



DEFENSA DEL

TRABAJO FIN DE MÁSTER

PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

*“ESTUDIO DEL
COMPORTAMIENTO DEL
ALGORITMO
METROPOLIS-HASTINGS EN
FUNCIÓN DEL NÚMERO DE
ESPINES QUE SE VOLTEAN EN
EL MODELO DE ISING”*

Rubén Marrero Gómez

TUTOR: Dr. Jose Enrique Alvarellos Bermejo

MADRID, OCTUBRE DE 2017

RESUMEN

En este trabajo se realiza un estudio del comportamiento del algoritmo Metropolis-Hastings, aplicado al Modelo de Ising en dos dimensiones, al variar la forma en que realiza el muestreo. Concretamente, se estudia qué implicaciones tiene el cambio del número N de espines que se voltean en cada iteración del algoritmo.

Para ello, se ha desarrollado un marco teórico que aproxima el comportamiento que tiene el algoritmo en términos estadísticos en función de los distintos parámetros que definen las simulaciones: el tamaño de la red del modelo de Ising en dos dimensiones, la temperatura del sistema y el número de espines que se voltean en cada iteración.

Por otra parte, se discute la calidad de la aproximación teórica y se compara con el comportamiento real de las simulaciones en las que se calculan magnitudes termodinámicas como la energía media, la magnetización media, el calor específico y la susceptibilidad; además de la termalización y la autocorrelación.

Por último, se muestra el comportamiento del algoritmo Metropolis cuando se trata de aumentar la velocidad de convergencia al variar una vez, durante la ejecución, el número N de espines que se voltean en cada iteración.

ABSTRACT

In this work, a study of the Metropolis-Hastings algorithm behavior, is carried out by varying how sampling is performed applied to the Ising Model in two dimensions. Specifically, we study the implications of changing the number of spins flipped in each iteration of the algorithm.

For this purpose, a theoretical framework has been developed in order to approximate the behavior of the algorithm in statistical terms according to the different parameters defined in the simulations: the bidimensional size of the Ising model lattice, the system temperature and the number of spins that are flipped in each iteration.

Furthermore, the theoretical approach quality is discussed and compared with the actual simulations behavior in which thermodynamic magnitudes such as mean energy, mean magnetization, specific heat and susceptibility are calculated; in addition to thermalization and autocorrelation.

Finally, the Metropolis algorithm behavior is shown when trying to increase the rate of convergence by changing the number of flipped spins in each iteration only once during execution.

CONTENIDOS

INTRODUCCIÓN	1
ANTECEDENTES	3
Modelo de Ising.....	3
Proceso de Markov	7
muestreo de importancia: Algoritmo Metropolis-Hastings	7
Ergodicidad y Balance Detallado	9
Longitud de Correlación y Exponente Crítico.....	11
Problemática del algoritmo Metropolis y Otros algoritmos.....	14
Algoritmo de Wolff	15
Muestreo Wang-Landau	17
DESARROLLO Y RESULTADOS	19
Concepto de Vecinos Distintos: M y vd	20
Estadística: Caso en que $N=1$	22
Estadística: Casos en que $N > 1$	32
Ergodicidad	38
Comparando W_1^N con W_N	39
Estudio de la Variación de Energía ΔE con el valor de N	41

Energía media teórica atendiendo a $\langle \Delta E \rangle$ y a la Densidad de Estados	49
Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"	57
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$	60
Tamaño $L^2 = 20 \times 20$	62
Tamaño $L^2 = 40 \times 40$	64
Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "homogénea"	66
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$	67
Comparación entre la energía media teórica y la energía media simulada	69
Termalización	71
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$	73
Tamaño $L^2 = 20 \times 20$	76
Autocorrelación	79
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$	82
Tamaño $L^2 = 20 \times 20$	83
Tamaño $L^2 = 40 \times 40$	84
Calidad de la Aproximación espines no vecinos	85
Valor esperado del número de vecindades distintas $\langle vd \rangle$	91
Probabilidad W de aceptar el volteo de los N espines	91
Variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$	92
Resultados para $L=10$, $N=[2 \text{ y } 10]$	92
Resultados para $L=10$, en condiciones de termalización	96
Probando método para aumentar velocidad de convergencia	97
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$ y $N_{\text{inicio}} = 10$	102
Tamaño $L^2 = 20 \times 20$ y $N_{\text{inicio}} = 10$	103
Tamaño $L^2 = 10 \times 10$ y $N_{\text{inicio}} = 3$	105

CONCLUSIONES..... 107

BIBLIOGRAFIA 111

INTRODUCCIÓN

Las simulaciones por computador juegan un papel muy importante en muchos campos de la física como la mecánica estadística. La razón de su importancia en la mecánica estadística radica en que muchos de sus modelos, incluso los que parecen más simples, son teóricamente intratables y se resuelven mediante métodos que permiten encontrar buenas estimaciones.

De entre estos métodos, los denominados de Monte Carlo han demostrado ser muy potentes. Estos consisten en algoritmos que tratan de explorar el espacio de posibles soluciones de forma aleatoria, pero controlada, y, a partir de su comportamiento, obtienen una solución en términos estadísticos.

El método Monte Carlo más estudiado es posiblemente el algoritmo Metropolis-Hastings, desarrollado a mediados del s.XX, que, además, es una gran herramienta didáctica.

En este Trabajo Fin de Máster (TFM) se plantea el estudio del comportamiento del algoritmo Metropolis-Hastings, aplicado al Modelo de Ising en dos dimensiones, al variar la forma en que realiza el muestreo. Concretamente, se estudia qué implicaciones tiene el cambio del número N de espines que se voltean en cada iteración del algoritmo, empleando para ello el lenguaje de programación Python.

La memoria de este TFM se divide en cuatro capítulos. El primero de ellos se refiere a esta Introducción.

En el segundo capítulo, "Antecedentes", se realiza un breve repaso del Modelo de Ising, del algoritmo Metropolis-Hastings y se introducen varios conceptos, además de describir brevemente otros algoritmos que pueden encontrarse en la literatura.

El tercer capítulo, "Desarrollo y Resultados", consiste en el Trabajo propiamente dicho, y como su propio nombre indica, en él se describen el desarrollo del mismo, las ideas que han surgido para enfrentar el trabajo, los experimentos que se han realizado y los resultados obtenidos.

El cuarto y último capítulo, "Conclusiones", consiste en un resumen de las conclusiones más importantes o destacadas del Trabajo.

ANTECEDENTES

MODELO DE ISING

El modelo de Ising es un modelo de los denominados magnéticos en tanto en cuanto fue propuesto para explicar la transición de fase que existe en los materiales magnéticos al variar la temperatura. De hecho, fue el primer modelo que exhibía transición de fase y que fue resuelto de forma exacta [THIJSEN07].

El modelo de Ising en dos dimensiones consiste en una matriz de $L \times L$ espines s_i que pueden tomar valores $+1$ ó -1 . Cada espín interactúa con cuatro vecinos: el inmediatamente superior en la matriz, el inmediatamente inferior, y los dos espines a ambos lados del espín. Además, para simular que la matriz es infinita (límite termodinámico) y se encuentra en el límite termodinámico, a los espines que se encuentran en los extremos de la matriz se les asocia como vecinos los espines del otro extremo de la matriz, clonando así la matriz $L \times L$ infinitamente, rellenando el espacio bidimensional con conjuntos de puntos $L \times L$ idénticos.

El número de posibles configuraciones del sistema es $2^{L \times L}$, cada una de las cuales tiene una energía que viene determinada por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(X) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (1)$$

donde J es el parámetro de acoplamiento entre espines, $\langle i,j \rangle$ se refiere a todas las vecindades de la red y H es un campo escalar externo. Con "vecindades" se hace referencia a los pares de espines que interactúan entre sí en la forma en que se explicó anteriormente.

Respecto al parámetro J de acoplamiento hay que decir que se considerara constante, aunque su valor podría ser variable para cada una de las vecindades. Asimismo, el campo externo consiste en un campo escalar que, atendiendo a la expresión del Hamiltoniano, favorecerá que los espines se alineen con él, esto es, que los espines tomen el mismo signo que el campo ya que de este modo se minimiza la energía. Así, atendiendo además al primer término del Hamiltoniano, dependiendo del signo del parámetro de acoplamiento, los espines tenderán a estar alineados con sus vecinos para minimizar su energía si éste fuera positivo, o a tener signo opuesto si el parámetro de acoplamiento fuese negativo.

Además, se sabe que el modelo de Ising sigue una distribución de Boltzmann [THIJSEN07] [NEWMAN99] con lo que la función de partición del modelo viene dada por la expresión

$$Z = \sum_{s_i} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \beta H \sum_i s_i} \quad (2)$$

con

$$\beta = (k_B T)^{-1} \quad (3)$$

Por otra parte, se puede definir la magnetización del modelo como el valor medio de todos los espines. Esto es, si todos los espines tienen valor $+1$ ó -1 , el sistema estará totalmente magnetizado pues el valor medio será $+1$ ó -1 respectivamente; y si el valor medio es 0 , el sistema no estará magnetizado. Se dice que el modelo se encuentra en fase ferromagnética para el primer caso y en fase paramagnética en el segundo.

En este Trabajo Fin de Máster se plantea el modelo de Ising sin campo externo, i.e., $H = 0$, situación para la cual el sistema tiene solución analítica, pudiendo averiguarse la relación entre la temperatura y la magnetización del sistema. En concreto, se ha determinado a partir de qué temperatura el modelo sufre una transición de fase pasando de ser magnético a paramagnético y viceversa. Si el parámetro de acoplamiento J es positivo, a bajas temperaturas el sistema será ferromagnético y a altas temperaturas paramagnético. Si el parámetro de acoplamiento J es negativo, a bajas temperaturas el sistema será antiferromagnético y a altas temperaturas paramagnético.

Concretamente, se ha determinado que la temperatura crítica cumple [THIJSEN07] [NEWMAN99]:

$$\frac{J}{k_B T_c} \approx 0.44 \quad (4)$$

Así, el diagrama de fase resultante para $J > 0$, es el que se muestra en la Figura 1, donde los parámetros k_B y J toman valor unidad. En el diagrama se observa cómo para temperaturas T por encima de $T_c \approx 2.27$, la magnetización M es nula y para temperaturas T menores a T_c la magnetización converge a $+1$ ó -1 . En lo sucesivo se explicará a qué se debe que el sistema pueda converger a $+1$ ó -1 .

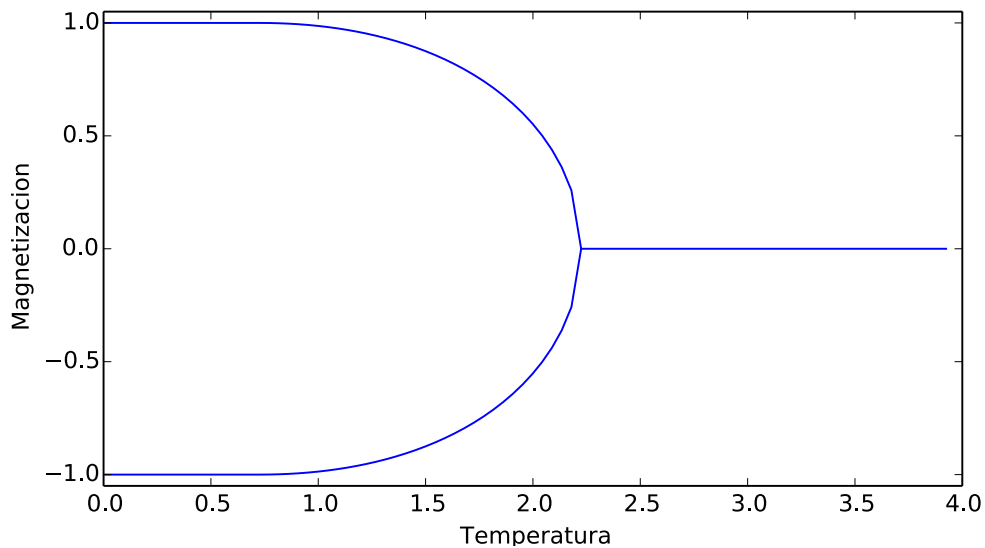


Figura 1.- Diagrama de Fase del modelo de Ising con $K = J = 1$

Dados los detalles de lo que es el Modelo de Ising, la pregunta necesaria es "¿Cómo saber qué valores pueden tomar las distintas propiedades termodinámicas del sistema?".

Como ya se ha dicho, el modelo de Ising sigue una distribución de Boltzmann, con lo que la probabilidad de que el sistema esté en un estado μ_i con una energía E_{μ_i} viene dado por

$$P(\mu_i) = p_{\mu_i} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu_i}} \quad (5)$$

con

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_{\mu_j}} \quad (6)$$

donde Z es la función de partición que normaliza el factor de Boltzmann $e^{-\beta E_{\mu_i}}$. Así, no es difícil ver que a mayor energía E_{μ_i} , la probabilidad de que el sistema se encuentre en ese estado es menor; y además, a mayor energía, mayor número de estados posibles.

Con ello, podemos calcular cualquier propiedad termodinámica Q como

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}} \quad (7)$$

siendo $\langle Q \rangle$ el valor esperado del observable y Q_{μ_i} se refiere al valor del observable en el estado μ_i [NEWMAN99].

Para sistemas con gran cantidad de estados, como en el caso del Modelo de Ising, este cálculo es impracticable si el número de espines en la red es elevado. Como ejemplo, si el tamaño de la red es 10×10 , que sería una red pequeña, tendríamos 2^{100} configuraciones distintas posibles.

Una posible solución es aplicar un muestreo simple (*Simple Sampling*) consistente en tomar de forma aleatoria N posibles configuraciones del sistema y realizar una media ponderada de las N configuraciones seleccionadas, siendo el factor de ponderación la probabilidad de dicha configuración. Sin embargo, este método tiene algunos inconvenientes como la dificultad de calcular la función de partición, o el simple hecho de que la mayoría de los estados posibles son de alta energía y por tanto improbables, por lo que se tendría una gran incertidumbre.

PROCESO DE MARKOV

Para solventar los inconvenientes mostrados al final de la sección anterior se introduce el Proceso de Markov que permitirá generar un conjunto de estados aleatorios acorde a la distribución de Boltzmann, lo cual será clave para la resolución del problema tratado en este Trabajo.

Un Proceso de Markov será aquel que dado un estado μ genera un estado ν del sistema de forma aleatoria siguiendo la llamada probabilidad de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$ que debe cumplir dos condiciones: no debe variar en el tiempo y debe depender sólo del estado actual μ y no de ningún otro por el que haya pasado antes el sistema, es decir, es un proceso sin memoria [NEWMAN99]. Además, como cualquier función de probabilidad

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (8)$$

En las simulaciones de tipo Monte Carlo se emplea el proceso de Markov de forma repetitiva para generar lo que se denomina cadena de Markov, esto es, una sucesión de estados.

MUESTREO DE IMPORTANCIA: ALGORITMO METROPOLIS-HASTINGS

La solución que se expone en esta sección fue dada por Metropolis et al. [METROPOLIS53] [NEWMAN99] [THIJSSSEN07], que aplica muestreo de importancia (*Importance Sampling*) pues las muestras se toman siguiendo una distribución de probabilidad no uniforme. Éste es un método de tipo Monte Carlo via Cadena de Markov: Monte Carlo porque realiza un muestreo aleatorio sobre el espacio de estados y basado en Cadena de Markov debido a que la convergencia se hace recorriendo distintos estados a partir de una probabilidad de transición. Mediante este algoritmo, siguiendo lo expuesto en el apartado anterior, se puede probar que la probabilidad converge a la función de distribución deseada a partir de la definición de probabilidad de transición de la cadena de Markov.

El cambio de paradigma y, por tanto, punto clave es que en lugar de elegir configuraciones al azar y ponderarlas mediante $e^{-\beta E_{\mu_i}}$ como haría un muestreo simple (*Simple Sampling*, ya apareció en el apartado anterior este concepto), se eligen configuraciones con probabilidad $e^{-\beta E_{\mu_i}}$ y se ponderan de forma uniforme. Además, no es

necesario calcular la probabilidad real de la configuración, para lo cual sería necesario calcular la función de partición, sino la probabilidad relativa entre configuraciones, lo cual es posible sin necesidad de calcular la función de partición.

Es decir, ahora el estimador para la magnitud $\langle Q \rangle$ en vez de seguir la expresión vista en (7), sigue la expresión (9) [LANDAU76]:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N Q_{\mu_i} \quad (9)$$

Donde Q es el observable que tratamos de estimar y Q_{μ_i} se refiere al valor del observable en el estado μ_i .

De esta forma, el algoritmo se resume como sigue:

- En primer lugar se selecciona siguiendo una distribución uniforme un nuevo estado del sistema modificando un espín. Este primer paso resume el que la probabilidad de que la cadena de Markov generada salte a un estado en el que cambie más de un espín es nula y la probabilidad de saltar a otro estado en el que difiera un espín es uniforme.
- el segundo paso, una vez seleccionado el espín a voltear, consiste en calcular la energía del sistema si se voltear el espín.
- Si la energía del nuevo estado con el espín volteado es menor que la energía del estado actual, el nuevo estado se acepta.
- Si la energía del nuevo estado con el espín volteado es mayor, entonces se acepta con una probabilidad $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, donde ΔE representa la diferencia de energía entre el estado actual y el nuevo estado.

Además, como se expone en la siguiente sección, el algoritmo cumple la condición de ergodicidad y la condición de balance detallado, por lo que una vez el sistema está termalizado, *i.e.*, que la probabilidad de encontrar el sistema en un estado dado es proporcional a su factor de Boltzmann asociado, se puede suponer que todos los estados que aparecen en la cadena de Markov son distribuciones válidas (probables), razón por la que podemos calcular a partir de estos estados las magnitudes que se estimen oportunas.

Este es el algoritmo que se trata en este trabajo y con el que se calcularán las siguientes magnitudes: la energía media por espín del sistema, la magnetización, el calor específico y la susceptibilidad magnética.

ERGODICIDAD Y BALANCE DETALLADO

Los algoritmos de tipo Monte Carlo que siguen una Cadena de Markov deben cumplir las condiciones de ergodicidad y balance detallado.

La **condición de ergodicidad** exige que el proceso markoviano debe ser capaz de alcanzar cualquier estado del sistema desde cualquier otro estado del mismo si el proceso se ejecuta durante el tiempo suficiente [NEWMAN99]. Esto es necesario para generar estados con sus correspondientes probabilidades distintas de cero dentro de la distribución de Boltzmann.

Así, si algún estado fuese inaccesible desde algún otro estado, su probabilidad asociada sería cero y no se correspondería con su probabilidad dentro de la distribución de Boltzmann.

La otra condición que se debe imponer al proceso de Markov es la **condición de balance detallado** que nos asegura que, llegados a una situación de equilibrio, es la distribución de Boltzmann, y no otra, la que rige el proceso en el que se generan los estados.

Que el sistema esté en equilibrio implica que el ritmo con que el sistema entra y sale de un estado debe ser igual y se expresa como se indica en la ecuación (10).

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (10)$$

Siendo p_{μ} la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado μ .

Teniendo en cuenta que, dado un estado, el sistema debe transitar a otro estado (o a él mismo), como ya se señaló en (8)

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (11)$$

Con ello, podemos reescribir la ecuación (10) como:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (12)$$

Sin embargo, estar en equilibrio no asegura que el sistema tienda a la distribución de probabilidad deseada. Así, si denominamos $w_{\nu}(t)$ a la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado ν en el instante t es claro que

$$w_{\nu}(t+1) = \sum_{\mu} w_{\mu}(t) P(\mu \rightarrow \nu) \quad (13)$$

que en notación matricial puede expresarse como

$$\mathbf{w}(t + 1) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}(t) \quad (14)$$

Y en equilibrio

$$\mathbf{w}(\infty) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}(\infty) \quad (15)$$

Sin embargo, la ecuación (15) se refiere al equilibrio simple ya que es posible alcanzar un equilibrio dinámico donde la distribución de probabilidades \mathbf{w} oscile alrededor de diferentes valores siguiendo lo que se denomina **ciclo límite**, tal que

$$\mathbf{w}(\infty) = \mathbf{P}^n \cdot \mathbf{w}(\infty) \quad (16)$$

donde n es la longitud del **ciclo límite** [NEWMAN99].

Como ejemplo, supóngase que se tiene un proceso que ha alcanzado el equilibrio en el instante $t = T$ con ciclo límite $n = 2$. Se tendría:

$$\mathbf{w}(T + 2) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}(T + 1) = \mathbf{P} \cdot [\mathbf{P} \cdot \mathbf{w}(T)] = \mathbf{P}^2 \cdot \mathbf{w}(T) \quad (17)$$

con

$$\mathbf{w}(T + 2) = \mathbf{w}(T) \neq \mathbf{w}(T + 1) \quad (18)$$

Es decir, el vector de probabilidades \mathbf{w} queda oscilando entre dos distribuciones \mathbf{w}_1 y \mathbf{w}_2 como sigue:

$$\mathbf{w}_1(\infty) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}_2(\infty) = \mathbf{P}^2 \cdot \mathbf{w}_1(\infty) \quad (19)$$

Con ello, es claro que si se eligen las probabilidades de transición \mathbf{P} de modo que se cumpla la ecuación (11) queda garantizado que el sistema está en equilibrio, pero puede tener cualquier número de ciclos límites, con lo que no queda garantizado que sigan la distribución de probabilidad deseada.

Es por esto que se necesita una condición más, la condición de balance detallado [THIJSEN07]:

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (20)$$

Cumplir esta condición es compatible con el equilibrio y además elimina los ciclos límite. Esta nueva condición significa que, en término medio, se producen tantas transiciones desde el estado μ al ν como transiciones desde el estado ν a μ , lo que asegura que las probabilidades p_μ no varían en el tiempo, son estacionarias. Esto, además, es coherente con los sistemas físicos que estamos tratando de simular, ya que cumplen simetría de inversión temporal por estar en equilibrio y estar basados en la mecánica clásica o cuántica.

Por otra parte, si se reordenan los términos de la ecuación (20) y se tiene en cuenta el tipo de distribución que queremos alcanzar (ecuación (5)) se tiene

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (21)$$

Con ello, si se eligen las probabilidades de transición P de modo que cumplan las ecuaciones (11) y (21) se puede asegurar que la distribución en equilibrio que se obtiene en el proceso de Markov coincide con la distribución de Boltzmann [NEWMAN99].

LONGITUD DE CORRELACIÓN Y EXPONENTE CRÍTICO

Aunque en este trabajo no se va a trabajar con la longitud de correlación ni con el exponente crítico, es conveniente introducir estos conceptos para poder entender la naturaleza del problema y algunos de los resultados obtenidos y que se muestran en el siguiente capítulo. Así, un aspecto interesante que se puede medir en la red de espines es la **función de correlación entre dos puntos**, que se define como

$$G_c^{(2)}(i, j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \langle s_i s_j \rangle - m^2 \quad (22)$$

donde m es el valor medio de la magnetización en la red.

Si quisiéramos una mejor estimación global de toda la red podríamos definir la misma función en términos de un desplazamiento r tal que

$$G_c^{(2)}(r_i, r_i + r) = G_c^{(2)}(r), \quad (23)$$

obteniendo una función que sólo depende de la distancia r entre los espines y no de las posiciones donde están los espines. Con ello, se puede hacer una mejor estimación si promediamos para toda la red para todos los espines separados una distancia r :

$$G_c^{(2)}(r) = \frac{1}{N} \sum_{i,j \text{ con } r_j - r_i = r} [\langle s_i s_j \rangle - m^2] \quad (24)$$

Este concepto da pie al concepto de longitud de correlación ξ que se explica a continuación.

Cuando la temperatura del sistema es alta, los espines tienden a estar incorrelados entre sí y apuntando de forma aleatoria hacia arriba o hacia abajo, pero cuando la temperatura decrece los espines cercanos tienden a alinearse entre sí, aumentando la correlación del sistema.

Los grupos de espines adyacentes que están correlados de esta manera y, por tanto, tienden a apuntar en la misma dirección, son denominados *clusters* y su tamaño tiende a divergir cuanto más se acerca a la temperatura T_C . Este tamaño de los *clusters* es lo que se denomina **longitud de correlación** ξ . Así, cuando el sistema se encuentra en la transición de fase se pueden encontrar grandes áreas donde los espines tienden a tomar la misma dirección.

Si la temperatura del sistema continúa decreciendo por debajo de la temperatura T_C , el sistema de forma espontánea comienza a tener todos sus espines apuntando en la misma dirección, surgiendo un valor distinto de cero para la magnetización. En qué dirección apuntarán todos los espines dependerá sólo de las fluctuaciones térmicas a las que se ve sometido el sistema cuando se cruza la temperatura crítica, con lo que, en el extremo, cuando $T=0$, m tomará valor $+1$ ó -1 .

Por otra parte, se sabe que, en el modelo de Ising, la longitud de correlación diverge siguiendo [NEWMAN99]

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (25)$$

donde

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (26)$$

y ν es el denominado exponente crítico, que se cree que es una propiedad intrínseca al modelo de Ising y es independiente de cualquier parámetro como pudieran ser el parámetro de acoplamiento J . Esta propiedad es denominada *universalidad*.

Por otra parte, el **tiempo de correlación** τ , *grosso modo*, es el tiempo necesario para producir una configuración estadísticamente independiente, por lo que es deseable que sea bajo. En este contexto,

tiempo hace referencia al número de *Monte Carlo Steps* (MCS). [OSSOLA04].

Este tiempo τ , cerca de T_C , diverge siguiendo la expresión

$$\tau \sim |t|^{-\nu z} \quad (27)$$

donde z es lo que se denomina "exponente dinámico". Este exponente es dependiente del algoritmo que se esté empleando por lo que no es un exponente universal. Un valor alto de z implica que τ crece muy rápido a medida que el sistema se aproxima a la transición de fase, haciendo la simulación más lenta y menos precisa. Así, un algoritmo con z bajo, será más rápido cerca de T_C .

Si combinamos las ecuaciones (25) y (27) es fácil ver que

$$\tau \sim \xi^z \quad (28)$$

Lo que implica que el tiempo de correlación será mayor a medida que la longitud de correlación diverge. Sin embargo, en un sistema finito como los que estamos simulando, de tamaño L^d , donde d es la dimensionalidad de nuestro sistema, la longitud de correlación podrá tomar el valor L como máximo. Así, para las temperaturas que estén cercanas a la temperatura crítica T_C la ecuación (28) se traduce en

$$\tau \sim L^z \quad (29)$$

Realizando múltiples simulaciones del algoritmo Metropolis para $T=T_C$ con diferentes tamaños L y usando la ecuación (29), se han obtenido diferentes valores para el exponente dinámico z , uno de los cuales, calculado por Nightingale y Blöte (1996) [NIGHT96], es $Z_{Metropolis}=2.1665\pm 0.0012$.

PROBLEMÁTICA DEL ALGORITMO METROPOLIS Y OTROS ALGORITMOS

Si continuamos con el desarrollo expuesto en la sección anterior y tenemos en cuenta que cada *Monte Carlo Step* (MCS) son L^d iteraciones, obtenemos que el tiempo de ejecución en el entorno de la temperatura crítica T_C sigue [NEWMAN99]

$$\tau_{ejecucion} \sim L^{d+z} \quad (30)$$

Para el modelo de Ising en dos dimensiones, este tiempo de ejecución será entonces del orden de L^4 , lo que hace que las medidas en el entorno de la región crítica sean impracticables para sistemas con L alto.

