Modelo de Ising

Red de spines $s = \pm 1$ en un arreglo $L \times L$.

$$\mathcal{H} = -J^* \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \, s_j - B^* \sum_i s_i \qquad (1)$$

donde $J^* = J/KT$ y $B^* = B/KT$.

Comenzamos con el caso $J = 0$

La densidad de distribución de configuraciones en el ensamble canónico (N,V,T) es,

$$e^{-\beta\mathcal{H}}/\mathcal{Q}_I(B,T) \qquad , \qquad \mathcal{Q}_I(B,T) = \sum_{s_i} e^{-\beta\mathcal{H}} \tag{2}$$

donde $\mathcal{Q}_I(B,T)$ es la función de partición del modelo de Ising y $\beta = 1/KT$.

Magnetización media de la red de spines $\langle s \rangle$

La probabilidad de que un dado spin se encuentre en el estado s vale para $J = 0$,

$$p(s = \pm 1) = \frac{e^{\beta\, B\, s}}{e^{\beta\, B} + e^{-\beta\, B}} = \frac{e^{\beta\, B\, s}}{2\cosh(\beta\, B)} \tag{3}$$

Podemos hallar la magnetización media por unidad de spin como,

$$\langle s \rangle = \frac{\langle M \rangle}{L^2} = \frac{(+1)\, e^{\beta\, B} + (-1)\, e^{-\beta\, B}}{e^{\beta\, B} + e^{-\beta\, B}} = \tanh(\beta\, B) = \tanh(B^*) \tag{4}$$

Algoritmo de Metropolis para Ising

$$P_{i,i+1} = \begin{cases} p^* \dfrac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i)} & \text{si } \omega(S_{i+1}) \leq \omega(S_i) \\ \\ p^* & \text{si } \omega(S_{i+1}) > \omega(S_i) \end{cases} \tag{5}$$

$$p^* = \begin{cases} 1/L^2 & \text{si } |S_{i+1} - S_i| = 1 \\ \\ 0 & \text{si } |S_{i+1} - S_i| \neq 1 \end{cases} \tag{6}$$

donde $\omega(S_i) = e^{-\beta\mathcal{H}}/\mathcal{Q}_I(B,T)$ y S_i representa una configuración dada.

Cálculo del cociente $\omega(S_{i+1})/\omega(S_i)$

$$\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i)} = e^{-\beta(\mathcal{H}_{i+1}-\mathcal{H}_i)} \tag{7}$$

$$\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i)} = \begin{cases} +1 \to +1 : \quad e^{\beta B-\beta B} = 1 \\ +1 \to -1 : \quad e^{-\beta B-\beta B} = e^{-2\beta B} \\ -1 \to +1 : \quad e^{\beta B+\beta B} = e^{2\beta B} \to 1 \\ -1 \to -1 : \quad e^{-\beta B+\beta B} = 1 \end{cases} \tag{8}$$

Cálculo de la probabilidad de aceptación $P_i \to P_{i+1}$

$$P_i \to P_{i+1} = \begin{cases} +1 \to +1 : & 1 - L^{-2}\, e^{-2\beta B} \\ +1 \to -1 : & L^{-2}\, e^{-2\beta B} \\ -1 \to +1 : & L^{-2} \\ -1 \to -1 : & 1 - L^{-2} \end{cases} \tag{9}$$

Matriz de transición

$$\Pi = \left(\begin{array}{c|c} +1 \rightarrow +1 & -1 \rightarrow +1 \\ & \\ +1 \rightarrow -1 & -1 \rightarrow -1 \end{array} \right) \tag{10}$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 1 - L^{-2}\, e^{-2\beta B} & L^{-2} \\ & \\ L^{-2}\, e^{-2\beta B} & 1 - L^{-2} \end{pmatrix} \tag{11}$$

Las columnas suman una probabilidad 1.

Equilibrio detallado

$$P(+1) \cdot \Pi(+1 \to -1) = P(-1) \cdot \Pi(-1 \to +1) \tag{12}$$

$$\frac{e^{\beta\, B}}{e^{\beta\, B} + e^{-\beta\, B}} \cdot L^{-2}\, e^{-2\beta B} = \frac{e^{-\beta\, B}}{e^{\beta\, B} + e^{-\beta\, B}} \cdot L^{-2} \tag{13}$$

Cumple con equilibrio detallado.

Evolución de un estado cualquiera

$$P^{(n)} = \Pi \cdot \Pi \cdots \Pi \, P^{(0)} = \Pi^n \, P^{(0)} = P \, D^n \, P^{-1} \, P^{(0)} \tag{14}$$

Los autovalores de Π se obtienen así $(q = L^{-2} \, e^{-2B}, p = L^{-2})$

$$\begin{vmatrix} 1-q-\mu & p \\ q & 1-p-\mu \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mu = \begin{cases} 1 \\ 1-(p+q) \end{cases} \tag{15}$$

El autovalor $\mu = 1$ corresponde al régimen estacionario porque $\mu^n = 1$. En cambio, $\mu^n = (1-q-p)^n < 1$ corresponde al régimen transitorio.

Estimación de los pasos de termalización

$$\mu^n = 0.01 \quad \Rightarrow \quad n = \frac{\ln 0.01}{\ln \mu} \tag{16}$$

Si $B/KT \ll 1$ entonces $1 - q - p \approx 1 - 2\,L^{-2}$ (alta temperatura).

Si $B/KT \gg 1$ entonces $1 - q - p \approx 1 - L^{-2}$ (baja temperatura).

Por ejemplo si $L = 32$

$$\mu^n = 0.01 \quad \Rightarrow \quad n = \frac{\ln 0.01}{\ln(1 - L^{-2})} \approx 5.10^3 \tag{17}$$