



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
FACULTAD DE CIENCIAS

ALGORITMO DE WANG-LANDAU BIDIMENSIONAL Y LOCALIZACIÓN DE
TRANSICIONES DE FASE EN MODELOS TIPO ISING

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA:
LUIS ENRIQUE QUINTANAR CORTÉS

TUTOR: DR. DAVID PHILIP SANDERS
FACULTAD DE CIENCIAS

CIUDAD DE MÉXICO, ENERO DE 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Resumen

En el presente trabajo se estudian y simulan modelos de Ising en dos dimensiones, con el fin de encontrar y analizar transiciones de fase y presentar bosquejos de los diagramas de fase. Hay especial interés en el comportamiento de redes triangulares con interacción antiferromagnética, en donde ocurre el fenómeno de frustración. El antiferromagnetismo consiste en la tendencia de alinear un espín de manera opuesta a espines vecinos con los que tiene interacción; si se modela un material como un arreglo regular de átomos o moléculas organizados de tal forma que espines vecinos o interactuantes estén acomodados triangularmente, y cada vértice tiene un espín asociado, dos de ellos tienen por tendencia, una orientación opuesta, mientras que el tercero “no sabe” que orientación tomar; a esta falta de determinación en la elección se le llama frustración.

Para encontrar transiciones de fase, es necesario estudiar variables macroscópicas y encontrar comportamientos singulares; a su vez es indispensable contar con bases en física estadística, en particular, es un requisito conocer la distribución de probabilidad de Boltzmann. La parte de la distribución de Boltzmann que comúnmente se desconoce es el factor de normalización, conocido como función de partición (Z). La idea principal de la simulación se centra en dar una aproximación suficientemente buena de Z de forma indirecta, ya que la simulación arroja una aproximación de la densidad de estados (g), una función que cuenta el número de microestados o configuraciones del sistema con energía y magnetizaciones fijas, a partir de la cual se puede calcular la función de partición Z .

El algoritmo usado es el algoritmo de *Wang-Landau* [21]. Este algoritmo busca recorrer todas las energías y magnetizaciones posibles del sistema, con una distribución elegida por nosotros, siendo la más usada una homogénea. Utiliza para ello un caminante en el espacio de configuraciones del sistema. El principal problema que tiene es que sólo es eficiente (en tiempo) para

sistemas muy pequeños, es decir con un número relativamente pequeño de espines. En el presente trabajo se trató de optimizar el algoritmo usando varios caminantes al mismo tiempo, recorriendo el espacio de configuraciones del sistema. Sin embargo, se observó que esto no mejora el tiempo de simulación, ni la aproximación de la densidad de estados.

Para verificar que la programación hecha funciona, se usa como sistema de comparación al modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada, del cual se tiene la solución exacta para algunos tamaños de sistema [9].

Índice general

Lista de figuras	5
1. Introducción	9
1.1. Introducción	9
1.1.1. Materiales magnéticos y el modelo de Ising	9
1.1.2. Transiciones de fase	12
1.1.3. Cómo estudiar el modelo de Ising	14
1.1.4. El algoritmo de Wang–Landau	15
1.2. Plan del trabajo	16
2. Fundamentos de termodinámica y física estadística	19
2.1. El modelo de Ising	19
2.2. Densidad de estados	23
2.3. Fundamentos de la física estadística	23
2.4. Relación con la termodinámica macroscópica	28
2.5. Relación entre la física estadística y la termodinámica	29
2.6. Transiciones de fase	30
2.7. Parámetros de orden	32
2.8. Localización de las transiciones de fase	32
2.8.1. Escalamiento de tamaño finito	35
3. Simulaciones tipo Monte Carlo	39
3.1. Motivación	39
3.2. Cadenas de Markov	40
3.2.1. Cadenas de Markov irreducibles	42
3.2.2. Cadenas de Markov aperiódicas	42
3.2.3. Distribuciones de probabilidad para procesos estocásticos	42
3.2.4. Cadenas de Markov reversibles	43

3.3. Ecuación maestra	44
4. Dos algoritmos para MCMC	47
4.1. Metropolis	47
4.2. Wang–Landau	48
4.3. Razones de aceptación	50
4.4. Implementación del algoritmo de Wang–Landau	52
5. Simulación computacional	55
5.1. Obtención de la densidad de estados	55
5.1.1. Clase <code>Red</code>	55
5.1.2. Clase <code>Modelo</code>	56
5.1.3. Clase <code>Algoritmo</code>	57
5.2. Pruebas a la densidad de estados	57
5.3. Obtención de variables macroscópicas y localización de transición de fase	58
6. Resultados	59
6.1. Precisión de la simulación	59
6.2. Exactitud de la simulación	61
6.3. Variando el número de caminantes	61
6.4. Ising ferromagnético en redes cuadradas	62
6.4.1. Entropía experimental y entropía exacta	62
6.4.2. Transiciones de fase de segundo orden	63
6.4.3. Transiciones de fase de primer orden	67
6.5. Ising antiferromagnético en red cuadrada	68
6.6. Ising ferromagnético en redes triangulares	74
6.6.1. Transiciones de fase de segundo orden	74
6.6.2. Transiciones de fase de primer orden	76
6.7. Modelo de Ising antiferromagnético en redes triangulares; fenómeno de frustración.	79
6.7.1. Transiciones de 2° orden	79
7. Conclusiones	89

Índice de figuras

1.1. Se observan 6 regiones o dominios antiferromagnéticos.	10
1.2. Red cuadrada con interacción a primeros vecinos	11
1.3. En una red triangular con interacción a primeros vecinos, cada espín tiene 6 vecinos.	12
1.4.	14
1.5. Configuración del modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para una temperatura cercana a la temperatura crítica $T_c = 2.269$ sin campo magnético externo.	15
2.1. En una red cuadrada se definen dos subredes, una representada por puntos rojos y la otra con puntos azules. La magnetización staggered se define sumando las magnetizaciones absolutas de cada subred.	33
2.2. Cada color pertenece a una de tres subredes posibles. Los espines de una subred son aquellos que son vecinos a segundo orden.	34
6.1. Entropía promedio para una red triangular de 18×18 en el modelo de Ising ferromagnético	60
6.2. Entropía simulada y teórica para Ising ferromagnético en una red cuadrada	63
6.3. Diferencia entre valores exactos y valores simulados de la entropía para una red cuadrada con $L = 16$ del modelo de Ising ferrimagnético	64
6.4. Observables para el modelo de Ising ferromagnético	64

- 6.5. Se grafica la susceptibilidad magnética en función de la variable de escalamiento para diferentes tamaños de sistema. Con los valores $\nu = 1.02$, $\gamma = 1.74$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.26$ se da el mejor colapso en las gráficas de función de escalamiento de la susceptibilidad magnética para diferentes tamaños de sistema. 65
- 6.6. Con los valores $\nu = 0.7$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.294$ se encuentra el mejor ajuste lineal a la serie de datos. . . 66
- 6.7. Se grafican dos observables para varios tamaños de sistema. No se encuentran tendencias a un comportamiento singular cuando el tamaño del sistema aumenta. 66
- 6.8. Si se grafica la susceptibilidad magnética en función de la variable de escalamiento, no se observa transición de fase, es decir no se presenta un comportamiento de colapso de las gráficas para distintos tamaños de sistema, en una sola, En particular, la gráfica se muestra para los valores $\nu = 1.02$, $\gamma = 1.74$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.26$, con un campo externo $h = 2$. 67
- 6.9. Observables en función del campo externo h para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para una temperatura fija $T = 1$. Hay una transición de fase de primer orden en $h = 0$ 68
- 6.10. Observables en función del campo externo h para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada a una temperatura fija $T = 3 > T_c \approx 2.26$. Todas las curvas son suaves; no se observan comportamientos singulares conforme se aumenta el tamaño del sistema por lo que no hay transición de fase. . . . 69
- 6.11. Entropía para una red cuadrada de 16×16 espines del modelo de Ising con interacción antiferromagnética 70
- 6.12. Observables para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada en presencia de campo externo $h = 2$. Hay una transición de fase de segundo orden en $T_c \approx 1.85$ 71
- 6.13. Función de escalamiento finito para distintos tamaños del modelo de Ising antiferromagnético en una red cuadrada para un $h = 2$. El mejor colapso ocurre los valores en los coeficientes de escalamiento de $T_c = 1.86$, $\gamma = 1.7$ y $\nu = 1.2$ 72

6.14. Ajuste lineal usando FFS para el modelo de Ising antiferromagnético en una red cuadrada, con campo externo $h = 2$. El mejor ajuste lineal se logra para los valores en los coeficientes críticos de $T_c = 1.8597$ y $\nu = 1.2$ 72

6.15. Diagrama de fase del modelo de Ising antiferromagnético para una red cuadrada. La curva representa transiciones de fase, todas ellas de segundo orden. 73

6.16. Entropía para una red triangular de 18×18 espines en el modelo de Ising ferromagnético. 74

6.17. Observables para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular sin campo externo h . Hay una transición de fase de segundo orden en $3 < T_c < 4$ 75

6.18. Usando el método FSS se varían manualmente los exponentes críticos y la temperatura crítica para obtener el mejor colapso de datos cerca del máximo en la curva. El mejor resultado se da para $\nu = 0.84$, $\gamma = 1.46$ y temperatura crítica $T_c = 3.64$. . . 76

6.19. Se usó el método FFS para encontrar la mejor aproximación lineal de los datos $L^{(1/\nu)}$ vs $T_c(L)$ donde ν es un parámetro variable. El mejor resultado se da para el exponente crítico $\nu = 0.81$ y temperatura crítica $T_c = 3.66 \pm 0.08$ 77

6.20. Observables por espín, para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular variando el campo h a temperatura fija $T = 3.0$. Se observa una transición de fase de primer orden para $h \approx 0.0$ 77

6.21. Observables por espín, para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular variando el campo h a temperatura fija $T = 5.0$. Cuando $T > T_c$ no hay transiciones de fase de primer orden. 78

6.22. Entropía en función de energía y magnetización $S(E, M)$ en una red triangular para el modelo de Ising antiferromagnético para una red de 12×12 espines. 79

6.23. En ausencia de campo externo se observa transición de fase de segundo orden para una temperatura $T \approx 0.5$, para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular. 80

6.24. La magnetización no funciona como parámetro de orden para este modelo 81

- 6.25. Método FFS bosquejando los valores críticos que mejor hacen colapsar las gráficas para distintos tamaños de sistema, en una sola curva. Se obtienen los mejores resultados para $\nu = 1.10$, $\gamma = 1.26$ y $T_c = 0.38$ 81
- 6.26. Método de escalamiento de tamaño finito simplificado para el modelo de Ising en una red triangular con interacción antiferromagnética a primeros vecinos y condiciones a la frontera periódicas. El valor de Temperatura crítica encontrada es $T_c = 0.4018$ para el exponente crítico $\nu = 1.1$ 82
- 6.27. Observables para varios tamaños de sistema, del modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular y con un campo externo $h = 2$. Se observa una transición de fase de 2° orden. 83
- 6.28. Función de escalamiento finito para distintos tamaños de sistema modelando Ising antiferromagnético en una red triangular para un $h = 2$ 83
- 6.29. Relación entre temperatura (pseudo)crítica y tamaño del sistema 84
- 6.30. El mejor ajuste lineal señala que el exponente crítico tiene un valor de $\nu = 1.158$, para una temperatura crítica $T_c = 1.2204$ que se obtiene con la ordenada al origen del ajuste. 85
- 6.31. Diagrama de fases del modelo de Ising antiferromagnético para una red triangular en donde se presenta el fenómeno de frustración. Las transiciones de fase son de 2° orden. 86
- 6.32. Con un campo externo $h = 7$, no se observa transición de fase de 2° orden. 86
- 6.33. Observables para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular para una temperatura fija $T = 1.0$ y un campo externo variable $3 \leq h \leq 7$. Se observa transición de fase de segundo orden para $h \approx 4.6$ 87
- 6.34. Observables para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular para una temperatura fija $T = 2.0$ con campo externo h variable. No se observa transición de fase, consistente con el diagrama de fases de la figura 6.31. 88

Capítulo 1

Introducción

1.1. Introducción

1.1.1. Materiales magnéticos y el modelo de Ising

En la naturaleza existe materia que responde de cierta forma ante la presencia de campos magnéticos. El interés en este trabajo se centra en materiales con ciertas propiedades magnéticas: materiales ferromagnéticos y antiferromagnéticos.

Entre los materiales ferromagnéticos [15] se encuentra al hierro, níquel y cobalto. Dentro del material, las interacciones fuertes entre los momentos magnéticos atómicos los llevan a alinearse paralelamente entre sí para formar regiones conocidas como dominios magnéticos, sin necesitar la influencia de un campo externo. Bajo la influencia de un campo magnético externo, los dominios paralelos a éste se ven fortalecidos, aumentando su superficie (o volumen) y reduciendo los dominios cuyo momento magnético no tenga la misma dirección que el campo externo aplicado. Como consecuencia se tiene que, a partir de cierta magnitud del campo magnético externo, aún cuando esta siga aumentando, la magnetización del material ya no aumentará, fenómeno conocido como *magnetismo por saturación* [15].

El antiferromagnetismo es una tendencia a alinear el momento magnético (o espín) de un átomo o molécula, de forma opuesta a los espines de átomos y moléculas vecinos [15]. En materiales antiferromagnéticos, también hay dominios magnéticos, pero dentro de cada dominio el momento magnético de átomos adyacentes está antialineado, es decir, tienen la misma dirección pero sentido opuesto. Bajo la influencia de un campo magnético externo, los

dominios tienden a alinearse con los espines, es decir, que dentro de cada dominio la mitad de los espines están alineados con el campo y la otra mitad apunta en sentido contrario, como se muestra en la figura ??.

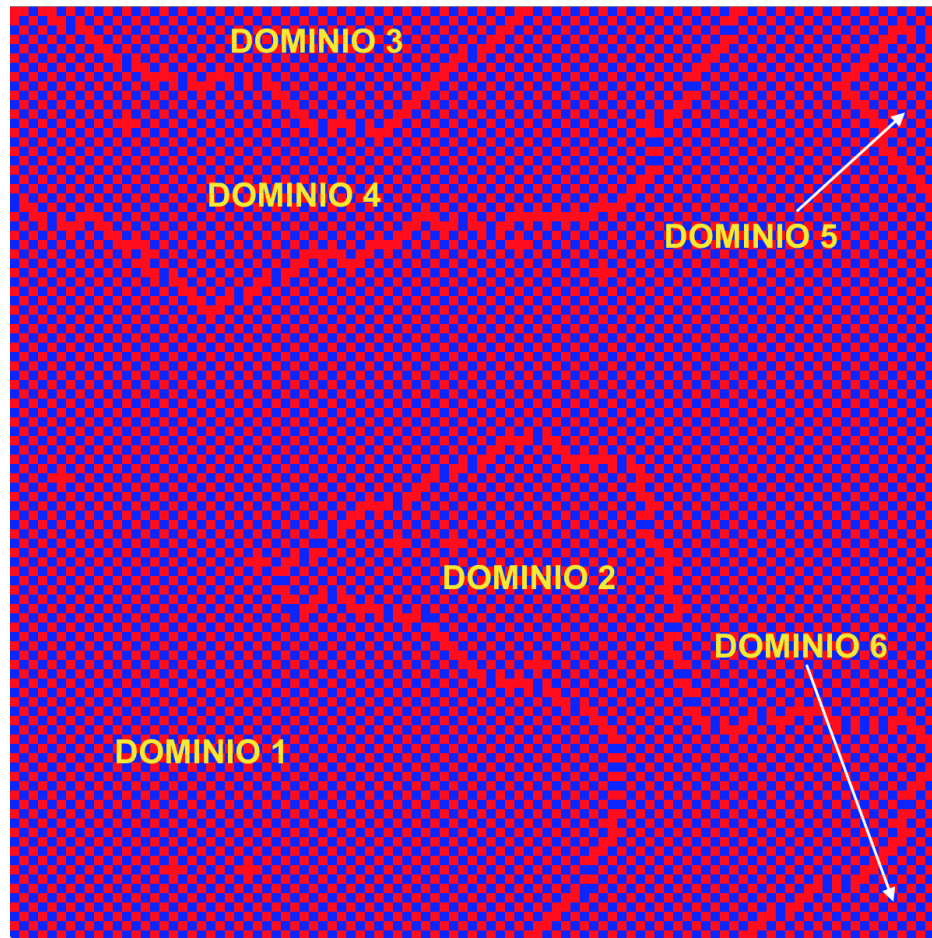


Figura 1.1: Se observan 6 regiones o dominios antiferromagnéticos.

Estas propiedades de magnetismo se atenúan a altas temperaturas: en particular para temperaturas $T \geq T_c$ –donde T_c se conoce como temperatura de Curie o temperatura crítica– los dominios desaparecen y se tiene una alineación de los momentos magnéticos de cada átomo aleatoria, dando como resultado una magnetización promedio aproximadamente nula en el material, ya sea ferromagnético o antiferromagnético.

Los materiales magnéticos se modelan de manera muy simplificados para

su estudio: se suponen arreglos o distribuciones de átomos o moléculas con dos posibles momentos magnéticos. Estas distribuciones se describen a través de gráficas o redes, formadas por vértices y aristas, y que en el caso más sencillo describen una red cuadrada, como la que se muestra en la figura 1.2 o una red triangular en la figura 1.3. Sería relativamente sencillo modelar materiales tridimensionales con geometrías cúbicas, tetraédricas, etc. Los vértices de la gráfica representan espines de los átomos del material y las aristas simulan la interacción entre espines (vértices) conectados.

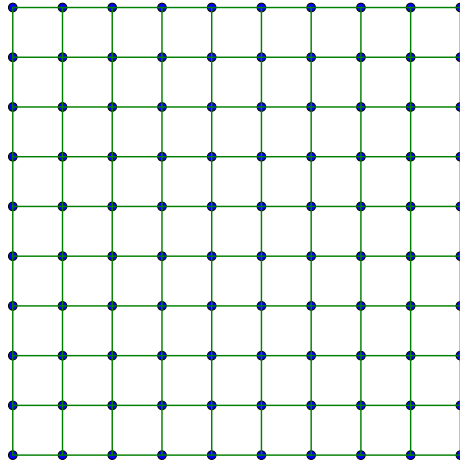


Figura 1.2: Red cuadrada con interacción a primeros vecinos

En algunas redes es posible definir *celdas* como un conjunto de vértices y aristas que forman un patrón, que se copia o tesela a lo largo de todo el espacio (o plano si es una red bidimensional); a éstas se les llama redes regulares. En este trabajo se utiliza la red cuadrada, ampliamente estudiada, como referencia para contrastar los resultados de la simulación programada. Asimismo también se estudian redes triangulares, poniendo especial atención en interacciones antiferromagnéticas, ya que presentan comportamientos especiales. De la misma forma se podrían agregar con relativa facilidad, y debido a la *programación orientada a objetos*, otro tipo de redes regulares: honey-comb [4], Kagomé [20], etc., e incluso redes que no tengan alguna celda base, es

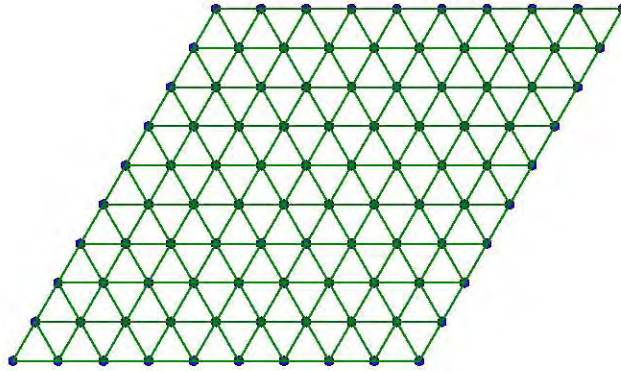


Figura 1.3: En una red triangular con interacción a primeros vecinos, cada espín tiene 6 vecinos.

decir redes completamente irregulares.

En el presente trabajo se usó el modelo de Ising para simular materiales con propiedades magnéticas. Este modelo consiste en una red como la mencionada anteriormente, en donde la energía de interacción entre dos espines es proporcional a su producto; en el modelo de Ising original el espín de un átomo sólo acepta dos valores posibles (1 y -1), y significa que dos espines sólo pueden estar alineados en la misma dirección o en dirección opuesta. Sin mucha dificultad se podría modificar esta restricción en el programa hecho.

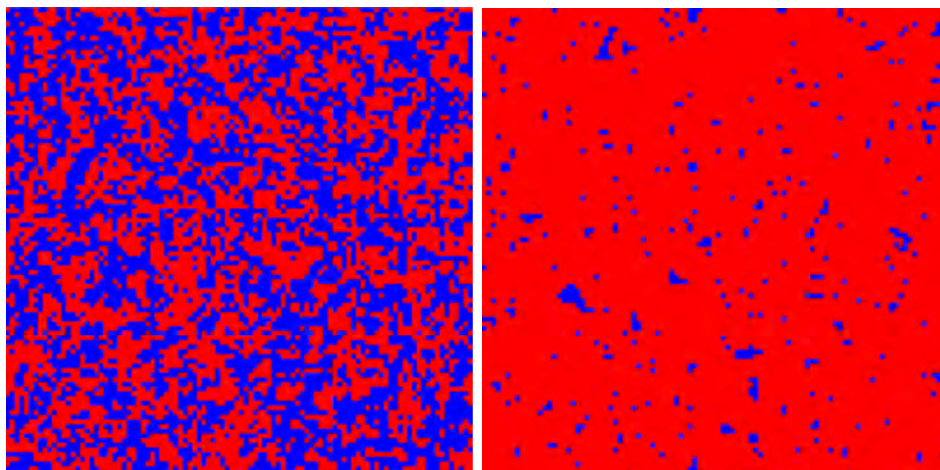
1.1.2. Transiciones de fase

Con el propósito de entender físicamente el comportamiento de sistemas termodinámicos, se estudian variables u observables macroscópicas como la energía interna y la magnetización que dependen de parámetros como la temperatura del baño térmico y campos magnéticos externos. Como idea fundamental y preliminar, una *transición de fase* ocurre cuando hay cambios

abruptos en las propiedades macroscópicas del sistema, aún cuando el cambio que ocurre en los parámetros de los cuales dichas macroscópicas dependen sea muy pequeño. En general se transita de fases ordenadas a fases desordenadas; en materiales ferromagnéticos las fases ordenadas se encuentran por debajo de una temperatura crítica T_c y se observan cuando los espines están alineados por dominios, mientras que en el antiferromagnetismo cuando están anti-alineados. Por encima de la temperatura crítica T_c , la figura 1.4a muestra desorden dentro del material: cada átomo apunta su momento magnético “en la dirección que quiere” y este paso de orden al desorden (o viceversa) no ocurre de manera suave, sino abrupta; es pues, una transición de fase que matemáticamente se detecta cuando en la gráfica de alguna variable macroscópica, hay saltos (o discontinuidades) o picos (secciones no suaves) [8].

Para materiales ferromagnéticos, en la figuras 1.4a y 1.4b se muestran las fases de orden y desorden que se pueden encontrar por debajo y por encima de la temperatura crítica T_c cuando no hay presencia de campo externo. Cada cuadro de color representa un espín que apunta para arriba o para abajo (color rojo o azul, respectivamente) y se observa que en la fase ordenada casi todos los espines apuntan en la misma dirección, mientras que en la fase desordenada cada espín escoge su orientación de manera aleatoria. De la misma manera podríamos tratar el problema en presencia de campo externo, y las investigaciones hechas anticipan que sin importar la intensidad de dicho campo externo, no existen transiciones de fase. Sin embargo, si tratamos con materiales antiferromagnéticos se observa un comportamiento diferente al que ocurre en materiales ferromagnéticos. En redes cuadradas se observan transiciones de fase independientemente de si existe o no un campo magnético; por otro lado, en redes triangulares las transiciones de fase solo se observan en presencia de un campo magnético externo.

Se mencionó ya que las transiciones de fase ocurren cuando hay cambios abruptos en alguna propiedad macroscópica. Matemáticamente y al analizar las gráficas de las variables macroscópicas, se tienen regiones no suaves, caracterizadas por puntos no derivables o singulares. En la figura 6.27 se pueden observar ambos comportamientos. En el inciso (a) se muestra en la gráfica una caída abrupta y un punto no suave en T_c y en el inciso (b) hay un punto aparentemente singular que se va acentuando conforme se aumenta el tamaño del sistema.