La razón fundamental de por qué el algoritmo Metrópolis tiene un exponente dinámico z tan alto se debe a cómo diverge la longitud de correlación en el entorno de la transición de fase. Cuando nos encontramos en esta región crítica, se producen dominios en la red, grupos de espines que apuntan en la misma dirección, y es muy difícil para el algoritmo Metropolis lograr voltear alguno de estos espines, pues casi todos ellos estarán rodeados de cuatro vecinos que apuntan en la misma dirección (Sólo los espines que estén en la frontera de dichos dominios, no tendrán sus 4 vecinos apuntando en la misma dirección). Así, a la temperatura T_C , y a temperaturas menores, es poco probable que el algoritmo Metropolis acepte nuevos estados, ya que con alta probabilidad se elegirán espines rodeados de cuatro vecinos iguales y cuya probabilidad de volteo en dichas condiciones es

$$e^{\frac{\Delta E}{T_C}} = e^{\frac{-8}{2.27}} \approx 0.029 \quad (31)$$

Lo que supone un $\sim 3\%$ (En el siguiente capítulo se expone por qué el $\Delta E = -8$ en esta situación en que todos los vecinos son iguales al espín que se evalúa voltear; más concretamente, este valor puede encontrarse en la Tabla 1).

Existe otra problemática asociada a este fenómeno y se da cuando tratamos de simular sistemas con temperaturas bajas, donde esperamos que la magnetización converja a $+1$ ó -1 . Es muy posible que, cuando el sistema trate de alcanzar el equilibrio a estas temperaturas bajas, el sistema pueda quedar "estancado" en regiones del espacio de estados por un tiempo, ofreciendo valores de salida similares entre sí y, por tanto, haciendo pensar que se ha alcanzado el equilibrio cuando lo que sucede es que el sistema está atrapado en un mínimo local y no en el mínimo global donde correspondería al sistema ubicarse para la temperatura dada. Más

concretamente, cuando el estado inicial es un estado que debiera corresponder a una temperatura por encima de la transición de fase, es muy posible que el sistema quede atrapado de forma indefinida en un estado donde los dominios han crecido lo suficiente como para que casi todos los espines tengan sus 4 vecinos iguales, los volteos sean improbables y por tanto no se logre converger a estados que se pudieran corresponder con dicha temperatura baja [MARTINO12].

Aunque no se van a emplear en este trabajo, en lo sucesivo se exponen dos algoritmos que intentan solventar esta problemática.

Algoritmo de Wolff

Como se expone en los párrafos anteriores, la longitud de correlación comienza a divergir, especialmente en el entorno de la temperatura crítica T_C , y es en este entorno donde el algoritmo Metropolis tiene dificultades para voltear un grupo de espines vecinos entre sí y que apuntan en la misma dirección. Esto es debido a que el algoritmo tiene que voltear uno a uno los espines del grupo y, además, la probabilidad de aceptar cada uno de los volteos es baja, ya que sus vecinos están alineados entre sí y por tanto, el volteo implica un incremento de energía.

Una solución a este problema la da Ulli Wolff en el año 1989, basándose en trabajos anteriores de Swendsen y Wang (1987) [NEWMAN99]. El algoritmo propuesto se denomina Algoritmo de Wolff y se incluye dentro de los denominados *cluster algorithms* ya que la idea consiste en voltear todos los espines de un grupo de espines (*cluster*) que estén apuntando en la misma dirección de una vez, evitando así voltear los espines de forma individual uno a uno.

La estrategia seguida para elegir qué grupo de espines voltear consiste en elegir un espín al azar siguiendo una distribución uniforme y seleccionar los vecinos que estén alineados con él; y se continúa seleccionando los vecinos de los vecinos que estén alineados entre sí, y así, sucesivamente, hasta formar un *cluster*.

Sin embargo, es deseable que el tamaño del *cluster* que se va a voltear dependa de la temperatura T a la que se encuentra el sistema. Así, si la temperatura es alta, dado que los espines deben estar desalineados con sus vecinos, lo deseable es que el tamaño del clúster sea pequeño; y si la temperatura es baja, es deseable que el tamaño del *cluster* sea grande para converger rápidamente a la fase ferromagnética, donde todos los espines tienden a estar alineados entre sí. Para ello se define la probabilidad $p(T)$ que se evalúa cada vez que se valora la posibilidad de añadir o no un espín al *cluster*.

Finalmente, cuando el proceso de añadir espines al *cluster* finaliza, el volteo del *cluster* completo se debe evaluar siguiendo otra probabilidad, la probabilidad de aceptar el nuevo estado, que debe depender de la variación de energía que implica la aceptación del nuevo estado. Sin embargo, la definición de la probabilidad $p(T) = 1 - e^{-2\beta J}$, que cumple la condición de balance detallado, permite aceptar el volteo del *cluster* formado con probabilidad 1.

Por otra parte, cuando la temperatura del sistema es alta, el tamaño de los *clusters* formados será pequeño, muy probablemente de tamaño unidad y , por tanto, el algoritmo de Wolff tiene un comportamiento similar al comportamiento del algoritmo Metropolis, llegando a ser menos eficiente que éste a partir de una cierta temperatura, ya que, a diferencia del algoritmo Metropolis, el algoritmo de Wolff tiene que realizar varios *tests* en la vecindad para incluir o no a los vecinos en el *cluster*, mientras Metropolis realiza un único *test*. Así, cerca de la transición de Fase, el algoritmo de Wolff es mejor, pero por encima de cierta temperatura, el algoritmo Metropolis es más eficiente.

A bajas temperaturas, lo más probable es que el algoritmo de Wolff seleccione un espín que forme parte del grueso de espines que están alineados entre sí y, por tanto, es probable que se giren todos ellos. Así, el algoritmo no sigue el comportamiento que se esperaría del modelo de Ising, donde los espines que están excitados térmicamente y desalineados con el grueso, son los que tienden a voltearse, no al revés. Sin embargo, el algoritmo no es absurdo en tanto en cuanto logra añadir los espines desalineados de una vez, aunque tenga que voltear el grueso de espines en cada iteración. Igual que a altas temperaturas, a bajas temperaturas el algoritmo de Wolff tiende a parecerse al algoritmo Metropolis, pero debido a la mayor complejidad de aquél tiende a ser menos eficiente también.

Por ello, el algoritmo de Wolff es realmente interesante de usar en el entorno de la temperatura crítica T_C . Además, el exponente dinámico del algoritmo de Wolff se ha estimado en $z_{\text{Wolff}} = 0.25 \pm 0.01$ según [NEWMAN99] y en $z_{\text{Wolff}} = 0.33 \pm 0.05$ según [TAMAYO90]; en ambos casos muy inferior al exponente dinámico de Metropolis que, como se expuso anteriormente, está estimado en $z_{\text{Metropolis}} = 2.1665 \pm 0.0012$ [NIGHT96].

Muestreo Wang-Landau

El muestreo de Wang-Landau [LANDAU04] tiene por objeto el cálculo de la densidad de estados $g(E)$ sin un conocimiento previo de la misma. Conocida la densidad de estados $g(E)$, dependiente de la energía, se puede calcular la función de partición y, con ello, el sistema estaría "resuelto", en tanto en cuanto la mayoría de las magnitudes termodinámicas pueden calcularse a partir de la función de partición.

El muestreo de Wang-Landau permite muestrear el espacio de configuraciones de sistemas que no podían tratarse mediante el algoritmo Metropolis, debido a que éste trabaja bien si el rango de energías es relativamente estrecho. Si el rango de energías a tratar es muy amplio, la probabilidad de que el Algoritmo Metropolis se quede atrapado en un mínimo local es muy alta, especialmente si se trata de transitar desde estados de alta (baja) energía a estados de baja (alta) energía. Además, el muestreo de Wang-Landau es independiente de la temperatura y es muy fácil de implementar, pudiendo ser paralelizable [VOGEL13].

La idea parte de que, si se realizase un camino aleatorio sin condicionar, a través del espacio de energías, variando el estado de los espines de forma aleatoria y aceptando todos los estados resultantes, el histograma $h(E)$ de los estados de energía transitados debería converger a la función densidad de estados $g(E)$ buscada.

Sin embargo, en la práctica esto es impracticable, incluso para sistemas pequeños, debido a la gran cantidad de configuraciones posibles.

Por ello, el muestreo Wang-Landau condiciona este camino aleatorio variando la probabilidad de aceptar los nuevos estados que aparecen, de manera que la probabilidad sea proporcional a la inversa de la densidad de estados $g(E)$. Esto va a permitir que el algoritmo no consuma tiempo en las energías donde hay mayor cantidad de estados.

Dado que no se conoce la densidad de estados $g(E)$, se parte de una función constante, con $g(E) = 1$, para todo E , y se van aceptando las transiciones de estado con probabilidad

$$p(E_1 \rightarrow E_2) = \min\left(\frac{g(E_1)}{g(E_2)}, 1\right) \quad (32)$$

Si el estado con energía E_2 es aceptado entonces $g(E_2)$ se actualiza multiplicándose por un factor $f > 1$ y se incrementa en una unidad el

valor de $h(E_2)$, el histograma donde se acumula el número de veces que se ha pasado por un estado con energía E .

Si el estado con energía E_2 no se acepta, entonces $g(E_1)$ se actualiza multiplicándose por el mismo factor $f > 1$ y se incrementa en una unidad el valor de $h(E_1)$.

Los autores proponen como valor inicial $f_0 = e^1 \approx 2.71828$, ya que, según ellos, este valor permite alcanzar todos los estados de energía rápidamente, incluso para sistemas grandes. Si f_0 fuera muy pequeño, el muestreo tardaría mucho en alcanzar todas las energías; y si f_0 fuera muy grande, conduciría a una gran incertidumbre estadística.

Con ello, el algoritmo continúa su muestreo hasta obtener un histograma $h(E)$ "plano", es decir, hasta que todas las energías han sido visitadas un número similar de veces, momento en el que la densidad de estados $g(E)$ ha convergido a su valor real con una precisión proporcional a $\ln(f)$.

Los autores proponen evaluar si el algoritmo es "plano" tras 10.000 Monte Carlo Steps (MCS, con $1\text{MCS} = L^2$ iteraciones), tras lo cual, si se considera suficientemente "plano", se procede a inicializar $h(E)$ con todas sus entradas a 0, y se actualiza el valor f siguiendo la expresión $f_{i+1} = (f_i)^{1/2}$, que es la recomendación de los autores.

Así, la simulación continúa hasta que el factor f sea menor que un valor predefinido. Los autores recomiendan que debe detenerse la simulación cuando el factor f alcance $f_{\text{final}} = \exp(10^{-8})$.

Por último, la consideración de si el histograma $h(E)$ es "plano" se realiza evaluando si el histograma $h(E)$ para todo E , no es menor que un porcentaje definido respecto a la media $\langle h(E) \rangle$. Este porcentaje debe ser acorde al tamaño y complejidad del sistema y a la precisión que se desea obtener. Para el modelo de Ising en dos dimensiones como el que se considera en este TFM, los autores recomiendan definir este porcentaje en 95%.

Algunas variaciones del algoritmo se han propuesto para evitar algunos inconvenientes que podría tener el algoritmo en situaciones en las que no todas las configuraciones de un rango de energía son alcanzables, con lo que el algoritmo podría fallar a la hora de "aplanar" la función $h(E)$. Así, en [TROSTER05] se propone realizar el muestreo definiendo la densidad de estados no solo en términos de la energía E sino también de la magnetización M , $g(E, M)$, pudiendo así detectar mejor estados "prohibidos" en la matriz densidad de estados $g(E, M)$.

DESARROLLO Y RESULTADOS

En este trabajo se pretende mostrar y explicar qué consecuencias produce aumentar el número N de espines a evaluar en cada iteración del algoritmo Metrópolis-Hastings para el modelo de Ising en dos dimensiones y sin campo externo. Se empleará una red cuadrada de tamaño finito con L filas y L columnas, con un espín en cada uno de los nodos de dicha red. Además, con la intención de simular el sistema en su límite termodinámico (tamaño infinito), se aplicarán condiciones de contorno periódicas, esto es, los vecinos de los espines que se encuentren en los extremos de la red serán aquellos espines que estén en el otro extremo de la red. Se recuerda que cada espín tiene cuatro vecinos: misma columna, fila superior; misma columna, fila inferior; misma fila, columna anterior; y misma fila, columna posterior.

En principio, de forma intuitiva cabría esperar:

- *Que el sistema tenga mayor dificultad para aceptar nuevos estados cuanto mayor sea N , siendo N el número de espines que exigimos voltear, ya que cabría esperar que el sistema tienda a oponerse más cuanto mayor es el cambio que se propone.*
- *Que, cuanto mayor es N , a bajas temperaturas el sistema tenga mayor flexibilidad para "romper" los dominios (grupos de espines alineados entre sí) que puedan formarse e impiden que el sistema converja a Magnetización total y Energía mínima. Esta problemática se expuso en el apartado "Problemática del algoritmo Metropolis y otros algoritmos" del capítulo anterior. Cuando los dominios ya están formados, el volteo individual de*

un espín que forma parte de un dominio se vuelve improbable porque su volteo implicará un aumento de la aportación energética individual que realiza al conjunto del sistema por desalinearse el espín respecto al resto del dominio; sin embargo, si el volteo se realiza de forma conjunta con otros espines, cabe la posibilidad de que se logre desalinearse el espín de su dominio si los otros espines que se está evaluando voltear están disminuyendo su aportación energética individual. Esto es posible porque en cada iteración se evalúa la variación energética del sistema completo al voltear todos los espines candidatos a la vez.

- *Que, cuanto mayor sea N , la correlación entre estados sea menor y por tanto el cálculo de los magnitudes termodinámicas pueda ser más precisa. Cuantos más espines se voltean, cabría esperar un mayor cambio en las magnitudes termodinámicas y un mayor cambio hace pensar que la correlación pueda ser menor entre muestras sucesivas.*

CONCEPTO DE VECINOS DISTINTOS: M Y VD

En esta sección se explican y diferencian dos conceptos que van a repetirse en lo sucesivo: la cantidad de vecindades distintas en toda la red, M ; y la cantidad vd de vecinos distintos que tienen los N espines seleccionados que se prueba si se voltean en cada iteración.

Como se ha expuesto previamente, la intención del trabajo consiste en averiguar las consecuencias que tiene en el sistema el volteo de N espines en cada iteración. El parámetro más importante y que define la dinámica del modelo, es la energía del sistema definida por el *Hamiltoniano*, expuesto en la ecuación (1). Así, recordando la ecuación (1), y definiendo $H=0$ y $J=1$, tenemos para nuestro modelo de Ising

$$\mathcal{H}_{Ising}(X) = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (33)$$

donde los espines s pueden tomar valores $+1$ ó -1 . Con ello, es fácil ver que el *Hamiltoniano* será mínimo cuando todos los espines estén alineados, es decir, cuando todas las vecindades $\langle i,j \rangle$ sean iguales, tomando valor $-2L^2$; y será máximo cuando todos los espines de la red estén desalineados, tomando valor $2L^2$; siendo L^2 el tamaño del sistema, es decir, el número de espines.

Es claro, pues, que la energía va a depender de cuántas vecindades distintas existen en el sistema. Así, existe una relación directa entre el número M de vecindades distintas en todo el sistema y la energía del sistema:

$$E = 2(M - L^2) \quad (34)$$

Por ello, en este trabajo se va a tratar de forma indistinta el concepto energía E o número M de vecindades distintas en toda la red.

Por otra parte, en las siguientes secciones se definirá el marco teórico que nos permitirá explicar la fenomenología del problema a través de la variación del número M de vecindades distintas en la red, motivo por el que surge el concepto "vecinos distintos", vd , de los N espines seleccionados que se prueba si se voltean en una iteración determinada. Así, el valor M variará, o no, en función de cómo sean los vecinos de los N espines que estemos evaluando en cada iteración.

Un ejemplo:

Seleccionamos de forma aleatoria un espín ($N=1$) que tiene valor +1 y sus cuatro vecinos toman valores [-1, -1, +1 y -1], es decir, 3 vecinos distintos ($vd=3$) y 1 vecino igual. Si volteamos el espín seleccionado tomará valor -1 y, atendiendo al valor de sus vecinos, ahora tendrá 3 vecinos iguales y 1 vecino distinto.

Si M_t era el número de vecindades distintas totales en la red antes de voltear el espín seleccionado, al haber pasado de 3 vecinos distintos a 1 vecino distinto, $M_t - 2$ será el nuevo número M_{t+1} de vecindades distintas en la red tras realizarse el volteo, con lo que habrá disminuido la energía del sistema y se aceptará la nueva configuración.

Con ello, es claro que es posible evaluar cómo se verá afectado el sistema en cada iteración valorando el número vd de vecinos distintos que tienen los N espines que se puede estar evaluando voltear. En lo sucesivo se entenderán los N espines a voltear como si fuesen un único meta-espín con $4N$ vecinos. De aquí surge la siguiente aproximación: **en el marco teórico, se asumirá que los N espines que se toman aleatoriamente en cada iteración no son vecinos entre sí**, lo que permite asumir que se deben evaluar $4N$ vecindades y no menos. Esta aproximación se toma porque simplifica enormemente las expresiones desarrolladas a lo largo del marco teórico expuesto en este capítulo. Nótese que, si se considerase la posibilidad de voltear espines vecinos, por cada par de espines que fuesen vecinos, el valor $4N$ se vería disminuido en 2 unidades. Se ha desarrollado una discusión respecto a esta aproximación en el apartado "Calidad de la Aproximación espines no vecinos".

Es importante resaltar esta suposición porque en las simulaciones no se ha impuesto esta restricción, es decir, en las simulaciones se puede estar evaluando el volteo de espines que son vecinos entre sí. Sin embargo, como se mostrará en lo sucesivo, esta suposición permite una buena estimación teórica del comportamiento de las simulaciones.

Por último, por claridad, se expone una tabla con las variaciones que habría si se voltease un espín (caso con $N=1$) en función del número de vecinos distintos vd que tuviese dicho espín antes del volteo:

vd	0	1	2	3	4
ΔM	+4	+2	0	-2	-4
ΔE	+8	+4	0	-4	-8

Tabla 1.- casos posibles en cada iteración para $N=1$

Recapitulando y por diferenciar con claridad:

- M = número total de vecindades distintas en toda la red.
- vd = número total de vecinos con espín distinto que tienen los N espines que han sido seleccionados y están siendo evaluados para ser volteados en la iteración actual.

ESTADÍSTICA: CASO EN QUE $N=1$

En esta sección se va a definir la probabilidad de que el algoritmo Metrópolis-Hastings acepte voltear un espín ($N=1$) en función de la energía del sistema para una configuración dada.

Así, cabe esperar una relación probabilística entre el número vd de vecinos distintos que tendrá un espín tomado aleatoriamente y el número M de vecindades distintas que existe en toda la red.

Intuitivamente, si el número M de vecindades distintas es alto, será más probable que el número vd de vecinos distintos del espín seleccionado tome valor 4 y no valor 0. En el caso extremo, si todas las vecindades del sistema son distintas, $M=2L^2$, entonces $vd=4$ con probabilidad 1. Y viceversa: si el número M de vecindades distintas en el sistema es bajo, será más probable que el número vd de vecinos distintos de el espín seleccionado tome valor 0 y no 4.

Con ello, definimos la esperanza del número de vecinos distintos, vd , como

$$\langle vd \rangle = 4 \frac{M}{2L^2} \quad (35)$$

que resulta de escalar los 4 vecinos posibles que estamos evaluando por el *ratio* de vecindades distintas en toda la red. Este valor debe coincidir con

$$\langle vd \rangle = \sum_{i=0}^4 i p_i \quad (36)$$

donde p_i es la probabilidad de que el número de vecinos vd sea igual a i , que se puede aproximar como

$$p_i = \binom{4}{i} \frac{\prod_{x=0}^{i-1} (M-x) \prod_{x=0}^{3-i} (M'-x)}{\prod_{x=0}^3 (2L^2-x)} \quad (37)$$

$$\sum_{i=0}^4 p_i = 1 \quad (38)$$

siendo $M' = 2L^2 - M$ el número de vecindades iguales en todo el sistema.

La ecuación (37) consiste en una función de densidad de probabilidad basada en la distribución binomial sin reemplazo (distribución hipergeométrica), cuyo valor mide la probabilidad de que el espín que estamos evaluando tenga i vecinos distintos cuando el número de vecindades distintas en toda la red es M .

Por claridad, se expone un símil:

Supongamos que tenemos una urna con M bolas rojas y M' bolas negras. Si tomamos 4 bolas de la urna sin reemplazo (sin reposición), ¿Qué probabilidad hay de que i bolas tomadas sean rojas y $4-i$ sea negras?

Un ejemplo a partir del símil:

Supongamos que en la urna existen 20 bolas, 15 de las cuales son rojas y 5 son negras. ¿Qué probabilidad hay de que se tomen 3 bolas rojas y 1 negra?

En primer lugar hay que averiguar de cuántas formas podemos tomar 3 bolas rojas y 1 negra. Por combinatoria, el número de formas posibles es 4:

Roja, Roja, Roja, Negra (RRRN)

Roja, Roja, Negra, Roja (RRNR)

Roja, Negra, Roja, Roja (RNRR)

Negra, Roja, Roja, Roja (NRRR)

A este valor obtenido por combinatoria se refiere el factor binomial de la ecuación (37).

Veamos la probabilidad de que se cumpla la primera combinación (RRRN):

La primera bola tendrá una probabilidad 15/20 de ser roja; la segunda bola tendrá una probabilidad 14/19 de ser roja porque no se ha repuesto la primera bola; la tercera bola tendrá una probabilidad 13/18 de ser roja; y la cuarta bola tendrá una probabilidad 5/17 de ser negra. Con lo que:

$$p(RRRN) = 15/20 \cdot 14/19 \cdot 13/18 \cdot 5/17$$

Veamos ahora la probabilidad de que se cumpla la segunda combinación (RRNR):

La primera bola tendrá una probabilidad 15/20 de ser roja; la segunda bola tendrá una probabilidad 14/19 de ser roja porque no se ha repuesto la primera bola; la tercera bola tendrá una probabilidad 5/18 de ser negra; la cuarta bola tendrá una probabilidad 13/17 de ser negra. Con lo que:

$$p(RRNR) = 15/20 \cdot 14/19 \cdot 5/18 \cdot 13/17$$

Por la propiedad conmutativa, no es difícil observar que ambas probabilidades son idénticas y que, por tanto, las 4 combinaciones posibles toman igual probabilidad.

Por tanto la probabilidad de tomar 3 bolas rojas y 1 bola negra sin importar el orden es:

$$p = 4 \frac{15 \cdot 14 \cdot 13 \cdot 5}{20 \cdot 19 \cdot 18 \cdot 17}$$

que es la ecuación (37), donde el coeficiente binomial está referido al número de combinaciones posibles, 4; M=15 es el número de bolas rojas en el sistema; M=5' el número de bolas negras; y 2L² = 20 el número de bolas totales.

Como ejemplos, en la Figura 2 se muestran algunas funciones de densidad de probabilidad para L = 10 y para varios valores de M.

En la Figura 2, además de mostrar en azul la función de distribución de probabilidad, se muestra, en vertical, la esperanza <vd> calculada siguiendo las expresiones (35) y (36) coincidiendo ambas perfectamente.

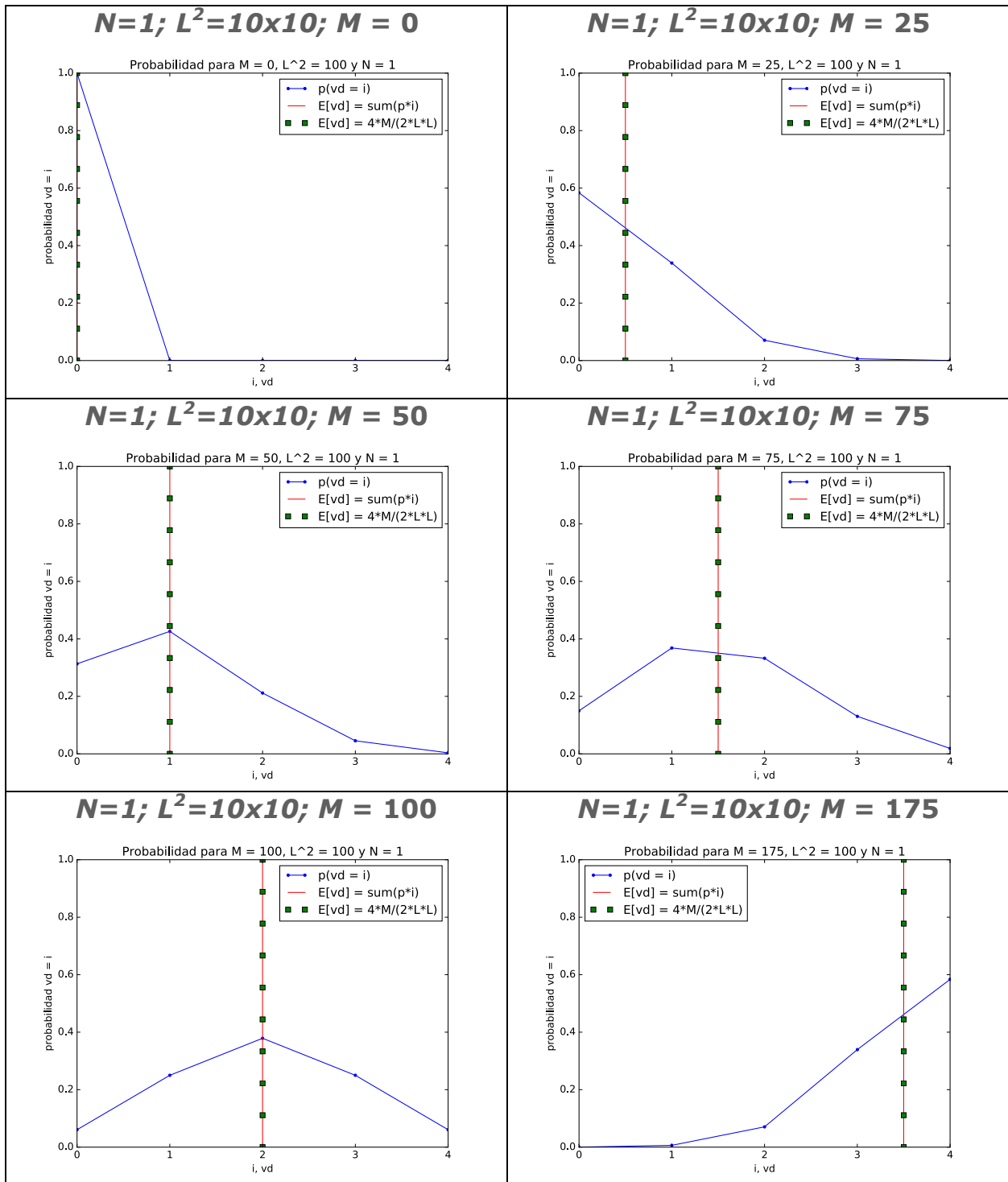


Figura 2.- Funciones densidad probabilidad para $N=1$. En vertical se muestra la esperanza $\langle vd \rangle$. El valor M referido a cada ejemplo está en la cabecera de cada gráfica.

Para comprobar que esta distribución es válida para nuestro modelo, se ha diseñado un experimento consistente en lanzar de forma iterativa 1500 simulaciones del algoritmo Metropolis-Hastings, con 2 *Monte Carlo Steps* (1 MCS = L^2 iteraciones), para un mismo tamaño de la red y una temperatura dados, comenzando siempre con una distribución Tablero de Damas que nos ofrece la máxima energía del sistema (todas las vecindades son distintas) con la intención de recorrer todas las energías posibles. Durante las distintas simulaciones se almacenan en una misma tabla el número de vecindades M distintas en todo el sistema y el número de vecinos distintos vd que tiene el espín seleccionado en cada instante. Con ello, calculamos la probabilidad como el cociente entre el número de veces que el espín tiene vd vecinos y el número total de veces que en la simulación el sistema tuvo M vecindades distintas en toda la red.

En la Figura 3 se muestra una comparación entre los valores teóricos y los resultados de una simulación con tamaño de la red 10×10 y temperatura $T=0$. Se observa cómo los valores teóricos y simulados en esta muestra coinciden muy bien. Las diferencias se deben a que el número de muestras de la simulación con que se cuenta para estimar la probabilidad es finita y a que la ecuación (37) aproxima el número de vecindades distintas suponiendo que están distribuidas de forma uniforme por la red, cuando, en realidad, la forma en que se distribuyen las vecindades distintas depende de consideraciones espaciales.

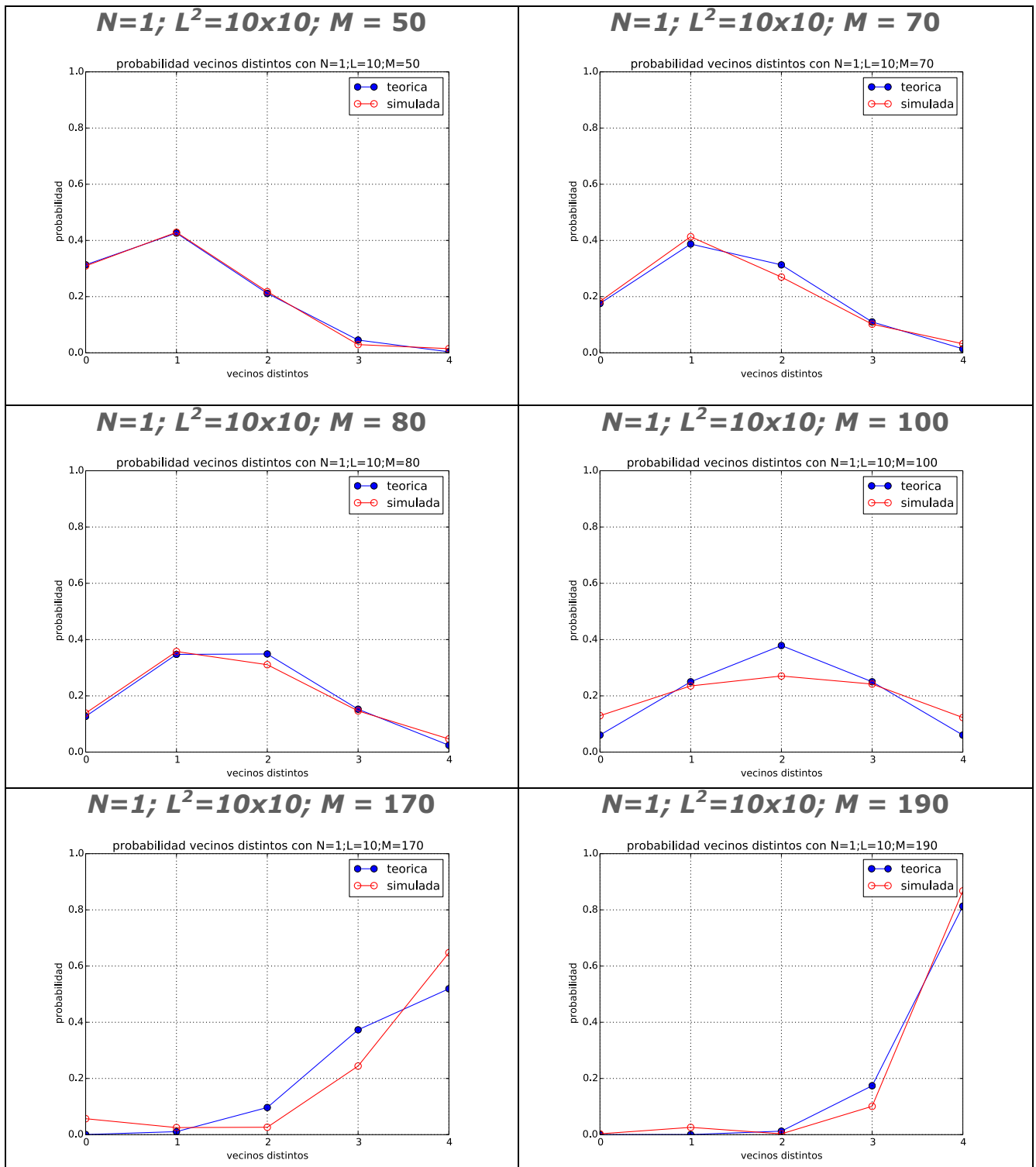


Figura 3.- Comparación entre la densidad de probabilidad simulada (Temperatura $T=0$) y teórica para $N=1$. En rojo la función estimada a partir de las simulaciones, en azul la estimación teórica. El valor M referido a cada ejemplo está en la cabecera de cada gráfica.

Por otra parte, teniendo una expresión para la probabilidad p_i , se puede definir la probabilidad de aceptar el volteo del espín que estamos evaluando en cada iteración como:

$$W_{N=1}(L, M, T) = \sum_{i=0}^1 p_i e^{-\frac{\Delta E_i}{kT}} + \sum_{i=2}^4 p_i \quad (39)$$

En efecto, si el espín seleccionado tiene $i=\{0 \text{ ó } 1\}$ vecinos distintos, el volteo implica un aumento de energía y se acepta con probabilidad $e^{-\frac{\Delta E_i}{kT}}$; y si el espín seleccionado tiene $i=\{2, 3 \text{ ó } 4\}$ vecinos distintos, entonces el volteo implica un descenso de energía y se acepta siempre.

Además, como

$$\Delta E_i = 4(2 - i) \quad (40)$$

podemos reescribir

$$W_{N=1}(L, M, T) = \sum_{i=0}^1 p_i e^{-\frac{4(2-i)}{kT}} + \sum_{i=2}^4 p_i \quad (41)$$

En la Figura 4, se muestra esta probabilidad W de aceptar el volteo del espín evaluado en función del porcentaje de vecindades distintas M en toda la red y para temperaturas en el rango $T=[0,5]$. Obviamente, la curva superior se refiere a la temperatura $T=5$ y la curva inferior a la temperatura $T=0$. Se observa cómo la probabilidad de aceptar un nuevo estado aumenta a medida que el número de vecindades distintas M aumenta, ya que a mayor M , mayor probabilidad de disminuir la energía, alineando el espín evaluado con sus vecinos. Es interesante ver cómo, a temperatura $T=0$, cuando todos los espines están alineados, $M = 0$, la probabilidad de aceptar una nueva configuración es 0; y cómo, para igual M , cuando la temperatura $T = 5$, la probabilidad de aceptar un nuevo estado asciende a $W \approx 20\%$.

Nótese que es posible mostrar la curva en términos del **porcentaje** de vecindades distintas M en toda la red con la intención de independizarlo del tamaño L^2 del sistema (las diferencias son mínimas respecto de L); y que la energía es mínima cuando $M = 0\%$ y la energía es máxima cuando $M = 100\%$ (Ecuación (34)).

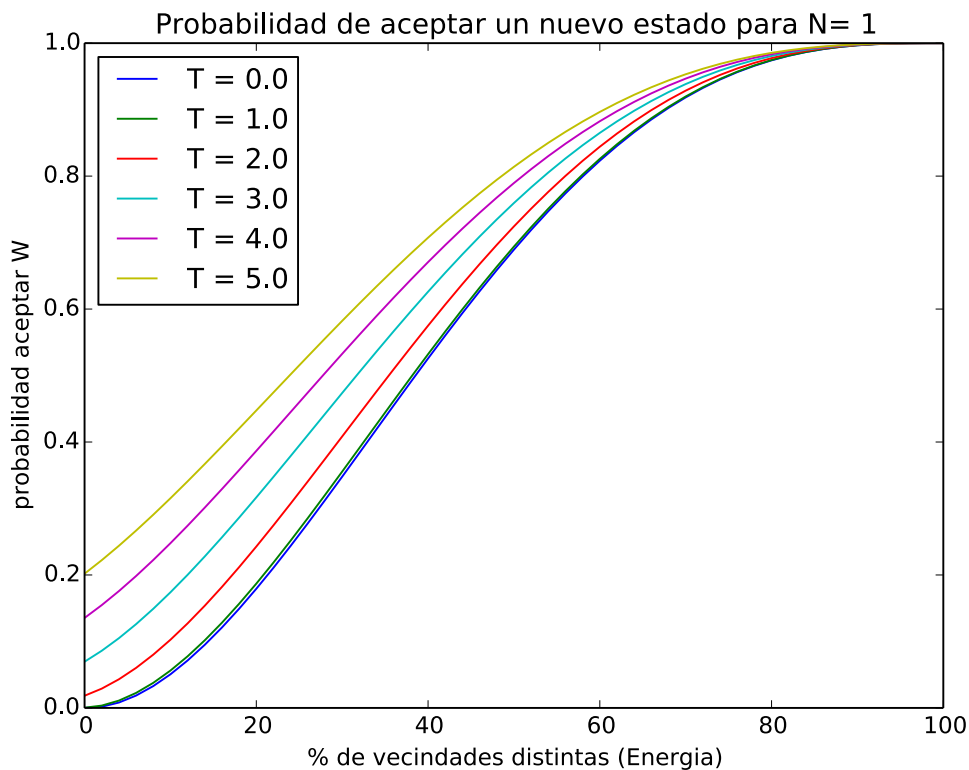


Figura 4.- Probabilidad W de aceptar un nuevo estado para $N=1$, en función del porcentaje M de vecindades distintas en toda la red, para temperaturas $T=[0, 1, 2, 3, 4$ y $5]$.

Para comprobar este comportamiento se ha utilizado el experimento descrito con anterioridad en esta sección, almacenando en una tabla el número de veces que el sistema tenía M vecindades distintas y el número de veces que se aceptaba el volteo del espín para dicho valor M , estimando la probabilidad como el cociente entre ambos valores. En la Figura 5 se comparan los valores teóricos y los valores obtenidos en la simulación para distintas temperaturas, con $L=10$. Se observa cómo los valores simulados siguen los valores teóricos salvo para valores de M por encima del 50% ($M=100$ para $L=10$) donde la teoría parece sobreestimar dicha probabilidad.

Esta sobreestimación se debe a que la función de probabilidad p_i no tiene en cuenta consideraciones espaciales, es decir, considera que las vecindades distintas están distribuidas de forma uniforme por la red. Así, para M alto subestima el valor p_i para i bajo. Como ejemplo, supóngase que se tiene una red con tamaño 10×10 , como la de la simulación, con todas las vecindades distintas, $M=200$, y se volteo un espín cualquiera. En la siguiente iteración, las probabilidades p_i serían las que se muestran en la columna " p_i real" de la Tabla 2, comparadas con las probabilidades " p_i estimadas". Así, p_0 real se refiere a la probabilidad de que el algoritmo tome en la siguiente iteración el espín volteado de entre los 100 espines que forman la

red, p_3 se refiere a la probabilidad de que el algoritmo tome en la siguiente iteración uno de los cuatro vecinos del espín volteado y p_0 se refiere a que coja cualquier otro espín de la red. De esta manera, es claro que se está subestimando la probabilidad de que $i < 2$ en la siguiente iteración, es decir, se sobreestima la probabilidad de que $i \geq 2$ y por tanto se sobreestima aceptar un nuevo estado como se aprecia en la Figura 5.

Este fenómeno se ve atenuado cuanto mayor es L y cuanto mayor es el número N de espines que valoramos voltear como se verá en la siguiente sección. Además, como se verá a lo largo del trabajo, en los alrededores de las energías donde el sistema tiende a converger dada una temperatura T y, por tanto, donde se sacan todas las conclusiones del trabajo, la estimación funciona bien.

Por otra parte, es interesante notar como para $T=3$ no hay valores simulados para M bajo debido a que, para una temperatura tan alta, la simulación no es capaz de alcanzar estados de energía baja. Esto no significa que, para M bajo, no se acepten estados nuevos, sino que los estados que se aceptan son de mayor energía, es decir, se aceptan pero el sistema asciende en energía, ya que la energía que le corresponde para temperatura $T=3$, no se corresponde con M bajo.

i	p_i real	p_i estimada
0	1/100	1.54e-8
1	0	1.21e-5
2	0	1.77e-3
3	4/100	0.076
4	95/100	0.92

Tabla 2.- Probabilidades p_i reales y estimadas para el caso en que se voltea un espín al tener todas las vecindades en una red de tamaño 10×10

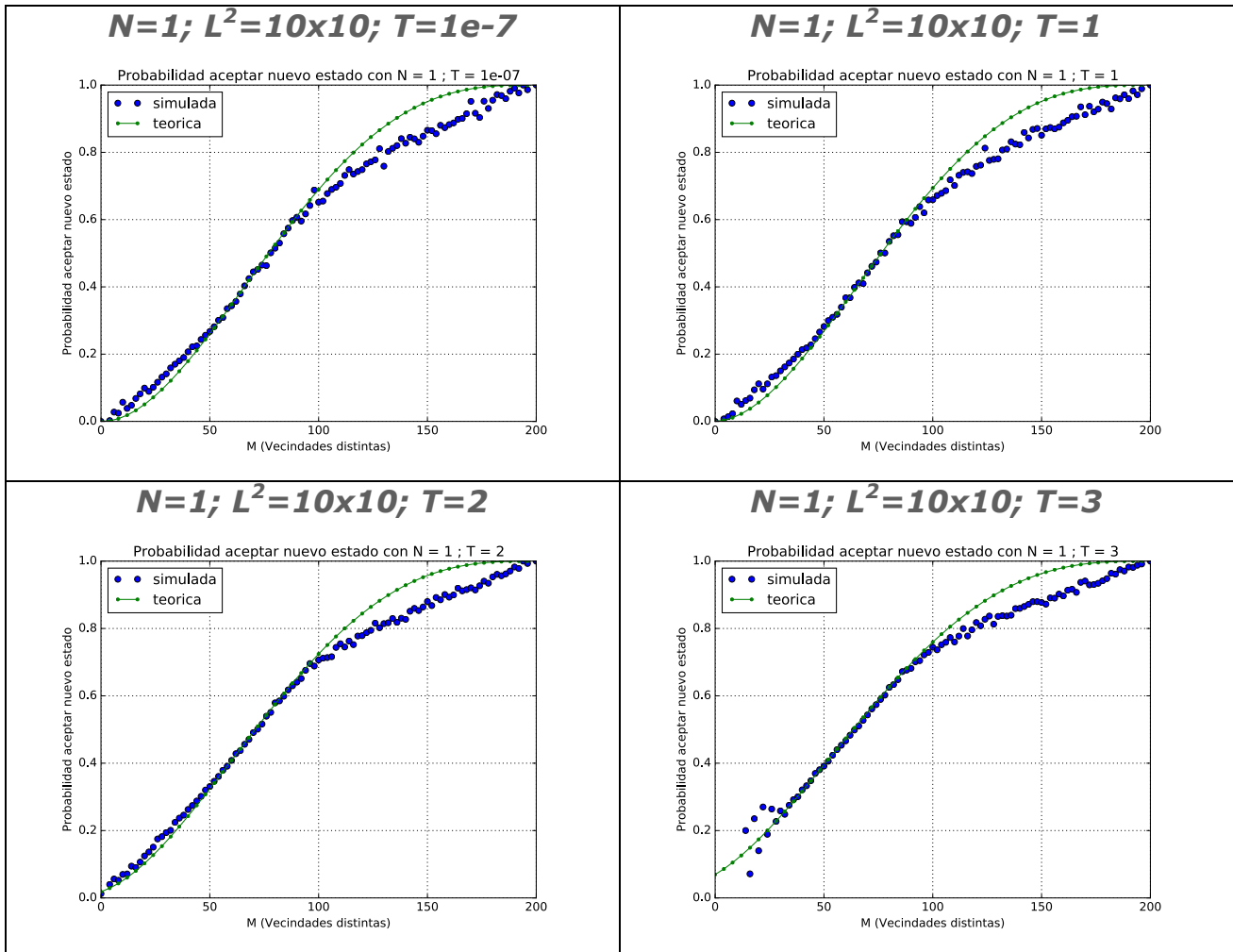


Figura 5.- Comparativa Probabilidad W de aceptar un nuevo estado para $N=1$, entre los valores teóricos y los simulados, en función de M , para temperaturas $T=[0, 1, 2$ y $3]$.

ESTADÍSTICA: CASOS EN QUE $N > 1$

Una vez expuesta la estadística para el caso $N=1$, en esta sección se realizará una generalización para $N>1$. En el plano teórico, si **consideramos que los espines a evaluar no son vecinos**, la expresión que aproxima p_i para cualquier N queda

$$p_i = \binom{4N}{i} \frac{\prod_{x=0}^{i-1} (M-x) \prod_{x=0}^{4N-i-1} (M'-x)}{\prod_{x=0}^{4N-1} (2L^2-x)} \quad (42)$$

donde M' es el número de vecindades iguales en todo el sistema, $M' = 2L^2 - M$.

Es importante recalcar en este punto que la ecuación (42) asume que los N espines seleccionados no son vecinos entre sí, con la intención de generalizar el total de vecinos que tienen en total los N espines, es decir, $4N$ vecinos en total. Sin embargo, en las simulaciones los N espines sí pueden ser vecinos entre sí. Se ha desarrollado una discusión al respecto en el apartado "Calidad de la Aproximación espines no vecinos".

Definido p_i y recurriendo a la ecuación (36), es inmediato obtener $\langle vd \rangle$ como

$$\langle vd \rangle = \sum_{i=0}^{4N} i p_i \quad (43)$$

Como muestra comparativa, en la Figura 6 y Figura 7 se muestran los resultados teóricos y simulados para $N=6$ y $N=10$ respectivamente. Se observa cómo la teoría predice bien los valores simulados, existiendo una mayor diferencia a medida que M es mayor, debido a lo que se apuntó en la sección anterior, esto es, que la función de probabilidad p_i no tiene en cuenta consideraciones espaciales, es decir, considera que las vecindades distintas están distribuidas de forma uniforme por la red.

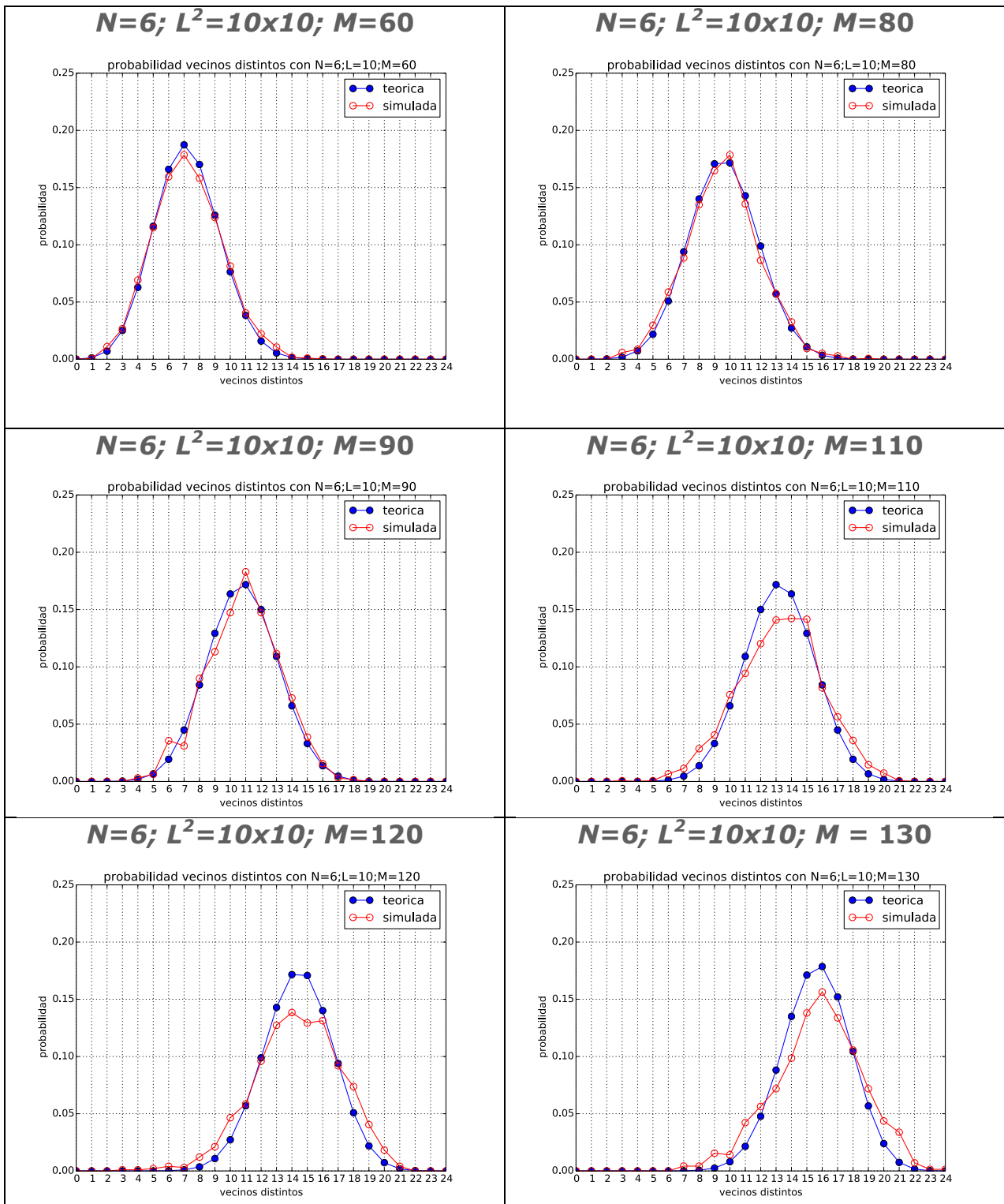


Figura 6.- Comparación densidad de probabilidad simulada y teórica para N=6. En rojo la función estimada a partir de las simulaciones, en azul la estimación teórica. El valor M referido a cada ejemplo está en la cabecera de cada gráfica

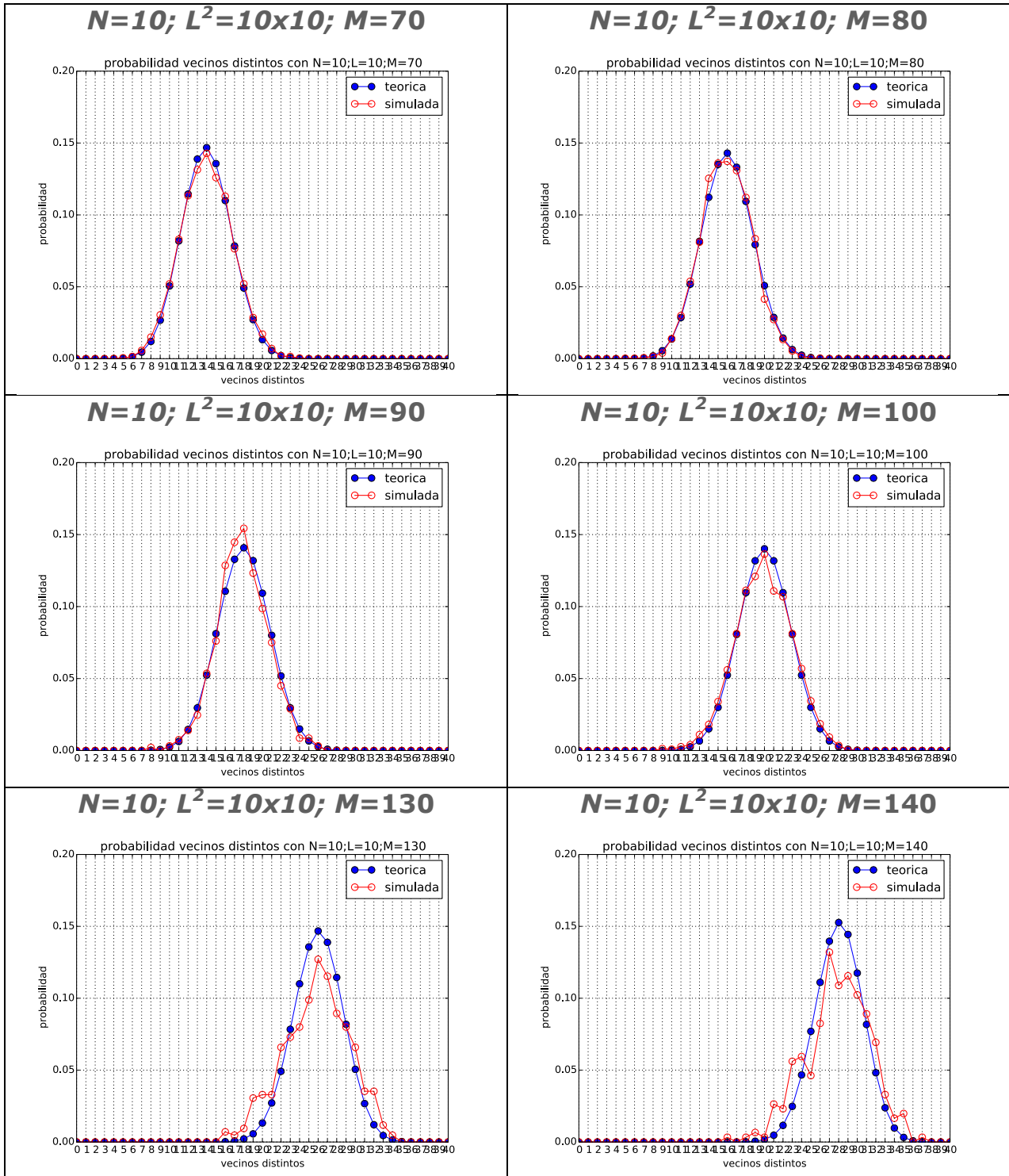


Figura 7.- Comparación densidad de probabilidad simulada y teórica para N=10. En rojo la función estimada a partir de las simulaciones, en azul la estimación teórica. El valor M referido a cada ejemplo está en la cabecera de cada gráfica.

Con ello, la probabilidad de aceptar el volteo de los N espines que estamos evaluando en cada iteración queda

$$W_N(L, M, T) = \sum_{i=0}^{2N-1} p_i e^{-\frac{\Delta E_i}{kT}} + \sum_{i=2N}^{4N} p_i \quad (44)$$

Y como

$$\Delta E_i = 4(2N - i) \quad (45)$$

Podemos reescribir

$$W_N(L, M, T) = \sum_{i=0}^{2N-1} p_i e^{-\frac{4(2N-i)}{kT}} + \sum_{i=2N}^{4N} p_i \quad (46)$$

Así, en la Figura 8 se muestran cuatro ejemplos de probabilidad W de aceptar el volteo de N espines **no vecinos** en función del porcentaje de vecindades distintas M en toda la red y para temperaturas en el rango $T=[0,5]$, para $N=[2, 3, 6$ y $10]$.

Se observa cómo la función W tiende a estrecharse alrededor de $M = 50\%$ a medida que aumenta N . Así, en el límite, cuando N es igual al número de espines totales en el sistema, tendremos, para $T = 0$, un escalón perfecto, *i.e.*, $W = 0$ cuando $M < 50\%$ y $W = 1$ cuando $M \geq 50\%$ porque, en este límite, vd coincide con M .