(a) Modelo de Ising ferromagnético desordenado; los espines, representados por cuadrados tienen dos posibles orientaciones (o colores). En este caso cada espín elige aleatoriamente su orientación.

(b) Modelo de Ising ferromagnético ordenado; los espines en general apuntan en la misma dirección; hay unos cuantos espines que apuntan en dirección contraria, resultado de fluctuaciones térmicas en el sistema.

Figura 1.4

1.1.3. Cómo estudiar el modelo de Ising

El hamiltoniano es esencial para entender el comportamiento estadístico y termodinámico del sistema ya que mide su energía total, compuesta por la energía interna (propia del sistema), resultado de las interacciones entre pares de espines, y la energía debida a factores externos, que en el presente trabajo son campos magnéticos. Se trabaja con una interacción entre espines a primeros vecinos, de tal forma que sólo contribuyen a la energía interna aquellos pares de vértices que están a una distancia mínima. Esta información se incluye cuando se define a la red y es aquí donde se plantea cuáles que espines (vértices) tiene interacción un espín dado (aristas).

Aunque muy bien definida la interacción de átomos dentro del arreglo, hay que tomar en cuenta que en principio, los vértices que se encuentran en la frontera de la red no tienen la misma cantidad de vecinos que aquellos en el interior. Se puede estudiar el sistema con condiciones finitas en la frontera, es decir, tomando en cuenta que todos los vértices de la frontera tendrán menos átomos de interacción que los del interior de la red. Alternativamente, se plantean sistemas con condiciones periódicas en la frontera, que consiste

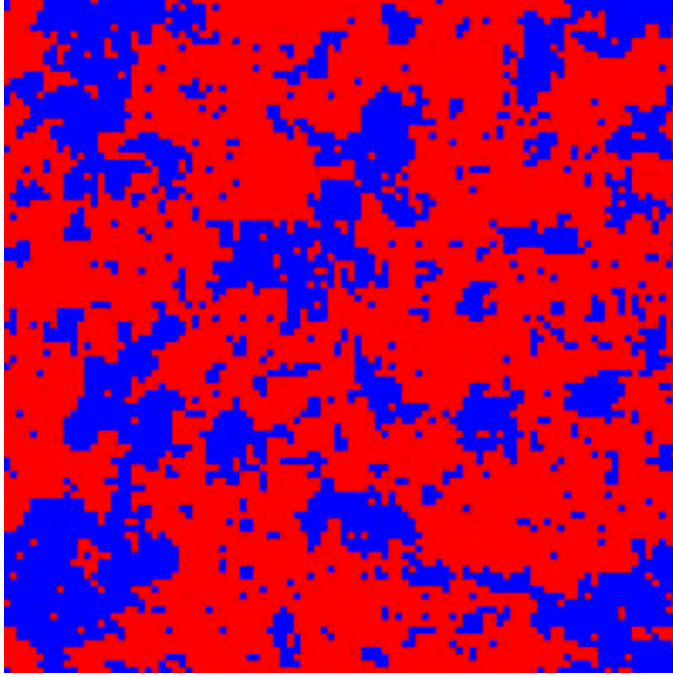


Figura 1.5: Configuración del modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para una temperatura cercana a la temperatura crítica $T_c = 2.269$ sin campo magnético externo.

en dar a todos los vértices de la frontera la misma cantidad de vértices de interacción que tienen los átomos que no pertenecen a la frontera. Para ello, se hacen copias del sistema en los cuatro bordes de un sistema de $L \times L$ espines. Con estas observaciones, y teniendo como ejemplo la red cuadrada, el espín de interacción que le hace falta a un átomo en la frontera derecha del sistema, se toma del espín que se encuentra en el extremo izquierdo del sistema del mismo renglón.

1.1.4. El algoritmo de Wang–Landau

Como se ha mencionado anteriormente, ya se ha estudiado ampliamente el problema de la simulación de sistemas ferromagnéticos, usando diferentes algoritmos, como el de Metrópolis, el de Wang–Landau u otros. Nuestro estudio se centrará en el algoritmo de Wang–Landau [21], que tiene como propósito obtener una buena aproximación de la entropía del sistema en función de su energía y magnetización $S(E, M)$, y que, como se explicará más

adelante, sirve para obtener la densidad de estados¹, función necesaria para resolver la termodinámica del sistema en equilibrio. Con ayuda del algoritmo de Wang–Landau se pretende profundizar un poco más en el comportamiento de sistemas antiferromagnéticos en redes triangulares donde ocurre el fenómeno de *frustración*, a través de variables macroscópicas específicas² como la energía interna (u), la magnetización absoluta ($|m|$), la capacidad calorífica (c_v), la susceptibilidad magnética (χ), etc., para poder hacer un bosquejo bastante claro del diagrama de fases correspondiente.

El algoritmo de Wang–Landau va construyendo la entropía con ayuda de un caminante en el espacio de configuraciones del sistema Ω , en donde el salto de un microestado a otro se rige por una probabilidad que depende del par (E, M) de cada configuración; pero no se sabe bien qué consecuencias tiene que haya varios caminantes en el espacio de configuraciones Ω . ¿Mejoraría la precisión o exactitud de la simulación? ¿Se requerirá un mayor o menor trabajo computacional para obtener los mismos resultados que con un solo caminante?

1.2. Plan del trabajo

En el capítulo 2 se dan los fundamentos teóricos necesarios. Por un lado se estudia la termodinámica básica de sistemas canónicos y por otro la relación con la física estadística, en particular, la construcción de las variables macroscópicas termodinámicas a partir de microestados del sistema en estudio, suponiendo que estos microestados satisfacen la distribución de probabilidad de Boltzmann. El capítulo 3, se estudian a profundidad las bases matemáticas que se requieren para construir la simulación que tiene como objetivo construir una densidad de estados aproximada, es decir una función que haga un conteo del número de microestados que tienen una energía y magnetización espontánea particulares y accesibles al sistema. En el capítulo 4 se describe cómo aplicar en la práctica las técnicas del capítulo anterior para programar la simulación y se explica paso a paso el algoritmo de Wang–Landau, utilizado en este trabajo. En el siguiente capítulo 5 se expone la estructura del programa hecho en C++, basado en programación orientada a objetos y finalmente se delinea la teoría usada para el análisis de los resultados obtenidos.

¹En este trabajo, la densidad de estados es el número de configuraciones o microestados que tienen una energía y magnetización dadas, $g(E, M)$.

²Variables macroscópicas por espín, es decir magnitudes físicas intensivas.

En el capítulo 6 se muestran resultados y análisis, contrastando con investigaciones previas cuando es posible, para finalmente mostrar las conclusiones del trabajo realizado en el capítulo 7.

Capítulo 2

Fundamentos de termodinámica y física estadística

En este capítulo se describe formalmente cómo modelar materiales ferromagnéticos y antiferromagnéticos. A estos modelos se les conoce como *modelos de Ising* y son fundamentales para poder simular por computadora comportamientos termodinámicos en materiales magnéticos. Geométricamente se modelan a través de gráficas o redes, que consisten en una colección de vértices unidos por aristas. De esta forma, cada vértice está asociado a un átomo o molécula con momento magnético o espín, característica que se encuentra en materiales con propiedades magnéticas. Una magnitud física importante en estos modelos es la energía total del sistema conocida como Hamiltoniano, por lo que su descripción es importante.

2.1. El modelo de Ising

El modelo de Ising [12] simula materiales magnéticos; consiste en una red con N vértices, en donde cada vértice representa un átomo o molécula con un momento magnético o espín asociado que únicamente puede tener dos valores posibles, $+1$ o -1 . Se denota por

$$\sigma_i = \begin{cases} 1 \\ -1 \end{cases} \quad (2.1)$$

al valor del i -ésimo espín de la red.

La energía de interacción entre un par de espines del modelo de Ising está dada por

$$E_{ij} = \begin{cases} -J\sigma_i\sigma_j, & \text{si } \sigma_i \text{ y } \sigma_j \text{ son espines vecinos o de interacción} \\ 0, & \text{si no lo son,} \end{cases} \quad (2.2)$$

donde J es una constante obtenida de la naturaleza de la interacción y que además da unidades a la expresión. En la práctica, la interacción entre espines que están muy “lejos” es prácticamente cero, de tal forma que según el modelo en cuestión, hay que definir cuál es el rango de interacción de cada espín.

A una orientación dada para cada espín de la red, se le llama configuración o microestado del sistema, y se denota

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N). \quad (2.3)$$

El espacio de microestados Ω para el modelo de Ising es discreto y finito, por lo que se puede numerar a los elementos de Ω :

$$\Omega = \{\boldsymbol{\sigma}^{(1)}, \boldsymbol{\sigma}^{(2)}, \boldsymbol{\sigma}^{(3)}, \dots, \boldsymbol{\sigma}^{(2^N)}\}, \quad (2.4)$$

ya que para un sistema de N espines hay 2^N posibles configuraciones.

Al sumar todas las energías posibles de interacción entre espines para un microestado $\boldsymbol{\sigma}$ dado, se obtiene la energía configuracional (o interna) $E(\boldsymbol{\sigma})$ de la red. Por tanto la energía interna tiene la forma

$$E(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i\sigma_j, \quad (2.5)$$

con $\langle i,j \rangle = \{i,j\}$, un par no ordenado (de índices) de espines en la red que sean vecinos, es decir que tengan interacción no nula; de hecho es equivalente a tener una suma sobre aristas de la red, notando que la arista $\{i,j\}$ es la misma que la $\{j,i\}$ ¹. La cantidad de pares que contribuyen a la suma varía de acuerdo a la forma de la red que se utilice para describir al sistema.

Una forma alternativa de obtener la energía de configuración total, es sumar sobre pares ordenados, de tal forma que si en la suma contribuye el par (i,j) también se tendrá que incluir a (j,i) , y finalmente se tendrá que corregir esta contribución duplicada dividiendo entre dos

¹Se debe tener cuidado de no duplicar términos en la suma.

$$E(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \sum_{\sigma_j \in V_i} \sigma_j \right], \quad (2.6)$$

donde σ_i es el valor del espín i -ésimo, V_i es el conjunto de espines vecinos de σ_i , y N es el número de espines en el sistema.

Otra variable macroscópica importante es la magnetización total:

$$M(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (2.7)$$

Ahora se puede definir una función que asigne el par ordenado que tiene como primera entrada el valor de la energía configuracional y como segunda entrada la magnetización de cada microestado del sistema:

$$\Psi(\boldsymbol{\sigma}) := (E(\boldsymbol{\sigma}), M(\boldsymbol{\sigma})) \quad (2.8)$$

Para caracterizar completamente al sistema físico se utiliza al Hamiltoniano $H(\boldsymbol{\sigma})$ como la magnitud física principal, que mide la energía total del sistema, debido a su configuración y a posibles interacciones con su entorno. En el presente trabajo se usan Hamiltonianos de sistemas con propiedades magnéticas, de tal forma que el Hamiltoniano queda definido por

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -JE(\boldsymbol{\sigma}) - hM(\boldsymbol{\sigma}), \quad (2.9)$$

en donde se escoge para este trabajo $J > 0$ si se trata de un sistema ferromagnético, $J < 0$ si es antiferromagnético y h es un campo magnético externo. Este es el Hamiltoniano del modelo de Ising a tratar. El Hamiltoniano, como puede observarse, depende del microestado en el que se encuentre el sistema pero también del valor de J y del campo externo h , por lo que se debe entender que

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = H(\boldsymbol{\sigma}; J, h). \quad (2.10)$$

Se puede reexpresar al Hamiltoniano en función de la energía configuracional y la magnetización total $(E, M) \in \Psi$ en lugar de configuraciones o microestados $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\tilde{H}(E, M) = -JE - hM. \quad (2.11)$$

ya el Hamiltoniano depende de la energía y magnetización de una configuración dada, y por tanto, cualquier otra configuración que lleve a los mismos

valores de energía y configuración, llevarán a su vez al mismo valor en el Hamiltoniano.

Los Hamiltonianos quedan entonces relacionados a través de

$$\tilde{H} \circ \Psi(\boldsymbol{\sigma}) = H(\boldsymbol{\sigma}) \quad (2.12)$$

Al tener un espacio de configuraciones o microestados discreto y finito, los valores de las variables macroscópicas E y M también son discretos y finitos. Se denota

$$\mathcal{E} := \text{rango}(E) = \{E^{(i)} : i = 1, 2, \dots, m\} \quad (2.13)$$

al conjunto de valores en la energía configuracional que son accesibles al sistema. De manera similar,

$$\mathcal{M} := \text{rango}(M) = \{M^{(j)} : j = 1, 2, \dots, n\} \quad (2.14)$$

es el conjunto de valores en la magnetización que puede tener el sistema. Con estos dos conjuntos definidos se puede denotar a

$$\mathcal{B} = \text{rango}(\Psi) = \{(E, M)^{(k)} : k = 1, 2, \dots, l\}, \quad (2.15)$$

como el conjunto de pares ordenados en donde la primera entrada es la energía configuracional y la segunda entrada es la magnetización de todos los microestados $\boldsymbol{\sigma}$. Se debe observar que en el caso de modelos de Ising $\mathcal{B} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{M}$, lo que indica que no todos los pares (E, M) son posibles para el conjunto de configuraciones Ω . Para posteriores consideraciones es conveniente definir el conjunto de todas las configuraciones que llevan al par k -ésimo $(E, M)^{(k)} \in \mathcal{B}$ como

$$S_k := \{\boldsymbol{\sigma} \in \Omega : (E(\boldsymbol{\sigma}), M(\boldsymbol{\sigma})) = (E, M)^{(k)}\}. \quad (2.16)$$

Es importante notar que el conjunto $\{S_k : k = 1, 2, 3, \dots, l\}$ induce una partición de Ω en donde los conjuntos S_k son clases de equivalencia para la relación: “ $\boldsymbol{\sigma}^{(i)} \leftrightarrow \boldsymbol{\sigma}^{(j)} \Leftrightarrow \Psi(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}) = \Psi(\boldsymbol{\sigma}^{(j)}) = (E, M)^{(k)}$ ”, es decir, dos microestados pertenecen a la misma clase de equivalencia si tienen la misma energía y la misma magnetización.

También se pueden definir

$$\tilde{S}_i := \{\boldsymbol{\sigma} \in \Omega : E(\boldsymbol{\sigma}) = E^{(i)}\} \quad (2.17)$$

y ahora las clases de equivalencia inducen la relación: “ $\boldsymbol{\sigma}^{(j)} \leftrightarrow \boldsymbol{\sigma}^{(k)} \Leftrightarrow E(\boldsymbol{\sigma}^{(j)}) = E(\boldsymbol{\sigma}^{(k)}) = E^{(i)}$ ”, y ahora dos configuraciones están relacionadas, si tienen la misma energía únicamente.

2.2. Densidad de estados

Cuando el sistema pasa de una configuración a otra, la energía interna, la magnetización y el Hamiltoniano pueden cambiar², y estos cambios se pueden cuantificar. En el presente trabajo se supondrá que cuando ocurre un cambio de configuración, a lo más un espín cambia su orientación, el espín i -ésimo σ_i ; así la $E(\boldsymbol{\sigma})$ que es la suma de todas las contribuciones de energías de interacción entre pares no ordenados, sólo se ve afectada en los términos de los pares no ordenados que contienen al espín i -ésimo, y que según la notación usada son V_i pares, es decir el número de vecinos que dicho espín tiene. Así, se nota que al voltear un espín, la *energía de interacción* únicamente invierte su signo, por lo que el cambio en la *energía interna* depende únicamente del espín que se ha volteado, y está dado por:

$$\Delta E(\sigma_i) = -2\sigma_i \sum_{j=1}^V \sigma_j; \quad (2.18)$$

de manera similar, los cambios en la magnetización del sistema y en el Hamiltoniano son

$$\Delta M(\sigma_i) = -2\sigma_i \quad (2.19)$$

y

$$\Delta H(\sigma_i) = -J\Delta E(\sigma_i) - h\Delta M(\sigma_i) = -2J\sigma_i \sum_{j=1}^V \sigma_j - 2h\sigma_i \quad (2.20)$$

respectivamente.

2.3. Fundamentos de la física estadística

Es necesario estudiar [18] propiedades macroscópicas del sistema como la energía del sistema, su magnetización, parámetros de orden entre otros, para ciertas condiciones externas impuestas al sistema, como lo son la temperatura del baño térmico y la presencia de campo un magnético externo. Para ello es necesario hacer la conexión entre la física estadística y la termodinámica, recordando que las variables macroscópicas se obtienen a través de promedios

²No necesariamente cambian, ya que se podría saltar a una configuración que tenga los mismos valores en (E, M) y por lo tanto también en el Hamiltoniano.

pesados de todos los estados microscópicos posibles, dadas las condiciones de sistema antes mencionadas.

Entonces, si \mathcal{Q} es una observable macroscópica, ésta se puede obtener a través de variables microscópicas con la relación [12]

$$\mathcal{Q} = \langle Q \rangle = \sum_{\sigma} Q(\sigma) p^B(\sigma), \quad (2.21)$$

con \mathcal{Q} la variable macroscópica, $\langle Q \rangle$ el promedio de la variable microscópica $Q(\sigma)$ asociada, en donde el peso de Q para la configuración σ es $p^B(\sigma)$. En este trabajo, la probabilidad o peso estadístico de cada estado σ en **equilibrio**, está dada por la *distribución de probabilidad de Boltzmann*[12],

$$p^B(\sigma; \beta, h) = \frac{e^{-\beta H(\sigma; h)}}{Z(\beta, h)}. \quad (2.22)$$

Aquí, se observa que la distribución de probabilidad depende no solo de la configuración o microestado del sistema, sino también del parámetro $\beta \equiv 1/kT$ (relacionado con la temperatura) y del parámetro h , un campo magnético. A continuación se explica el término del lado derecho de la ecuación (2.22).

Si se suman las probabilidades de todas las configuraciones posibles σ para una temperatura β y un campo externo h fijos, se tiene que

$$\sum_{\sigma} p^B(\sigma; \beta, h) = 1, \quad (2.23)$$

por lo que el factor $Z(\beta, h)$, conocido como *función de partición*, tiene la labor de normalizar las probabilidades de equilibrio, de tal forma que su expresión es

$$Z(\beta, h) = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma; h)}. \quad (2.24)$$

La función de partición contiene toda la información termodinámica necesaria del sistema, por lo que tiene gran relevancia poder determinarla. Hasta aquí la teoría es bastante clara y elegante; sin embargo, cuando tratamos de reproducir este procedimiento en una simulación computacional, nos enfrentaremos a un gran obstáculo: en la ecuación (2.22) tenemos problemas con el denominador ya que la suma es imposible de realizar, debido a la cantidad

inmensa de configuraciones que el sistema pueda tener. Por ejemplo, en el modelo de Ising, si se tienen N espines, cada uno con dos posibles orientaciones, hay en total 2^N posibles configuraciones. Por tanto, si el sistema tiene 100×100 espines, hay aproximadamente $2^{10000} \simeq 10^{3000}$ estados, una suma imposible de realizar para las computadoras actuales o futuras. Este problema se puede resolver si sólo se toma en cuenta una pequeña fracción del espacio de estados Ω que sea calculable por una computadora, pero que al mismo tiempo sea representativa para que la función de partición de este subconjunto sea muy parecida a la función de partición de todo Ω . Al proceso de muestrear una fracción representativa del espacio de estados se le conoce como *muestreo ponderado* y es esencial para obtener la función de partición de un sistema; en capítulos posteriores se explica cómo realizar dicho muestreo.

Será igualmente útil observar que la función de partición puede reescribirse reagrupando los microestados del sistema en las clases de equivalencia S_k definidas en la ecuación (2.16), notando que cualquier $\sigma \in S_k$ tiene el mismo valor del Hamiltoniano. En vista de esto, la contribución a la función de partición es la misma para cualquiera de estas configuraciones, y entonces, en vez de sumar sobre el total de configuraciones posibles, se suma sobre el total de clases S_k de configuraciones posibles, que lleven a un mismo par $(E, M)^{(k)}$, por lo que la función de partición se reexpresa

$$Z(\beta, h) = \sum_{k=1}^l \left(\sum_{\sigma \in S_k} e^{-\beta H(\sigma; h)} \right), \quad (2.25)$$

donde la suma entre paréntesis se hace para todo microestado σ de la clase (o conjunto) S_k . Observando que el factor exponencial es constante para los elementos de S_k , la suma entre paréntesis es igual a $|S_k|$ (la cardinalidad del conjunto S_k) veces el factor exponencial. A esta cardinalidad se le conoce como **densidad de estados** y se denota $g(E, M)$, por lo que finalmente tenemos

$$Z(\beta, h) = \sum_{k=1}^l g((E, M)^{(k)}) e^{-\beta \tilde{H}((E, M)^{(k)}; h)} \quad (2.26)$$

o

$$Z(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} g(E, M) e^{-\beta \tilde{H}(E, M; h)}, \quad (2.27)$$

que indica que hay que hacer la suma sobre todos los pares (E, M) posibles, l en total, según la ecuación (2.15).

28CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS DE TERMODINÁMICA Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Si se conociera la densidad de estados $g(E, M)$ del sistema a estudiar, entonces se podría obtener la función de partición $Z(\beta, h)$ y además las observables macroscópicas se podrían calcular con la expresión:

$$\mathcal{Q} = \langle Q \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} Q(E, M) g(E, M) e^{-\beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.28)$$

De esta manera, si lo que se quiere obtener es la energía promedio del sistema una temperatura dada por β y para un valor del campo magnético externo h , la fórmula (2.28) se tiene:

$$\langle E \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} E g(E, M) e^{-\beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.29)$$

Análogamente la magnetización promedio es

$$\langle M \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} M g(E, M) e^{-\beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.30)$$

Hasta ahora se ha dicho el que hamiltoniano depende del par (E, M) ; a su vez, la función de partición depende del par (β, h) y la densidad de estados de (E, M) . Todas estas expresiones se pueden simplificar si de inicio pensamos que el campo externo en el sistema es nulo; como consecuencia en el hamiltoniano dependerá únicamente de la energía configuracional $\tilde{H}(E, M; h = 0) = \tilde{H}(E)$, la función de partición será una $Z(\beta, h = 0) = Z(\beta)$ y la densidad de estados aunque en principio sigue dependiendo de (E, M) para efectos de los resultados en las variables termodinámicas sólo requerimos el conteo de configuraciones con energía E sin importar el valor de magnetización, por lo que se tiene una densidad de estados $\tilde{g}(E)$ que se calcula con

$$\tilde{g}(E) = \sum_{M \in \mathcal{M}} g(E, M). \quad (2.31)$$

Hay que notar que a través de la densidad de estados, es posible obtener la función de partición de la ecuación (2.27), en vista de que la suma a realizar tiene una cantidad mucho menor de términos, y que ya se puede procesar con una computadora. Como se había mencionado, la función de partición es imprescindible para poder estudiar la termodinámica del sistema.

Sabemos que, aunque estos sean los valores promedios que tendrá el sistema al estar en equilibrio con un baño térmico y en presencia de un campo

magnético externo h que es constante, la realidad es que el sistema fluctúa. Para calcular el tamaño de estas fluctuaciones, y debido a que lo que la observable macroscópica es el resultado de un promedio pesado, la fluctuación se mide con el error estadístico de un promedio: la varianza

$$\sigma_Q^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2. \quad (2.32)$$

En caso de que la observable $\langle Q \rangle$ tenga varios valores posibles para un (E, M) se hace un promedio de ellos, que se pesará con la probabilidad de Boltzmann correspondiente.