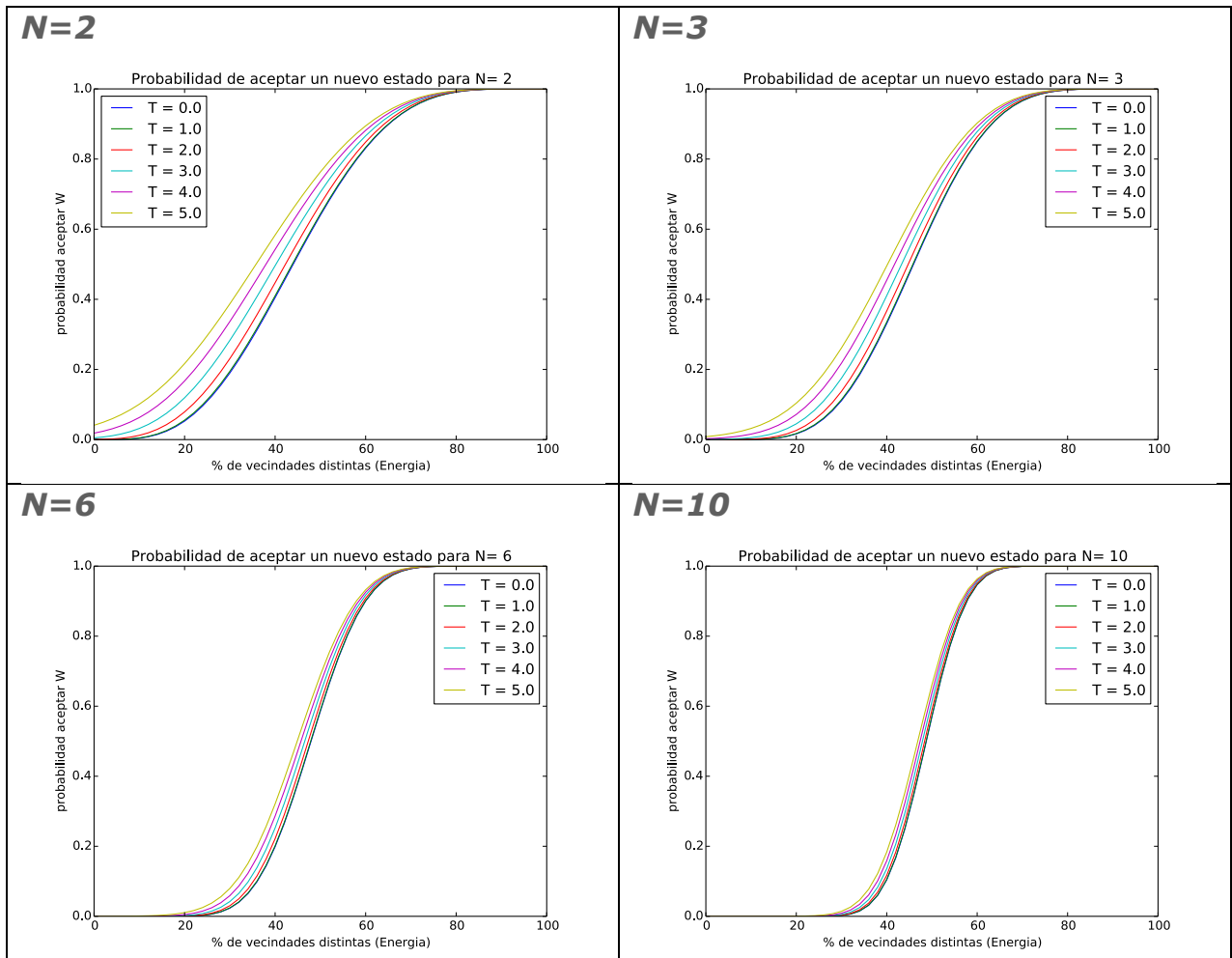


Figura 8.- Probabilidad W de aceptar un nuevo estado para $N=[2, 3, 6$ y $10]$, en función del porcentaje M de vecindades distintas en toda la red, para temperaturas $T=[0, 1, 2, 3, 4$ y $5]$.

Para comprobar este comportamiento, como se hiciera en la Figura 5, en la Figura 9 se comparan los valores teóricos y los valores obtenidos en la misma simulación con $L=10$, $N = [6$ y $10]$ y $T = [0$ y $2]$. Se observa cómo los valores simulados siguen los valores teóricos salvo para valores de M por encima del 50% ($M=100$ para $L=10$) donde la teoría parece sobreestimar dicha probabilidad. Una explicación a este fenómeno es la dada en la sección anterior, donde se explicó que la aproximación de la función p_i no tiene en cuenta consideraciones espaciales, sino que supone que las vecindades distintas están distribuidas de forma uniforme por la red. Sin embargo, como también se apuntó en la sección anterior, cuanto mayor es el valor N menor será el impacto de esta sobreestimación como puede apreciarse en la Figura 9.

Además, en el apartado “Calidad de la Aproximación espines no vecinos” se analiza el hecho de que las colisiones (colisión: espines seleccionados que son vecinos) provocan leves diferencias antes de saturarse la función de probabilidad (*i.e.*, en las curvas), tanto a $W=0$ como a $W=1$. Estas diferencias son las que se aprecian en la Figura 9.

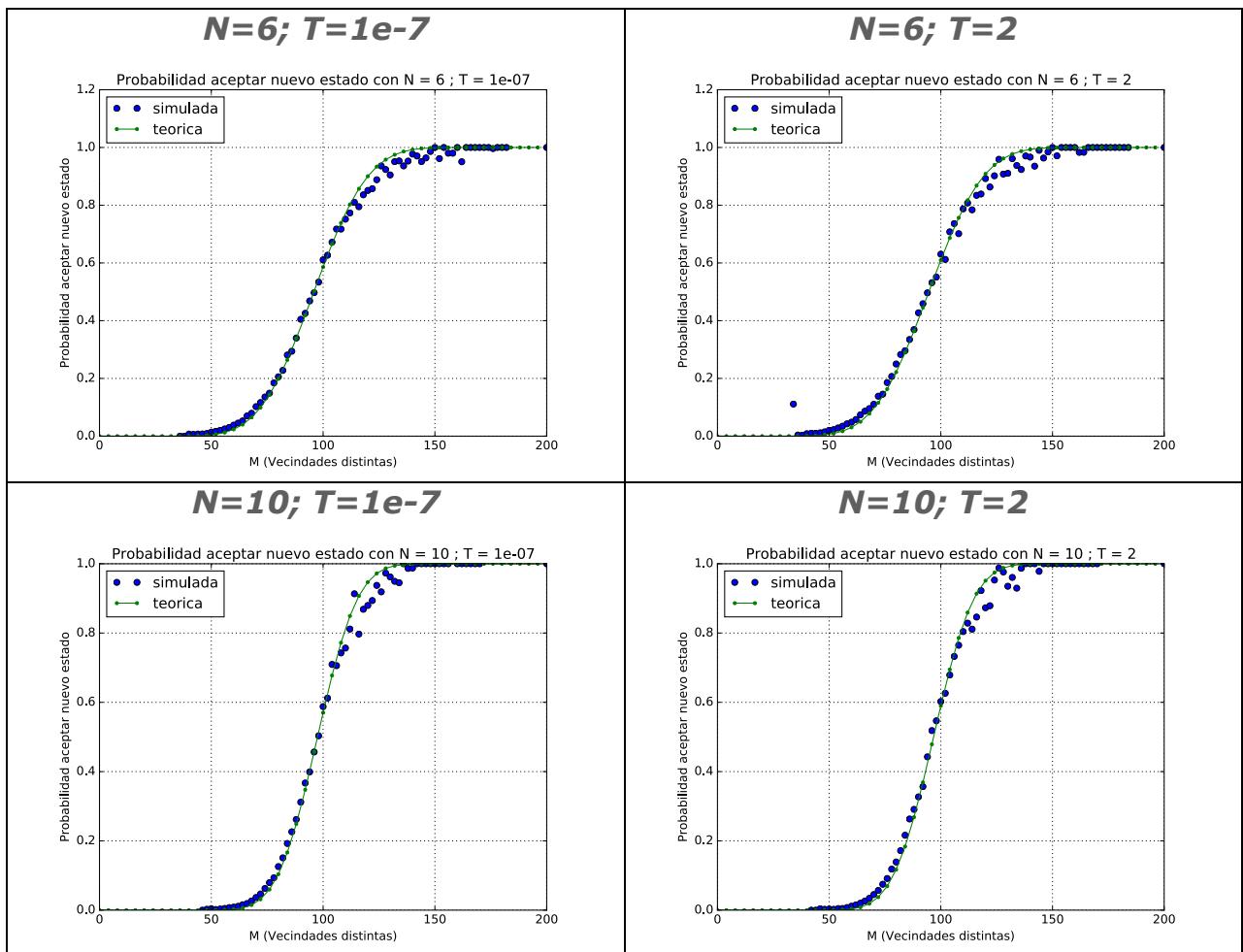


Figura 9.- Comparativa Probabilidad W de aceptar un nuevo estado para $L=10$, entre los valores teóricos y los simulados, en función de M , para $N=[6 \text{ y } 10]$ y temperaturas $T=[0 \text{ y } 2]$.

ERGODICIDAD

En la sección "Ergodicidad y Balance Detallado", del capítulo Antecedentes, se explica que se necesita asegurar que el sistema es ergódico, esto es, que el proceso de Markov puede pasar por todos los estados posibles del sistema. Mejor expresado, debe existir una probabilidad distinta de 0 de alcanzar cualquier estado partiendo de cualquier otro estado del sistema.

Sin embargo, como se demuestra a continuación, esto no es posible para N par.

Para el caso en que $N=1$ es obvio que existe un camino para alcanzar cualquier otro estado. No hay más que seleccionar en cada iteración cada uno de los espines que se quiere voltear para alcanzar el estado objetivo.

Sin embargo, para $N > 1$, esto no es tan obvio. Si queremos alcanzar cualquier estado E_i a partir de un estado E_0 dado, de alguna manera, el proceso de Markov debe ser capaz de alcanzar cualquier otro estado en el que sólo varíe un espín.

Con ello, definamos V_p como el número de espines distintos entre el estado E_0 de partida y el estado E_i tras p iteraciones, en cada una de las cuales volteamos N espines, tal que

$$V_{p,\{r_i\},\{s_i\}} = \sum_{i=1}^p s_i - r_i \quad (47)$$

donde s_i es el número de nuevos espines que se voltean en la iteración i -ésima; y r_i el número de espines que se voltean también en la iteración i -ésima, pero que tras el volteo quedan igual que en el estado E_0 .

Con esta definición es claro que en la primera iteración $r_1 = 0$ y $s_1 = N$. Además, $s_i + r_i = N$ ya que volteamos N espines en cada iteración, con lo que $s_i = N - r_i$ y podemos reescribir

$$V_{p,\{r_i\}} = \sum_{i=1}^p N - 2r_i \quad (48)$$

$$V_{p,\{r_i\}} = pN - 2 \sum_{i=2}^p r_i \quad (49)$$

Donde $r_i \leq N$ y se ha tenido en cuenta que $r_1 = 0$ en la primera iteración ($i = 1$).

En esta última expresión (49), es obvio que el segundo término del miembro derecho es par y si se quiere que $V = 1$, condición necesaria para alcanzar cualquier otro estado, el término pN debe ser impar. Así, es claro que esto es imposible si N es par, por lo que podemos asegurar que el sistema no es ergódico con N par. Si N es impar, el número p de iteraciones debe ser impar para alcanzar dicha condición, pero siempre será posible alcanzar cualquier estado E_i a partir de uno dado, con lo que siempre será ergódico para N impar.

A pesar de la falta de ergodicidad para N par, se barre un gran número de configuraciones posibles (aunque no todas) y es por esto que en lo sucesivo seguimos tratando los casos con N par, ya que no dejan de ofrecer resultados esclarecedores.

COMPARANDO W_1^N CON W_N

A priori, es natural preguntarse si es equivalente intentar voltear N espines **no vecinos** en una única iteración o voltear los mismos N espines en N iteraciones, para alcanzar la misma configuración. En esta sección y en la siguiente se compara la probabilidad de alcanzar una nueva configuración con los N espines volteados y la variación de energía esperada en ambos casos.

Así, la primera cuestión, si asumimos que los N espines **no son vecinos entre sí**, es equivalente a hacer la comparativa entre W_1^N y W_N .

En la Figura 10 se muestran los valores teóricos para distintos valores de N a temperatura $T=0$. En línea continua se muestra W_N y en línea discontinua W_1^N . En la Figura 11, se muestra los mismos valores para $T = 5$.

En primer lugar, siguiendo las curvas de línea continua referidas a W_N podemos apreciar la tendencia comentada anteriormente y es que las curvas tienden a una función escalón a medida que N aumenta. Por otra parte, es claro que la probabilidad de aceptar la nueva configuración es mayor cuando se trata de voltear los N espines en una misma iteración (línea continua) comparado a voltear los mismos N espines en N iteraciones (línea discontinua). La única diferencia entre ambas figuras (Figura 10 y Figura 11), se evidencia en la cola para vecindades distintas bajas, donde la probabilidad siempre es mayor para el caso en que la temperatura $T= 5$ como era de esperar si atendemos a la ecuación (46). A temperaturas intermedias se obtienen resultados intermedios como sucedía en la Figura 4 y en la Figura 8. No obstante, que la configuración se acepte con mayor probabilidad no significa necesariamente que la variación de energía sea mayor como se expone en la siguiente sección. Interesante

también cómo, para porcentajes de vecindades distintas M por debajo del $\sim 50\%$, la probabilidad de aceptar un nuevo estado es mayor cuanto menor es N y viceversa.

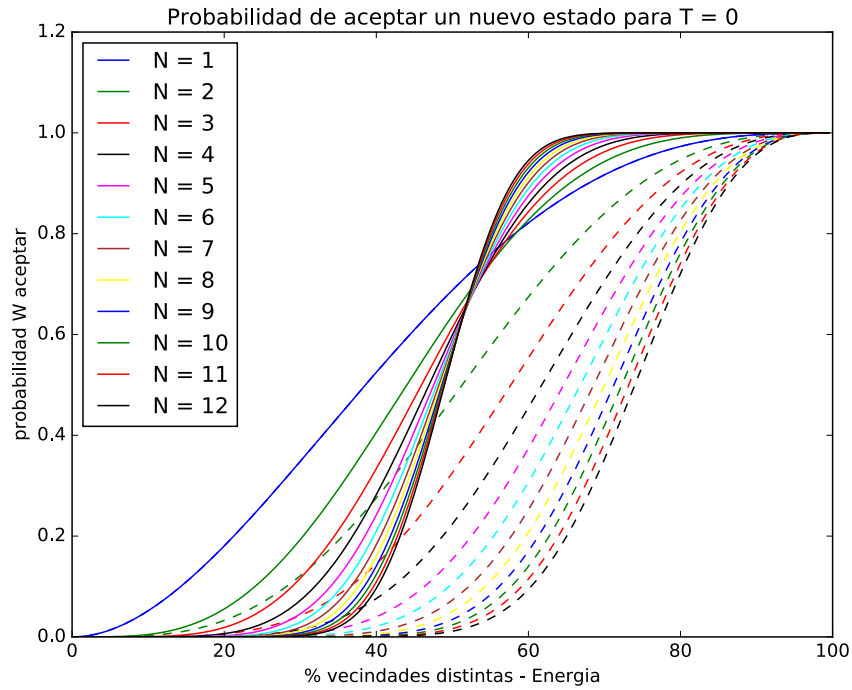


Figura 10.- Probabilidad de aceptar una nueva configuración a temperatura $T=0$ para distintos valores de N . En línea continua se muestran las probabilidades W_N y en línea discontinua W_1^N

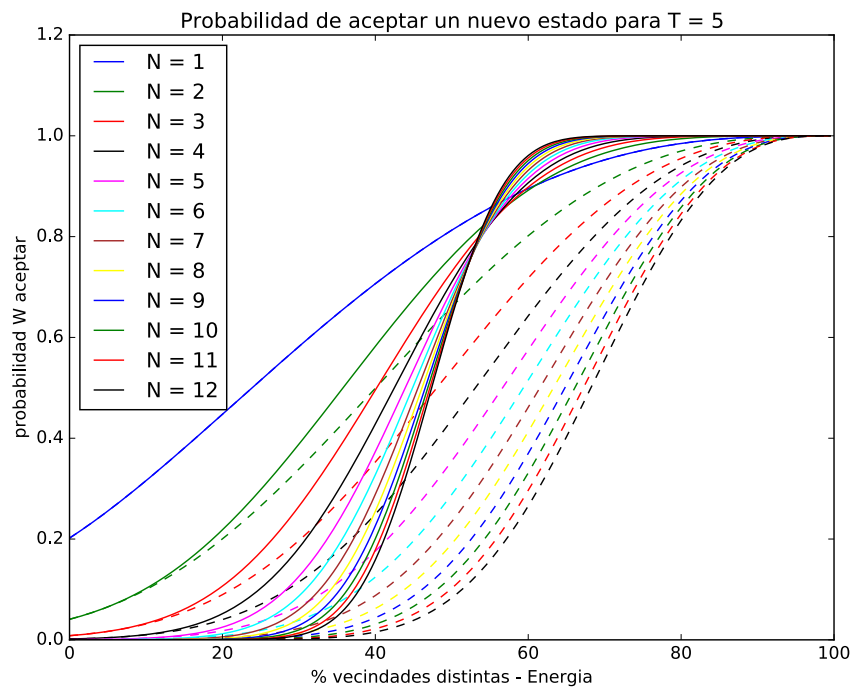


Figura 11.- Probabilidad de aceptar una nueva configuración a temperatura $T=5$ para distintos valores de N . En línea continua se muestran las probabilidades W_N y en línea discontinua W_1^N

ESTUDIO DE LA VARIACIÓN DE ENERGÍA ΔE CON EL VALOR DE N

A priori, se podría pensar que voltear N espines conlleva una variación de energía del sistema mayor a medida que N aumenta. Sin embargo, esto no tiene por qué ser así necesariamente.

Un ejemplo:

A temperatura $T=0$, tomamos dos espines; uno tiene 3 vecinos distintos (1 igual), el otro tiene 1 vecino distinto (3 iguales).

Si los evaluamos uno por uno ($N=1$) voltearíamos el primer espín y el segundo no, obteniendo una variación energética total $\Delta E = -4$ si atendemos a la ecuación (45).

Si evaluamos los dos espines en una iteración ($N=2$), voltearíamos los dos espines porque tendríamos (3+1) vecinos distintos, obteniendo una variación energética total $\Delta E = 0$ si atendemos a la ecuación (45).

Con la intención de cuantificar este fenómeno se define la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ como

$$\langle \Delta E \rangle_N = \sum_{i=0}^{4N} q_i \Delta E_i \quad (50)$$

con

$$q_i = \begin{cases} p_i e^{-\frac{\Delta E_i}{kT}} & \text{si } \Delta E_i > 0 \\ p_i & \text{si } \Delta E_i \leq 0 \end{cases} \quad (51)$$

que no es más que la media ponderada de la variación de energía en función de la probabilidad de volteo. Ésta nos va a permitir medir cuánto va a variar en media la energía del sistema para una N , temperatura T y M dadas. Conviene aquí recordar que el incremento de energía está relacionado con el número de vecinos distintos vd a través de la ecuación (45). Además, hay que tener en cuenta que

$$\sum_i q_i < 1 \quad (52)$$

Sin embargo, esto no afecta al cálculo de $\langle \Delta E \rangle$ porque

$$\Delta E_i = 0 \quad \text{con probabilidad} \quad \left(1 - \sum_i q_i\right) \quad (53)$$

Discutimos ahora el caso de las dos temperaturas $T=0$ y $T=5$. En la Figura 12 se muestran distintas curvas para distinto N en función de

M , a temperatura $T=0$. En línea continua se representa $\langle \Delta E \rangle_N$ que muestra la variación de energía media si volteamos N espines en cada iteración; y en línea discontinua $N \cdot \langle \Delta E \rangle_{N=1}$, que cuantifica la variación de energía media, volteando un espín en cada iteración, tras N iteraciones.

Así, es claro que a temperatura $T=0$ la variación media de energía siempre será negativa, es decir, tendemos a alinear todos los espines de la red, a homogeneizar la red.

Además, es claro que para valores altos de M , número de vecindades distintas en el sistema, habrá una mayor velocidad de convergencia a estados de energía menores cuanto mayor sea el número N de espines que evaluemos en cada iteración. Sin embargo, este efecto se ve mermado a medida que disminuye M , llegando a invertirse en el entorno $M \approx 40\%$ donde a menores valores de N mayor es la velocidad de descenso energético. Esta inversión se aprecia mejor en la Figura 13, donde se muestra un detalle de la Figura 12 para $M < 60\%$.

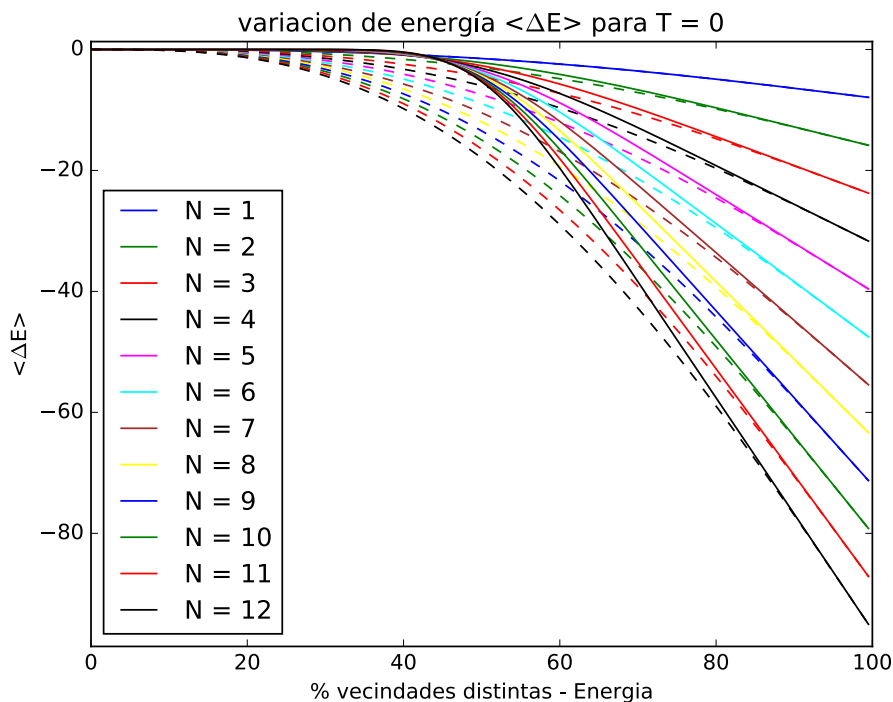


Figura 12.- Variación media de Energía a temperatura $T=0$, para distintos valores de N en función de M . En línea continua se muestra $\langle \Delta E \rangle_N$. En línea discontinua se muestra $N \cdot \langle \Delta E \rangle_{N=1}$.

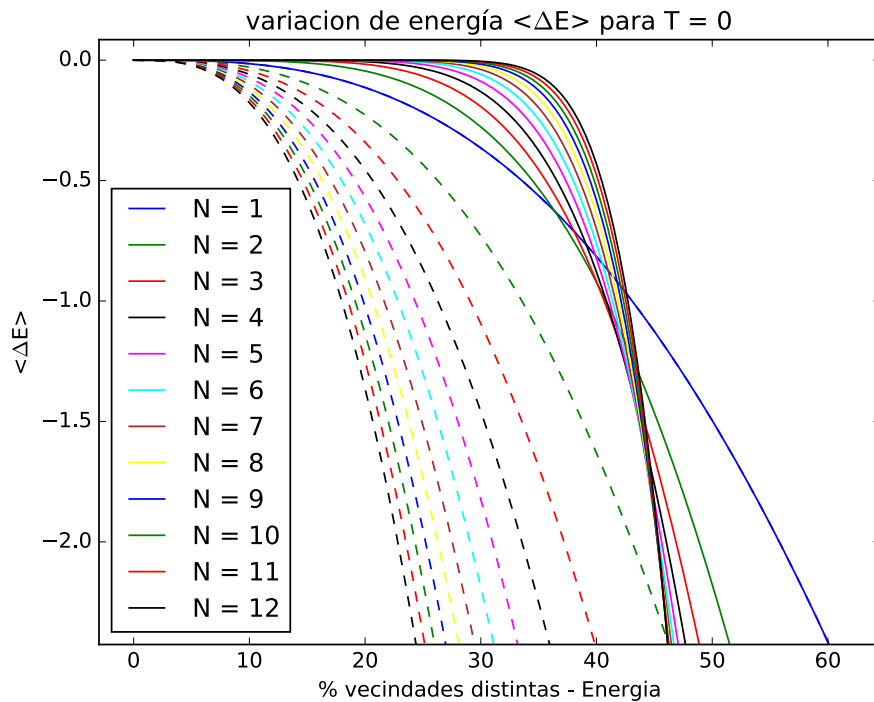


Figura 13.-Detalle de la Figura 12, para $M < 60\%$.

Por otra parte, atendiendo a las líneas discontinuas, referidas a $N \cdot \langle \Delta E \rangle_{N=1}$, y comparándolas con la línea continua, referidas a $\langle \Delta E \rangle_N$, es claro que el descenso energético será mayor tras N iteraciones del algoritmo volteando un espín en cada iteración. Con todo ello, parece claro que para M por debajo del 40%, si queremos converger al mínimo de energía, lo óptimo es disminuir el número N de espines que se voltea en cada iteración del algoritmo Metropolis-Hastings.

En la Figura 14 se muestran los valores obtenidos para temperatura $T=5$. Para valores M altos la naturaleza de las curvas es equivalente a la mostrada en la Figura 12, aunque la magnitud de la variación energética es ligeramente mayor. Sin embargo, para $M < 40\%$, se observan valores positivos de la variación media de la Energía, mayor cuanto menor es N . Esto puede observarse mejor en la Figura 15, donde se muestra un detalle de la Figura 14 para $M < 60\%$ y $\langle \Delta E \rangle$ positivas. Por un lado, notar que para estos valores bajos de M , $N \cdot \langle \Delta E \rangle_{N=1}$ es muy superior a $\langle \Delta E \rangle_N$; y por otro lado, notar que esto indica que es improbable alcanzar estados de Energía bajos a esta temperatura ya que el sistema tiende a incrementar su energía en esta región energética. Esta última idea se desarrolla en mayor detalle en la siguiente sección.

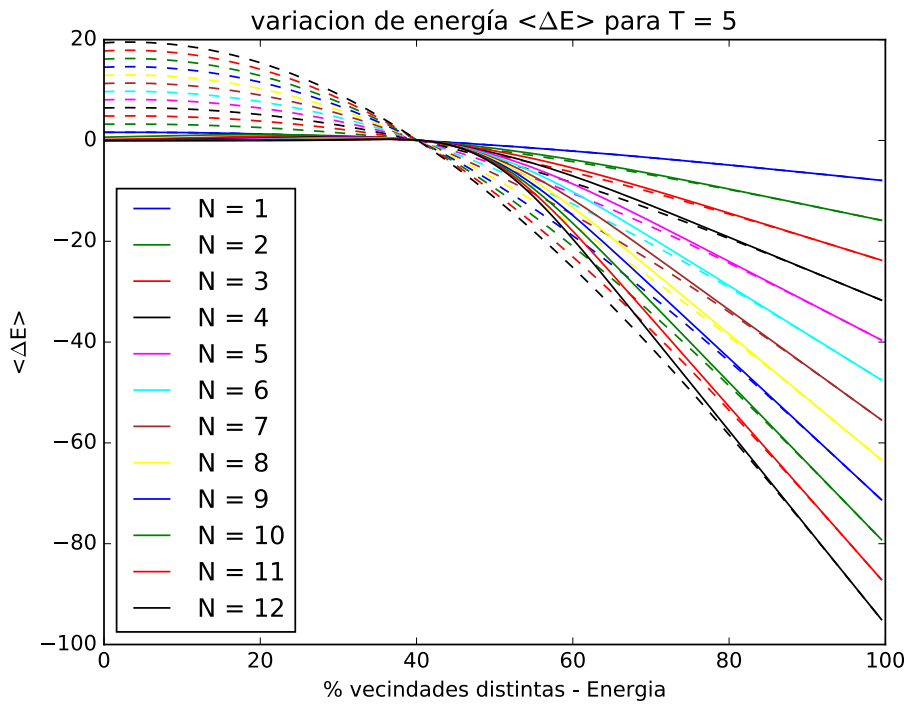


Figura 14.- Variación media de Energía a temperatura $T=5$, para distintos valores de N en función de M . En línea continua se muestra $\langle \Delta E \rangle_N$. En línea discontinua se muestra $N \cdot \langle \Delta E \rangle_{N=1}$.

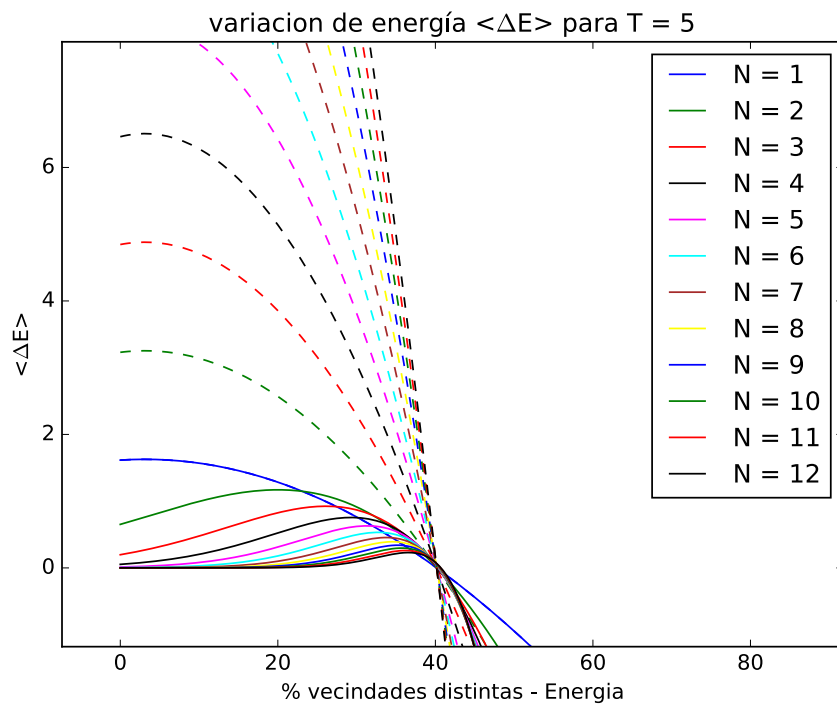


Figura 15.- Detalle de la Figura 14, para $M < 60\%$ y $\langle \Delta E \rangle$ positivo

Por otra parte, se ha calculado la desviación típica σ_N de la energía siguiendo la expresión (54)

$$\sigma_N = \sqrt{\sum_{i=0}^{4N} q_i (\Delta E_i - \langle \Delta E \rangle)^2} \quad (54)$$

Y cuyos resultados, para $N = [1, 2, 3, 6 \text{ y } 10]$ y $T = [0 \text{ y } 5]$ son los que se muestran en la Figura 16 y Figura 17. Podemos apreciar que los máximos, dado un N , se alcanzan para un mismo valor de M para ambas temperaturas y que todos los máximos se hallan en el entorno entre $M=125$ y $M=150$.

Sin embargo, para valores de M menores, los resultados cambian su naturaleza tanto en función de N como de T . Así, para $T=0$, se observa que a pesar de que la desviación máxima es mayor cuanto mayor es N , a medida que M disminuye, la desviación para N mayores disminuye más rápidamente, llegando a invertirse la tendencia, es decir, para $M < \sim 70$, a menor N mayor σ . Por otra parte, para $T=5$, la desviación σ se "aplana" para valores de M bajo y, para N bajos, la desviación σ nunca llega a 0.

Por último, en la Figura 18, Figura 19, Figura 20 y Figura 21, se muestran los resultados $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ para $N=[1, 2, 3, 6 \text{ y } 10]$, $L=10$ y $T=[0 \text{ y } 5]$. En ellas puede observarse cómo para valores $M > 100$, los resultados son similares, siguiendo la tenencia vista anteriormente en esta sección para $\langle \Delta E \rangle$. Tanto para $T=0$ y $T=5$, alrededor de $M \approx 80$ los resultados respecto de N convergen, es decir, en este entorno las diferencias respecto de N son mínimas. Sin embargo, para $T=0$, a medida que M disminuye, las curvas $(\langle \Delta E \rangle + \sigma)$ y $(\langle \Delta E \rangle - \sigma)$ tienden a converger a 0; y más rápidamente cuanto mayor es N , lo que explica el hecho de que no sea posible alcanzar valores de energía bajos (M bajos) para N alto a esta temperatura. Para $T=5$, las curvas $(\langle \Delta E \rangle + \sigma)$ y $(\langle \Delta E \rangle - \sigma)$ mostradas, sólo convergen a 0 para el caso $N=10$ y prácticamente convergen a 0 para el caso $N=6$ cuando $M \approx 0$. Para $N=[1, 2, \text{ y } 3]$, las curvas $(\langle \Delta E \rangle + \sigma)$ y $(\langle \Delta E \rangle - \sigma)$ se mantienen prácticamente equidistantes respecto de 0, llegando incluso a parecer que fuesen a divergir para valores M negativos en el caso $N=1$.

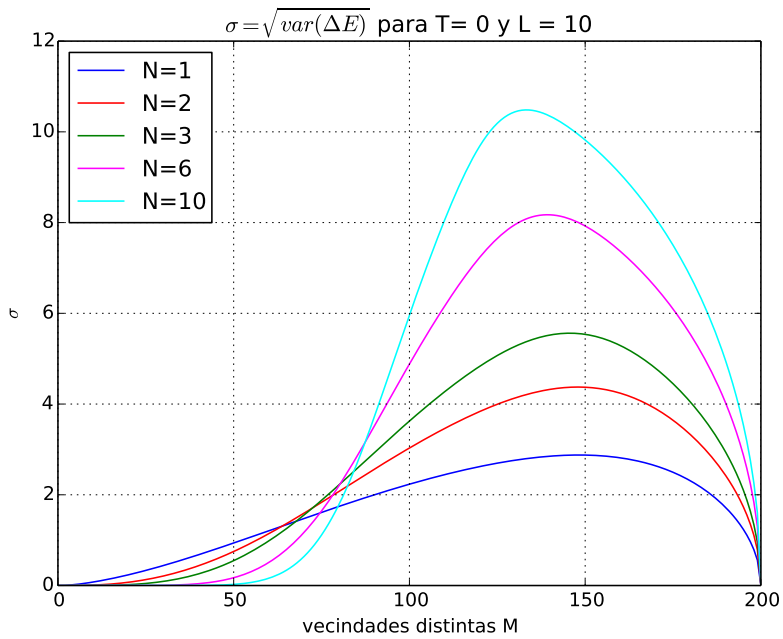


Figura 16.- desviación típica σ_N en función de M para $N=[1, 2, 3, 6 \text{ y } 10]$, $T=0$ y $L=10$

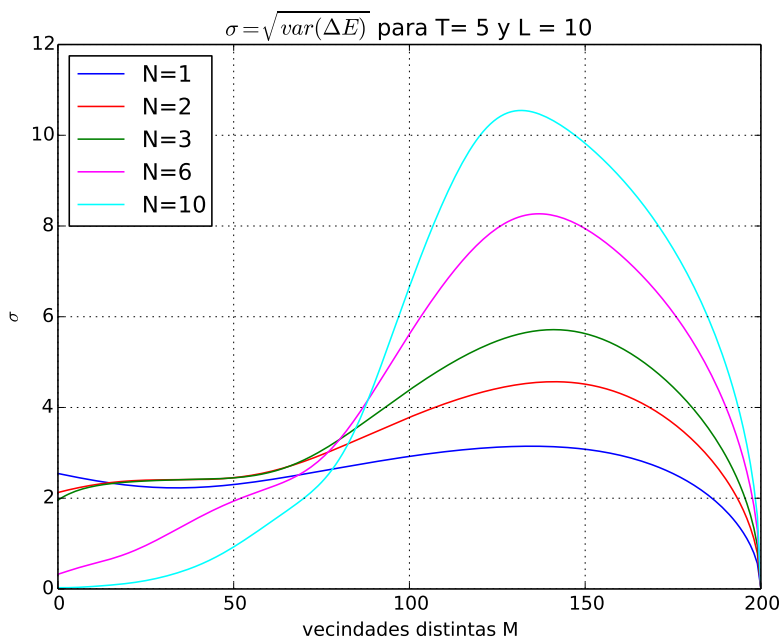


Figura 17.- desviación típica σ_N en función de M para $N=[1, 2, 3, 6 \text{ y } 10]$, $T=5$ y $L=10$

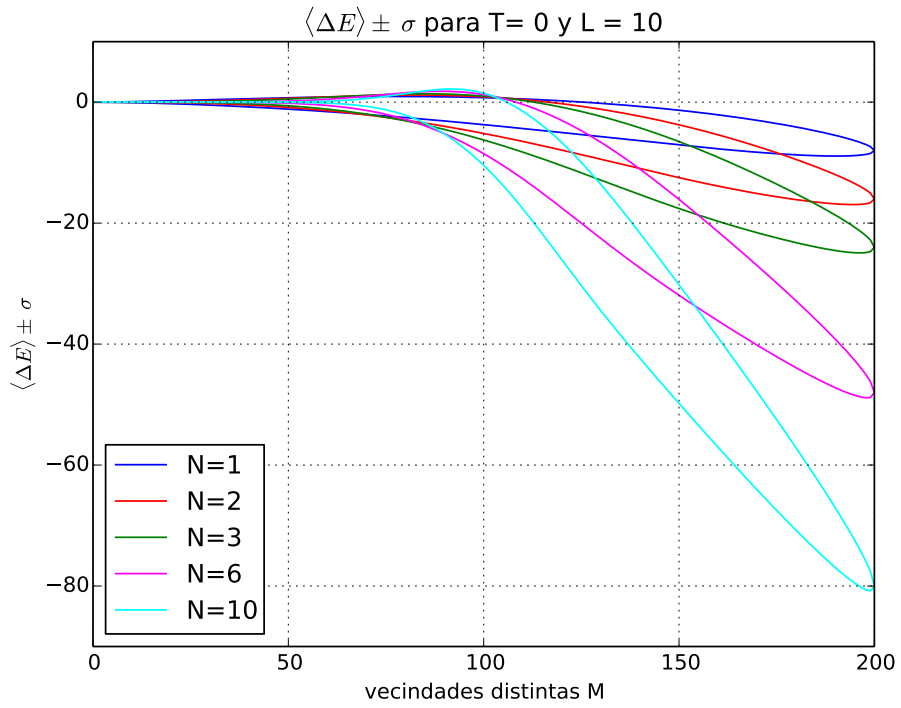


Figura 18.- $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ para $T=0$ y $L=10$

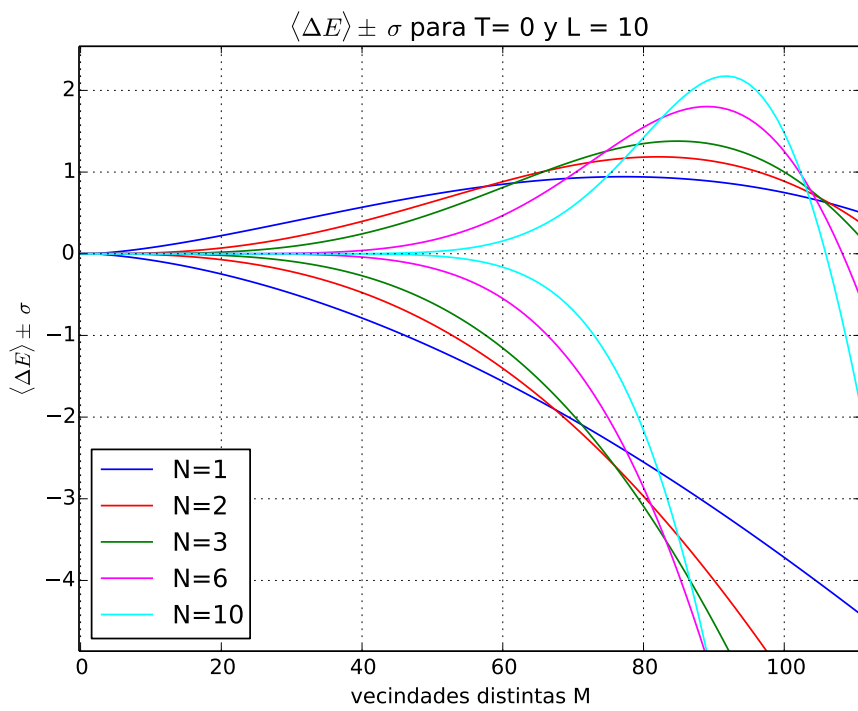


Figura 19.- Detalle de la Figura 18 para $M < 110$

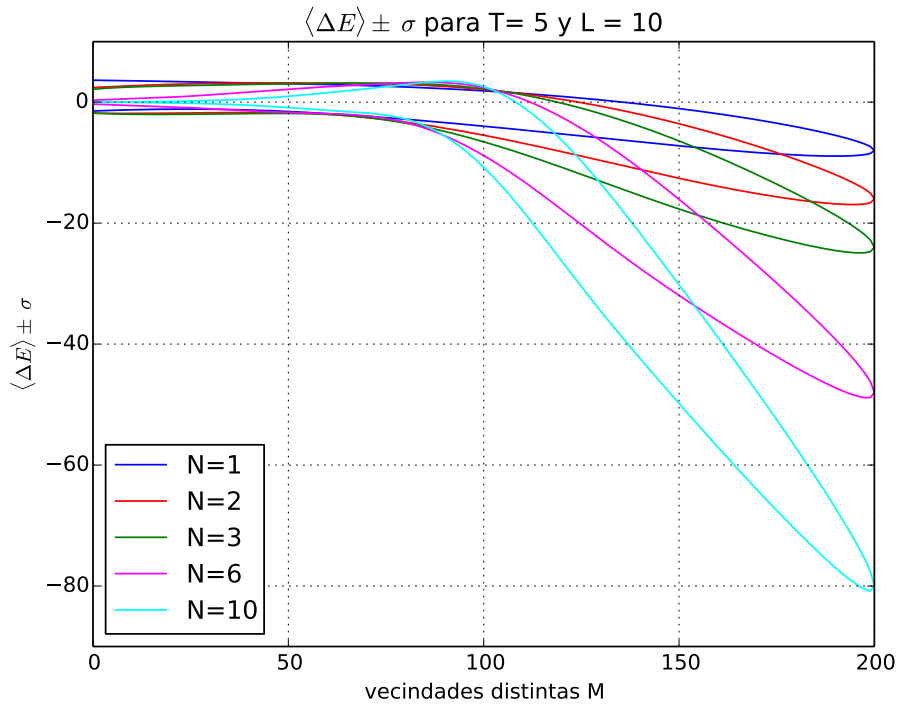


Figura 20.- $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ para $T=5$ y $L=10$

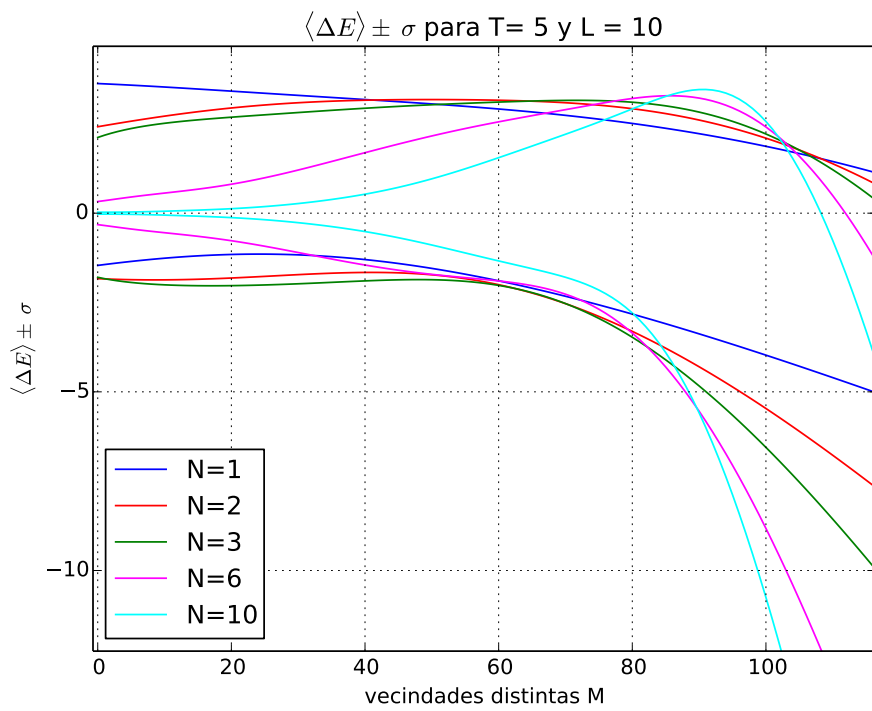


Figura 21.- Detalle de la Figura 20 para $M < 110$

ENERGIA MEDIA TEÓRICA ATENDIENDO A $\langle \Delta E \rangle$ Y A LA DENSIDAD DE ESTADOS

En esta sección se propone una estimación de cuál es la energía media de un sistema ya termalizado en función de: su tamaño L^2 , del número N de espines cuyo volteo conjunto se evalúa en cada iteración y de la temperatura T . La intención de este apartado, además de mostrar una propuesta original, consiste en seguir comprobando que es consistente el marco teórico desarrollado en este trabajo.

La idea consiste en que la energía del sistema oscilará alrededor de una energía E_0 , que es la energía en la cual $\langle \Delta E \rangle$ es cero. Además, atendiendo a las curvas mostradas en la Figura 12, Figura 13, Figura 14 y Figura 15, el corte de las curvas con el eje x se realiza con pendiente negativa, es decir

$$\left. \frac{\partial \langle \Delta E \rangle}{\partial E} \right|_{E_0} < 0 \quad (55)$$

Esto garantiza que el sistema es estable alrededor de este punto porque

- si $E < E_0$, entonces $\langle \Delta E \rangle$ es positivo, lo que indica que el sistema tiende hacia energías mayores;
- y si $E > E_0$, entonces $\langle \Delta E \rangle$ es negativo, lo que indica que el sistema tiende hacia energías menores.

En la Figura 22 se muestra la variación media de la Energía para $N=1$ y distintas temperaturas en el intervalo $T=[0,5]$ con tamaño $L^2 = 100$. Y en la Figura 23 se muestra en detalle la región donde las curvas cortan al eje x que se ha señalado como una línea gruesa en color rojo.

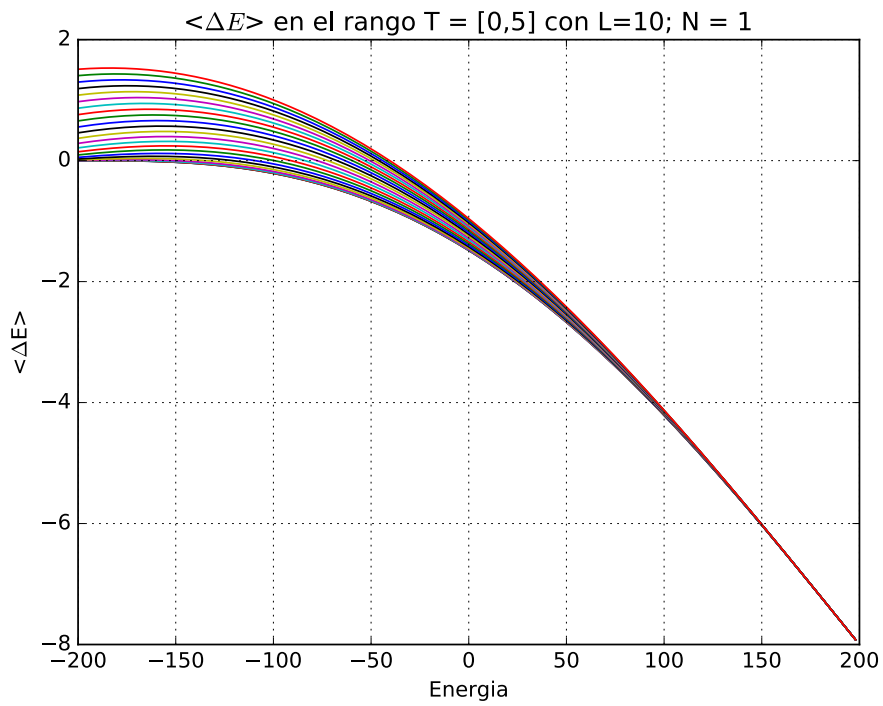


Figura 22.- Variación media de energía para $N=1$, $L=10$ y temperatura en el rango $T=[0,5]$.

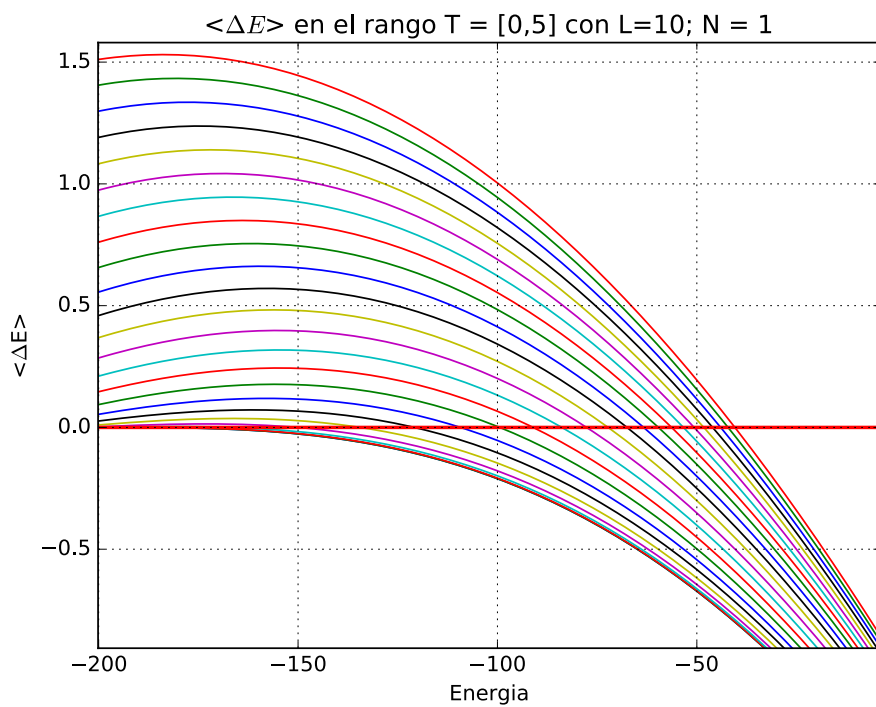


Figura 23.- Detalle de la Figura 22 con la línea $\langle \Delta E \rangle = 0$ marcada en color rojo.

Con ello, se ha calculado E_0 para cada temperatura. El resultado se muestra en la Figura 24. Se trata de una curva monótona creciente que estima la energía media alrededor de la cual va a oscilar el sistema para las distintas temperaturas. Cuanto mayor es la temperatura T , mayor es la energía media del sistema.

Para ver el efecto introducido por el volteo de N espines, mostramos los mismos resultados para $N=6$, en las Figura 25, Figura 26 y Figura 27.

En la sección "Comparación entre la energía media teórica y la energía media simulada", de este mismo capítulo, se realiza una comparación de la energía media en función de la temperatura expuesta en esta sección con las energías medias obtenidas a partir del algoritmo Metropolis-Hastings.

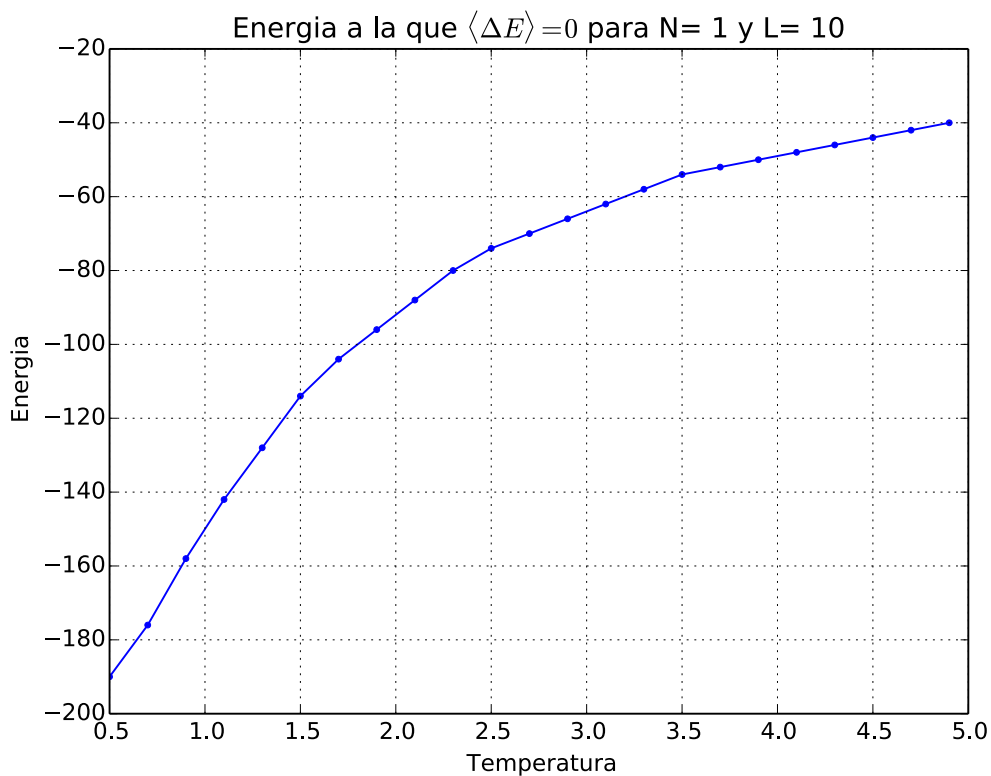


Figura 24.- Estimación de la energía media del sistema termalizado en función de la temperatura, para $N=1$ y tamaño $L=10$

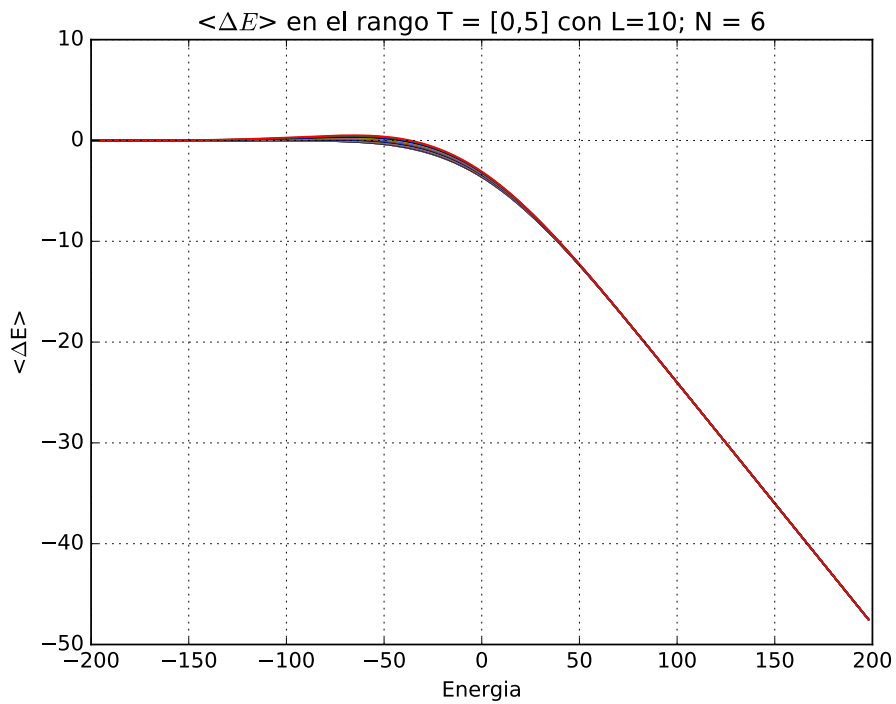


Figura 25.- Variación media de energía para $N=6$, $L=10$ y temperatura en el rango $T=[0,5]$.