Otro concepto importante es el de entropía S . Desde el punto de vista microscópico se trata de una medida de desorden en el sistema para una energía y magnetización dadas (E, M) . Se puede intuir que entre mayor sea la cantidad de estados –es decir, mientras más grande sea el valor de la densidad de estados g – con valores (E, M) , mayor desorden se tendrá en el sistema y por tanto, mayor será el valor de la entropía $S(E, M)$. Con esta motivación se define

$$S(x) \equiv -k \ln(g(x)) \quad (2.33)$$

en donde $x = (E, M)$ para nuestro estudio y $g(x)$ es la densidad de estados con valor x . En conclusión, si se conociera la entropía del sistema S , se podría conocer la densidad de estados g y a su vez la función de partición Z , con lo que podemos calcular variables termodinámicas macroscópicas y describir al sistema por completo. De hecho, las variables macroscópicas de la ecuaciones (2.28), (2.29) y (2.30) se pueden reescribir en función de la entropía, ya que los valores de la densidad de estados pueden ser demasiado grandes para el lenguaje computacional, por lo que en la práctica se usan las expresiones:

$$\mathcal{Q} = \langle Q \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} Q(E, M) e^{S(E, M) - \beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.34)$$

$$\langle E \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} Q(E, M) e^{S(E, M) - \beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.35)$$

$$\langle M \rangle(\beta, h) = \sum_{(E, M) \in \mathcal{B}} Q(E, M) e^{S(E, M) - \beta \tilde{H}(E, M; h)}. \quad (2.36)$$

2.4. Relación con la termodinámica macroscópica

Como se sabe [14], para calcular las variables termodinámicas de sistemas físicos basta conocer los potenciales termodinámicos. Entre ellos tenemos a la energía libre de Helmholtz:

$$F = U - TS - hM, \quad (2.37)$$

de especial interés para el presente trabajo como se mostrará más adelante, ya que conecta directamente la termodinámica con la física estadística. Además, la primera ley de la termodinámica expresa que

$$dU = TdS + hdM, \quad (2.38)$$

en donde hdM sustituye a PdV en sistemas magnéticos. De esta forma se tendrá que

$$dF = -SdT - Mdh. \quad (2.39)$$

De la ecuación (2.39) se observa que algunas variables termodinámicas como la magnetización, la capacidad calorífica, y la susceptibilidad magnética se obtienen de derivadas parciales de distinto orden de F y de U [12]. En particular se tiene que:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial h}; \quad (2.40)$$

$$X = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}; \quad (2.41)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k\beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta}; \quad (2.42)$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta}; \quad (2.43)$$

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}; \quad (2.44)$$

$$C = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}. \quad (2.45)$$

Sin embargo es más interesante estudiar las variables *intensivas* o *específicas* respectivas, es decir, dividir una variable extensiva entre el número de espines total del sistema. De esta forma construimos las variables termodinámicas *específicas*:

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}; \quad (2.46)$$

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial h^2}; \quad (2.47)$$

$$c = -\frac{T}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (2.48)$$

2.5. Relación entre la física estadística y la termodinámica

A continuación se estudia la relación entre la termodinámica y la física estadística primero de manera intuitiva y luego formal. En principio se tiene un sistema termodinámico de espines con un conjunto de energías y magnetizaciones (E, M) posibles y que interactúa con su entorno a través de un baño térmico y un campo magnético. Un sistema termodinámico en equilibrio, a nivel microscópico está constantemente fluctuando entre configuraciones, de tal forma que el promedio –sobre el espacio de configuraciones del sistema, cada una con su propio peso estadístico– de una variable microscópica, da como resultado la variable macroscópica correspondiente. Por lo tanto se tiene que:

$$U = \langle E \rangle, \quad (2.49)$$

$$M = \langle M \rangle, \quad (2.50)$$

$$c_v = \frac{1}{NkT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{k\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (2.51)$$

y

$$\chi = \frac{1}{NkT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (2.52)$$

Si se combinan las ecuaciones (2.29) y (2.49) y se toma en cuenta la función de partición de la ecuación (2.27) se puede observar que la energía interna U se puede expresar en función de $Z(\beta, h)$ de la siguiente forma:

$$U = -\frac{1}{Z(\beta, h)} \frac{\partial Z(\beta, h)}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z(\beta, h)}{\partial \beta} \quad (2.53)$$

Con las ecuaciones (2.43) y (2.53) se obtiene

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z(\beta, h)}{\partial \beta^2}, \quad (2.54)$$

una expresión para la capacidad calorífica en términos de la función de partición.

Además la termodinámica dice que la capacidad calorífica también se puede relacionar con la entropía:

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{1}{k\beta} \frac{\partial S}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{1}{k\beta} \frac{\partial S}{\partial \beta} k\beta^2 = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} \quad (2.55)$$

Así, de las ecuaciones (2.54) y (2.55) obtenemos una ecuación diferencial en parciales:

$$\frac{\partial S(\beta, h)}{\partial \beta} = -k\beta \frac{\partial^2 \ln Z(\beta, h)}{\partial \beta^2} \quad (2.56)$$

Al integrar respecto a β , usando integración por partes para el lado derecho se obtiene

$$S(\beta, h) = -k\beta \frac{\partial \ln Z(\beta, h)}{\partial \beta} + k \ln Z(\beta, h) \quad (2.57)$$

en donde faltaría un término de integración $f(h)$ pero por simplificación se toma como cero. Al sustituir las ecuaciones (2.53) y (2.57) en (2.37) se obtiene una ecuación que relaciona a la termodinámica con la física estadística:

$$F = -kT \ln Z(T, h) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta, h). \quad (2.58)$$

2.6. Transiciones de fase

Una transición de fase para un sistema magnético se detecta en el comportamiento de las observables termodinámicas del sistema al variar parámetros

externos. En este trabajo los parámetros que pueden crear estos comportamientos en el sistema son la temperatura T y algún campo magnético externo h . Por definición una transición de fase se localiza en valores (T_c, h_c) donde las derivadas de primer orden u orden superior del potencial termodinámico (o energía libre) son discontinuas o no suaves, existiendo por consecuencia dos clases de transiciones de fase:

Transiciones de fase de primer orden, o discontinuas

Este tipo de transiciones se caracterizan por la presencia de *calores latentes*. En el punto de transición se recibe y libera una gran cantidad de energía en comparación con otros puntos (donde no hay transición), aún cuando la temperatura del sistema (baño térmico) no cambia. Si el sistema no está en equilibrio, se producen *curvas de histéresis* en el lugar donde existen las transiciones de fase, así como fenómenos dinámicos de nucleación, que son pequeñas zonas del sistema en fase ordenada y que al exceder cierto tamaño, logran llevar a todo el sistema a dicha fase. Matemáticamente la energía libre F presenta discontinuidades en la primera derivada en algún punto (T_c, h_c) , ocasionado geométricamente por un cambio finito (no suave) en la pendiente del potencial termodinámico. Las variables termodinámicas que se usan para detectar transiciones de fase de primer orden son la capacidad calorífica y la susceptibilidad del parámetro de orden, puesto que la presencia de calor latente produce singularidades en dichas variables.

Transiciones de fase de segundo orden, o continuas

Se manifiestan en singularidades de las susceptibilidades en el punto crítico (T_c, h_c) . La energía libre F y su primera derivada son continuas, pero alguna segunda derivada presenta una discontinuidad. Se debe recordar que una susceptibilidad mide el cambio de una variable de estado con respecto a su conjugada, de tal forma que una transición se presenta cuando al variar muy poco la variable de estado, su respectiva conjugada tiene un cambio muy grande, por lo que el cociente tiende a ser un número muy grande que en el límite se puede convertir en un punto singular. En equilibrio, al estar en el punto donde ocurre la transición de fase de segundo orden, hay regiones del sistema ordenadas y desordenadas de todos tamaños.

2.7. Parámetros de orden

Un parámetro de orden es una variable macroscópica que se utiliza para reconocer transiciones de fase de sistemas físicos. Es una medida del orden y desorden de un sistema, que asigna el valor de 1 al parámetro cuando se tiene un orden total en el sistema y un valor de cero cuando el sistema está desordenado. El parámetro de orden se usa como método para encontrar con precisión los puntos donde se localizan las transiciones de fase del sistema.

De esta forma se requiere para cada modelo físico un parámetro de orden adecuado. En el caso de sistemas ferromagnéticos el parámetro de orden es la magnetización absoluta macroscópica del sistema. En el caso de sistemas antiferromagnéticos esta variable no es de utilidad, ya que tanto para estados ordenados, como desordenados, la magnetización absoluta es siempre cercana a cero. En el caso de que el sistema se pueda simular a través de redes cuadradas el parámetro de orden correspondiente se denomina *magnetización staggered*, y consiste en dividir a la red original en dos subredes. Cada subred está formada por espines vecinos a segundo orden, por lo que el parámetro de orden se define

$$M_s = |M_{r_1}| + |M_{r_2}|, \quad (2.59)$$

donde M_s es la magnetización staggered, y M_{r_i} es la magnetización usual de la subred i con $i = 1, 2$. En la figura 2.1 se representan las dos subredes de una red cuadrada usando colores.

En el caso de una red triangular, el procedimiento para encontrar el parámetro de orden adecuado es análogo pero ahora se requieren 3 subredes, por lo que se tiene

$$M_s = |M_{r_1}| + |M_{r_2}| + |M_{r_3}|, \quad (2.60)$$

donde M_s es la magnetización staggered, y M_{r_i} es la magnetización tradicional de la subred i . En una red de esta clase, se forman triángulos cuyos vértices son espines y en donde las aristas representan espines que interactúan. La idea es que cada vértice en un triángulo pertenezca a una subred distinta, por lo que en total se tendrán tres subredes (ver figura 2.2).

2.8. Localización de las transiciones de fase

Se debe tomar en cuenta que cuando se realizan simulaciones siempre tendremos sistemas de tamaño finito, por lo que las singularidades de las

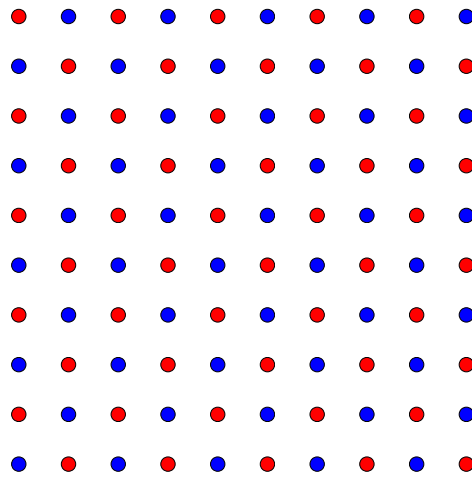


Figura 2.1: En una red cuadrada se definen dos subredes, una representada por puntos rojos y la otra con puntos azules. La magnetización staggered se define sumando las magnetizaciones absolutas de cada subred.

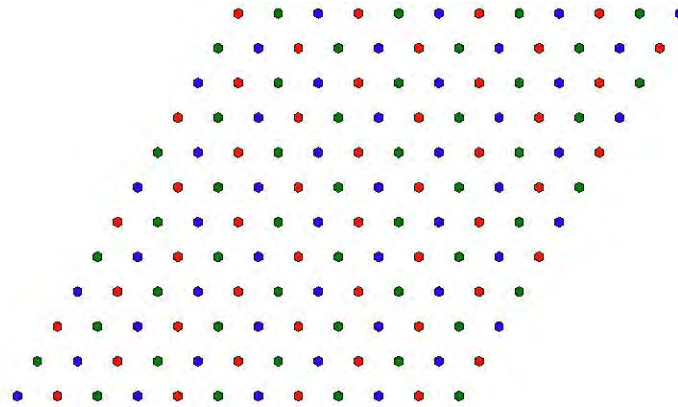


Figura 2.2: Cada color pertenece a una de tres subredes posibles. Los espines de una subred son aquellos que son vecinos a segundo orden.

transiciones de fase, desde el punto de vista matemático no se presentan. Sin embargo se pueden observar comportamientos que tienden a ellas cuando el tamaño del sistema tiende a infinito; la única información que podemos obtener de la simulación son puntos pseudo-críticos que no coinciden forzosamente con los puntos críticos de un sistema de tamaño infinito.

Para encontrar los puntos críticos reales usando los puntos pseudo-críticos de la simulación se usan métodos de extrapolación de datos, entre los cuales está el de *escalamiento de tamaño finito* [12], para el cual deben satisfacerse ciertas condiciones. Otro método se basa en el uso del *Cumulante de Binder* [17], que no requiere una extrapolación de datos, y otro más es conocido como *grupo de renormalización* [12]. Las transiciones de fase se estudian en el presente trabajo según la teoría del *escalamiento de tamaño finito*.

2.8.1. Escalamiento de tamaño finito

Esta sección sólo se usa cuando la transición de fase que se presenta es de segundo orden, es decir, variables macroscópicas obtenidas de segundas derivadas parciales del potencial termodinámico adecuado, que presentan singularidades (llamados puntos críticos) en el límite termodinámico. En general, las susceptibilidades tienen este comportamiento por lo que el desarrollo que hace a continuación se realiza para la susceptibilidad magnética, suponiendo que se trata de un modelo de Ising ferromagnético.

Resulta que las variables macroscópicas de sistemas finitos, en las vecindades del punto crítico de sistemas en el límite termodinámico, pueden modelarse con una relación de potencias para la temperatura T (o de manera equivalente de la variable β) [12]. En vista de que la singularidad ocurre en T_c conviene hacer el cambio de variable

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.61)$$

de tal suerte que, únicamente cerca de la transición de fase se pueden plantear las siguientes ecuaciones:

$$M \propto |t|^b \quad (2.62)$$

$$\chi \propto |t|^{-a} \quad (2.63)$$

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (2.64)$$

en donde M , χ y ξ son la magnetización, la susceptibilidad magnética y la longitud de correlación; además a , b y ν se conocen como exponentes críticos. Resulta interesante notar que la longitud de correlación en el límite termodinámico también tiende a infinito, y éste no es el caso cuando en la práctica o en las simulaciones se trabaja con sistemas finitos y además relativamente pequeños. En dichos casos la longitud de correlación cerca del punto crítico tiende a lo más al tamaño lineal del sistema L , es decir

$$\lim_{t \rightarrow 0} \xi_L(t) \approx L \quad (2.65)$$

y por lo tanto la longitud de correlación para sistemas finitos nos lleva a la expresión

$$\xi_L \approx L \propto |t|^{-\nu} \quad (2.66)$$

Además, de las ecuaciones (2.63) y (2.64) se obtiene

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu} \quad (2.67)$$

con un factor de proporcionalidad todavía no determinado y no necesariamente constante.

El método de *escalamiento de tamaño finito* [12] consiste en sustituir la susceptibilidad del límite termodinámico $\chi(t)$ por la susceptibilidad que ocurre en sistemas finitos $\chi_L(t)$. Sin embargo, en sistemas finitos cerca de la temperatura crítica no hay divergencia, por lo que la ecuación anterior no tendría sentido, ya que la longitud de correlación sí presenta comportamientos singulares cuando la temperatura se acerca a su valor crítico. Para corregir esta situación se tiene que multiplicar a la expresión por un factor no constante que anule el comportamiento divergente para la susceptibilidad $\chi_L(t)$ en sistemas de tamaño finito. La principal idea es que será una función de proporcionalidad pero dependiente de la variable ξ/L . El factor de proporcionalidad se construye de tal forma que lejos de la región donde ocurre la transición de fase, $\chi_L(t) \approx \chi(t)$; mientras que en las vecindades de T_c la función no debe tener puntos singulares, a lo más debe tener un valor extremo. De esta forma es conveniente que la expresión para la susceptibilidad en sistemas de tamaño finito sea

$$\chi_L(t) = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0 \left(\frac{L}{\xi} \right), \quad (2.68)$$

con

$$\chi_0 \left(\frac{L}{\xi} \right) \propto \begin{cases} C & \text{si } L/\xi > 1 \\ \left(\frac{L}{\xi} \right)^{\gamma/\nu} & \text{si } L/\xi \rightarrow 0 \end{cases}. \quad (2.69)$$

La principal razón de la forma de χ_0 cerca de la transición de fase, es eliminar la divergencia en sistemas finitos, dado que la dependencia con ξ desaparecería, dependiendo el comportamiento sólo del tamaño del sistema finito. Conviene sin embargo reexpresar a χ_0 según la expresión

$$\chi_0 \left(\frac{L}{\xi} \right) = \left(\frac{L}{\xi} \right)^{\gamma/\nu} \tilde{\chi} \left((L/\xi)^{1/\nu} \right) \quad (2.70)$$

o despejando $\tilde{\chi}$,

$$\tilde{\chi} \left(\frac{L}{\xi} \right) = \left(\frac{L}{\xi} \right)^{-\gamma} \chi_0 \left((L/\xi)^{\nu} \right). \quad (2.71)$$

La expresión para la susceptibilidad en sistemas de tamaño finito se puede escribir

$$\chi_L = \xi^{\gamma/\nu} \left(\frac{L}{\xi} \right)^{\gamma/\nu} \tilde{\chi} \left((L/\xi)^{1/\nu} \right), \quad (2.72)$$

pero se tiene todavía el problema de una dependencia con ξ que es un parámetro propio de sistemas en el límite termodinámico y no finitos, por lo que podemos utilizar la ecuación (2.64) para dar una expresión final

$$\chi_L(t) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi} \left(L^{1/\nu} t \right). \quad (2.73)$$

A la función $\tilde{\chi} \left(L^{1/\nu} t \right)$ se le conoce como factor de escala, el término $L^{1/\nu} t$ se le llama variable de escala y es una combinación de las variables L y t . Se observa que por construcción, el factor de escala tiende a una constante cerca de la transición de fase, sin importar cuál sea el tamaño del sistema, es decir que se trata de una función válida para toda L con la peculiaridad de que los parámetros γ , ν y T_c son desconocidos pero fijos, a saber tienen el mismo valor para cualquier tamaño de sistema.

Despejando al factor de escala de la ecuación (2.73) se obtiene

$$\tilde{\chi} \left(L^{1/\nu} t \right) = L^{-\gamma/\nu} \chi_L(t). \quad (2.74)$$

La forma de encontrar estos valores consiste en encontrar la gráfica de la susceptibilidad para distintos tamaños de sistema y después hacer distintas combinaciones de valores para los tres parámetros desconocidos hasta encontrar la terna adecuada que haga que las $\tilde{\chi}$'s, sin importar el valor de L , represente a la misma función de la variable de escalamiento $L^{1/\nu} t = x$; esto se traducirá en encontrar los más adecuados valores de los tres parámetros que superpongan lo mejor posible a todos los factores de escala.

Hay que tomar en cuenta que hasta ahora al hablar de “los parámetros que mejor superpongan gráficas” no se es completamente cuantitativo. Existe una alternativa sencilla[12] para poder cuantificar valores e incertidumbres y ésta se obtiene tomando la temperatura de los pseudo-máximos de la observable en cuestión para los distintos tamaños finitos del sistema que se hayan simulado, que también es un punto máximo de la función de escala correspondiente.

Recordando que la variable de escalamiento está definida como

$$x = L^{1/\nu} t \quad (2.75)$$

y usando la ecuación (2.61), se puede despejar la temperatura para obtener

$$T = T_c(1 + xL^{-1/\nu}). \quad (2.76)$$

Cabe notar que máximos en la variable de escalamiento corresponden igualmente a máximos en las observables macroscópicas. Así, si las temperaturas pseudo-críticas $T_c(L)$ de la observable \mathcal{Q} se sustituyen en la variable de escalamiento, el resultado es el mismo x_0 , sin importar el tamaño del sistema, siempre y cuando se conozca el valor del exponente crítico ν . De esta forma, al sustituir $x = x_0$ en la ecuación (2.76), da como resultado una relación lineal entre $L^{-1/\nu}$ y $T_c(L)$. El problema es que el valor de ν se desconoce, por lo que se tiene que graficar $L^{-1/\nu}$ vs $T_c(L)$ para distintos valores “prueba” de ν , tomando como adecuado aquél que mejor ajuste los puntos a una recta. El parámetro que se usa para encontrar dicho ajuste, es el factor correlación de Pearson R^2 .

Capítulo 3

Simulaciones tipo Monte Carlo

En este capítulo se dan las bases de los procesos estocásticos conocidos como cadenas de Markov y su aplicación en métodos numéricos que se basan en el uso de números aleatorios, llamados métodos de Monte Carlo, los cuales se usan en la física para resolver problemas de distinta naturaleza. En nuestro caso los métodos de Monte Carlo se usan para obtener buenas aproximaciones de algunas distribuciones de probabilidad que sirven para entender la física de transiciones de fase simulando materiales con propiedades magnéticas.

3.1. Motivación

Los métodos de Monte Carlo, como métodos estocásticos, hacen uso de números aleatorios para resolver problemas de distinta índole en el ámbito de la física. En el presente trabajo los MC dan una “buena” aproximación de una *distribución de probabilidad* definida sobre alguna variable aleatoria. En este estudio se implementan dos algoritmos (Metrópolis tradicional y Wang–Landau) que conducen a dos distribuciones de probabilidad: la primera aproxima la distribución de probabilidad de Boltzmann para una fracción de estados representativos de un sistema que se encuentra bajo ciertas condiciones termodinámicas; la segunda conduce a una distribución de probabilidad uniforme en energía y magnetización, y es en realidad un objetivo intermedio que sirve para aproximar a la función de partición Z de la distribución de Boltzmann.

Como se planteó, el algoritmo de Metrópolis tiene como objetivo obtener la distribución de probabilidad de Boltzmann, pero sólo lo hace para una

temperatura y un campo magnético fijos cuando se trata de sistemas con propiedades magnéticas. Para ello, el algoritmo genera una cadena o sucesión de microestados que, a tiempos suficientemente grandes sólo visita una pequeña región del espacio de configuraciones, aquella que es más probable según la distribución de Boltzmann para un valor fijo de temperatura y campo externo. Esta oscilación reproduce las *fluctuaciones térmicas aleatorias del sistema para una temperatura y un campo externo fijos, es decir cuando se encuentra interactuando con un baño térmico y bajo la influencia de un campo magnético externo*. La desventaja del método es que si se requiere la distribución de probabilidad de Boltzmann para otros valores de temperatura y campo externo, es necesario generar una nueva cadena de Markov con esas condiciones.

Otro algoritmo muy usado, que es central en este trabajo, es el *algoritmo de Wang–Landau*[21]. Éste requiere una sola simulación para poder encontrar la distribución de probabilidad de Boltzmann para cualquier valor de temperatura y campo externo, gran ventaja respecto a Metropolis. El objetivo del algoritmo es encontrar una buena aproximación de la *función de partición*, es decir el factor de normalización de la distribución de probabilidad de Boltzmann. En esta ocasión se busca que a tiempos grandes, los microestados que se visiten en la cadena tengan una distribución de probabilidad tal que conduzcan a una distribución de probabilidad uniforme ¹ en el espacio de energías \mathcal{E} –o en el espacio de energía y magnetización $\mathcal{E} \times \mathcal{B}$ – del sistema definidas en la sección 2.1.

En el presente capítulo se explica cómo generar una cadena o sucesión de estados y que además tenga comportamientos como los planteados en los algoritmos anteriores a tiempos grandes.

3.2. Cadenas de Markov

Definición 3.2.1 (Proceso estocástico). Es una sucesión de variables aleatorias (X_0, X_1, \dots) , cada una definida sobre un espacio de microestados finito $\Omega = \{\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}, \dots, \sigma^{(2^N)}\}$. Además Ω tiene definida una distribución de probabilidad $\boldsymbol{\mu}(n) = (\mu_1(n), \mu_2(n), \dots, \mu_{2^N}(n))$, donde $\mu_i(n) = \mu(n, \sigma^{(i)})$ denota la probabilidad de que el sistema se encuentre en el microestado $\sigma^{(i)}$

¹No tiene que ser uniforme forzosamente, sino que puede ser cualquier distribución, pero al momento de hacer promedios estadísticos habrá que tomar en cuenta el sesgo de la probabilidad elegida.

al tiempo n .

La dinámica del proceso, es decir la probabilidad de elegir el microestado $\sigma^{(j)}$ al tiempo $n + 1$, depende de toda la historia del proceso, por lo que se tiene una probabilidad condicionada a los estados visitados en tiempos anteriores, que se denota

$$P(X_{n+1} = \sigma^{(j)} | X_n = \sigma^{(i)}, X_{n-1} = \sigma^{(i_{n-1})}, \dots, X_0 = \sigma^{(i_0)}). \quad (3.1)$$

Definición 3.2.2 (Cadena de Markov). Es un proceso estocástico con una distribución de probabilidad condicionada $P(X_{n+1} = s_j | X_n = s_i)$, es decir, que sólo depende del estado anterior del sistema, no de toda la historia de la cadena o sucesión de estados originada:

$$P(X_{n+1} = \sigma^{(j)} | X_n = \sigma^{(i)}) := P(X_{n+1} = \sigma^{(j)} | X_n = \sigma^{(i)}, X_{n-1} = \sigma^{(i_{n-1})}, \dots, X_0 = \sigma^{(i_0)}). \quad (3.2)$$

En una cadena de Markov, la probabilidad condicionada tiene la notación simplificada

$$P_{ij}(n) := P(X_{n+1} = \sigma^{(j)} | X_n = \sigma^{(i)}), \quad (3.3)$$

que sugiere la entrada (i, j) de una matriz de tamaño $2^N \times 2^N$, y que en principio es una matriz que sólo sirve para probabilidades condicionadas o matrices de transición en el tiempo n -ésimo del proceso.