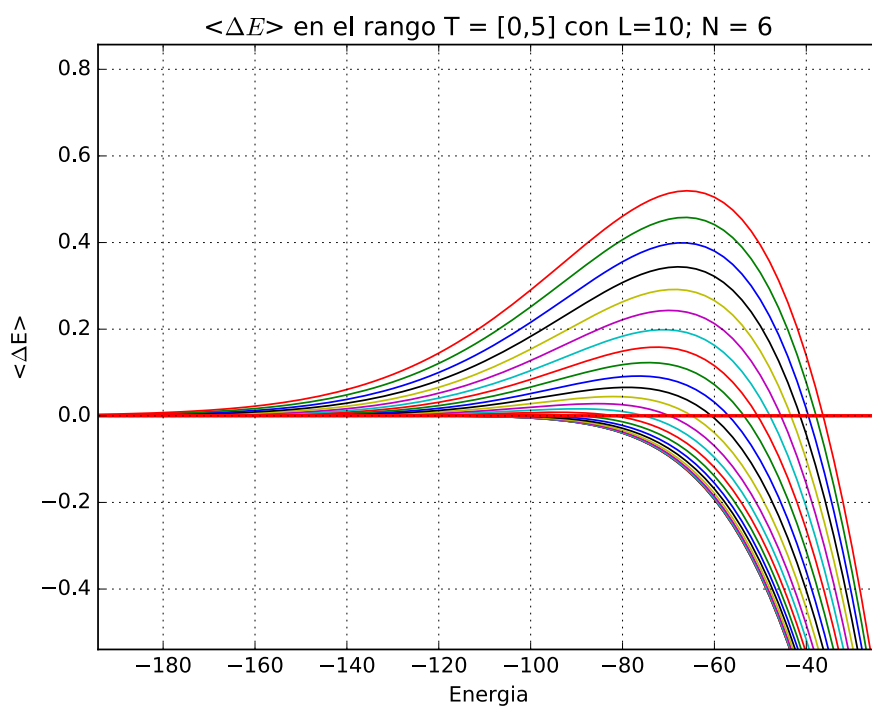


Figura 26.- Detalle de la Figura 25 con la línea $\langle \Delta E \rangle = 0$ marcada en color rojo.

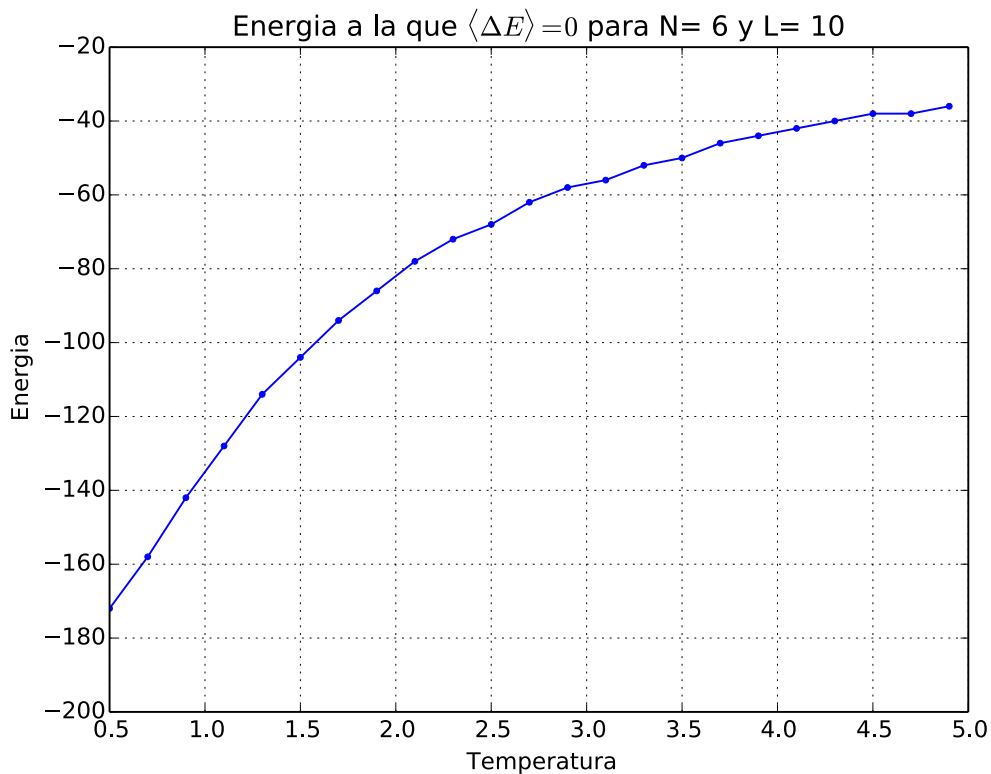


Figura 27.- Estimación de la energía media del sistema termalizado en función de la temperatura para N=6 y tamaño L=10.

Por otra parte, con la intención de seguir comprobando que el marco teórico desarrollado y que lo expuesto en este apartado es consistente, se ha querido calcular la Energía media del sistema a partir del concepto "Densidad de estados", ya que si se tuviese el número de estados para una energía dada, se podría calcular la función de partición Z y el sistema estaría "resuelto", en tanto en cuanto la mayoría de las magnitudes termodinámicas pueden calcularse a partir de Z . Para sistemas pequeños como el que se considera en este trabajo, calcular una estimación del número de estados es posible.

Así, si denominamos "densidad de estados", $g(E)$, al número total de posibles estados para un nivel de energía E del sistema, entonces [LANDAU04]:

$$Z = \sum_{\{\text{configuraciones}\}} e^{\frac{-E}{kT}} = \sum_E g(E) e^{\frac{-E}{kT}} \quad (56)$$

Y por tanto,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_E E g(E) e^{-\frac{E}{kT}}}{\sum_E g(E) e^{-\frac{E}{kT}}} \quad (57)$$

Por otra parte, $g(E)$ puede calcularse como el número de combinaciones en que se puede tener el número M de vecindades distintas, sobre el total de vecindades del sistema, $2L^2$, teniendo en cuenta que M es función de E (ver ecuación (34)):

$$M(E) = \frac{E}{2} + L^2 \quad (58)$$

Con lo que

$$g(E) = \binom{\#vecindades\ totales}{M(E)} = \binom{2L^2}{E/2 + L^2} \quad (59)$$

Llegados a aquí se hace necesario comentar que no se ha demostrado si existe una configuración posible para cada una de las combinaciones calculadas según (59), pues existen limitaciones en cómo los espines se ubican para corresponder cada una de las combinaciones que calculan el valor $g(E)$. Así, es posible que $g(E)$ esté sobrestimado según (59).

En la Figura 28 se muestra el número de estados en función de la energía del sistema, para tamaño del sistema $L=10$; y en la Figura 29 se muestra la estimación de $\langle E \rangle$ siguiendo la expresión mostrada en (57).

Por último, en la Figura 30 se expone una comparativa entre este último método, cálculo de $\langle E \rangle$ a partir de la densidad de estados, y el método visto anteriormente, consistente en calcular la energía E_0 en la que $\langle \Delta E \rangle = 0$, para el caso $N=1$. Como se puede observar, **ambos métodos coinciden perfectamente**, lo que permite dar mayor crédito al marco teórico desarrollado en este trabajo.

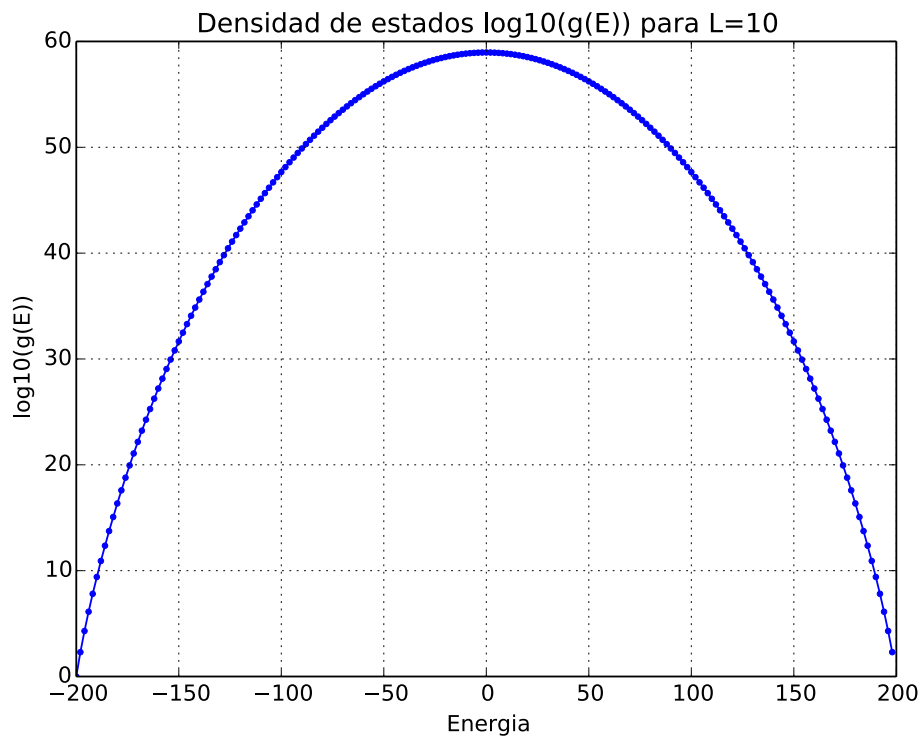


Figura 28.- Densidad de Estados $\log_{10}(g(E))$ para $L=10$

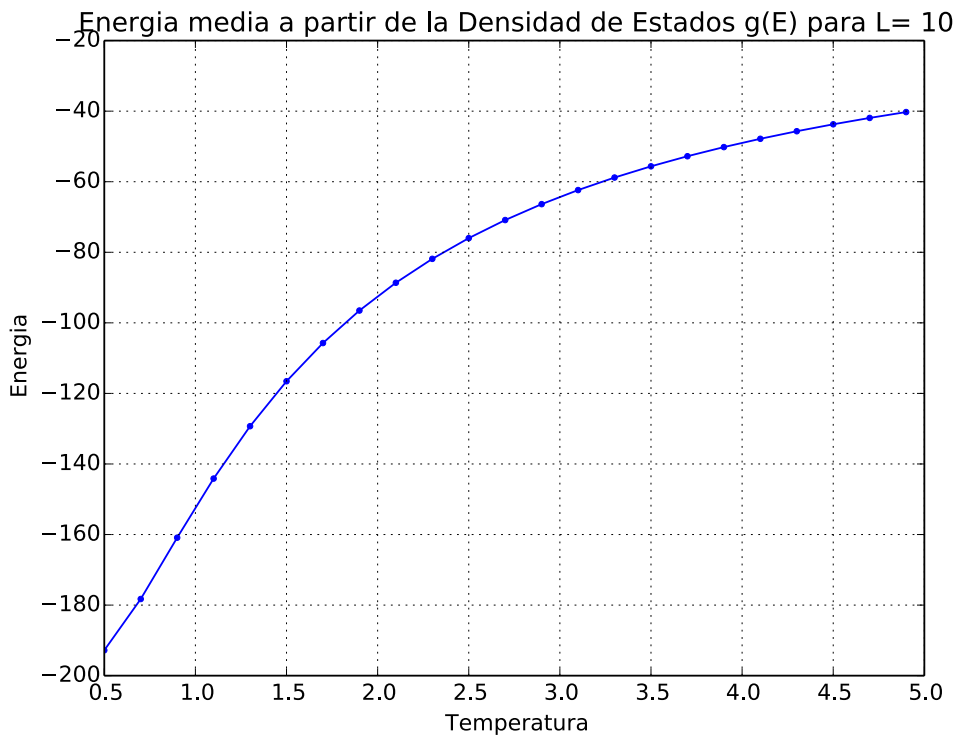


Figura 29.- Energía media calculado a partir de la Densidad de Estados.

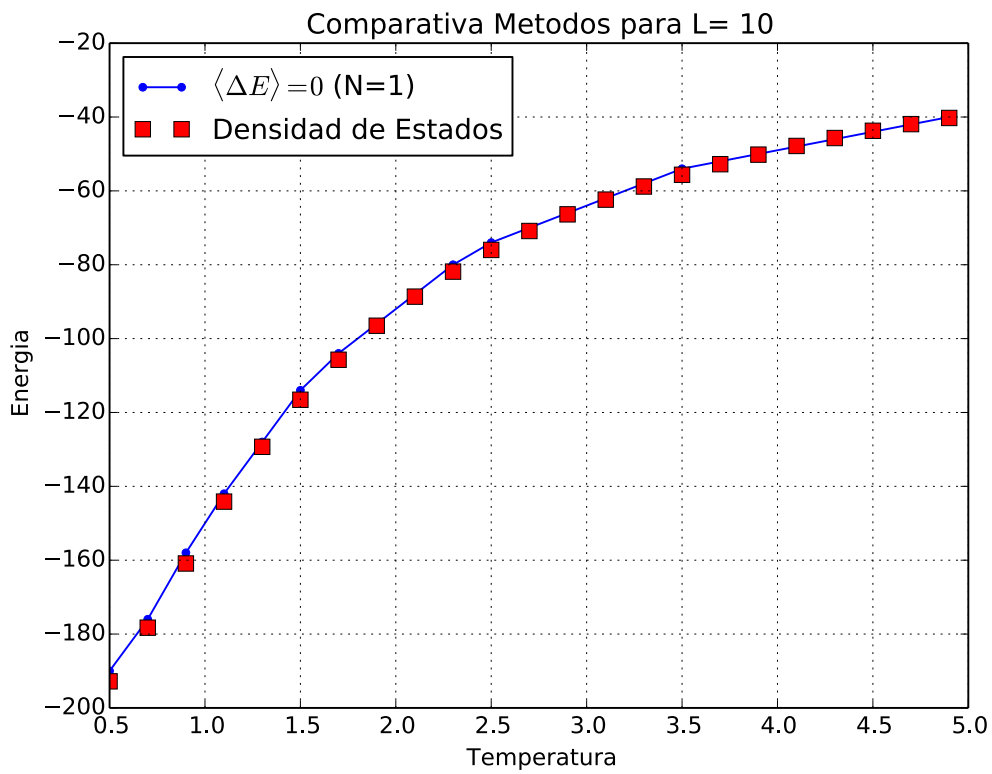


Figura 30.- Comparativa cálculo de Energía media a partir de los métodos vistos en esta sección: en azul, igualando $\langle \Delta E \rangle = 0$; en rojo, a partir de la Densidad de Estados $g(E)$.

MAGNITUDES TERMODINÁMICAS CON DISTRIBUCIÓN INICIAL "TABLERO DE DAMAS"

En esta sección se muestran los resultados de la simulación del algoritmo Metropolis-Hastings para distintos valores de N , T y tamaño L del sistema. Los resultados se muestran a través de las magnitudes termodinámicas siguientes: la energía media, la magnetización media, el calor específico y la susceptibilidad magnética.

El experimento consiste en lanzar para una temperatura T , N y L dados 10 simulaciones. Cada simulación consiste en 600 Monte Carlo Steps ($1 \text{ MCS} = L^2 \text{ iteraciones}$) y las propiedades termodinámicas se calculan cuando el sistema se considera termalizado, esto es, para los últimos 60 MCS de la simulación (10% final).

Las simulaciones para cada N y L comienzan a temperatura $T = 4.9$ partiendo de una distribución inicial "Tablero de Damas" que nos ofrece máxima energía inicial ya que, en esta configuración, todas las vecindades del sistema son distintas (para L par; para L impar no se cumple). Una vez ejecutado el algoritmo durante 600 MCS, se almacena el 10% final de la simulación (60 MCS) y, con la última configuración de espines obtenida, se realiza una nueva simulación para los mismos valores de N y L pero a temperatura $T=4.7$. Así, se repite el procedimiento descendiendo en Temperatura, $\Delta T = -0.2$, partiendo de la distribución de espines final obtenida en la temperatura T inmediatamente superior. Este procedimiento se realiza 10 veces para cada combinación de N y L . De esta forma, se han obtenido 10 simulaciones para cada combinación de N , L y T , lo que permite calcular media y desviación estándar de las magnitudes termodinámicas.

Las simulaciones se han hecho para $N=[1, 2, 3, 6 \text{ y } 10]$, para tamaños del sistema $L^2 = [10 \times 10, 20 \times 20 \text{ y } 40 \times 40]$.

Así, las figuras que se muestran en esta sección consisten en los valores medios obtenidos a partir del 10% final de cada una de las 10 simulaciones anteriormente mencionadas, para cada combinación de los distintos parámetros que definen la simulación. Además de la media, en las figuras se representa la desviación estándar con líneas verticales.

Lo primero que cabe destacar es que, para todo L , los resultados para $N=[1, 2 \text{ y } 3]$ entran dentro de lo esperado, mostrando unas curvas que demuestran un excelente comportamiento, ligeramente mejores cuanto mayor es L , disminuyendo la desviación respecto a la media.

Sin embargo, para $N=[6 \text{ y } 10]$, los resultados a bajas temperaturas son malos, tanto peor, cuanto mayor es L . Esto se debe a que el sistema es incapaz de converger a bajas energías cuando N es alto,

como se reflejó en la Figura 18 y Figura 19, que explican que la variación de energía, para $N=6$ y $N=10$, es prácticamente nula cuando la temperatura es baja, debido fundamentalmente a que la probabilidad de aceptar nuevos estados, a medida que desciende el número de vecindades distintas M , se desvanece a mayor velocidad cuanto mayor es N , como se puede observar en la Figura 8.

Es por esto que la magnetización media para los casos $N=[6 \text{ y } 10]$ no llega a saturarse a valor unidad, ni siquiera a temperatura $T=0.5$. Además, estos resultados se alejan aún más del valor unidad cuanto mayor es L . Estos resultados parecen probar que al descender por debajo de la temperatura crítica T_C , en el sistema se forman dominios, grupos de espines que apuntan en la misma dirección, que toman mayor tamaño cuanto mayor es L . A mayor tamaño, más difícil es romper estos dominios, y más difícil cuanto mayor es N , ya que disminuye la probabilidad de aceptar nuevos estados.

Más concretamente, como se ha demostrado en secciones anteriores, si el valor N es alto, $N=10$ por ejemplo, es improbable que el modelo acepte cambios de estado por debajo de valores en torno al 30% de las M vecindades distintas en toda la red. Es por ello que el mínimo de energía alcanzado en las simulaciones a baja temperatura es más elevado cuanto mayor es el valor de N . Esto demuestra que valores altos de N no interesan si se quiere termalizar el sistema a baja temperatura. En la sección "Termalización" puede entenderse mejor este fenómeno de forma cualitativa, observando cómo es la evolución de la energía en las primeras 1000 iteraciones para un sistema de tamaño $L^2 = 10 \times 10$.

Así, podemos decir que, para N alto, se produce una pobre convergencia y que pueda deberse al hecho de caer en mínimos de energía locales. Esto se expuso en el capítulo "Antecedentes", en la sección "Problemática del algoritmo Metropolis y Otros algoritmos", donde se explica que es probable que el sistema puede quedar estancado en un mínimo local si se parte de un estado asociado a una temperatura superior a la T_C , fallando por tanto en la convergencia [MARTINO12].

Por otra parte, cabe destacar también que la desviación estándar de los resultados es muy baja para temperaturas altas, independientemente de la magnitud física, de N , o del tamaño L^2 del sistema. Una forma posible de explicar este fenómeno recae en el concepto explicado en la sección "Energía media teórica atendiendo a $\langle \Delta E \rangle$ y a la Densidad de Estados" donde se expuso el concepto de derivada de la variación media de la Energía respecto a la Energía, ecuación (55). Viendo las figuras de esa sección, Figura 23 y Figura 26 principalmente, es claro que a mayor temperatura, la pendiente de las curvas en el momento en que cortan al eje x es mayor en magnitud (más negativa) con lo que la oscilación del sistema va a

estar más definida alrededor de la energía E_0 y variando más en magnitud, con lo que es más probable alcanzar configuraciones más independientes entre sí estadísticamente. Este último punto se demuestra en la sección "Correlación", donde se prueba que se alcanzan configuraciones que son más independientes entre sí cuanto mayor es la temperatura T del sistema, con lo que la incertidumbre respecto a la estimación disminuye con T .

Por último, atendiendo a las figuras relacionadas con el calor específico y la susceptibilidad magnética es claro que la estimación empeora cuanto mayor es N . Las simulaciones para $N=[1 \text{ y } 2]$ parecen ofrecer buenos resultados, al exhibir un pico claro a la temperatura crítica $T_C \sim 2.27$ y con una dispersión alta de los resultados como cabía esperar.

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$

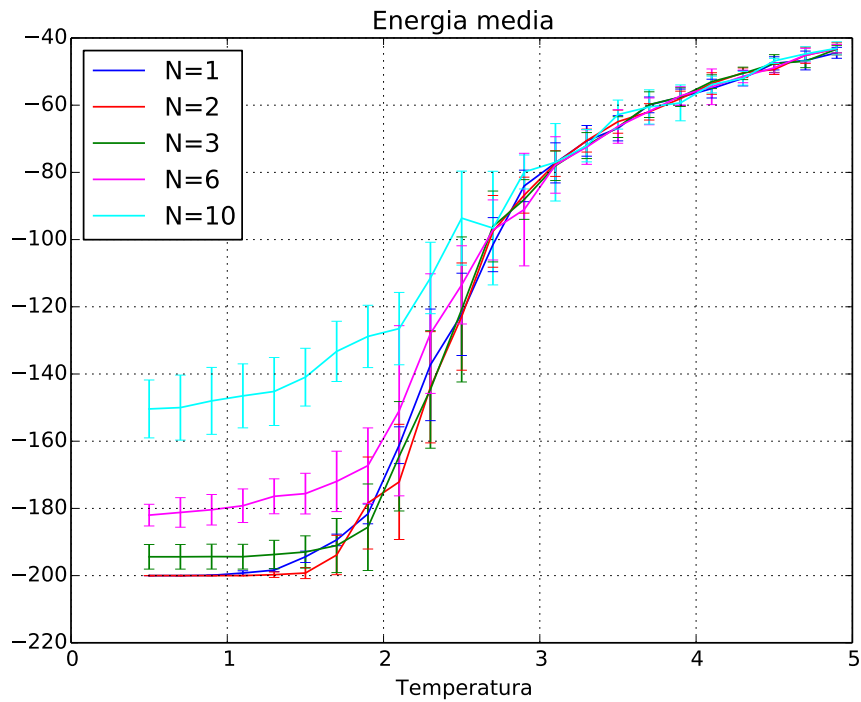


Figura 31.- Energía media para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución Inicial "Tablero de Damas"

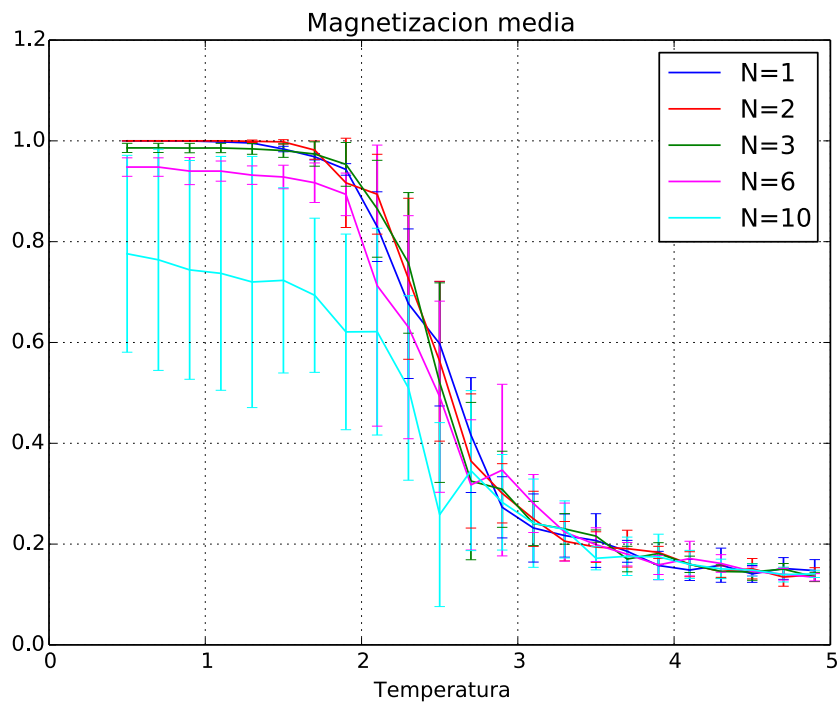


Figura 32.- Magnetización media para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución "Tablero de damas"

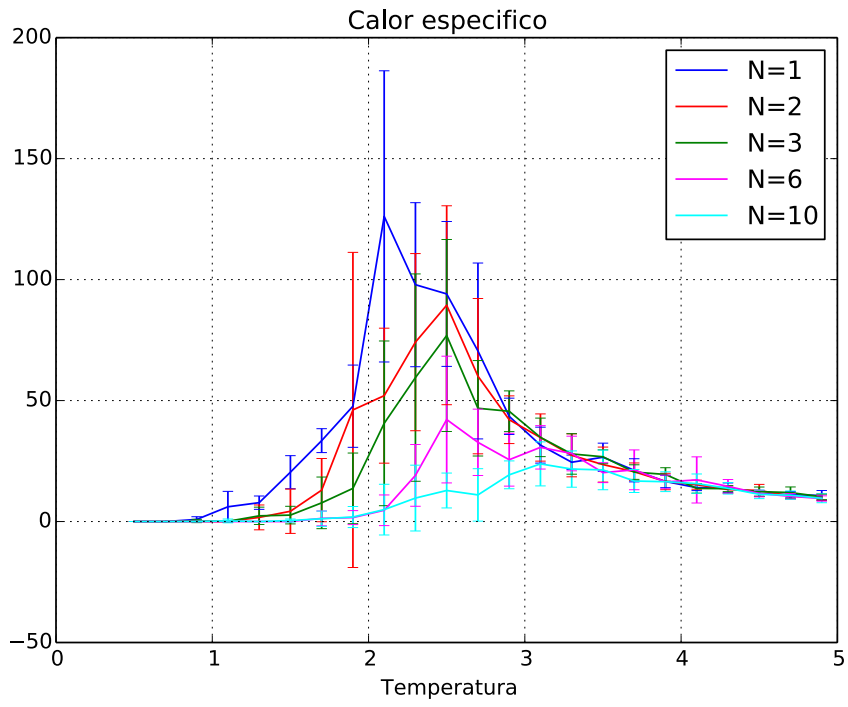


Figura 33.- Calor específico para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Tablero de Damas