Definición 3.2.3. A la matriz $P_{ij}(n)$ se le conoce con *matriz de transición* P , y al ser una matriz de probabilidades satisface que

$$\sum_{j=1}^m P_{ij}(n) = 1, \quad (3.4)$$

es decir, la suma sobre el renglón i -ésimo de la matriz es uno; en palabras, la condición dice que al tiempo $n + 1$, el sistema debe saltar a alguna configuración $\sigma^{(j)}$, para algún $j \in 1, 2, \dots, 2^N$.

Definición 3.2.4 (Cadena de Markov homogénea). Cadena construida con una matriz de transición independiente del tiempo del proceso, esto es:

$$P_{ij}(n) = P_{ij} \quad \forall n. \quad (3.5)$$

Definición 3.2.5 (Cadena de Markov inhomogénea). Cadena construida con una matriz de transición que depende del tiempo del proceso en que se aplica.

3.2.1. Cadenas de Markov irreducibles

En una **cadena de Markov irreducible** es posible crear un puente entre dos microestados cualesquiera a través de un número finito de pasos.

Definición 3.2.6. Se dice que el estado $\sigma^{(i)}$ comunica con el estado $\sigma^{(j)}$ si existe una n tal que $P(X_{m+n} = \sigma^{(j)} | X_m = \sigma^{(i)}) > 0$. Esto se denota $\sigma^{(i)} \rightarrow \sigma^{(j)}$. Si además $\sigma^{(i)} \rightarrow \sigma^{(j)}$ y $\sigma^{(j)} \rightarrow \sigma^{(i)}$ se dice que los estados se *intercomunican* y se denota $\sigma^{(i)} \leftrightarrow \sigma^{(j)}$.

Definición 3.2.7 (Cadena de Markov irreducible). Es una cadena de Markov tal que

$$\forall i, j \quad \sigma^{(i)} \leftrightarrow \sigma^{(j)}. \quad (3.6)$$

3.2.2. Cadenas de Markov aperiódicas

Definición 3.2.8 (Periodo de una cadena de Markov). $d(\sigma^{(i)})$ es el periodo del estado $\sigma^{(i)}$ si y sólo si

$$d(\sigma^{(i)}) = M.C.D.\{n \geq 1 : P_{ii}(n) > 0\} \quad (3.7)$$

con *M.C.D.* el máximo común divisor.

Definición 3.2.9 (Cadena de Markov aperiódica). Se dice que una cadena de Markov es aperiódica si

$$\forall i, \forall n \quad P_{ii}(n) > 0, \quad (3.8)$$

o si

$$\forall i \quad d(\sigma^{(i)}) = 1. \quad (3.9)$$

3.2.3. Distribuciones de probabilidad para procesos estocásticos

Definición 3.2.10. Una distribución de probabilidad μ definida sobre el conjunto (de estados) $\Omega = \{\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}, \dots, \sigma^{(2^N)}\}$ se denota con el vector $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)$ donde $\mu_i = \mu(\sigma^{(i)})$.

Definición 3.2.11 (Distribución estacionaria). Una distribución de probabilidad $\boldsymbol{\pi}$ de una cadena de Markov homogénea es *estacionaria* para la matriz de transición P , si

$$\boldsymbol{\pi}P = \boldsymbol{\pi}. \quad (3.10)$$

El teorema que se enuncia a continuación da las condiciones necesarias para que en una cadena markov exista una distribución estacionaria.

Teorema 3.2.1 (Existencia y unicidad de una distribución estacionaria). *Una cadena de markov irreducible y aperiódica tiene una distribución estacionaria y además es única.*

Teorema 3.2.2 (Convergencia de una cadena de Markov). *Sea (X_0, X_1, \dots) una cadena de Markov con matriz de transición $P_{ij}(n)$ irreducible y aperiódica con distribución inicial $\boldsymbol{\mu}(0)$. Sea $\boldsymbol{\pi}$ la distribución estacionaria para la cadena de Markov. Entonces se cumple que*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \boldsymbol{\mu}(n) = \boldsymbol{\pi}, \quad (3.11)$$

es decir

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_i(n) = \pi_i \quad \forall i. \quad (3.12)$$

3.2.4. Cadenas de Markov reversibles

Se puede demostrar que si una cadena de Markov es reversible, se tiene condición suficiente para que haya aperiodicidad e irreducibilidad [6]; a su vez, estas dos condiciones aseguran que las distribuciones de cada paso del proceso $\boldsymbol{\mu}(n)$, tiendan a una distribución límite $\boldsymbol{\pi}$, como lo asegura el teorema de convergencia 3.2.2; es conveniente entonces que la matriz de probabilidad que se construya satisfaga reversibilidad.

Definición 3.2.12 (Distribución reversible). Una distribución de probabilidad $\boldsymbol{\pi}$ es reversible para la cadena de Markov (X_0, X_1, \dots) (o para la matriz de transición P) si

$$\boxed{\pi_k P_{k,i} = \pi_i P_{i,k}}. \quad (3.13)$$

Además, y aunque la notación lo hace parecer trivial, $\boldsymbol{\pi}$ es una distribución estacionaria.

Definición 3.2.13 (Cadena de Markov reversible). A una cadena de Markov en la que existe una distribución de probabilidad reversible $\boldsymbol{\pi}$, se le llama cadena de Markov reversible.

El siguiente teorema enuncia las condiciones suficientes para tener una cadena de Markov reversible [6].

Teorema 3.2.3. *Si una cadena de Markov es reversible, entonces también es aperiódica e irreducible [6].*

Teorema 3.2.4. *Una cadena de markov satisface la ecuación de Chapman-Kolmogorov(C-K):*

$$\sum_{l=1}^k P_{il}(m, r)P_{lj}(n) = P_{ij}(m + n, r + s). \quad (3.14)$$

Es una expresión para la probabilidad de pasar del estado i en el tiempo $m + n$ a estado j después de $r + s$ pasos. Dice que esta probabilidad se puede ver como el producto de probabilidades debido a la independencia de eventos de las cadenas de markov. Primero se obtiene la probabilidad de que al tiempo m el sistema esté en el estado i y después de r pasos esté en un estado k ; después se mide la probabilidad de que al tiempo n el sistema esté en el estado k y s pasos después en el estado j . Este producto se da para cualquier estado k intermedio, por lo que la probabilidad total es la suma de todos estos productos.

3.3. Ecuación maestra

En esta sección se hace la deducción de la ecuación que describe el cambio en la distribución de probabilidad ($d\mu_i(n)/dt$) a lo largo del proceso estocástico. La probabilidad de estar en el estado j al tiempo $n + 1$ es la suma de todas probabilidades de estar en un estado i en el tiempo n y saltar al estado j al tiempo siguiente², es decir:

$$\mu_j(n + 1) = \sum_{i=1}^m \mu_i(n)P_{i,j}(n) \quad (3.15)$$

La deducción de la ecuación se hace para una proceso de Markov a tiempo continuo aunque también es válida para cadenas a tiempos discretos. De esta forma, se sustituye n por t , $n + 1$ por $t + \Delta t$, $P_{ij}(n)$ por $P_{ij}(t, \Delta t)$, y se busca una expresión para $\mu_i(t + \Delta t)$ equivalente a la ecuación (3.15), separando el término que corresponde a la probabilidad de permanecer en el mismo microestado i al tiempo $t + \Delta t$. Así se obtiene la ecuación

²Recordemos que $\mathbf{P}(A \cap B) = \mathbf{P}(A|B)\mathbf{P}(B)$.

$$\mu_i(t + \Delta t) = \sum_{k=1, k \neq i}^m \mu_k(t) P_{k,i}(t, \Delta t) + \mu_i(t) P_{i,i}(t, \Delta t), \quad (3.16)$$

donde se toma en cuenta que la probabilidad de transición debe estar normalizada, de tal forma que el segundo término de lado derecho toma la forma

$$\mu_{i,i}(t, \Delta t) = 1 - \sum_{k=1, k \neq i}^m P_{i,k}(t, \Delta t). \quad (3.17)$$

La ecuación que rije las probabilidades del sistema es llamada *ecuación maestra* y tiene la forma

$$\mu_i(t + \Delta t) = \sum_{k=1, k \neq i}^m \mu_k(t) P_{k,i}(t, \Delta t) + \mu_i(t) \left(1 - \sum_{k=1, k \neq i}^m P_{i,k}(t, \Delta t) \right). \quad (3.18)$$

Recordando que se puede utilizar (3.21) y reexpresar la ecuación como

$$\frac{\mu_i(t + \Delta t) - \mu_i(t)}{\Delta t} = \sum_{k=1, k \neq i}^m \mu_k(t) \frac{P_{k,i}(t, \Delta t)}{\Delta t} - \sum_{k=1, k \neq i}^m \mu_i(t) \frac{P_{i,k}(t, \Delta t)}{\Delta t}, \quad (3.19)$$

y por último tomando en límite cuando $\Delta t \rightarrow 0$, se llega a la expresión final

$$\boxed{\frac{d\mu_i(t)}{dt} = \sum_{k=1}^m \mu_k(t) w_{k,i}(t) - \sum_{k=1}^m \mu_i(t) w_{i,k}(t)}, \quad (3.20)$$

conocida como *ecuación maestra* y que es una ecuación de continuidad o conservación de probabilidad. Se ha sumado y restado el término $\mu_i(t) w_{i,i}(t)$ y se ha incorporado en cada suma del lado derecho. Además se ha denotado:

$$w_{ij}(t) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P_{ij}(t, \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.21)$$

como la tasa instantánea de probabilidad de transición del estado i al estado j en el tiempo t de la cadena; así, si se tienen valores Δt muy pequeños (i.e. $\Delta t \approx dt$), entonces

$$P_{ij}(t, dt) \approx w_{ij}(t) dt \quad (3.22)$$

La ecuación (3.20) rije el comportamiento temporal de las probabilidades y a partir de ella se desarrollan todos los algoritmos que describen el comportamiento de sistemas de nuestro interés.

Una distribución estacionaria debe cumplir que el cambio en la distribución de probabilidad respecto al tiempo durante el proceso es cero, por lo que se obtiene de la ecuación (3.20):

$$\sum_{k=1}^m \pi_k w_{k,i}(t) = \sum_{k=1}^m \pi_i w_{i,k}(t) \quad (3.23)$$

que se puede interpretar como un balance entre la suma total de la tasa de transición que lleva “hacia” el estado i con la suma total de la tasa de transición que lleva “fuera” del estado i . Cuando se trabaja sobre una distribución estacionaria, se dice que hay una condición de *balance*.

Ahora se debe remarcar la diferencia entre estar en equilibrio o tender a una distribución de equilibrio. Algunos algoritmos satisfacen que la cadena de Markov tiende a un valor fijo de probabilidad para cada estado i si se satisfacen las condiciones del teorema (3.2.2), y se dice que la probabilidad tiende a un valor estacionario, la diferencia aquí es que a partir de la ecuación maestra (3.20) se está obteniendo el límite cuando $t \rightarrow \infty$ y el lado izquierdo a cero, por lo que ahora se puede reescribir

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^m \pi_k(t) w_{k,i}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^m \pi_i(t) w_{i,k}(t) \quad (3.24)$$

Una manera sencilla de hacer válida la ecuación de balance es imponer el uso de una cadena de markov reversible, de tal suerte que la igualdad de la suma se cumple término a término. A esta condición se le conoce también como *balance detallado* y es válida para distribuciones de probabilidad estacionarias:

$$\boxed{\pi_j w_{ji} = \pi_i w_{ij}} \quad (3.25)$$

La diferencia con una cadena reversible es que aparecen las **tasas de probabilidades de transición** w_{ij} en lugar de las **probabilidades de transición** $P_{ij}(n)$ a tiempo discreto de la definición (3.2.12).

Capítulo 4

Dos algoritmos para MCMC

En este capítulo, se habla principalmente de dos métodos de Monte Carlo con cadenas de Markov (MCMC por sus siglas en inglés). En ambos casos se intenta predecir valores de variables macroscópicas u observables Q , en función de parámetros externos (que serán las variables independientes) como la temperatura (T) y/o el campo magnético externo (h), es decir $Q(T, h)$ en el caso más general. La dificultad principal es que la distribución de probabilidad de Boltzmann se conoce parcialmente, por lo que el objetivo principal de las simulaciones MCMC es aproximarlas numéricamente. En ambos algoritmos se hace un muestreo ponderado de las configuraciones del sistema, por lo que a final obtenemos únicamente una muestra pequeña de espacio de estados pero suficientemente representativa para lograr resultados numéricos aceptables.

4.1. Metropolis

El algoritmo de Metropolis [11][12] es un MCMC que usa la distribución de probabilidad de Boltzmann (2.22)–sin conocerla completamente, lo cual es genial – como distribución estacionaria para generar la cadena de Markov. El objetivo es que para tiempos grandes, las observables microscópicas fluctúen alrededor de un valor fijo, obteniendo de esta forma, al hacer un promedio, un valor para la observable macroscópica correspondiente. Así, sin conocer completamente a la distribución de probabilidad de Boltzmann¹ se

¹No se conoce totalmente ya que no se puede calcular el factor de normalización de la distribución, conocido como función de partición $Z(\beta, h)$

pueden aproximar variables macroscópicas. Cuando se usa el algoritmo de Metropolis, se encuentran variables macroscópicas sólo para un valor fijo de temperatura T (o β) y de campo externo h (si es el caso), porque la distribución de Boltzmann depende de estas dos variables: $p^B(\boldsymbol{\sigma}; \beta, h)$. Entonces, si se requieren variables macroscópicas del sistema en equilibrio para otros valores de β y h es necesario correr el algoritmo para estos nuevos parámetros.

Este método reproduce el comportamiento del sistema cuando es puesto en contacto con un baño térmico. Sin pérdida de generalidad, al inicio el sistema no se encuentra en equilibrio térmico con su baño. Es de esperarse por tanto, que el sistema después de un tiempo suficientemente largo, alcance el equilibrio térmico con su entorno (baño). Desde el punto de vista microscópico, cuando ésto sucede, se observan fluctuaciones en el sistema, es decir, saltos de una configuración a otra, de tal forma que si se hace un promedio temporal de alguna variable microscópica se obtiene un estimado de la variable macroscópica asociada, para la temperatura de equilibrio del sistema.

Computacionalmente hablando, al usar el algoritmo de Metropolis, la idea es simular tanto el proceso de equilibración térmica como las fluctuaciones microscópicas en equilibrio del sistema. Como ya se mencionó, se impone como distribución de probabilidad de equilibrio de la cadena de Markov, a la de Boltzmann:

$$\pi_i = \pi(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}) = \frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}; h)}}{Z(\beta, h)}, \quad (4.1)$$

con el inconveniente de que se no se conoce la distribución de partición $Z(\beta, h)$. En la expresión π_i corresponde a la distribución de probabilidad para la configuración i -ésima del sistema $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$.

4.2. Wang–Landau

En el algoritmo original, el objetivo principal del algoritmo de *Wang–Landau* [21] es encontrar la densidad de estados $g(E)$ del sistema a estudiar. Una vez que la densidad de estados ya ha sido calculada, toda la termodinámica del sistema puede ser resuelta usando la ecuación (2.28).

Para construir la densidad de estados, se usa una distribución de probabilidad no estacionaria² que empuja a la cadena a visitar *la mayor cantidad de*

²La distribución no es estacionaria, pero a tiempos grandes converge a una que sí lo es.

energías accesibles –no de configuraciones– al sistema con la misma frecuencia, obteniendo como resultado un *histograma “plano”*³. Con el propósito de generar un histograma plano, es conveniente entonces que un microestado σ tenga una distribución de probabilidad que sea inversamente proporcional al número de microestados que comparten la energía del microestado σ , es decir, inversamente proporcional la densidad de estados $g(E)$, donde E es la energía asociada al microestado σ , es decir, $E = E(\sigma)$. Se propone una relación inversa entre la distribución de probabilidad no estacionaria y la densidad de estados, dado que se busca que el algoritmo visite la mayor cantidad de energías accesibles al sistema. Si se toman los conjuntos \tilde{S}_i y $\tilde{S}_{i'}$ definidos en la ecuación (2.17) formados por microestados σ que tienen energías $E^{(i)}$ e $E^{(i')}$ respectivamente, se puede notar que sus cardinalidades son $g(E^{(i)})$ y $g(E^{(i')})$; de este modo y sin pérdida de generalidad, si $g(E^{(i)}) > g(E^{(i')})$, al realizar una caminata aleatoria en el espacio de configuraciones –usando una distribución de probabilidad uniforme en Ω –, se visitarán con mayor frecuencia microestados con energía $E^{(i)}$ que configuraciones con energía $E^{(i')}$. En el caso de Wang-Landau, como se requiere que la cadena visite la mayor cantidad de energías del sistema, la probabilidad debe tener mayor peso para configuraciones con una densidad de estados $g(E^{(i')})$ que para configuraciones con densidad de estados $g(E^{(i)})$, de donde se concluye que la relación debe ser inversa. Más aún, con una distribución de probabilidad proporcionalmente inversa, se genera además una visita homogénea en el espacio de energías \mathcal{E} . Por tanto en el algoritmo de Wang-Landau se usa una distribución de probabilidad no estacionaria para la cadena de Markov definida por

$$\pi_i = \pi(\sigma^{(i)}) \propto \frac{1}{g(E(\sigma^{(i)}))} = \frac{1}{g(E_i)} \quad \forall i = 1, 2, 3, \dots, 2^N, \quad (4.2)$$

en donde es importante mencionar que $E_i \neq E^{(i)}$, ya que el lado izquierdo es la energía correspondiente al i -ésimo microestado $\sigma^{(i)}$ y el lado derecho es la i -ésima energía, del espacio \mathcal{E} de energías accesibles al sistema.

Todo este análisis es correcto pero todavía no se ha logrado nada ya que, recordando el objetivo principal, la intención es obtener la densidad de estados del sistema, lo que quiere decir que en realidad a priori no la conocemos, y entonces no hay forma por el momento de utilizar (4.2).

³Es importante tener presente que la cadena de Markov se genera sobre el espacio de configuraciones Ω ; en el caso del algoritmo de Wang-Landau, la consecuencia es que con una distribución de probabilidad particular definida sobre los microestados del sistema, se obtiene una visita homogénea pero en el espacio de energías \mathcal{E} .

4.3. Razones de aceptación

Si suponemos que la condición de balance detallado (ecuación (3.25)) se satisface y además la cadena se desarrolla a tiempo discreto, en donde $\omega_{ij} \rightarrow P_{ij}$, tendríamos la expresión

$$\frac{P_{ji}}{P_{ij}} = \frac{\pi_i}{\pi_j}, \quad (4.3)$$

que tiene muchas posibles soluciones ya que hay dos parámetros desconocidos y sólo una ecuación.

La expresión para la probabilidad de transición se puede factorizar y reescribir como [12]

$$P_{ji} = \gamma_{ji} \cdot \alpha_{ji}; \quad (4.4)$$

el factor γ_{ji} se describe como una probabilidad de selección, y mide la probabilidad de que nuestro algoritmo partiendo de la configuración σ^j pueda acceder a otra σ^i . Esta probabilidad está enteramente determinada por nosotros. Por ejemplo, en un sistema de espines, dada una configuración inicial, los estados que le son accesibles dependen de cuántos espines se desee cambiar en cada paso de la simulación; de esta forma, si se voltea solo un espín se tendrá un conjunto de N configuraciones nuevas $\sigma^{(i)}$ accesibles desde la configuración $\sigma^{(j)}$; si volteamos dos espines, tendremos un conjunto distinto de nuevos microestados accesibles. Se puede decir que γ_{ji} es una especie de matriz de estados accesibles al sistema. El segundo factor α_{ij} es la probabilidad de aceptación del cambio de configuración propuesto por γ_{ji} .

En el problema que nos ocupa, en cada paso de la cadena se puede voltear únicamente un espín, por lo que

$$\gamma_{ji} = \begin{cases} \frac{1}{N} & \text{si } \sigma^{(j)} \leftrightarrow \sigma^{(i)} \text{ al voltear sólo un espín.} \\ 0 & \text{si } \sigma^{(j)} \leftrightarrow \sigma^{(i)} \text{ al voltear más de un espín.} \end{cases} \quad (4.5)$$

De esta forma se tiene que el lado izquierdo de la ecuación de balance detallado a tiempo discreto (4.3) se expresa:

$$\frac{P_{ji}}{P_{ij}} = \frac{\gamma_{ji} \cdot \alpha_{ji}}{\gamma_{ij} \cdot \alpha_{ij}} = \frac{\alpha_{ji}}{\alpha_{ij}}, \quad (4.6)$$

ya que $\gamma_{ij} = \gamma_{ji}$ usando la ecuación (4.5).

En vista de ésto, para poder determinar las probabilidades de transición P_{ji} , es necesario conocer las probabilidades de aceptación α_{ji} ya que la ecuación de balance detallado queda

$$\frac{\alpha_{ji}}{\alpha_{ij}} = \frac{\pi_i}{\pi_j}, \quad (4.7)$$

y al igual que la ecuación (4.3) se tienen muchas soluciones posibles ya que hay dos incógnitas en la expresión, a saber, α_{ji} y α_{ij} . El principal problema entonces es escoger una solución, la más eficiente posible para la cadena de Markov que se vaya usar.

En el caso del algoritmo de Metropolis, *balance detallado* toma la forma

$$\frac{\alpha_{ji}}{\alpha_{ij}} = \frac{\frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{\sigma}^{(j);h})}}{Z(\beta,h)}}{\frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{\sigma}^{(i);h})}}{Z(\beta,h)}} = e^{-\beta[H(\boldsymbol{\sigma}^{(j)})-H(\boldsymbol{\sigma}^{(i)})]} = e^{-\beta\Delta H}, \quad (4.8)$$

y se observa que la función de partición, que de hecho se desconoce, no aparece en la expresión final de la ecuación. Una posible solución a balance detallado, propuesta por Metrópolis *et al.* [11] es

$$\alpha_{ji} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta H} & \text{si } \Delta H > 0 \\ 1 & \text{si } \Delta H \leq 0 \end{cases}. \quad (4.9)$$

Por otro lado, en el algoritmo de Wang-Landau con la distribución de probabilidad discutida en la sección 4.2, la ecuación de balance detallado queda

$$\frac{\alpha_{ji}}{\alpha_{ij}} = \frac{\frac{c}{g(E(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}))}}{\frac{c}{g(E(\boldsymbol{\sigma}^{(j)}))}} = \frac{g(E(\boldsymbol{\sigma}^{(j)}))}{g(E(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}))} = \frac{g(E_j)}{g(E_i)} \quad (4.10)$$

y una vez más, no es necesario conocer el factor de proporcionalidad de la distribución sugerida por Wang y Landau [21]. De la misma forma que en el algoritmo de Metropolis, los autores sugieren como una posible solución para las matriz de probabilidades de transición:

$$\alpha_{ji} = \begin{cases} \frac{g(E_j)}{g(E_i)} & \text{si } \frac{g(E_j)}{g(E_i)} < 1 \\ 1 & \text{si } \frac{g(E_j)}{g(E_i)} \geq 1 \end{cases}. \quad (4.11)$$

4.4. Implementación del algoritmo de Wang–Landau

El algoritmo original tiene busca visitar todas las energías accesibles del sistema de manera homogénea; el algoritmo desarrollado en el presente trabajo, se basa en la propuesta hecha por Wang y Landau, teniendo como objetivo encontrar la densidad de estados aunque con una pequeña modificación : al principio se trata de visitar la mayor parte del espacio de estados (E, M) de manera uniforme⁴, construyendo un histograma sobre él, obteniendo de esta forma una valor bastante burdo para la función de densidad de estados $g(E)$ del sistema, para después proceder haciendo ajustes más “finos” y encontrar valores más precisos de $g(E)$. Por esta razón se trata de un algoritmo que usa cadenas *no Markovianas* que además no satisfacen la condición de balance detallado, pero que sin embargo convergen al valor adecuado de $g(E)$.

Sin embargo, en el presente trabajo se observó que el sistema pasa la mayor cantidad de tiempo mejorando valores extremos de la energía configuracional E . En contraposición para valores centrales de E o alrededor de cero, se observa que para una energía fija, hay valores de magnetización que M del sistema que nunca se visitan. Esto representa un gran problema si al Hamiltoniano del sistema se le agrega un término debido a factores externos como un campo magnético h .