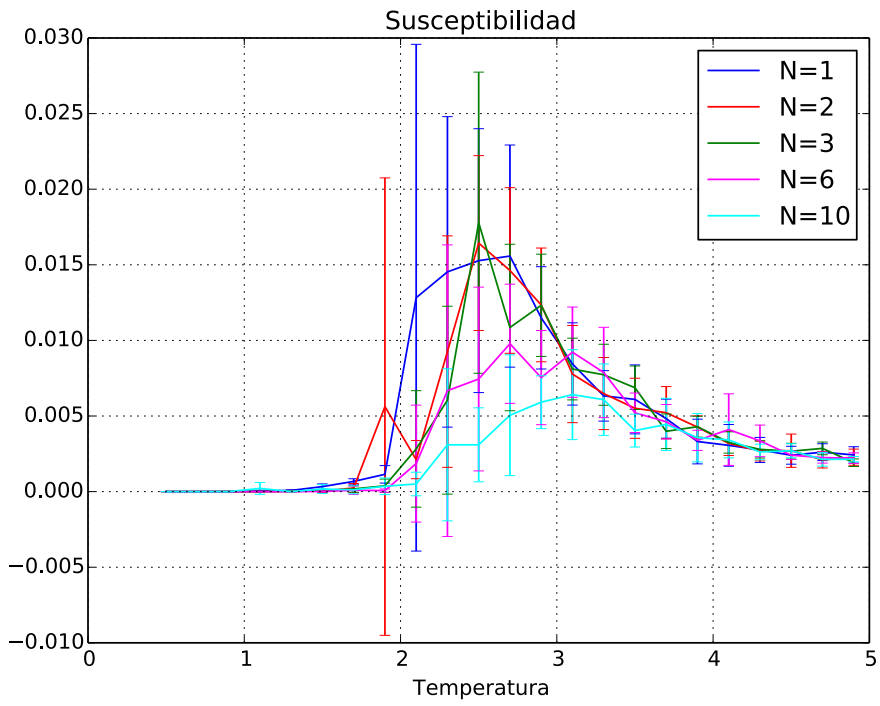


Figura 34.- Susceptibilidad magnética para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Tablero de Damas

Tamaño $L^2 = 20 \times 20$

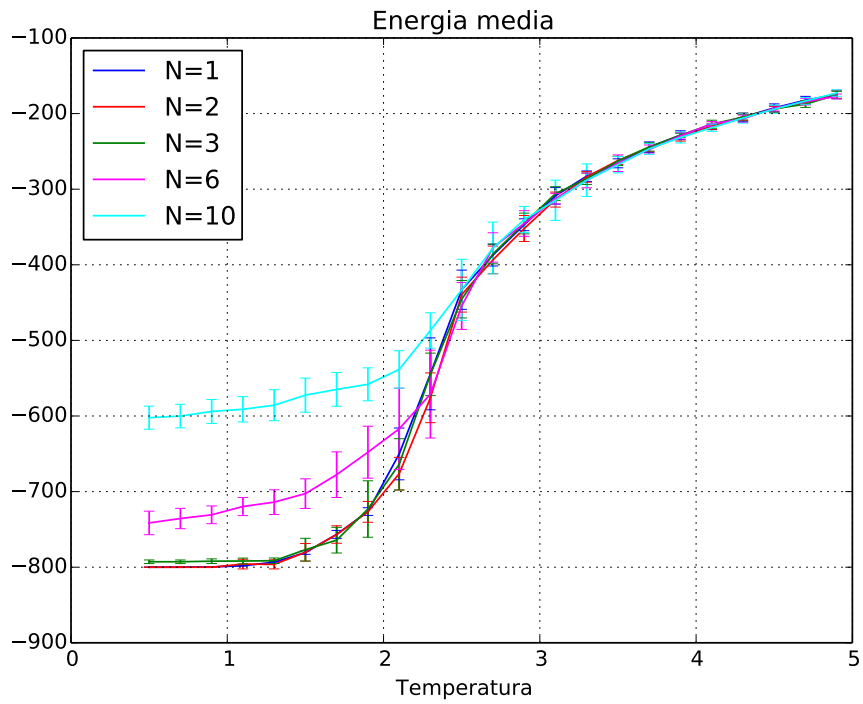


Figura 35.- Energía media para tamaño $L^2 = 20 \times 20$. Tablero de Damas

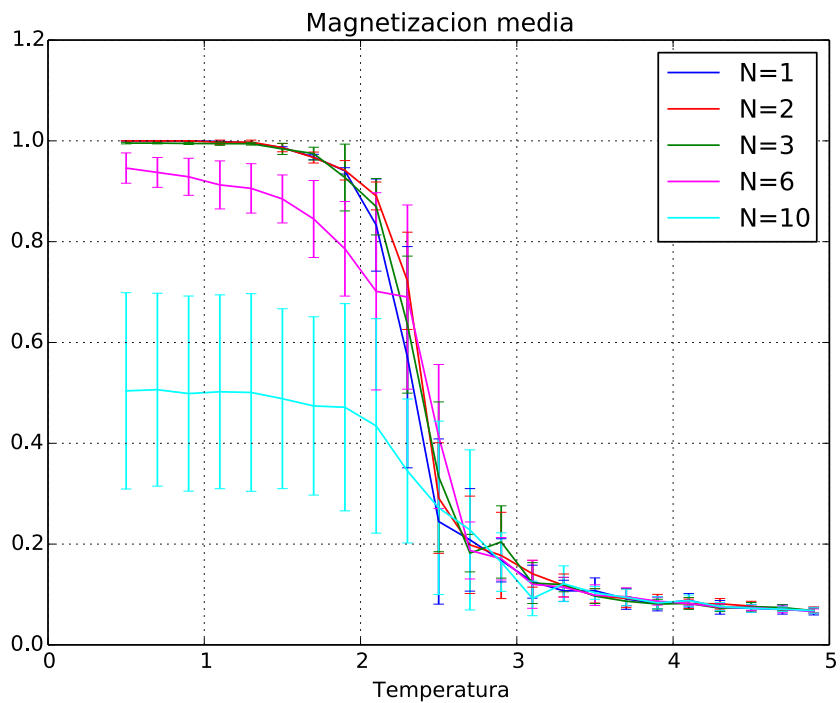


Figura 36.- Magnetización media para tamaño $L^2 = 20 \times 20$. Tablero de Damas.

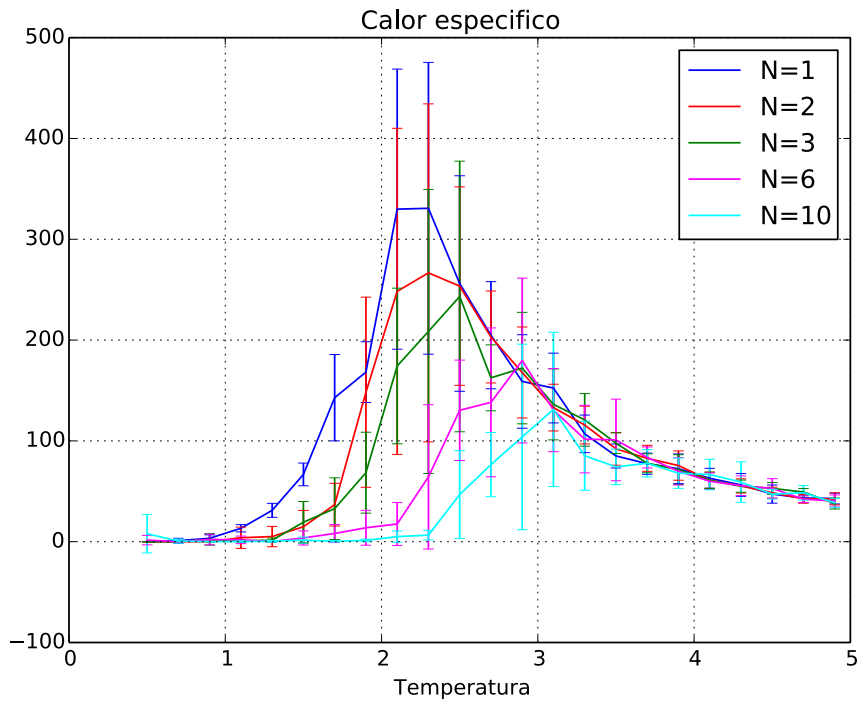


Figura 37.- Calor específico para tamaño $L^2 = 20 \times 20$. Tablero de Damas.

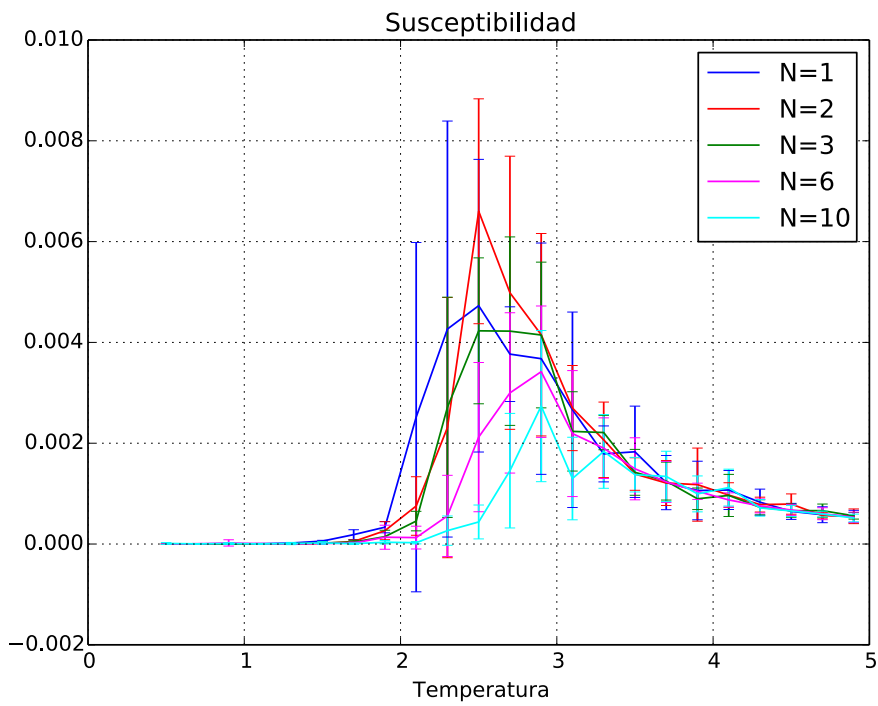


Figura 38.- Susceptibilidad magnética para tamaño $L^2 = 20 \times 20$. Tablero de Damas.

Tamaño $L^2 = 40 \times 40$

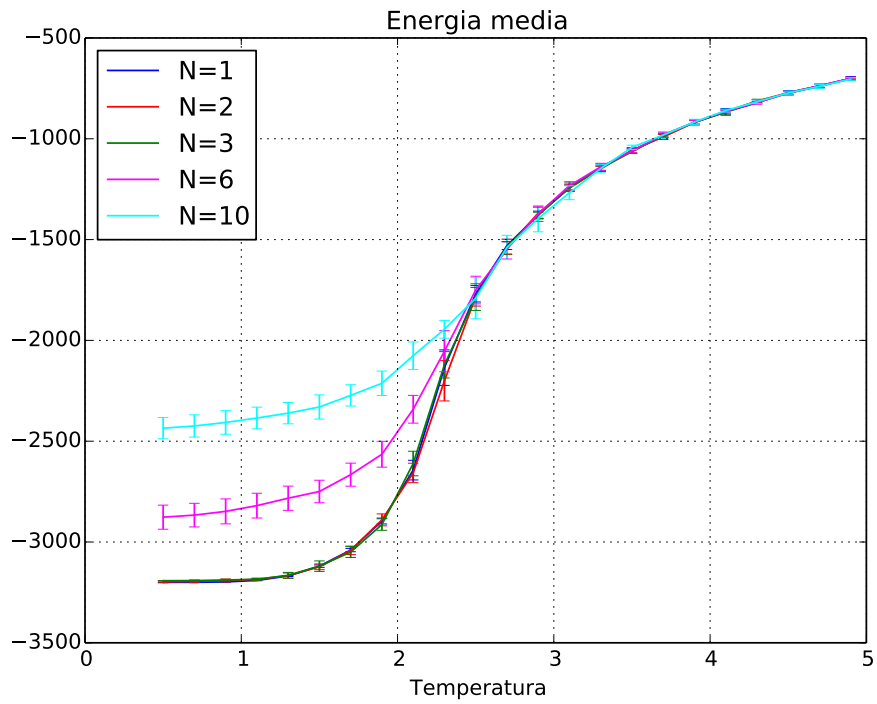


Figura 39.- Energía media para tamaño $L^2 = 40 \times 40$. Tablero de Damas.

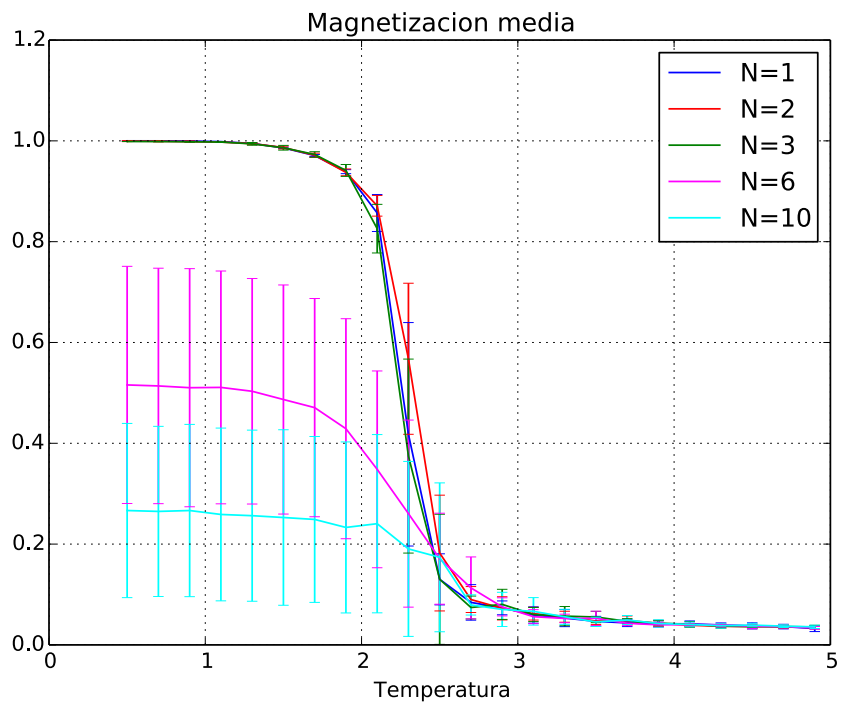


Figura 40.- Magnetización media para tamaño $L^2 = 40 \times 40$. Tablero de Damas.

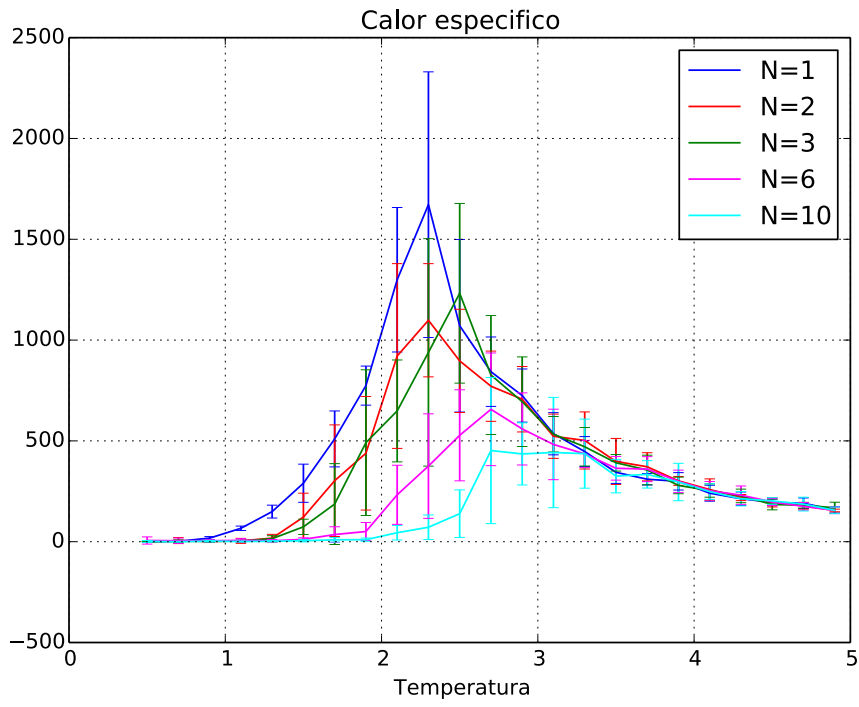


Figura 41.- Calor específico para tamaño $L^2 = 40 \times 40$. Tablero de Damas.

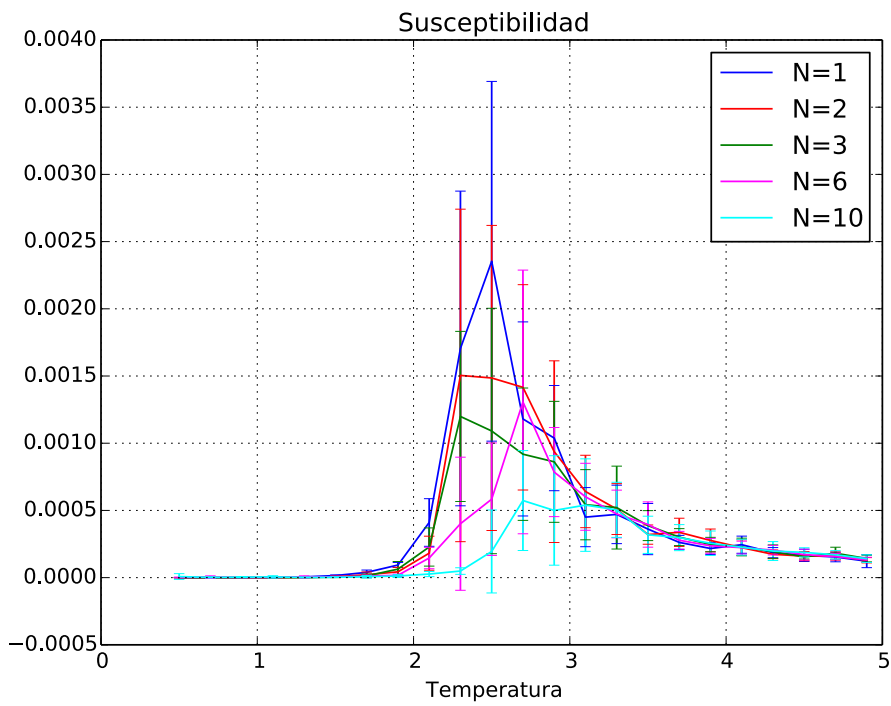


Figura 42.- Susceptibilidad magnética para tamaño $L^2 = 40 \times 40$. Tablero de Damas.

MAGNITUDES TERMODINÁMICAS CON DISTRIBUCIÓN INICIAL "HOMOGÉNEA"

En esta sección se muestran los resultados de la simulación del algoritmo Metropolis-Hastings para distintos valores de N , T y L del sistema, partiendo de una distribución inicial "Homogénea" (todos los espines de la red alineados) que nos ofrece mínima energía inicial ya que, en esta configuración, todas las vecindades del sistema son iguales ($M=0$). Como en la sección anterior, los resultados se muestran a través de las magnitudes termodinámicas siguientes: la energía media, la magnetización media, el calor específico y la susceptibilidad magnética.

Como en la sección anterior, el experimento consiste en lanzar, para una temperatura T y N dados, 10 simulaciones, pero en este caso, siempre, para cualquier temperatura T , se parte de la citada configuración "homogénea" (todos los espines de la red alineados). Cada simulación consiste en 600 Monte Carlo Steps (1 MCS = L^2 iteraciones) y las propiedades termodinámicas se calculan cuando el sistema se considera termalizado, esto es, para los últimos 60 MCS de la simulación (10% final).

Las simulaciones se han ejecutado para $N=[1, 2, 3, 6$ y $10]$ y para tamaño del sistema $L^2 = [10 \times 10]$ y se presentan en las figuras 43 a 46. En este caso, comparando con los resultados obtenidos en la sección anterior, es claro que a temperaturas bajas todas las simulaciones muestran el comportamiento esperado, con desviación estándar nula. Sin embargo, cuanto mayor es N , mayor es la rigidez para salir del mínimo de energía y los resultados obtenidos para $N=[6$ y $10]$ son catastróficos para todas las magnitudes, pues muestran una rigidez que sólo les permite salir del mínimo de energía a temperatura $T > 3.3$ para el caso $N=6$; y a temperatura $T > 4.5$ para el caso $N=10$.

Esta rigidez también se aprecia para $N=[2$ y $3]$ si lo comparamos con el caso $N = 1$, pero los resultados son aceptables. Es obvio que, si el sistema se encuentra en el estado de mínima energía, cualquier volteo va a aumentar la energía del sistema. Aumentar la energía del sistema siempre será más probable cuanto menor sea el incremento ΔE , debido al factor $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$. Dado que el incremento de energía será proporcional a N , cuanto menor sea N más probable será salir del mínimo. Esto es coherente con la probabilidad de aceptar un nuevo estado mostrado en la Figura 8, Figura 9, Figura 10 y Figura 11.

A alta temperatura para $N=[1, 2$ y $3]$ la desviación de los resultados sigue siendo baja a pesar de partir de una distribución con energía mínima. También, como era de esperar, la desviación aumenta en el entorno de la temperatura crítica $T_C \approx 2.27$.

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$

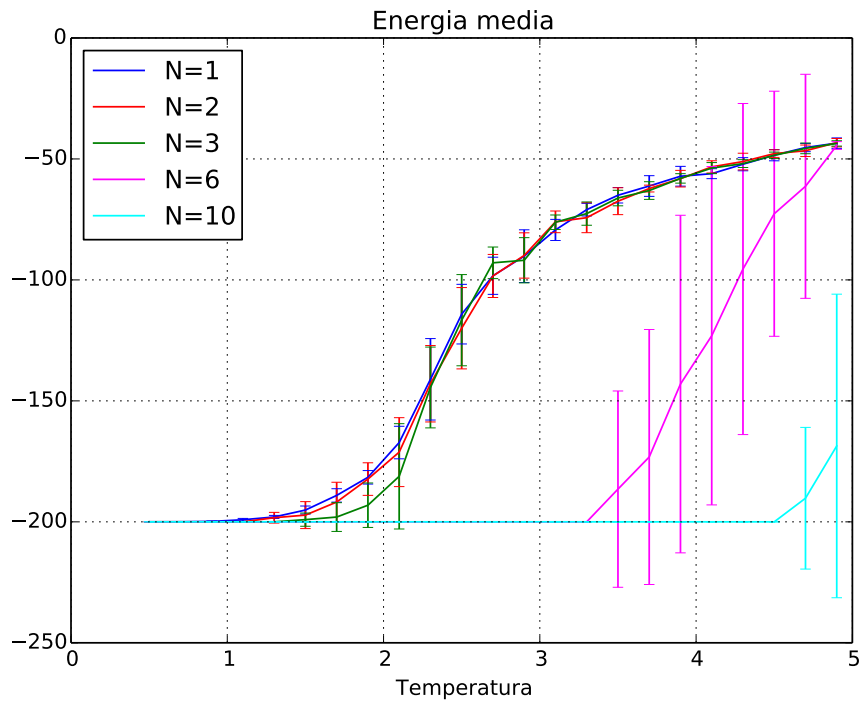


Figura 43.- Energía media para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución inicial "homogénea"

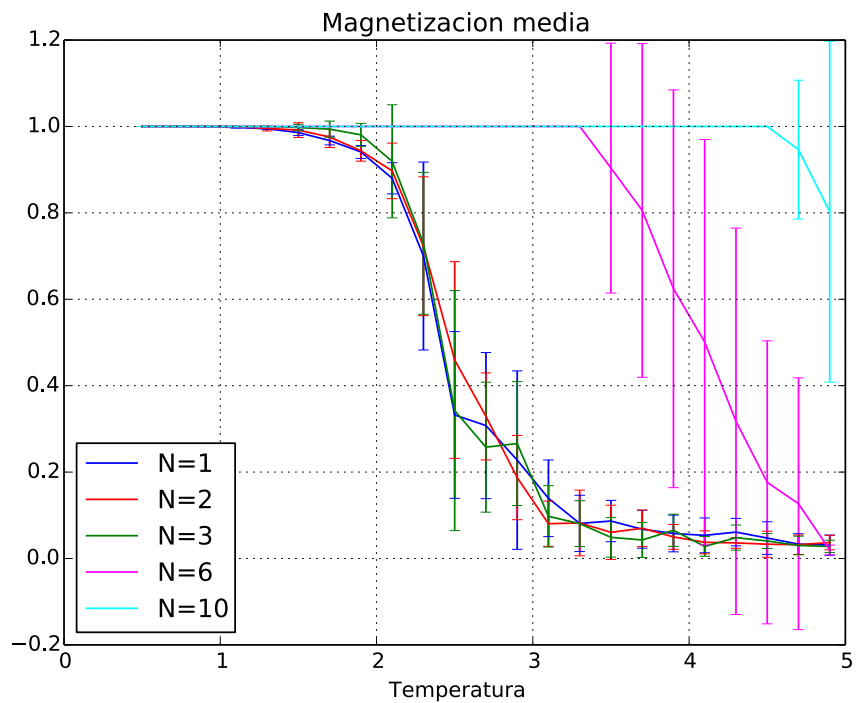


Figura 44.- Magnetización media para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución inicial "homogénea"

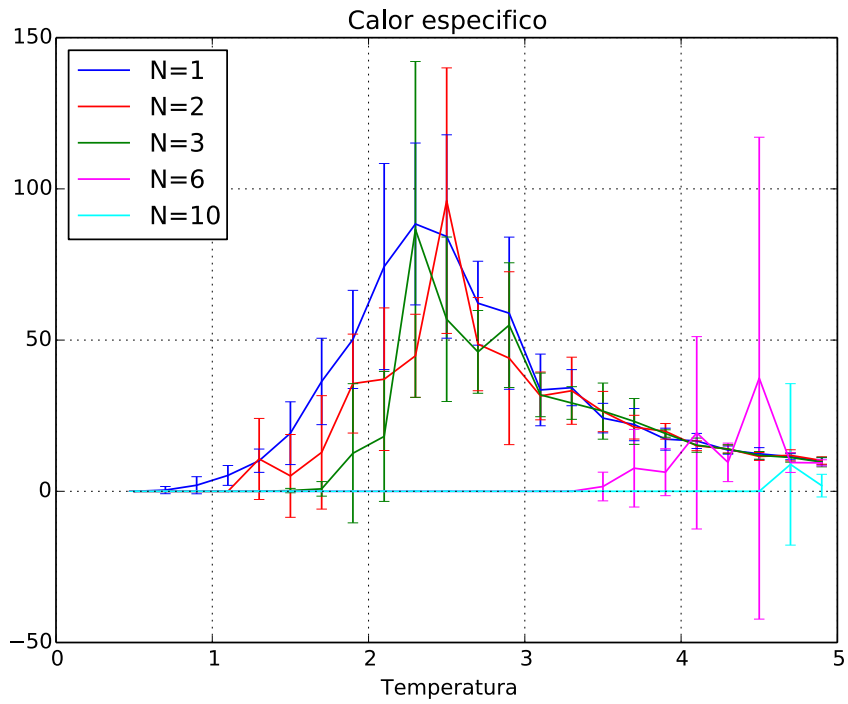


Figura 45.- Calor específico para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución inicial "homogénea"

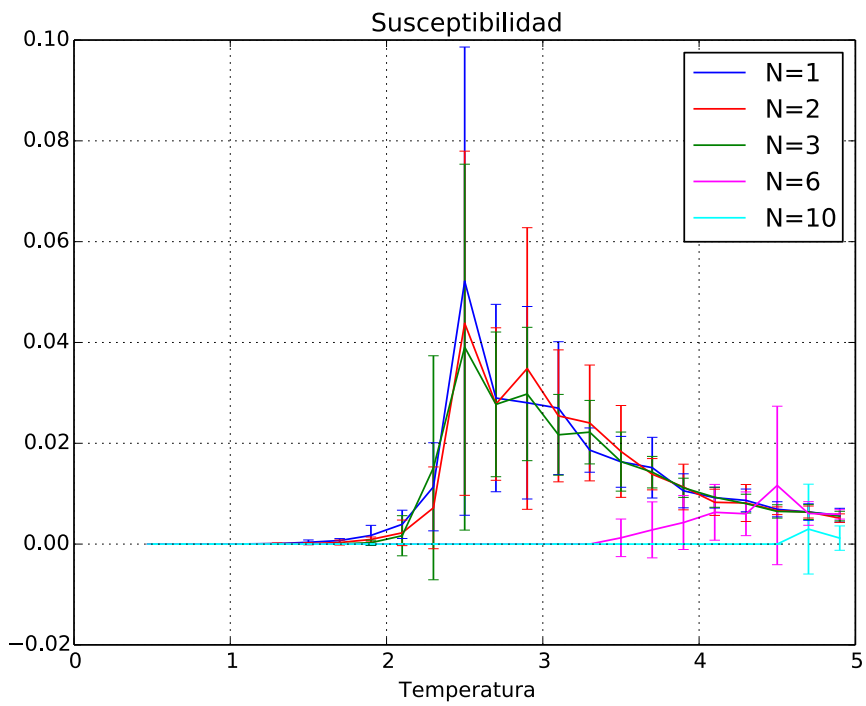


Figura 46.- Susceptibilidad magnética para tamaño $L^2 = 10 \times 10$. Distribución inicial "homogénea"

COMPARACIÓN ENTRE LA ENERGÍA MEDIA TEÓRICA Y LA ENERGÍA MEDIA SIMULADA

En esta sección se va a realizar una comparativa entre la energía media calculada en las simulaciones con distribución inicial "tablero de damas" (sección "Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"") y la energía media estimada de forma teórica siguiendo lo expuesto en la sección "Energía media teórica atendiendo a $\langle \Delta E \rangle$ y a la Densidad de Estados", concretamente, con el método en el que se iguala $\langle \Delta E \rangle = 0$.