Este algoritmo es eficiente y rápido, en cuanto a tiempo de cómputo, para una densidad de estados que depende únicamente de la energía configuracional E . El problema se presenta cuando se incluye al sistema un campo magnético externo h que modifica la función de partición y la hace adicionalmente dependiente de la magnetización del sistema, teniendo ahora una densidad de estados $g(E, M)$ con la que el algoritmo requiere una cantidad mucho mayor de recursos computacionales. En el presente trabajo se intentó variar un poco el algoritmo original para poder hacerlo un poco más eficiente aunque el resultado no fue satisfactorio. Se buscó obtener a $g(E, M)$ a través de $g(E)$, esperando que, aunque la probabilidad de saltar de un estado energético a otro sólo dependa de la energía, se logren visitar todas las magnetizaciones posibles para una energía dada. La conclusión fue que el algoritmo nunca visitó muchos estados (E, M) estadísticamente importantes para aproximar suficientemente bien a la función de partición $Z(\beta, h)$, por lo que ya no se siguió por esta línea de investigación.

⁴Uniforme significa que cada estado se visite el mismo número de veces.

En vista de lo anterior se usó el algoritmo de Wang-Landau pero para generar un histograma plano en *energía y magnetización*, en lugar de sólo energía. De la simulación, se notó que el algoritmo pasa más tiempo haciendo más precisas partes de $g(E, M)$ en regiones extremas de E , lo que tiene como consecuencia, una menor exactitud en dichas regiones.

En esencia el algoritmo para encontrar a $S(E, M)$ debe cumplir los siguientes pasos:⁵

1. Se inicializa la función $S(E, M) = 0 \quad \forall(E, M)$ y una variable $f = 1$, llamada factor de modificación.
2. Al azar, se elige una configuración inicial σ para el sistema en cuestión.
3. Al azar, se elige un espín de la red, que posiblemente cambiará su orientación.
4. Se calcula la energía y magnetización (E', M') , así como la densidad de estados $S(E', M')$ que tendría el sistema si este espín fuera volteado.
5. Se calcula la diferencia $\Delta := S(E', M') - S(E, M)$.
6. Según el valor de Δ :
 - a) Si $\Delta < 0$ se acepta el cambio del espín propuesto. Se actualiza el estado del sistema $(E, M) = (E', M')$. Se actualiza la función de partición $g(E, M) = g(E, M) + f$.
 - b) Si $\Delta > 0$, se elige un número aleatorio $r \in [0, 1]$ con las siguientes posibilidades:
 - 1) Si $e^{-\Delta} < r$ se acepta el cambio del espín propuesto. Se actualiza el estado del sistema $(E, M) = (E', M')$. Se actualiza la función de partición $S(E, M) = S(E, M) + f$.
 - 2) Si $e^{-\Delta} > r$ el cambio de espín propuesto no se realiza y sólo se actualiza la función de partición a $S(E, M) = S(E, M) + f$.
7. Este procedimiento se realiza hasta que todos los estados de energía que hasta el momento se han logrado visitar se han visitado por lo menos m veces. De lo contrario se repiten los pasos 1) a 6).

⁵El algoritmo que se describe es una extensión del presentado originalmente por Wang-Landau[21], para visitar la mayor cantidad posible de pares (E, M) , en lugar de sólo energías E .

8. Se actualiza el factor de modificación: $f = f/2$.
9. Se repiten los pasos 1 a 8, hasta que el factor de modificación f alcance cierto valor previamente establecido.

Recordando la ecuación (2.28), para obtener una observable macroscópica $\mathcal{Q} = \langle Q \rangle$, que como se indica, es el promedio pesado de la variable microscópica Q , es necesario conocer el valor de $Q(E, M)$. El problema es que en general $Q(E, M)$ no denota una función desde el punto de vista matemático⁶, sino a lo más *una relación*, por lo que en principio –y de hecho así sucede– el par (E, M) tiene asociado más de un valor de Q ⁷. Esta situación genera conflicto con la ecuación (2.28), que por su forma, acepta uno y sólo un valor de Q . Se elige entonces para resolver esta situación, asociar al par (E, M) , el promedio pesado \bar{Q} , hecho sobre todos los posibles valores del parámetro Q que llevan al estado (E, M) .

En vista de lo anterior, mientras el algoritmo está en ejecución se van almacenando para cada par de energía y magnetización (E, M) , los posibles valores del parámetro de orden, y cuando se termina la simulación, se le pide al programa que haga el promedio sobre dicha variable microscópica, para cada par (E, M) . Entonces se tiene ya la relación univaluada

$$(E, M) \longrightarrow \bar{Q} \quad \forall (E, M) \in \mathcal{B} \quad (4.12)$$

que ya se puede utilizar en la ecuación (2.28).

Este algoritmo funciona muy bien y ha mostrado reproducir resultados obtenidos en otras bibliografías [21] [7], sin embargo como se ha mencionado, con sistemas grandes el algoritmo se vuelve muy pesado y requiere mucha potencia computacional.

⁶Es decir, que Q no es univaluada en el espacio de energías y configuraciones $\{(E, M)\}$.

⁷Esto se debe a que hay casi siempre, más de un microestado σ relacionado con el par (E, M) , y por consecuencia, esos microestados no tienen forzosamente, el mismo valor de parámetro de orden.

Capítulo 5

Simulación computacional

La simulación por computadora para obtener la densidad de estados de diferentes materiales con propiedades magnéticas se hace en el lenguaje de programación *C++* utilizando clases, mientras que para el análisis y búsqueda de transiciones y diagramas de fase se usa *Julia*. El uso de clases en *C++* tiene el propósito de facilitar posteriores variantes de sistemas a analizar. Por otro lado se trabaja también una animación de sistemas en dos dimensiones para poder entender mejor el comportamiento de los materiales y distinguir el tipo de transición de fase.

5.1. Obtención de la densidad de estados

Para obtener la densidad de estados del sistema, se utilizó *programación orientada a objetos* con tres *clases* que describen completamente al sistema: la clase `red`, que describe la geometría, la clase `modelo` en donde se definen las variables microscópicas, y la clase `algoritmo` que define el MCMC a usar para estudiar al sistema. A continuación se describe brevemente cada clase.

5.1.1. Clase Red

En `Red` se simula la geometría del material como una red formada por *vértices* y conexiones entre ellos llamadas *aristas*, en donde para cada vértice se definen valores posibles en nuestro caso para las orientaciones de los espines. En el programa se generan redes con geometrías cuadradas y triangulares como *subclases* de la clase madre `red`, en donde cada vértice tiene

dos posibles valores (orientaciones del espín), a saber 1 y -1 . Las conexiones entre vértices definen el alcance de la interacción potencial interna, es decir la energía intermolecular. En ambos casos se ha pensado que las interacciones son a primeros vecinos, que significa que un átomo (espín) sólo puede interactuar con los vecinos más cercanos. En el caso de la red cuadrada, son cuatro los primeros vecinos y en la triangular son seis, como se describió en la sección 1.1.1. A esta sección del programa se le da la capacidad de modificar los valores de los espines, cambiando así el estado configuracional de nuestra simulación.

Se puede usar cualquier tipo de geometría para la red, incluso definir alguna completamente irregular, ya que la `subclase` sólo necesita la información de los vértices y las aristas.

Para una red con N espines, el programa necesita dos arreglos con N entradas:

- El primero asigna un valor a cada espín de la red, es decir, asigna un número a cada entrada del arreglo. Este arreglo define una configuración del sistema y se denotó en la sección 2.1 como σ , mientras que para el valor del espín i -ésimo se usó la notación σ_i .
- El segundo contiene la información de los vecinos de cada espín en la red. De esta forma, la entrada i -ésima del arreglo contiene una lista (arreglo desde el punto de vista computacional) de vecinos del espín i -ésimo, con lo que la red queda completamente definida.

5.1.2. Clase Modelo

En esta sección del programa se definen y calculan variables microscópicas: la magnetización, la energía configuracional, el Hamiltoniano y el parámetro de orden. Si se voltea un espín del sistema, se da lugar a una nueva configuración y por consecuencia se tendrán nuevos valores en las variables mencionadas, por tanto, también se deben calcular cambios y nuevos valores de las variables microscópicas de la manera más eficiente posible. En el programa se incluyen como subclases de la clase `Modelo`, al modelo de Ising ferromagnético y antiferromagnético. Es notable que la definición de algunas variables microscópicas, como el parámetro de orden, dependen del modelo como es de esperarse, pero también del tipo de red utilizado, así que la clase `Red` está en cierta forma anidada dentro de la clase `Modelo`.

El modelo de Ising original utiliza interacción entre espines a primeros vecinos, por lo que si se quisiera modelar una interacción un poco más compleja, habría que no sólo crear una nueva subclase en la clase `modelo`, sino también una nueva subclase en la clase `red` en donde cambiarían las conexiones entre vértices.

5.1.3. Clase Algoritmo

Se programa el algoritmo original de Metrópolis y el de Wang–Landau, pero para encontrar observables macroscópicas, transiciones y diagramas de fase del sistema en equilibrio, este trabajo se centra en el algoritmo de Wang–Landau, ya que, como se ha mencionado, sólo se requiere hacer una vez la simulación para encontrar toda la termodinámica del sistema. Se tienen dos versiones o subclases para Wang–Landau: uno para generar histogramas planos en el espacio \mathcal{E} , y otro para histogramas planos en el espacio $\mathcal{E} \times \mathcal{M}$, denominados `Wang–Landau–1D` y `Wang–Landau–2D` respectivamente. El algoritmo tiene la opción de utilizar múltiples caminantes en el espacio de configuraciones Ω , con el objetivo averiguar si el algoritmo podría ser más eficiente. Bajo esta situación, cada caminante requiere sus propias clases `red` y `modelo`, pero todos contribuyen a una única clase `algoritmo`.

5.2. Pruebas a la densidad de estados

Para saber si la densidad de estados obtenida por la simulación es correcta, hay que tener datos teóricos con qué contrastar. Recordando que en la ecuación (2.33) se tiene una relación entre la densidad de estados $g(E, M)$ y la entropía microscópica $S(E, M)$, para cada estado (E, M) accesible, si se conoce la entropía teórica, el error cometido es:

$$\epsilon(E, M) = \Delta S_{\text{exp}} - \Delta S_{\text{teo}} \quad (5.1)$$

con $\Delta S_{\text{exp}} = S_{\text{exp}}(E, M) - S_{\text{exp}}(E_0, M_0)$, $\Delta S_{\text{teo}} = S_{\text{teo}}(E, M) - S_{\text{teo}}(E_0, M_0)$, y (E_0, M_0) el estado base del sistema, donde en general se tiene que los estados bases experimental y teórico no coinciden, es decir, $(E_0, M_0)_{\text{exp}} \neq (E_0, M_0)_{\text{teo}}$.

De esta forma se puede definir la exactitud de la simulación, es decir, la medida de la proximidad de los valores teóricos a los valores experimentales. A continuación se puede tomar el promedio $\bar{\epsilon}$ de todos los errores y asignar la respectiva incertidumbre, dada por la desviación estándar $\sigma(\epsilon)$ de todos los

errores. Para poder descubrir alguna relevancia en el número de caminantes al momento de simular la entropía de algún sistema, en particular, una red cuadrada para el modelo de Ising ferromagnético. De manera similar se puede hacer un estimado de la precisión de la simulación, es decir, una medida de la repetibilidad de los resultados, para saber si es causalidad la obtención de “buenos” o “malos” resultados. Con este fin, se vuelve imprescindible hacer muchas repeticiones de la simulación, esperando que el resultado final de cada una sea “similar”. Se repite la simulación bajo las mismas condiciones, cierto número de veces. El error relativo en precisión, asociado al estado (E, M) de la simulación k -ésima es:

$$\varepsilon_p^{(k)}(E, M) = \left| \frac{\bar{S}(E, M) - S_k(E, M)}{\bar{S}(E, M)} \right|. \quad (5.2)$$

A continuación se calcula esta cantidad para todos los estados accesibles (E, M) obteniendo una precisión porcentual promedio $\bar{\varepsilon}_p^{(k)}$; luego se hace lo mismo para cada simulación y finalmente se obtiene el promedio de la precisión porcentual de todas las simulaciones hechas. Se espera que el resultado sea un valor cercano al 0 si la precisión del experimento es alta.

5.3. Obtención de variables macroscópicas y localización de transición de fase

Una vez obtenida la densidad de estados $g(E, M)$, se calculan observables macroscópicas en función de parámetros externos: la temperatura del baño térmico y la presencia de un campo magnético. Para ello se utiliza el lenguaje de programación *Julia*, en su parte interactiva *Jupyter*. Una vez calculadas las variables, se pueden localizar transiciones de fase en alguna de las gráficas *variables macroscópicas vs parámetros externos*. Son indicadores de transiciones de fase, la presencia de regiones suaves en las gráficas, que tienden a hacerse singulares conforme el tamaño del sistema aumenta. El método implementado para encontrar transiciones de fase es el *escalamiento de tamaño finito (FSS)*, descrito en la sección 2.8.1.

Capítulo 6

Resultados

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos con la simulación usando el algoritmo de Wang–Landau–2D. Como sistema de prueba se utiliza el modelo de Ising ferromagnético (y antiferromagnético) para una red cuadrada con condiciones periódicas a la frontera, del cual se conoce la solución exacta [9] siempre que se tengan sistemas pequeños (16×16 espines), por lo que es posible calcular la precisión y exactitud de la entropía. A continuación se estudia la influencia del número de caminantes sobre el espacio de configuraciones Ω , en el resultado de la simulación, particularmente en el tiempo de cómputo y en la exactitud. Finalmente se usa la simulación para estudiar los modelos de Ising (ferromagnéticos y antiferromagnéticos) en redes triangulares, para luego bosquejar el diagrama de fases del sistema.

6.1. Precisión de la simulación

Con el objetivo de medir la precisión de los resultados arrojados por la simulación se corre el programa varias veces para cuantificar la variación de los resultados entre simulaciones respecto a una media, y luego la desviación de la media respecto a algún valor teórico si existiera. Después de realizar 20 simulaciones para calcular la entropía de red triangular de 18×18 espines en el modelo de Ising ferromagnético, se obtiene un promedio mostrado en la figura 6.1.

Para hacer un análisis se toma el valor de entropía para cada posible par (E, M) , en cada una de las 20 simulaciones hechas. Así para cada par posible se tienen veinte valores supuestamente parecidos para hacer un promedio.

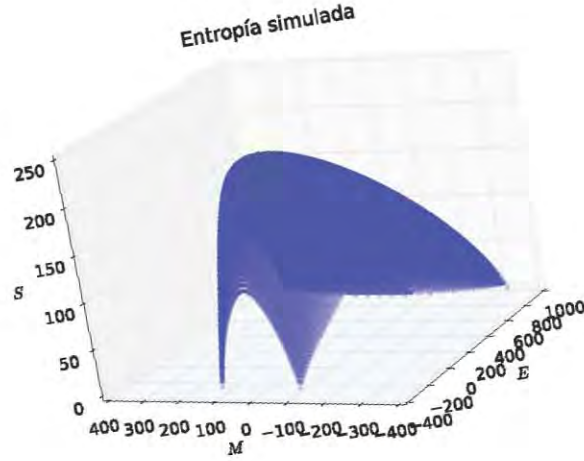


Figura 6.1: Entropía promedio para una red triangular de 18×18 en el modelo de Ising ferromagnético

Sin embargo, hay un error sistemático en cada simulación que tiene su origen en el desconocimiento del valor de la entropía para el *estado base* del sistema, dando lugar a posibles desplazamientos verticales (en el eje Z) que afectan al momento de calcular el promedio en cada punto (E, M) . A causa de esta observación, en realidad se debe obtener el promedio de los valores $(E, M) - (E_0, M_0)$, es decir del valor en la entropía pero siempre respecto a un estado base (E_0, M_0) , en principio distinto para cada simulación. A la entropía promedio $\bar{S}(E, M)$ se le asigna como incertidumbre la desviación estándar; al calcular el promedio de las desviaciones de \bar{S} para todos los pares (E, M) accesibles, se obtiene como valor $\bar{\sigma} = 1.35$. A su vez, y pensando que la desviación de cada posible par (E, M) no tiene necesariamente el mismo valor, se mide la desviación de estas desviaciones respecto de la desviación promedio $\bar{\sigma}$, y se obtiene como resultado $\sigma_{\bar{\sigma}} = 0.02$. Este valor muestra que en general se obtiene una desviación del valor promedio de entropía para cada par (E, M) bastante homogénea, llevando a la conclusión que los datos arrojados por la simulación son bastante precisos, excepto por un error sistemático que a priori no se consigue eliminar, pero que para efectos de cálculo del diagramas de fases y la termodinámica del sistema, no tienen impacto alguno en los resultados, según la solución exacta [9].

6.2. Exactitud de la simulación

La exactitud de la simulación mide la variación de los datos experimentales obtenidos por el método de Wang-Landau respecto a la solución exacta, en este caso, del modelo de Ising ya sea ferromagnético o antiferromagnético para una red cuadrada. Para abordar el problema primero se realiza el promedio de veinte simulaciones de la entropía para una red de 16×16 espines del modelo de Ising ferromagnético. Ahora simplemente se obtiene la diferencia absoluta del valor de la entropía de la solución exacta S_{teo} [9] y el valor de la entropía experimental S_{exp} de la simulación, para cada par (E, M) posible respecto al estado base; por último se obtiene el valor promedio de todas estas diferencias. En esta materia, se ha observado [1] una saturación en el error debido a la dinámica del factor de modificación f . Para disminuir este error, a partir de cierto momento en la simulación, el factor de modificación se cambia proporcionalmente a $1/t$, donde t es el tiempo de la simulación, sin embargo, en el presente trabajo no se trata esta cuestión.

Los resultados muestran un valor de $\bar{\epsilon} = 0.92$ que describe la variación absoluta que hay entre la entropía de la solución exacta y el valor promedio de las veinte simulaciones corridas; la diferencia parecería tener un valor grande pero debe recordarse que hay una saturación en el error y finalmente se observa que los resultados de las observables son bastante cercanas a las de la solución exacta. Además la desviación estándar del error $\sigma_{\epsilon} = 0.29$ es pequeña, lo cual implica un error en la entropía para cada par (E, M) de estados posibles bastante homogéneo, por lo que se puede inferir que la simulación arroja resultados bastante exactos excepto por el error sistemático antes mencionado.

6.3. Variando el número de caminantes

Es fundamental investigar si generar varias caminatas simultáneas para la construcción de la entropía presenta alguna ventaja, ya sea de tiempo o de calidad en los resultados. Se ha programado para que sin importar el número de caminantes en los posibles estados del sistema, el trabajo de cómputo sea el mismo (es decir se realicen el mismo número de sweeps¹). La meta

¹Recordar que 1 *sweep* consiste en N intentos de voltear espines en la red, donde N es el número total de espines del sistema. Así, en principio, se da oportunidad a todos los espines de cambiar su orientación.

es saber si la simulación arroja mejores resultados con un mayor número de caminantes y/o si reducen el tiempo de cómputo.

Se realizan simulaciones variando el número de caminantes, pero para cada valor en específico se realizan veinte repeticiones que finalmente se promedian. Por lo tanto se tiene el resultado de la entropía promedio para diferente número de caminantes. La simulación se hizo para 1, 8, 10, 16, 32, 50, 64, 128, 200, 256 caminantes en una red cuadrada de 16×16 espines para el modelo de Ising ferromagnético para poder contrastar los resultados con los datos exactos. Se muestra en la tabla 6.1 la desviación promedio de la entropía respecto a los datos exactos, así como su desviación.²

Caminantes	Exactitud promedio	Desviación
1	0.830348	0.461063
8	0.672921	0.111539
10	0.49318	0.111221
16	0.448089	0.106611
32	0.470883	0.103753
50	0.561977	0.128269
64	0.602096	0.128135
128	0.78235	0.148751
200	1.51023	0.310543
256	1.11886	0.160104

Cuadro 6.1: Resultados de la simulación en función del número de caminantes.

Se puede concluir entonces que aparentemente no hay diferencia o mejora en los datos experimentales cuando se coloca cierto número de caminantes en el espacio (E, M) .

6.4. Ising ferromagnético en redes cuadradas

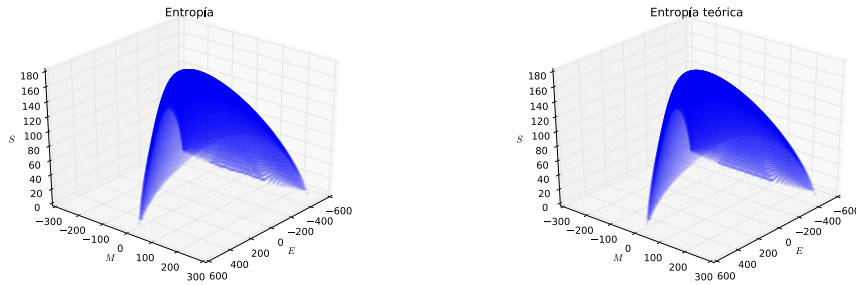
6.4.1. Entropía experimental y entropía exacta

Se muestra en la figura 6.2a la entropía obtenida con la simulación para un sistema de 16×16 espines, con 10 caminantes moviéndose en dos dimensiones para construir la entropía en función de la energía configuracional E

²Es decir la desviación de la gráfica experimental respecto a los datos teóricos.

y la magnetización microscópica del sistema M , en una red cuadrada con interacción a primeros vecinos, en el modelo de Ising ferromagnético con condiciones a la frontera periódicas.

Por otro lado, la solución exacta [9] para la entropía del mismo sistema se muestra en la figura 6.2b.



(a) Entropía simulada para el modelo de Ising ferromagnético, en una red cuadrada de 16×16

(b) Gráfica de la entropía teórica del modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada de 16×16

Figura 6.2: Entropía simulada y teórica para Ising ferromagnético en una red cuadrada

Para hacer una comparación entre los valores teóricos y los simulados se toma la diferencia entre ambas funciones mostrada en la figura 6.3. La comparación a nivel cualitativo muestra que la simulación arroja una entropía experimental bastante cercana a la entropía exacta[9], y que las zonas de mayor desviación corresponden a energías extremas, es decir, máximas y mínimas.

6.4.2. Transiciones de fase de segundo orden

Para localizar los puntos de transición de fase de segundo orden se toma como apoyo al parámetro de orden (magnetización absoluta, en el modelo de Ising ferromagnético) y la susceptibilidad magnética. Se puede notar en las graficas 6.4a y 6.4b que conforme el sistema es más grande, la transición se acentúa, recordando que según Wang y Landau [21], sólo cuando el campo externo es nulo ($h = 0$) ocurren esta clase de transiciones.

Para encontrar la temperatura de transición de fase T_c se usa el método de *escalamiento de tamaño finito*, y se observa que el valor de los exponentes

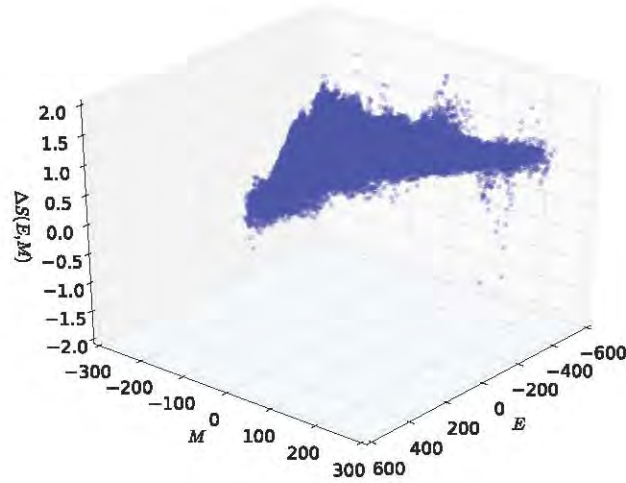
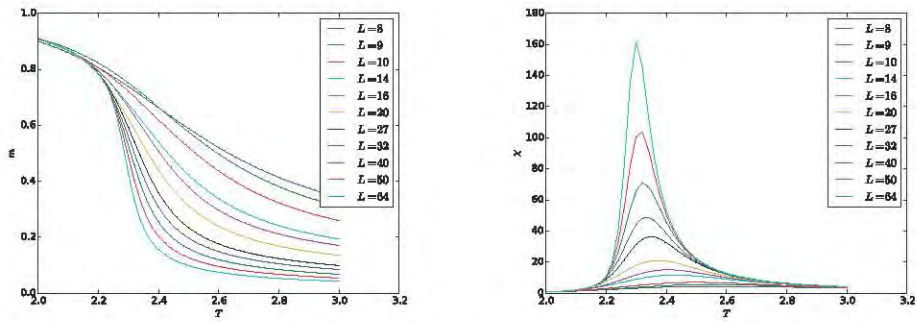


Figura 6.3: Diferencia entre valores exactos y valores simulados de la entropía para una red cuadrada con $L = 16$ del modelo de Ising ferrimagnético



(a) Magnetización por espín usando el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para distintos tamaños de sistema

(b) Susceptibilidad magnética por espín usando el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para distintos tamaños de sistema

Figura 6.4: Observables para el modelo de Ising ferromagnético

críticos que mejor definen a la función de escalamiento de la susceptibilidad magnética son $\nu = 1.02 \pm 0.01$ y $\gamma = 1.74 \pm 0.01$ para un valor de $T_c =$

2.26 ± 0.01 , como se puede observar en la figura 6.5. Para presentar estos valores se varió de forma manual, los exponentes y temperaturas críticas, encontrando de forma visual el mejor colapso de todas las gráficas en una sola. Éste método, muy susceptible a errores humanos puede servir para dar una idea bastante aproximada de la región en la que hay que buscar de manera más objetiva, los valores de los parámetros críticos.

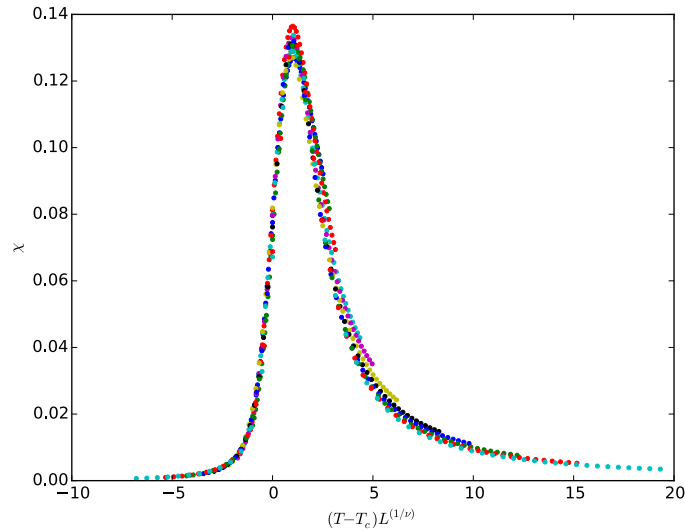


Figura 6.5: Se grafica la susceptibilidad magnética en función de la variable de escalamiento para diferentes tamaños de sistema. Con los valores $\nu = 1.02$, $\gamma = 1.74$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.26$ se da el mejor colapso en las gráficas de función de escalamiento de la susceptibilidad magnética para diferentes tamaños de sistema.

La manera objetiva de obtener la temperatura crítica en el límite termodinámico, consiste en buscar el mejor ajuste lineal de la gráfica $T_c(L)$ vs $L^{-1/\nu}$ al variar el exponente crítico ν (figura 6.6). La coincidencia no es perfecta comparando con los datos arrojados por el escalamiento de tamaño finito, pues únicamente se trabaja con los puntos máximos de cada sistema finito simulado.³

Si se repite el análisis para un sistema en presencia de un campo externo, $h = 2$ por ejemplo, la transición de fase desaparece. En la figura 6.7a ya

³Estos valores máximos podrían tener bastante dispersión, dependiendo de la simulación y del conjunto de temperaturas elegidas para hacer el análisis.

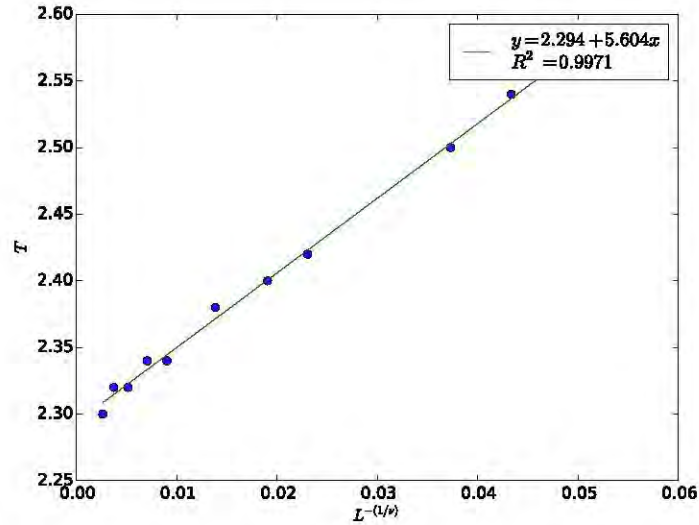
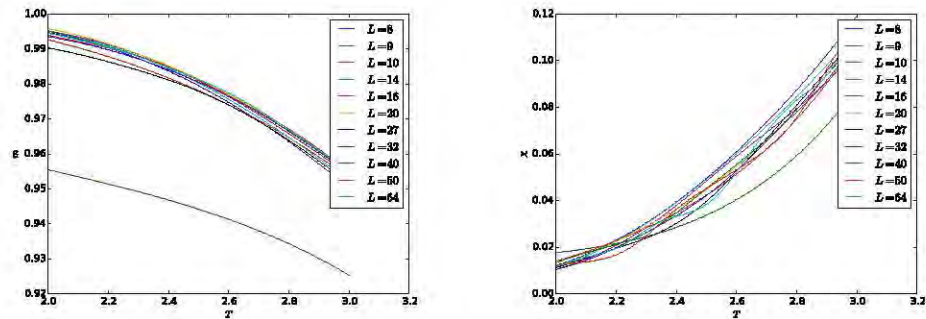


Figura 6.6: Con los valores $\nu = 0.7$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.294$ se encuentra el mejor ajuste lineal a la serie de datos.

no hay una región que represente orden en el sistema y otra que hable de desorden.

Un comportamiento sin transición también puede ser observado al graficar la susceptibilidad magnética en la figura 6.7b.



(a) Magnetización por espín

(b) Susceptibilidad magnética por espín

Figura 6.7: Se grafican dos observables para varios tamaños de sistema. No se encuentran tendencias a un comportamiento singular cuando el tamaño del sistema aumenta.

Usando el *escalamiento de tamaño finito* las gráficas sin importar los

valores de los exponentes y temperatura críticos, no presentan un colapso. Esto es síntoma de la desaparición de una transición de fase de segundo orden, comportamiento peculiar para estos sistemas y que son consistentes con los estudios previos hechos.

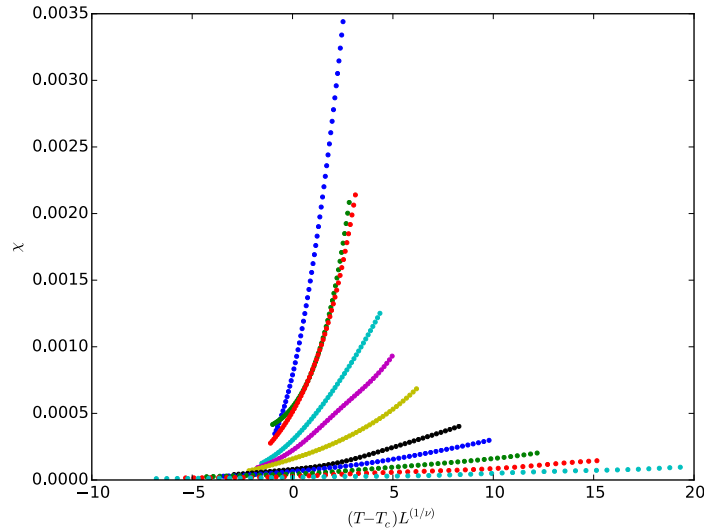


Figura 6.8: Si se grafica la susceptibilidad magnética en función de la variable de escalamiento, no se observa transición de fase, es decir no se presenta un comportamiento de colapso de las gráficas para distintos tamaños de sistema, en una sola. En particular, la gráfica se muestra para los valores $\nu = 1.02$, $\gamma = 1.74$ y para una temperatura crítica $T_c = 2.26$, con un campo externo $h = 2$.

6.4.3. Transiciones de fase de primer orden

En el modelo ferromagnético se pueden observar transiciones de fase de primer orden. Éstas ocurren únicamente cuando la temperatura del sistema es fija y menor que la temperatura crítica encontrada en la transición de segundo orden. El parámetro que se varía es el campo externo y lo que se pretende observar es una discontinuidad en la magnetización macroscópica al cruzar por $h = 0$. Como en casos anteriores, para sistemas finitos la curva que se observa es continua y suave, pero a medida que se aumenta el tamaño del sistema, la discontinuidad empieza a bosquejarse. En la figura 6.9 se muestra la magnetización en función del campo externo, para una temperatura $T =$

$1.0 < T_c \approx 2.26$ y se observa claramente que en el límite termodinámico hay una transición de fase para $T = 1$ y $h = 0$.

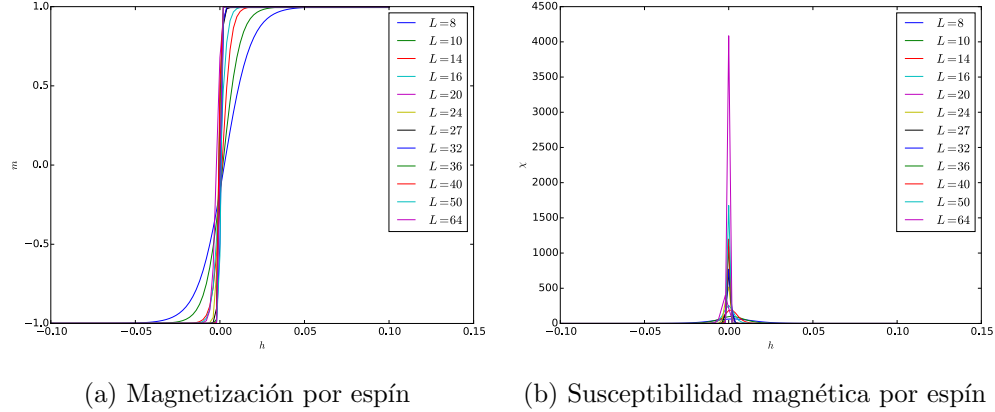


Figura 6.9: Observables en función del campo externo h para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada para una temperatura fija $T = 1$. Hay una transición de fase de primer orden en $h = 0$.

Al hacer este análisis para temperaturas menores que la temperatura crítica encontrada en transiciones de segundo orden, se observa el mismo comportamiento, por lo que se puede concluir que para toda temperatura $T < T_c$ hay transiciones de fase en $h = 0$. Por otra parte, al estudiar el comportamiento del sistema para $T > T_c$ se concluye que no hay transición de fase para valor alguno de h , como puede observarse en la figura 6.10.

6.5. Ising antiferromagnético en red cuadrada

De la misma forma se pueden comparar los datos para el modelo de Ising antiferromagnético, y a partir del hamiltoniano se puede deducir que la entropía de estos modelos es la misma del modelo ferromagnético, pero con una rotación de 180° respecto al eje z , como se muestra en la figura 6.11. Esta simetría es consecuencia del cambio de signo en la definición de la energía de interacción entre espines, cuando se transita de modelos ferromagnéticos a modelos antiferromagnéticos.

Sin embargo hay una gran diferencia al momento de estudiar las transiciones de fase, ya que bajo influencia de campos magnéticos externos es-

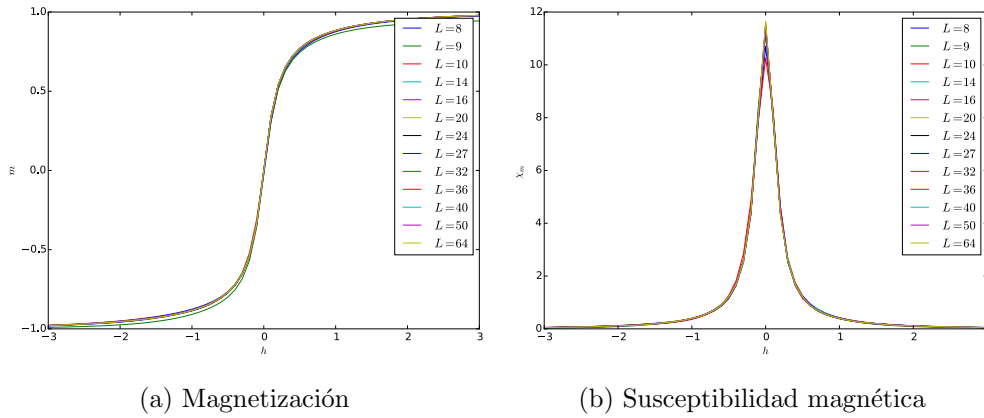


Figura 6.10: Observables en función del campo externo h para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada a una temperatura fija $T = 3 > T_c \approx 2.26$. Todas las curvas son suaves; no se observan comportamientos singulares conforme se aumenta el tamaño del sistema por lo que no hay transición de fase.

tos modelos sí presentan singularidades o discontinuidades en variables macroscópicas, es decir transiciones de fase. En la figura 6.12 se muestran las gráficas distintas variables termodinámicas para un campo externo $h = 2$ y se observan comportamientos típicos de una transición de fase en el parámetro de orden, para una temperatura $T_c \approx 1.85$. Es importante notar que la magnetización en estos modelos siempre es cercana a cero, razón por la cual es indispensable usar un parámetro de orden, conocido como *magnetización staggered* para estudiar interacciones antiferromagnéticas.

Utilizando el método de *escalamiento de tamaño finito*, y variando manualmente los exponentes y temperatura críticos se puede observar que la transición de fase ocurre a una temperatura $T_c = 1.86 \pm 0.01$ cuando $h = 2$, que según la figura (6.13) es donde las gráficas de la función de escalamiento tienen un mejor empalme cerca del máximo absoluto.

Utilizando el método de ajuste lineal que es una simplificación del *escalamiento de tamaño finito* la gráfica resultante muestra en la figura 6.14 la mejor recta para los parámetro críticos $\nu = 1.2$ y $T_c = 1.8597$. En este caso el ajuste lineal hace coincidir bastante bien la temperatura crítica utilizando el método de colapso de funciones de escalamiento.

Ahora se puede repetir el proceso de encontrar el mejor ajuste lineal del método de escalamiento finito para un conjunto de valores h para así obtener un bosquejo bastante decente del diagrama de fases del modelo de

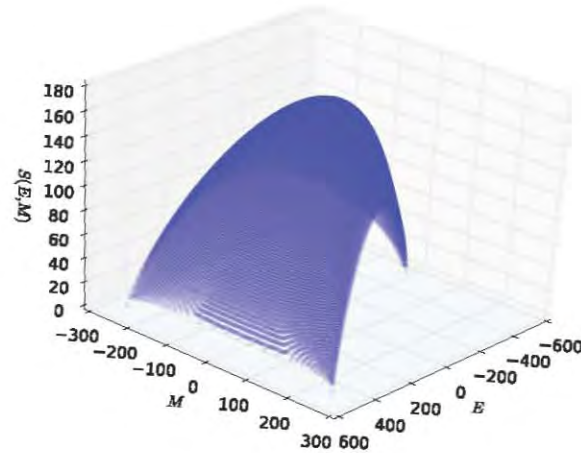


Figura 6.11: Entropía para una red cuadrada de 16×16 espines del modelo de Ising con interacción antiferromagnética

Ising antiferromagnético en una red cuadrada con condiciones periódicas a la frontera y con interacción a primeros vecinos. El diagrama de fases que se ha encontrado se muestra en la figura 6.15.

Al analizar el modelo ferromagnético se encuentra que en ausencia de campo externo, la transición de fase desaparece; y ocurre lo mismo si se analizan las observables para campo externos $h \geq 4$. Ésto se puede concluir de las gráficas porque se observan curvas suaves que no tienden a convertirse en curvas con discontinuidades o puntos singulares conforme se aumenta el tamaño del sistema.

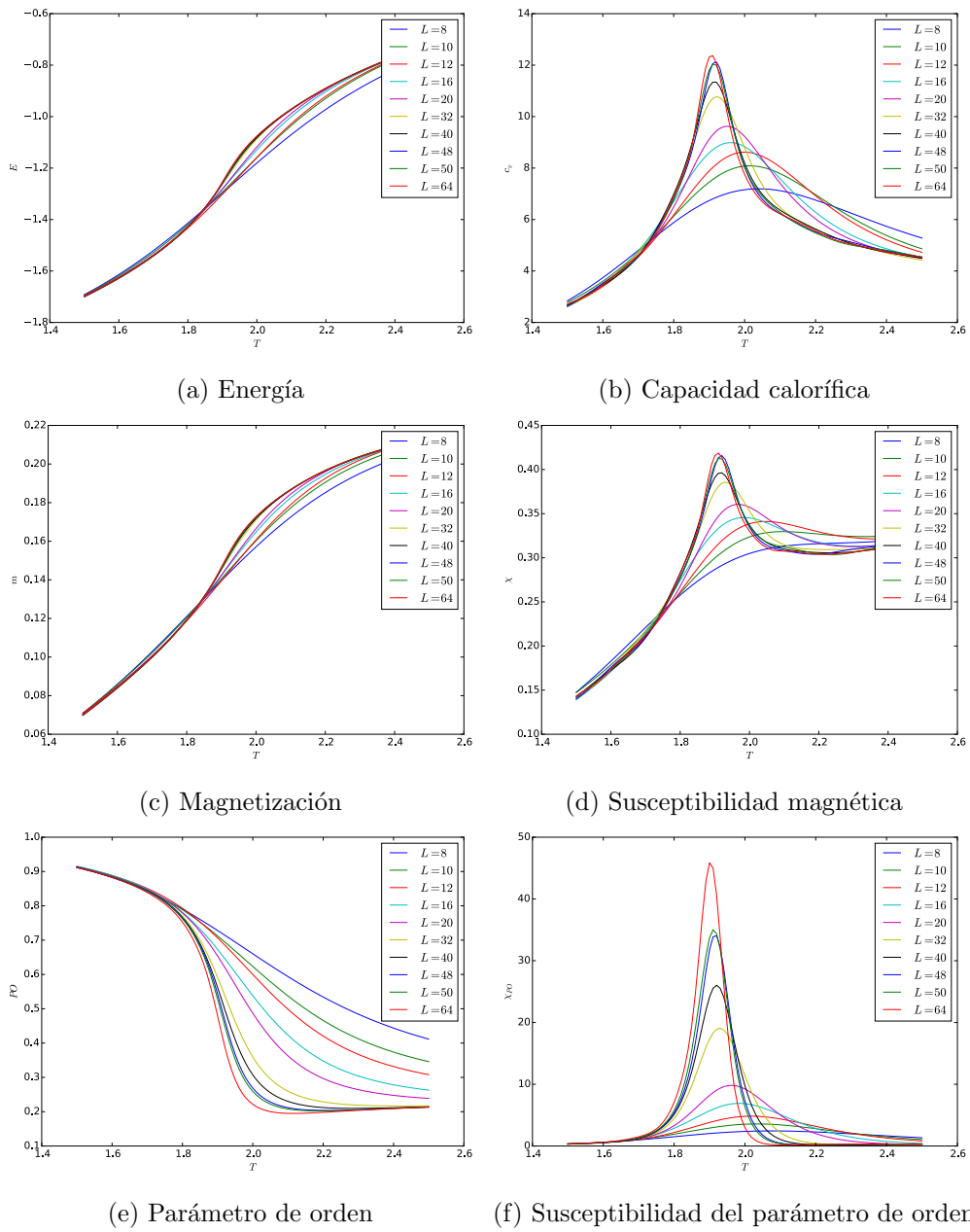


Figura 6.12: Observables para el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada en presencia de campo externo $h = 2$. Hay una transición de fase de segundo orden en $T_c \approx 1.85$

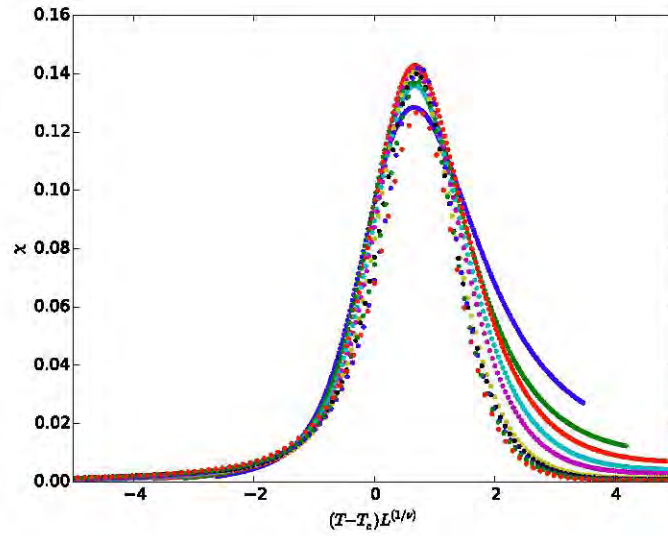


Figura 6.13: Función de escalamiento finito para distintos tamaños del modelo de Ising antiferromagnético en una red cuadrada para un $h = 2$. El mejor colapso ocurre los valores en los coeficientes de escalamiento de $T_c = 1.86$, $\gamma = 1.7$ y $\nu = 1.2$

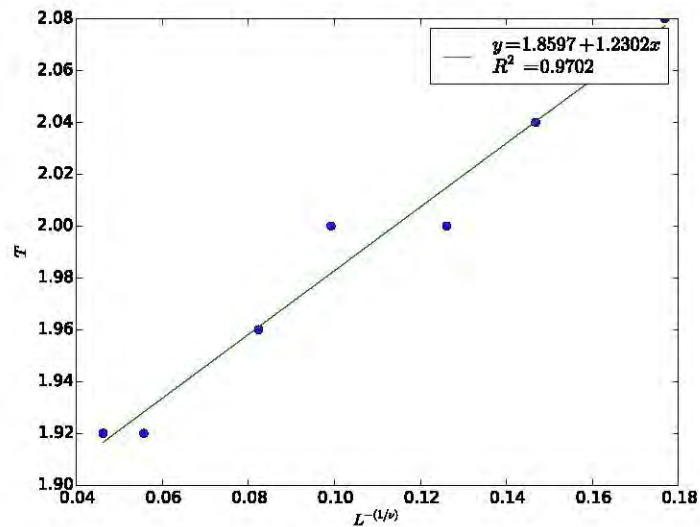


Figura 6.14: Ajuste lineal usando FFS para el modelo de Ising antiferromagnético en una red cuadrada, con campo externo $h = 2$. El mejor ajuste lineal se logra para los valores en los coeficientes críticos de $T_c = 1.8597$ y $\nu = 1.2$.

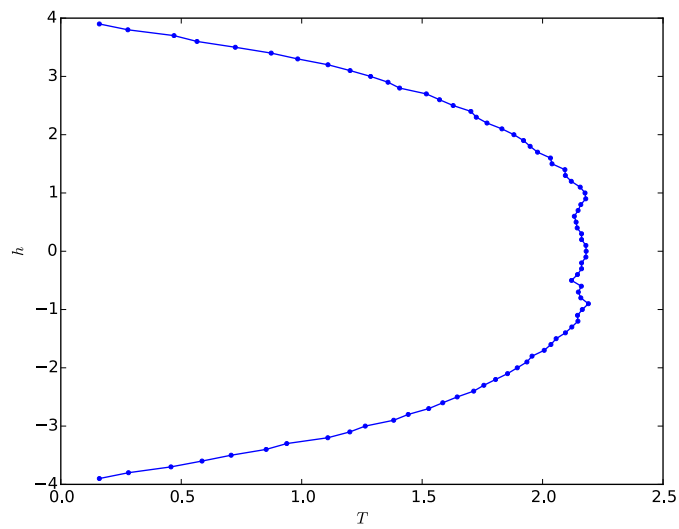


Figura 6.15: Diagrama de fase del modelo de Ising antiferromagnético para una red cuadrada. La curva representa transiciones de fase, todas ellas de segundo orden.

6.6. Ising ferromagnético en redes triangulares

En este caso la entropía se muestra en la figura 6.16 y el parámetro de orden es la tradicional magnetización macroscópica.

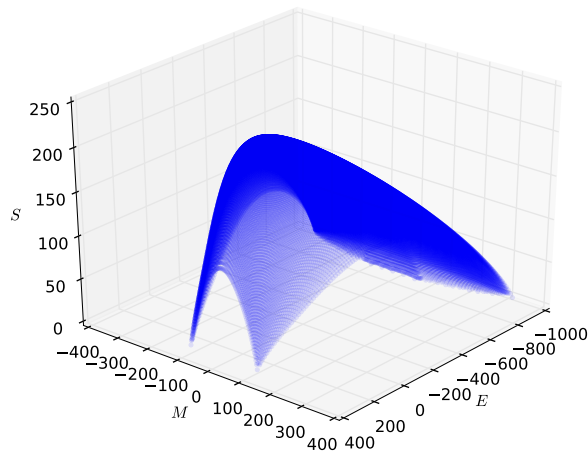


Figura 6.16: Entropía para una red triangular de 18×18 espines en el modelo de Ising ferromagnético.

6.6.1. Transiciones de fase de segundo orden

En la figura (6.17) se muestran las observables para el modelo de Ising ferromagnético en ausencia de campo magnético externo. La magnetización como parámetro de orden muestra una transición de fase de segundo orden cuando $h = 0$ cuando la temperatura es $T_c = 3.66 \pm 0.08$. En este modelo, la temperatura crítica es mayor a la encontrada en redes cuadradas debido a que en redes triangulares, la interacción a primeros vecinos se da con seis espines, en lugar de los cuatro que presenta la red cuadrada, lo que tiene como consecuencia valores extremos más grandes, en la energía de interacción de un espín.

El resultado se obtiene con el método de *escalamiento de tamaño finito* (*FSS*) simplificado, que consiste en encontrar la relación entre $T_c(L)$ y L (figura (6.19)) aplicado a la susceptibilidad magnética y de donde se puede extraer al $T_c = T_c(\infty)$. Usando el método *FSS* habitual, se varían los exponentes y la temperatura críticos de forma manual, encontrando el mejor colapso de datos en la figura (6.18) para $\gamma = 1.46$, $\nu = 0.84$ y $T_c = 3.64$. Comparando los métodos *FSS* habitual y simplificado se observa una muy pequeña variación en los valores de ν y T_c . Por otro lado, en presencia de campo externo, se observa que las transiciones de fase de segundo orden desaparecen cuando se varía la temperatura.

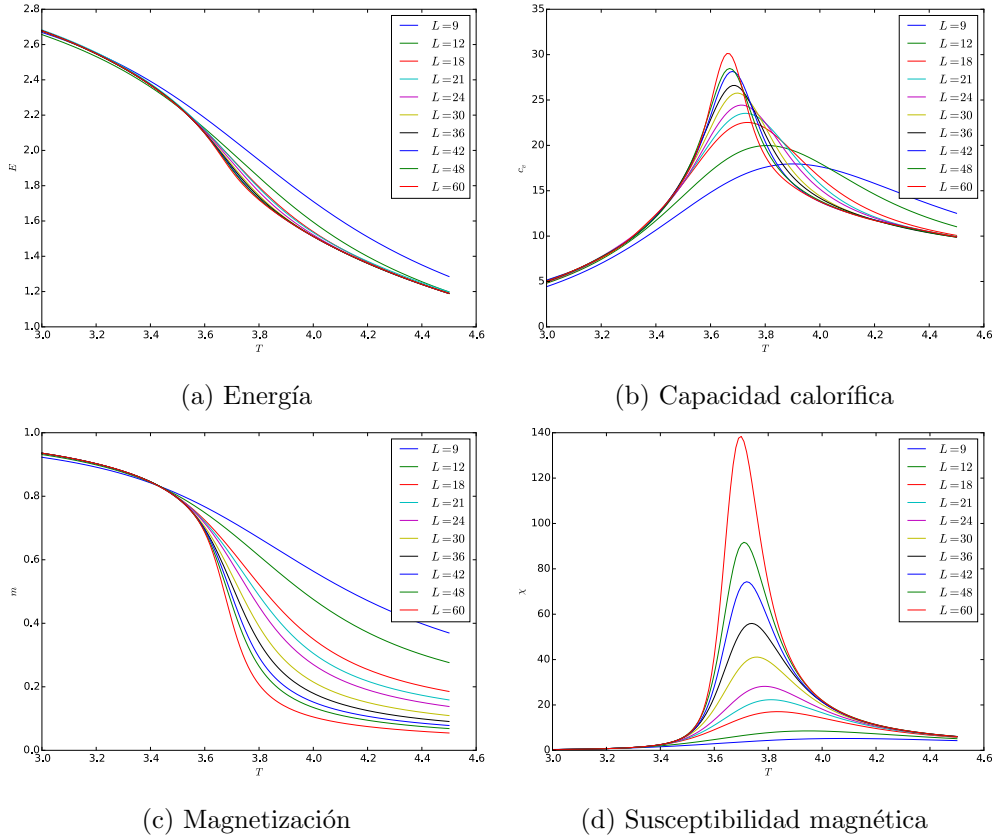


Figura 6.17: Observables para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular sin campo externo h . Hay una transición de fase de segundo orden en $3 < T_c < 4$

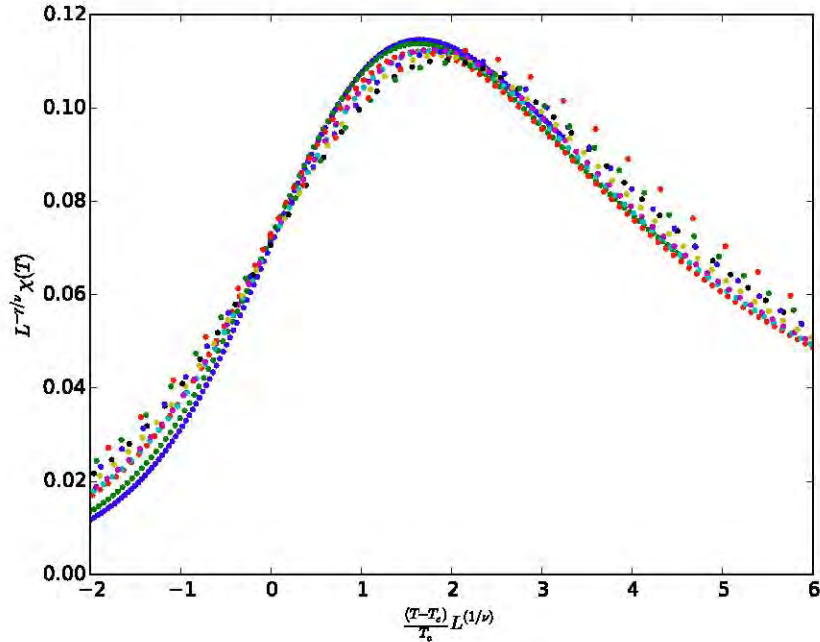


Figura 6.18: Usando el método FSS se varían manualmente los exponentes críticos y la temperatura crítica para obtener el mejor colapso de datos cerca del máximo en la curva. El mejor resultado se da para $\nu = 0.84$, $\gamma = 1.46$ y temperatura crítica $T_c = 3.64$.

6.6.2. Transiciones de fase de primer orden

En modelos ferromagnéticos se pueden encontrar transiciones de fase de primer orden cuando se varía el campo externo h y la temperatura se mantiene fija pero por debajo de la T_c encontrada en la transición de segundo orden. En la figura (6.20) se grafican las variables macroscópicas para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular cuando la temperatura es $T = 2.0 < T_c \approx 3.66$. Si se repite este procedimiento para valores $T < T_c$ se observa una transición de fase de primer orden, mientras que para $T > T_c$ la transición de fase desaparece (ver figura (6.21)).

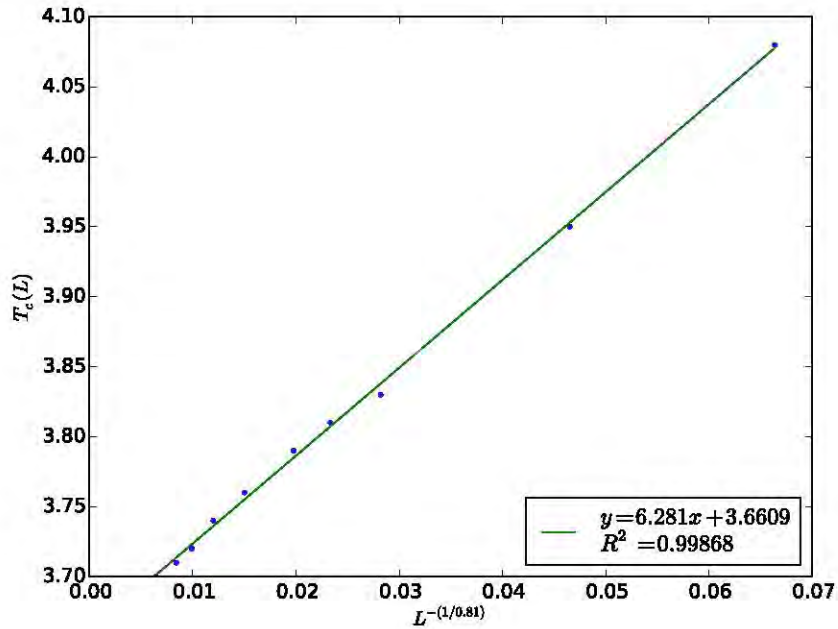
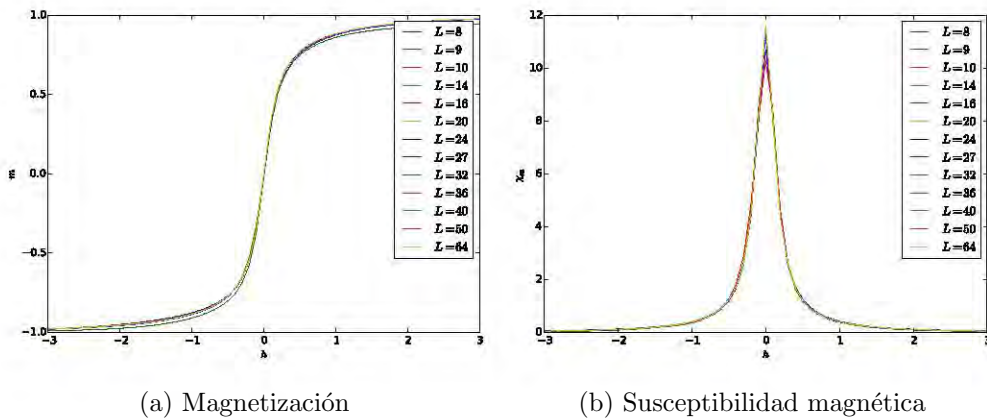


Figura 6.19: Se usó el método FFS para encontrar la mejor aproximación lineal de los datos $L^{(1/\nu)}$ vs $T_c(L)$ donde ν es un parámetro variable. El mejor resultado se da para el exponente crítico $\nu = 0.81$ y temperatura crítica $T_c = 3.66 \pm 0.08$.



(a) Magnetización

(b) Susceptibilidad magnética

Figura 6.20: Observables por espín, para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular variando el campo h a temperatura fija $T = 3.0$. Se observa una transición de fase de primer orden para $h \approx 0.0$.

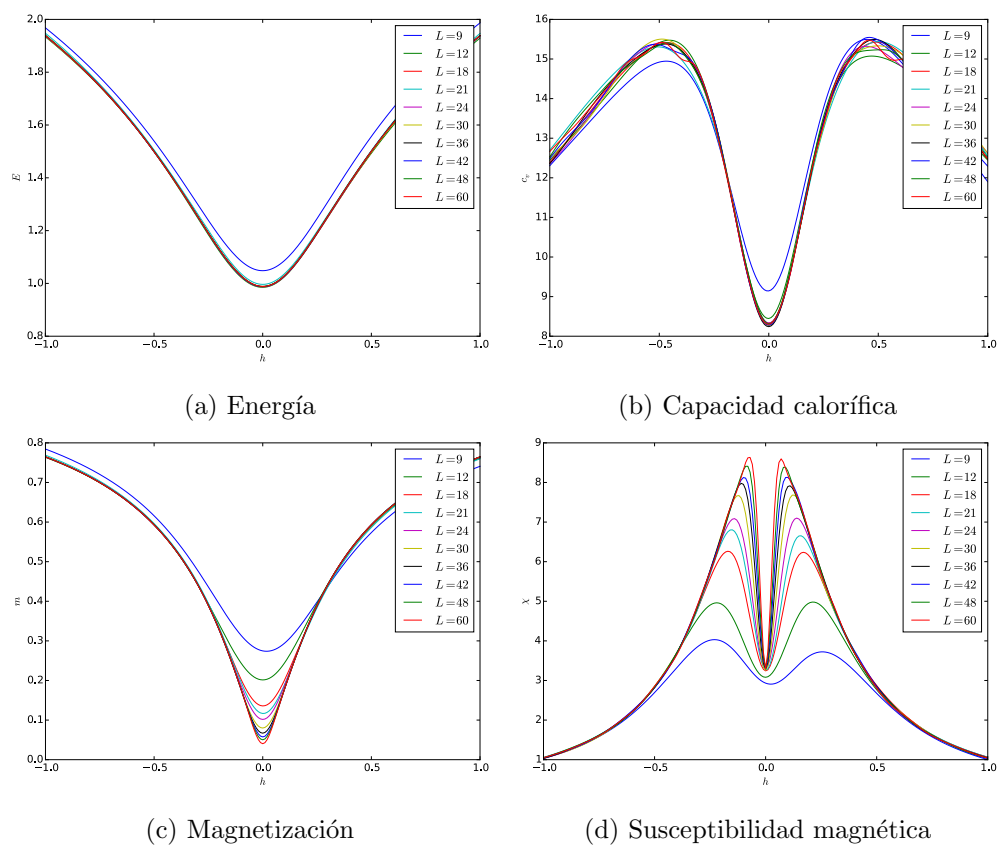


Figura 6.21: Observables por espín, para el modelo de Ising ferromagnético en una red triangular variando el campo h a temperatura fija $T = 5.0$. Cuando $T > T_c$ no hay transiciones de fase de primer orden.

6.7. Modelo de Ising antiferromagnético en redes triangulares; fenómeno de frustración.

En particular podemos trabajar con la red triangular de un modelo de Ising antiferromagnético con frustración y hacer una muy buena predicción del diagrama de fases. La entropía obtenida con la simulación, en el caso de una red de 18×18 espines, utilizando el algoritmo de Wang-Landau para dos variables, a saber (E, M) , y con 12 caminantes recorriendo el espacio de estados, del sistema se muestra en la figura 6.22.

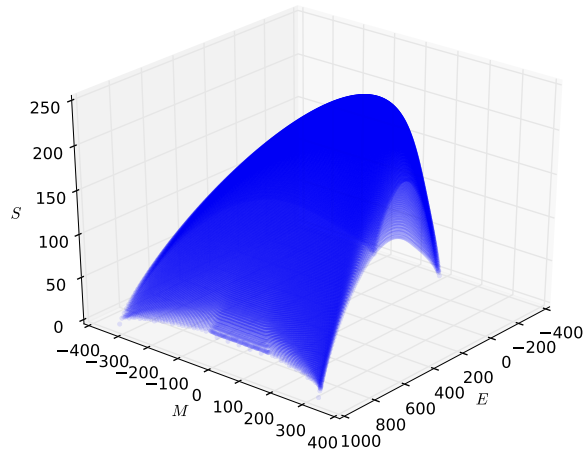


Figura 6.22: Entropía en función de energía y magnetización $S(E, M)$ en una red triangular para el modelo de Ising antiferromagnético para una red de 12×12 espines.

Para este modelo hay una gran cantidad de microestados que conducen al estado base en términos del Hamiltoniano $H(\sigma)$. Ésto se debe al fenómeno de frustración que ocurre en redes con geometría triangular.

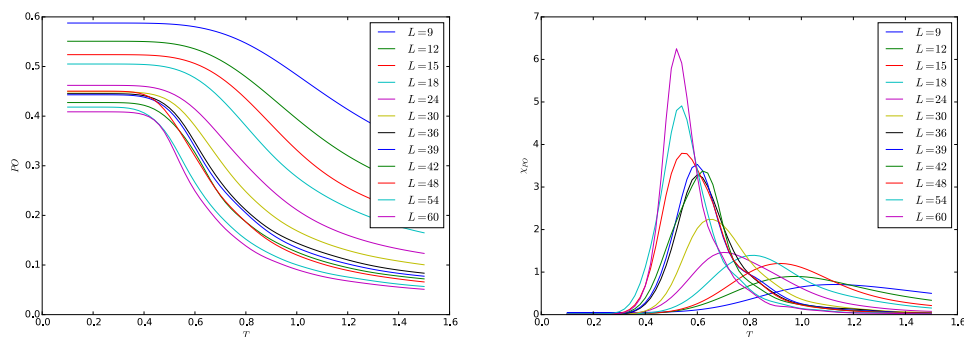
6.7.1. Transiciones de 2º orden

Con la entropía simulada a través del algoritmo Wang-Landau se pueden encontrar transiciones de fase de segundo orden al estudiar variables

macroscópicas como el parámetro de orden (*magnetización staggered*), la susceptibilidad del parámetro de orden y/o el cumulante de Binder.

Variando temperatura, en ausencia de campo magnético externo

Si se hace un análisis del sistema para un campo externo $h = 0$, una transición de fase de segundo orden ocurre como lo muestra la figura 6.23 en las gráficas del parámetro de orden y su susceptibilidad. Es notable observar que cuando se analizan interacciones antiferromagnéticas, la magnetización absoluta y su susceptibilidad no funcionan para buscar transiciones de fase, ya que como se observa en la figura 6.24, su valor es prácticamente nulo para cualquier temperatura.



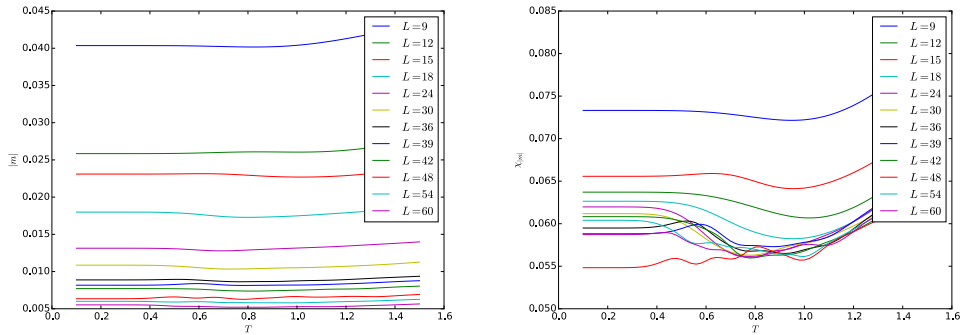
(a) Parámetro de orden por espín.

(b) Susceptibilidad por espín del parámetro de orden.

Figura 6.23: En ausencia de campo externo se observa transición de fase de segundo orden para una temperatura $T \approx 0.5$, para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular.

Para bosquejar la transición de fase se usa el método de *escalamiento de tamaño finito* y trata encontrar la combinación adecuada de valores de exponentes críticos ν y γ , así como de temperatura crítica T_c que mejor hagan colapsar a las gráficas de la susceptibilidad del parámetro de orden para distintos tamaños del sistema L , en una sola curva. Se encuentra visualmente, como lo muestra la figura 6.25, que esto ocurre para $\nu = 1.10$, $\gamma = 1.26$ y $T_c = 0.38$. Sin embargo, este resultado es más bien cualitativo por lo que para poder asignar valores críticos mejor fundamentados, se usa el método de *escalamiento de tamaño finito simplificado*.

6.7. MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EN REDES TRIANGULARES; FENÓMENO



(a) Magnetización por espín para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular sin campo para varios tamaños de sistema

(b) Susceptibilidad magnética por espín para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular sin campo para varios tamaños de sistema

Figura 6.24: La magnetización no funciona como parámetro de orden para este modelo

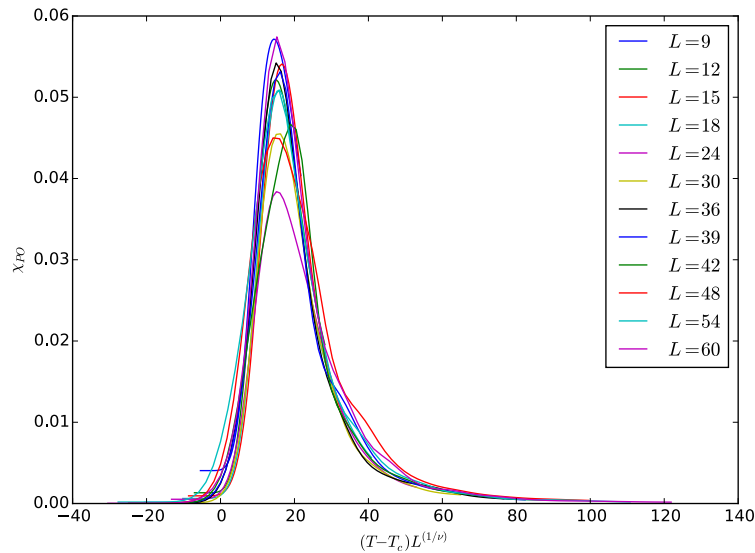


Figura 6.25: Método FFS bosquejando los valores críticos que mejor hacen colapsar las gráficas para distintos tamaños de sistema, en una sola curva. Se obtienen los mejores resultados para $\nu = 1.10$, $\gamma = 1.26$ y $T_c = 0.38$.

Con el método de *escalamiento de tamaño finito simplificado* (FFS simplificado) se puede extrapolar el valor de la temperatura crítica para un sistema en el límite termodinámico. La figura 6.26 muestra que la transición ocurre

a una temperatura crítica dada por la ordenada al origen del ajuste lineal, $T_c = 0.4018$ y para un exponente crítico $\nu = 1.1$.

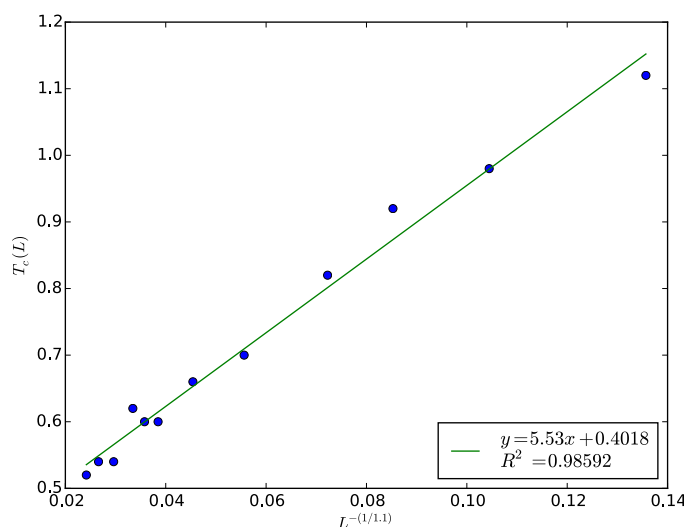


Figura 6.26: Método de escalamiento de tamaño finito simplificado para el modelo de Ising en una red triangular con interacción antiferromagnética a primeros vecinos y condiciones a la frontera periódicas. El valor de Temperatura crítica encontrada es $T_c = 0.4018$ para el exponente crítico $\nu = 1.1$.

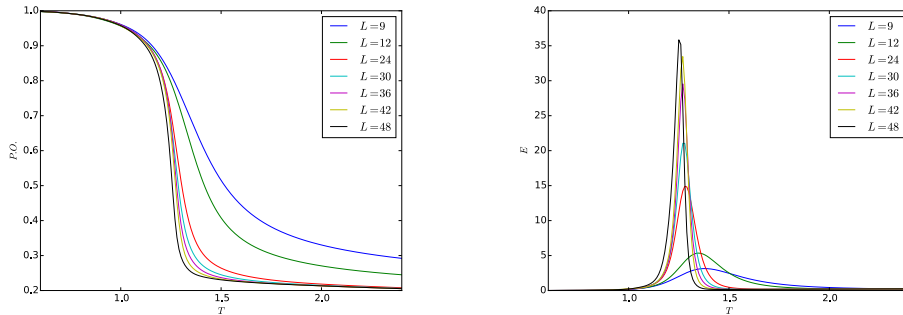
Variando temperatura, en presencia de un campo externo

En la figura 6.27 se muestra una transición de fase en el parámetro de orden y su susceptibilidad, en presencia de un campo magnético $h = 2$.

En la figura 6.28 se muestra el análisis hecho con el método de *escalamiento de tamaño finito*, y se observa que la transición, cuando el campo externo es $h = 2$, ocurre para los valores $\nu = 1.5 \pm 0.025$, $\gamma = 2.25 \pm 0.025$ y $T_c = 1.2 \pm 0.025$ para los parámetros críticos.

Si se toman las temperaturas críticas de cada tamaño de sistema podemos encontrar una relación cualitativa entre $T_c(L)$ y L . La gráfica 6.29 muestra un comportamiento similar al de una función inversa con asíntota horizontal en la temperatura crítica para un sistema infinito, es decir $T_c(\infty) = T_c$. De acuerdo al análisis podemos probar distintos exponentes críticos ν para la relación inversa y graficar $T_c(L)$ vs $L^{-1/\nu}$ por lo que ahora la relación es

6.7. MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EN REDES TRIANGULARES; FENÓMENO



(a) Parámetro de orden por espín para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular con un campo $h = 2$.

(b) Susceptibilidad por espín del parámetro de orden para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular con un campo $h = 2$.

Figura 6.27: Observables para varios tamaños de sistema, del modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular y con un campo externo $h = 2$. Se observa una transición de fase de 2^o orden.

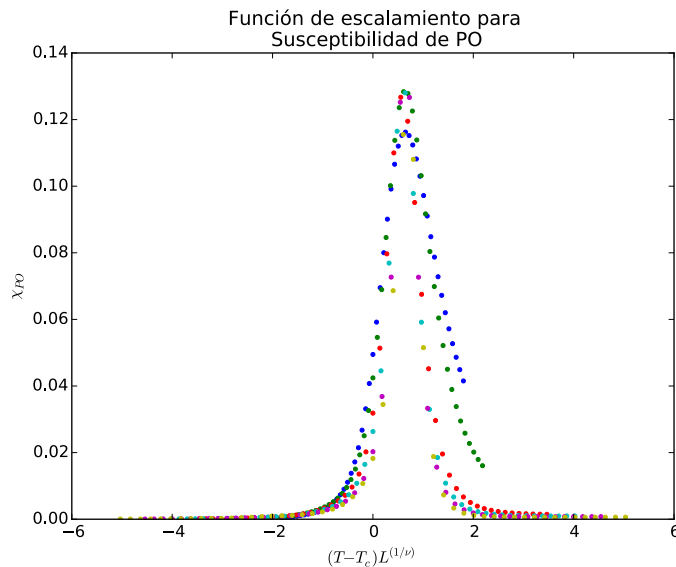


Figura 6.28: Función de escalamiento finito para distintos tamaños de sistema modelando Ising antiferromagnético en una red triangular para un $h = 2$

lineal, y tomar como exponente crítico más adecuado, aquél que mejor ajuste una recta. Para ello se toma el parámetro de correlación de Pearson más

cercano a 1. El mejor ajuste lineal (figura 6.30) se logra para $\nu = 1.158$. La temperatura crítica corresponde a la ordenada al origen de la recta ajustada, que en este caso tiene el valor de $T_c = 1.2204$.

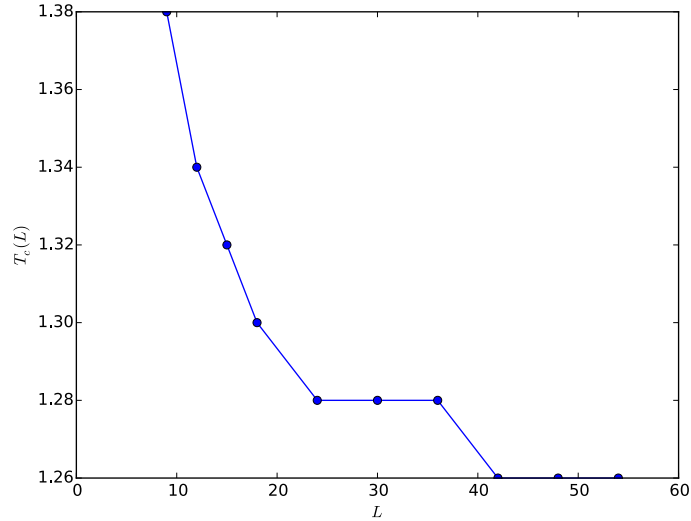


Figura 6.29: Relación entre temperatura (pseudo)crítica y tamaño del sistema

Ahora se puede repetir este procedimiento para diferentes valores de campo externo, recordando que al tener la entropía (o la densidad de estados) del sistema, se puede conocer toda la termodinámica. En la figura 6.31 se muestra una aproximación del diagrama de fases del sistema teniendo como parámetros la temperatura y el campo magnético externo. Las transiciones de fase son de segundo orden pues se obtuvieron de singularidades en la susceptibilidad del parámetro de orden χ_{PO} .

En cambio, en la figura 6.32, la transición de fase desaparece cuando se analizan el parámetro de orden y su susceptibilidad con un campo externo $h \geq 6$.

Variando el campo magnético externo, a una temperatura fija

Las transiciones de fase de segundo orden también se pueden observar cuando se varía el campo externo y se mantiene fija la temperatura. En la figura 6.33 se muestran las observables macroscópicas para una temperatura fija $T = 1$ y un campo variable $3 \leq h \leq 7$. En las gráficas del parámetro

6.7. MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EN REDES TRIANGULARES; FENÓMENO

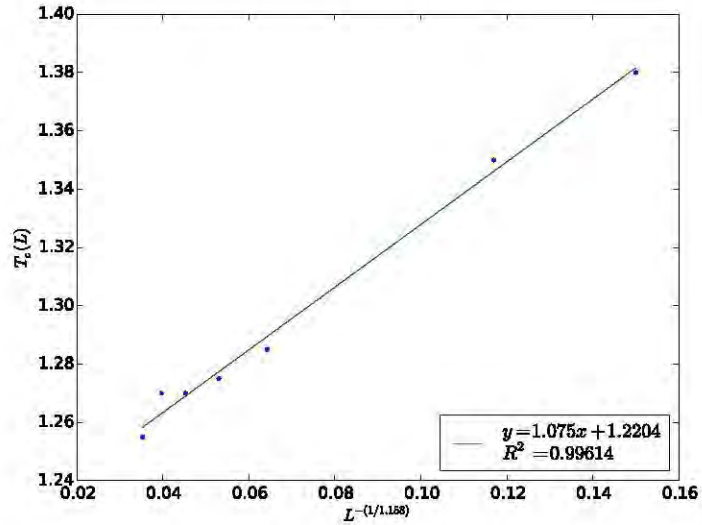


Figura 6.30: El mejor ajuste lineal señala que el exponente crítico tiene un valor de $\nu = 1.158$, para una temperatura crítica $T_c = 1.2204$ que se obtiene con la ordenada al origen del ajuste.

de orden y su susceptibilidad se detecta una transición de segundo orden en $h \approx 4.6$.

En resumen, se puede transitar del orden al desorden en el sistema, por caminos rectos verticales u horizontales en el diagrama de fases de la figura 6.31. Es importante mencionar que en redes triangulares, para modelos de Ising antiferromagnéticos, no se encuentran transiciones de fase de primer orden.

Por último, en la figura 6.34 se muestran las variables macroscópicas para una temperatura fija $T = 2.0$ y un campo externo variable para $h \leq |8|$; de acuerdo al diagrama de fases corresponde a un camino vertical que nunca cruza la curva de transición. Esta observación es consistente con la ausencia de comportamientos con tendencias singulares conforme el tamaño del sistema aumenta.

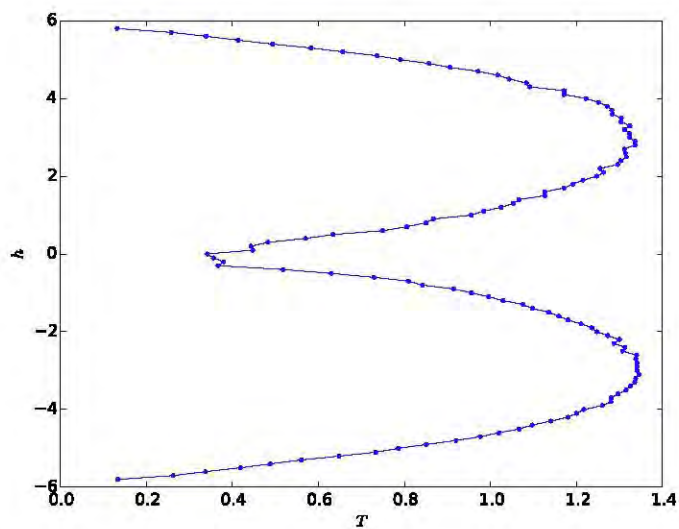


Figura 6.31: Diagrama de fases del modelo de Ising antiferromagnético para una red triangular en donde se presenta el fenómeno de frustración. Las transiciones de fase son de 2º orden.

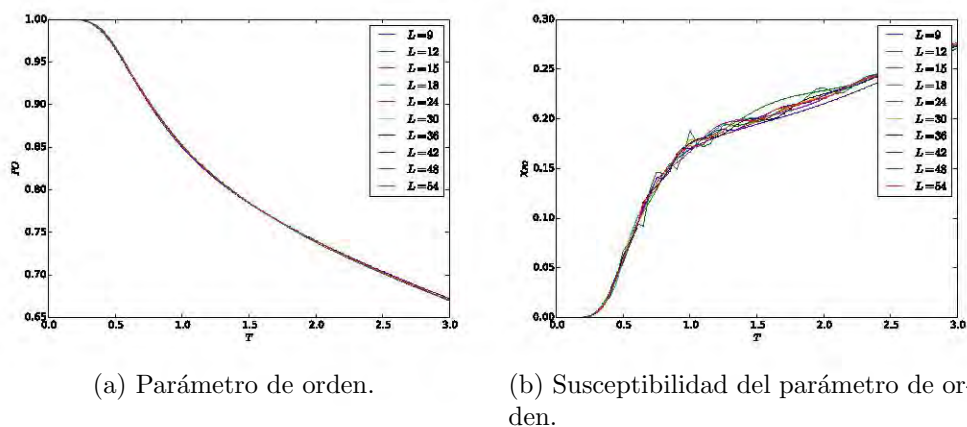


Figura 6.32: Con un campo externo $h = 7$, no se observa transición de fase de 2º orden.

6.7. MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EN REDES TRIANGULARES; FENÓMENO

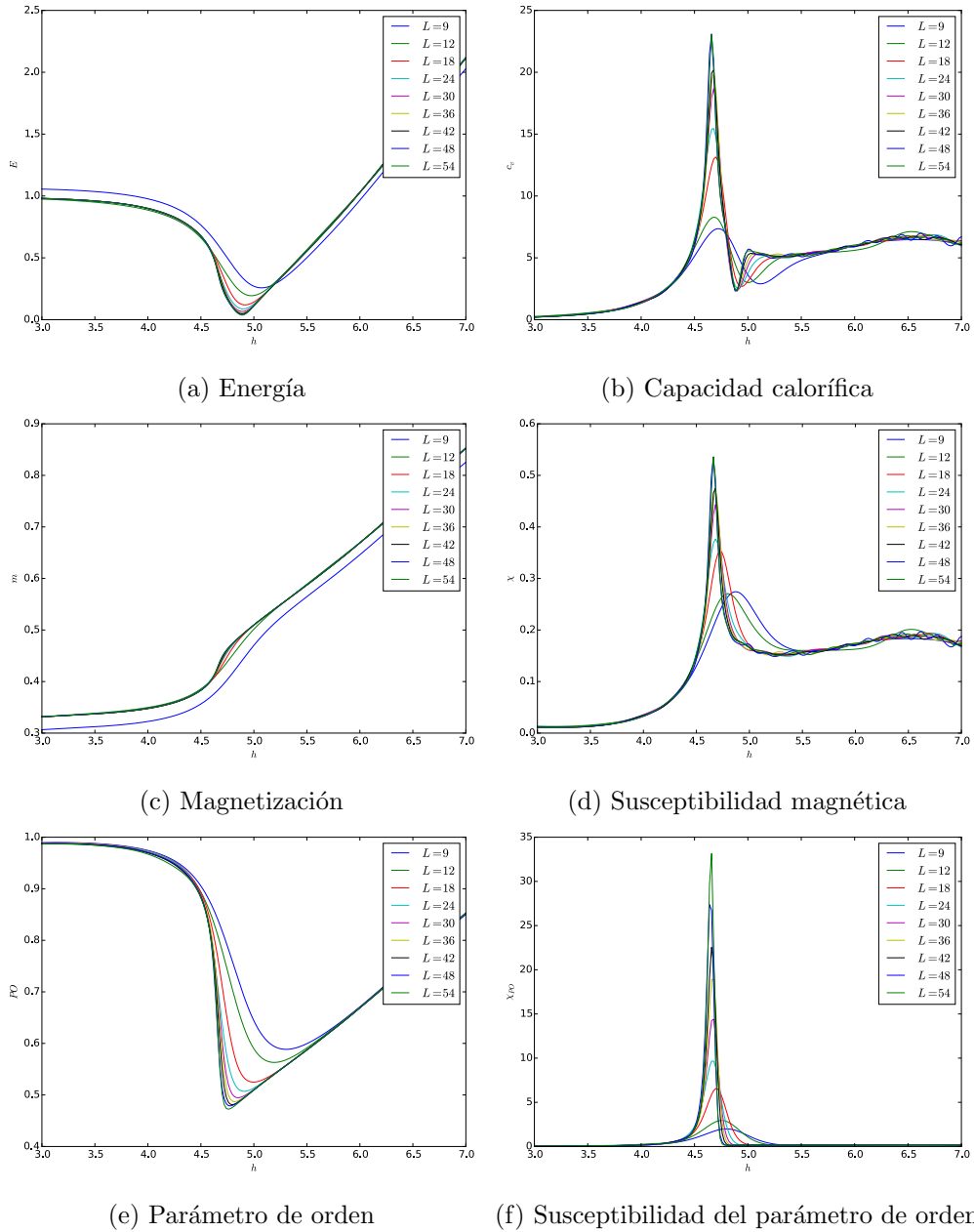


Figura 6.33: Observables para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular para una temperatura fija $T = 1.0$ y un campo externo variable $3 \leq h \leq 7$. Se observa transición de fase de segundo orden para $h \approx 4.6$.

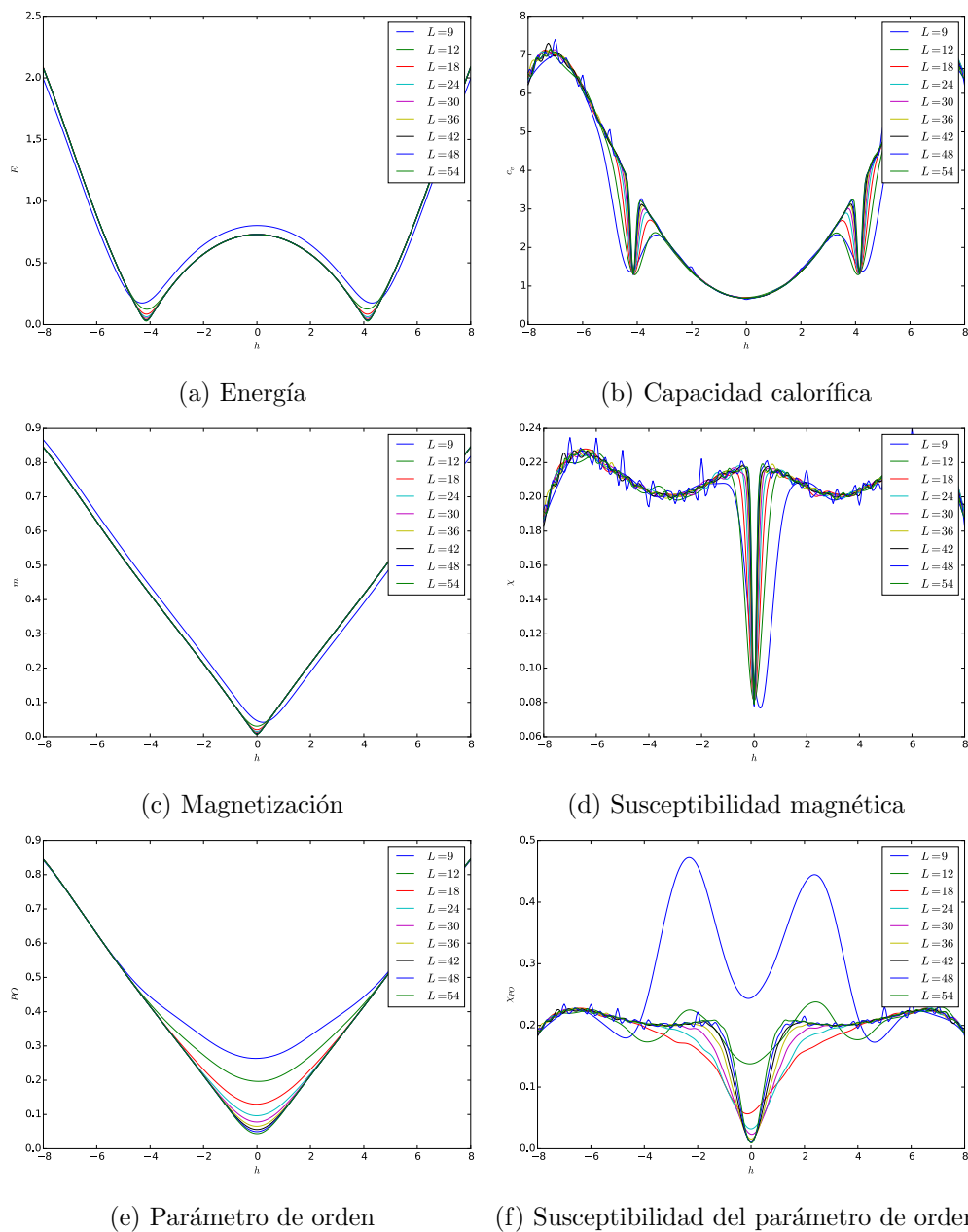


Figura 6.34: Observables para el modelo de Ising antiferromagnético en una red triangular para una temperatura fija $T = 2.0$ con campo externo h variable. No se observa transición de fase, consistente con el diagrama de fases de la figura 6.31.

Capítulo 7

Conclusiones

Se ha desarrollado una simulación basada en el algoritmo de Wang-Landau, usando programación orientada a objetos, que muestra buenos resultados en sistemas ya estudiados como el modelo de Ising ferromagnético para una red cuadrada. Debido a la programación orientada a objetos, este programa puede fácilmente incorporar sistemas más complejos, sin la necesidad de hacer modificaciones, sólo requiriendo incorporar la red a estudiar y su hamiltoniano.

En el trabajo presentado se estudió además del modelo mencionado, el tipo de transiciones de fase y su localización, para una red triangular de modelo de Ising pero con interacción antiferromagnética en donde aparecen fenómenos de “frustración”. Se mostró que la simulación tiene repetibilidad, ya que hay un buen grado de precisión en ella; sin embargo, no hay una solución exacta conocida para este problema cuando se simulan sistemas grandes, para poder hablar del grado de exactitud. Una vez encontrada la entropía de este sistema se trabajó con variables termodinámicas y se localizaron transiciones de fase dependientes de la temperatura del baño térmico (T) y de la influencia de un campo externo (h). Con esta información se puede bosquejar un diagrama de fases y entender mejor la física del sistema.

En particular, de las simulaciones hechas para el modelo de Ising antiferromagnético en ausencia de campo, se obtuvo una transición de fase, aunque no perfectamente detectable. Se sabe de otros trabajos que no hay transición de fase cuando el campo externo es nulo. Este problema se puede deber a que se trabajan con sistemas finitos y muy pequeños, ya que dicha conclusión se da en el límite termodinámico. Es importante también revisar a detalla la simulación para poder descartar definitivamente algún proble-

ma computacional. Sin embargo, todos los demás resultados presentados son consistentes con los trabajos que se han desarrollado en esta materia.

Recordando que para poder simular la entropía del sistema se requiere de un caminante sobre el espacio (E, M) del sistema que lo recorra de manera más o menos uniforme, se experimentó colocando varios caminantes sobre el espacio (E, M) para investigar si ésto tenía una influencia sobre la entropía simulada. Se planteó disminuir por un lado, el tiempo que requería la simulación, y por otro, el trabajo computacional, es decir, la cantidad de cálculos hechos para obtener los mismos resultados. Se observó que esto último no es posible ya que hay investigaciones [3] que revelan en el algoritmo original de Wang–Landau una saturación en el error cometido al simular la entropía debido al factor de modificación. No se observaron mejores resultados por el hecho de colocar más caminantes en el espacio de estados.

Será interesante en futuras investigaciones incluir redes tipo *honeycomb*, *Kagome*, cúbicas, etc., incluyendo redes regulares mucho más complejas, además de redes completamente irregulares. Se pueden añadir y estudiar fácilmente, con el programa hecho, sistemas donde los valores del espín sean más complejos, como por ejemplo, cuando se tienen q valores posibles angulares (modelo de Potts) repartidos homogéneamente en 360° .

También será interesante investigar cómo hacer el algoritmo de Wang–Landau más eficiente para sistemas grandes, ya que tomando en cuenta todas las bondades que tiene, los tiempos y recursos de la simulación que se requieren, son puntos en contra del algoritmo.

En referencia a la exactitud del algoritmo para sistemas en donde se conoce la solución exacta será importante para futuros trabajos incorporar, por ejemplo, el estudio de Belardinelli [1] del factor de modificación, cuyo objetivo principal es disminuir la saturación del error del algoritmo original.

Para el análisis de los datos y la localización de transiciones de fase es necesario profundizar el estudio y aplicación del *método de escalamiento de tamaño finito*, ya que como lo comenta Newman [12], el método de escalamiento simplificado usado no es tan exacto.

Bibliografía

- [1] R.E. Belardinelli and V.D. Pereyra. Wang–Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error. *The Journal of chemical physics*, 127(18):184105, 2007.
- [2] H. W. J. Blöte, F. Y. Wu, and X. N. Wu. Critical point of the honeycomb antiferromagnetic ising model in a nonzero magnetic field: Finite-size analysis. *International Journal of Modern Physics B*, 04(04):619–629, 1990.
- [3] A. A. Caparica and A. G. Cunha-Netto. Wang–Landau sampling: Improving accuracy. *Phys. Rev. E*, 85:046702, 2012.
- [4] M E Fisher. The theory of equilibrium critical phenomena. *Reports on Progress in Physics*, 30(2):615, 1967.
- [5] Geoffrey Grimmett and David Stirzaker. *Probability and Random Processes*. Oxford University Press, 2009.
- [6] Olle Häggström. *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications*. Cambridge University Press, 2003.
- [7] D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler. A new approach to monte carlo simulations in statistical physics: Wang-landau sampling. *American Journal of Physics*, 72(10):1294–1302, 2004.
- [8] David Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2005.
- [9] Per Håkan Lundow. Solución exacta. <http://www.theophys.kth.se/~phl/Data/index.html>. [Online; último acceso 31 de marzo de 2017].

- [10] A Malakis. Phase diagrams of the triangular ising antiferromagnet-variational approximations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 14(10):2767, 1981.
- [11] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [12] M.E.J. Newman and G.T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 2009.
- [13] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, 1944.
- [14] Frederick Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. Waveland Press, 2009.
- [15] Robert Resnick, David Halliday, and Kenneth S. Krane. *Física*, volume 2. Grupo Editorial Patria, 4a edition, 2002.
- [16] Luis Rincón. *Introducción a los procesos estocásticos*. Facultad de Ciencias, UNAM, 2013.
- [17] W. Selke. Critical binder cumulant of two-dimensional ising models. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 51(2):223–228, Mayo 2006.
- [18] James P. Sethna. *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters, and Complexity*. Univ. Press, 2006.
- [19] P A Slotte and P C Hemmer. The triangular ising antiferromagnet with first- and second-neighbour interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(26):4645, 1984.
- [20] Jozef Strečka, Lucia Gálisová, Michal Jascur, and Masayuki Hagiwara. Exact solution of the geometrically frustrated spin-1/2 ising-heisenberg model on the triangulated kagome (triangles-in-triangles) lattice. *Physical Review B*, 78, 02 2008.

- [21] Fugao Wang and D. P. Landau. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. *Phys. Rev. E*, 64:056101, Oct 2001.