En Figura 47, Figura 48 y Figura 49 se muestra la comparativa para tamaños $L^2 = [10 \times 10, 20 \times 20 \text{ y } 40 \times 40]$ respectivamente. Cada color se refiere a un valor de N , definidos en la leyenda. El diagrama de barras se refiere a la energía media calculada en la simulación; las líneas con círculos abiertos se refieren a la estimación teórica.

En primer lugar, notar cómo, para $L^2 = 40 \times 40$, la diferencia entre todos los resultados es menor que para $L^2 = 10 \times 10$. Esto se debe a que N no se ha escalado con el tamaño del sistema, lo que indica que el impacto que tiene N se corresponde con su relación en magnitud respecto al tamaño L del sistema, es decir, $N/40^2$ tiene un menor impacto que $N/20^2$ y éste, a su vez, un menor impacto que $N/10^2$.

Por otra parte, se aprecia una gran diferencia entre lo estimado teóricamente y los resultados de las simulaciones para el intervalo de temperaturas entre $T=1$ y $T=2.5$; y para bajas temperaturas, en general, cuanto mayor es N .

Sin embargo, la estimación es buena para temperaturas elevadas, pareciendo que existe un límite al que tienden la estimación y los resultados simulados a medida que aumenta la temperatura T .

No obstante, llegados a este punto, hay que hacer referencia a la Figura 30 en la que se compara las energías media estimadas a partir del método en que se iguala $\langle \Delta E \rangle = 0$ (método expuesto en esta sección) y a partir de la Densidad de Estados $g(E)$. En ella los resultados son exactamente iguales, por lo que se hace necesario un análisis más profundo para entender por qué en las simulaciones se obtiene una energía media $\langle E \rangle$ menor.

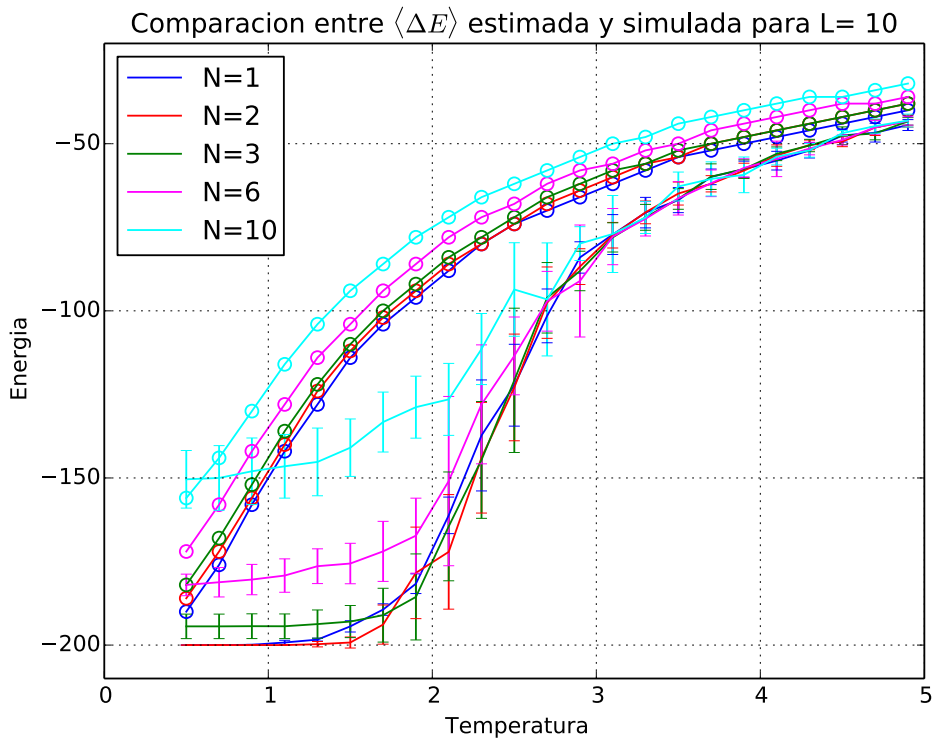


Figura 47.- Comparación entre $\langle E \rangle$ estimada y simulada para $L^2 = 10 \times 10$

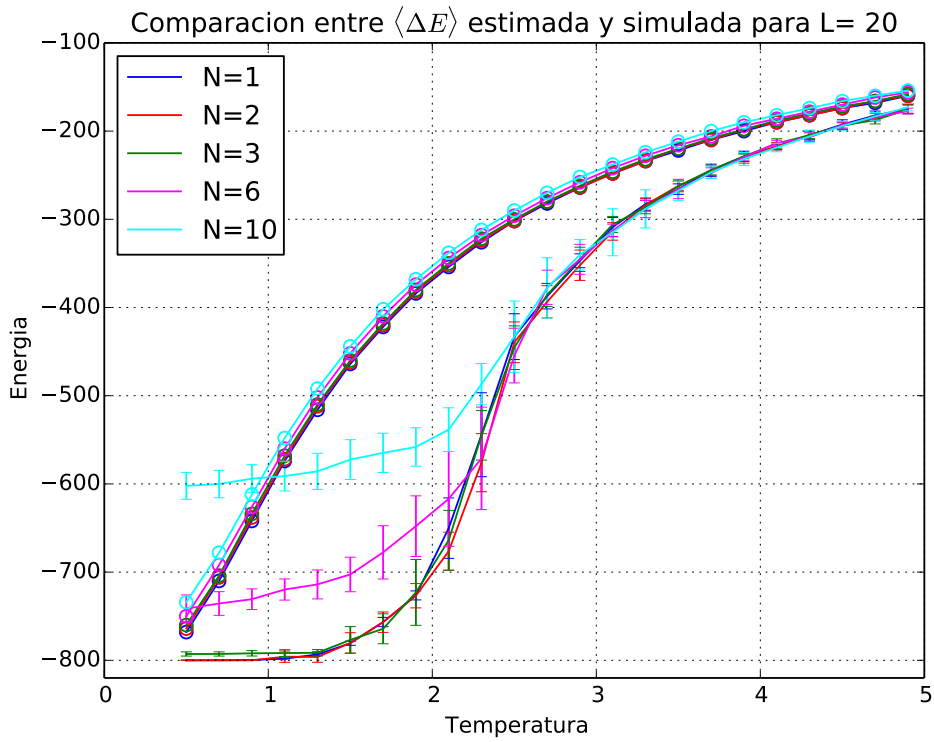


Figura 48.- Comparación entre $\langle E \rangle$ estimada y simulada para $L^2 = 20 \times 20$

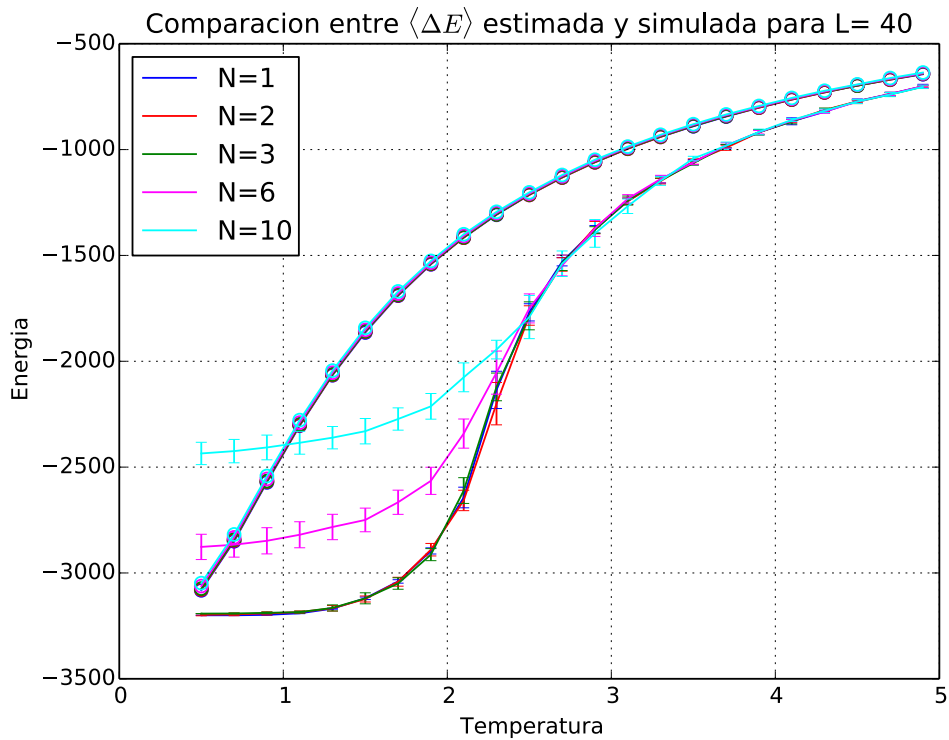


Figura 49.- Comparación entre $\langle E \rangle$ estimada y simulada para $L^2 = 40 \times 40$

TERMALIZACIÓN

En esta sección se muestra la velocidad a la que descienden en energía las simulaciones en función de N para tamaños $L^2 = [10 \times 10 \text{ y } 20 \times 20]$, y temperaturas $T = [0.5, 2.27 \text{ y } 3]$, partiendo de una distribución inicial "Tablero de Damas" (esta distribución asegura que se parte del máximo de energía).

La metodología seguida consiste en realizar 20 simulaciones para cada combinación de los parámetros mencionados (L , T y N), en cada una de las cuales se almacena en qué iteración, de las 600MCS iteraciones, se alcanza por primera vez cada una de las energías a medida que se va realizando el descenso en energía. Además, este valor de iteración, se le asigna también a todas aquellas energías que, siendo menores a la energía actual, no tienen aún un valor de iteración asignado.

Los resultados se muestran en las figuras al final de esta sección, con las energías en el eje Y, y la primera iteración en la que se alcanza cada energía en el eje X y en escala logarítmica.

En primer lugar, se hace necesario aclarar que las energías alcanzadas por las simulaciones en esta sección no coinciden con las energías mostradas en la sección "Magnitudes Termodinámicas con Distribución Inicial "Tablero de Damas"" porque las simulaciones se han realizado de manera diferente. En la sección "Magnitudes Termodinámicas con Distribución Inicial "Tablero de Damas"", cada temperatura se simulaba comenzando a partir de la distribución obtenida en la temperatura inmediatamente superior ($\Delta T = -0.2$), mientras en esta sección siempre se parte de la distribución "Tablero de Damas". En aquel caso, se asegura una más lenta y mejor termalización.

Por otra parte, atendiendo ya a las figuras, cabe destacar que la naturaleza de los resultados es independiente del tamaño L del sistema; y que como se ha venido demostrando hasta ahora, a medida que N aumenta, más improbable es que el sistema alcance estados con baja energía, a pesar de que la temperatura T sea baja.

En cuanto a las temperaturas, el comportamiento cualitativo es similar para los casos en que $T = 0$ y los casos en que $T = 2.27$, temperatura crítica T_c , donde la única diferencia es que al sistema le cuesta más iteraciones alcanzar los estados bajos de energía para $N=[1, 2 \text{ y } 3]$, ya que, para los casos en que $N=[6 \text{ y } 10]$, las energías alcanzadas son similares y erróneas; y lo hacen en número similar de iteraciones.

En cuanto a la comparativa respecto de N , es claro cómo para estados altos de energía, la velocidad de convergencia es mayor cuanto mayor es N , observando un rápido descenso de energía para $N=10$ si lo comparamos con el descenso que realiza $N=1$ en las primeras iteraciones. Sin embargo, para los casos en que la temperatura $T = [0.5 \text{ y } 2.27]$, este comportamiento se invierte en el entorno de la energía $E \sim -50$, para los casos con $L=10$; y en el entorno de la energía $E \sim -300$ para los casos con $L = 20$. Para los casos en que se tiene temperatura $T=3$, la convergencia se alcanza de forma adecuada en todos los casos y más rápida cuanto mayor es N .

El comportamiento así observado en esta sección es coherente con lo predicho en la sección "Estudio de la Variación de Energía ΔE ".

Por último, se quiere resaltar que la mayor velocidad de convergencia apreciada en las primeras iteraciones, para los casos en que N es alta, es inútil, ya que las simulaciones con $N = 1$ alcanzan los mismos estados de energía en las 100 primeras iteraciones, un valor despreciable ya que el total de iteraciones ejecutadas por cada simulación se encuentra 2.78 órdenes de magnitud por encima.

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$

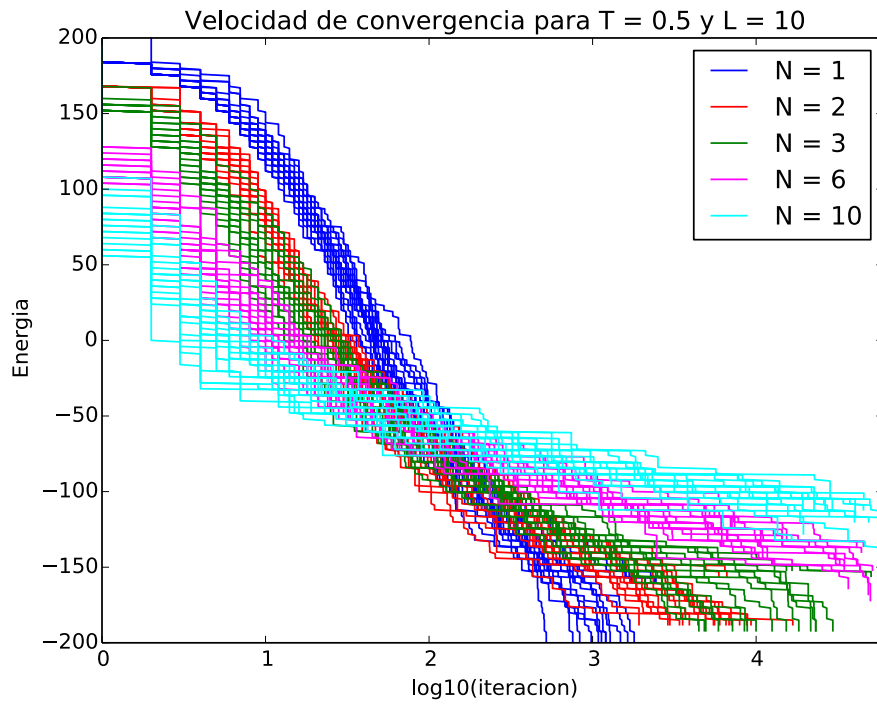


Figura 50.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=0.5$

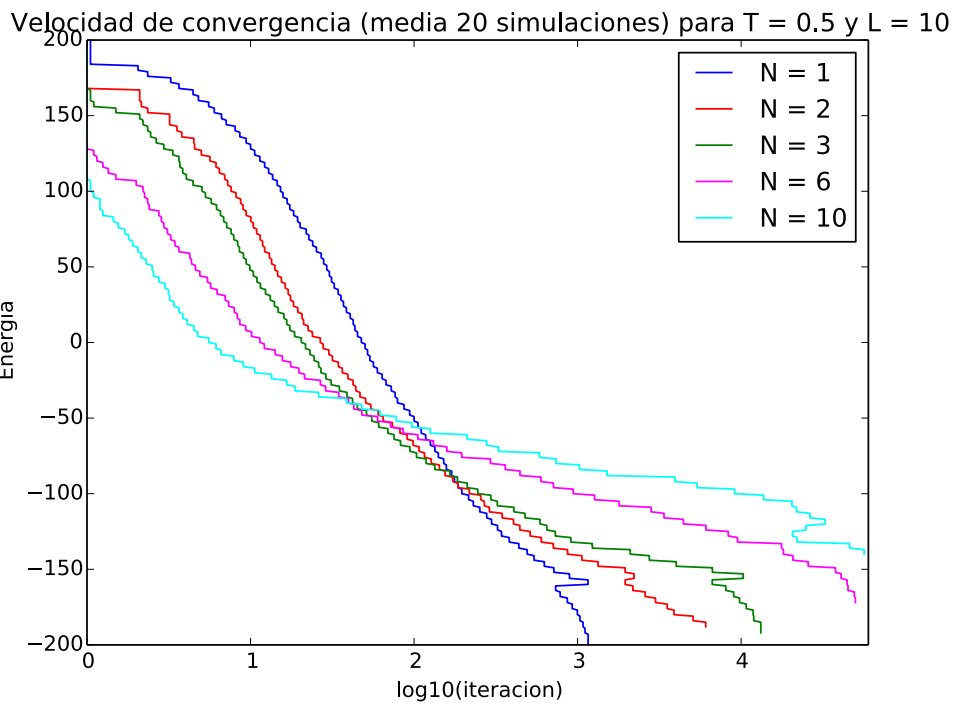


Figura 51.- Media de la Figura 50

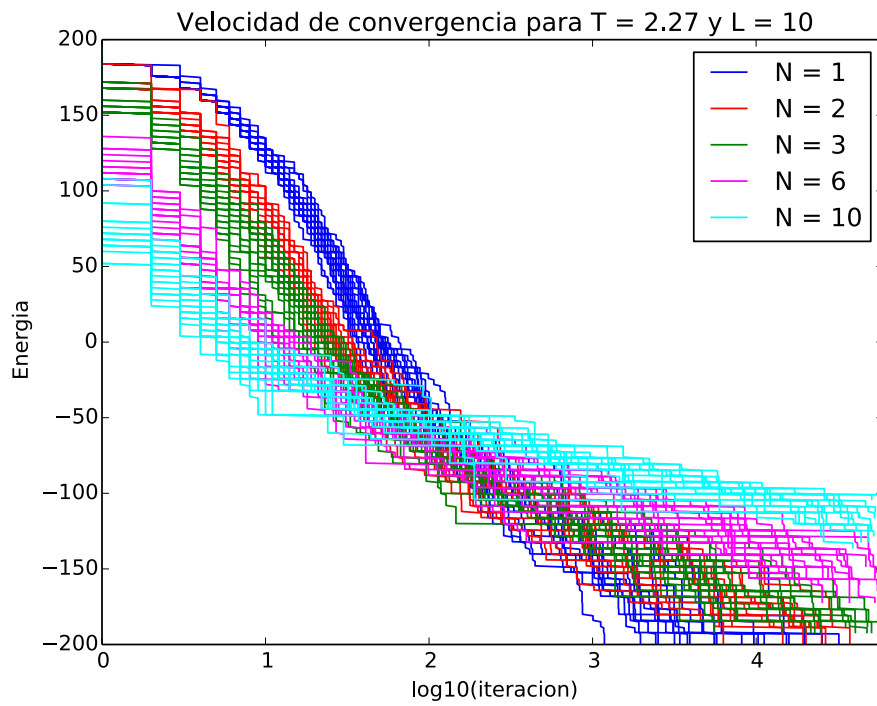


Figura 52.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=2.27$

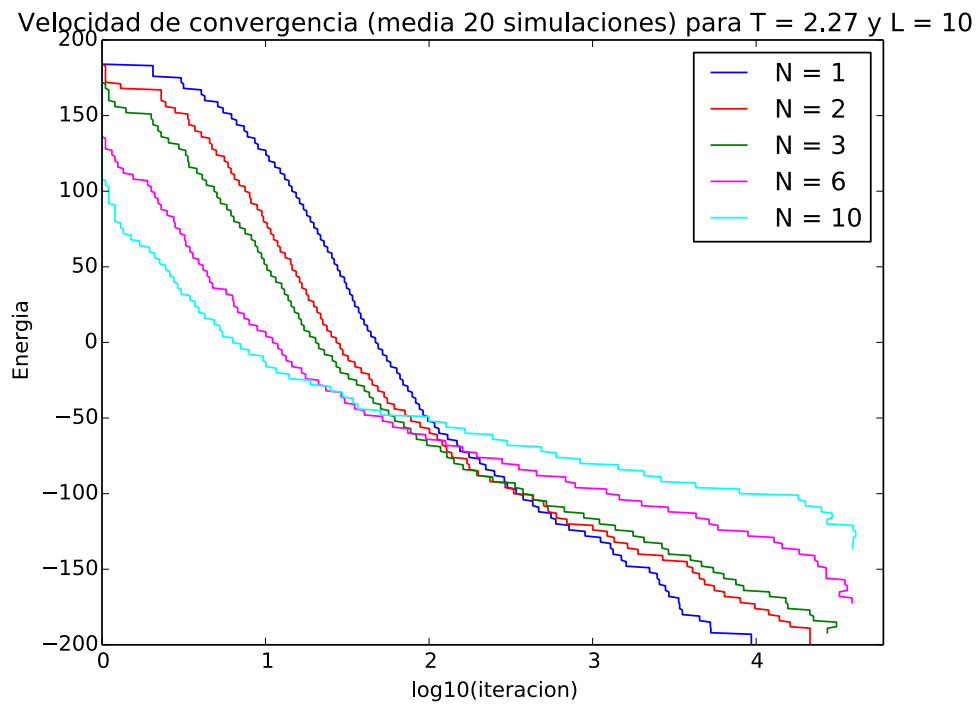


Figura 53.- Media de la Figura 52

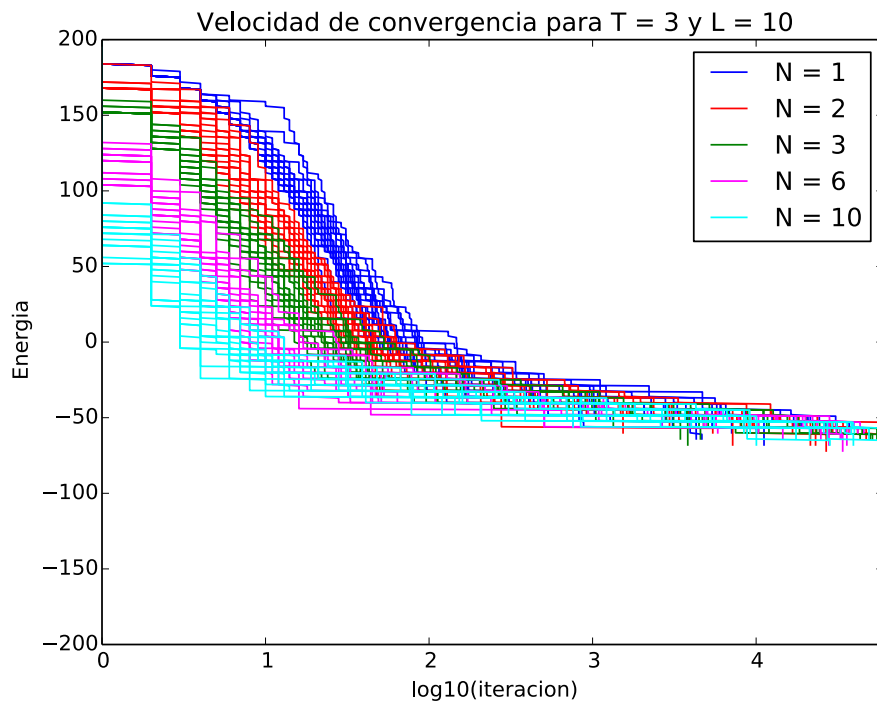


Figura 54.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=3$

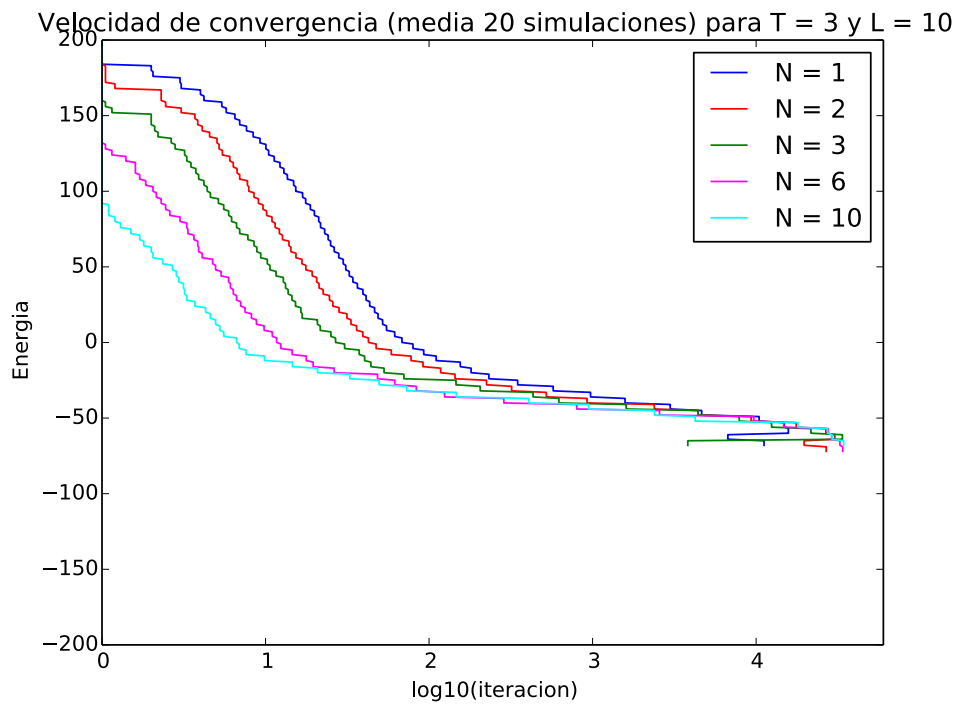


Figura 55.- Media de la Figura 54

Tamaño $L^2 = 20 \times 20$

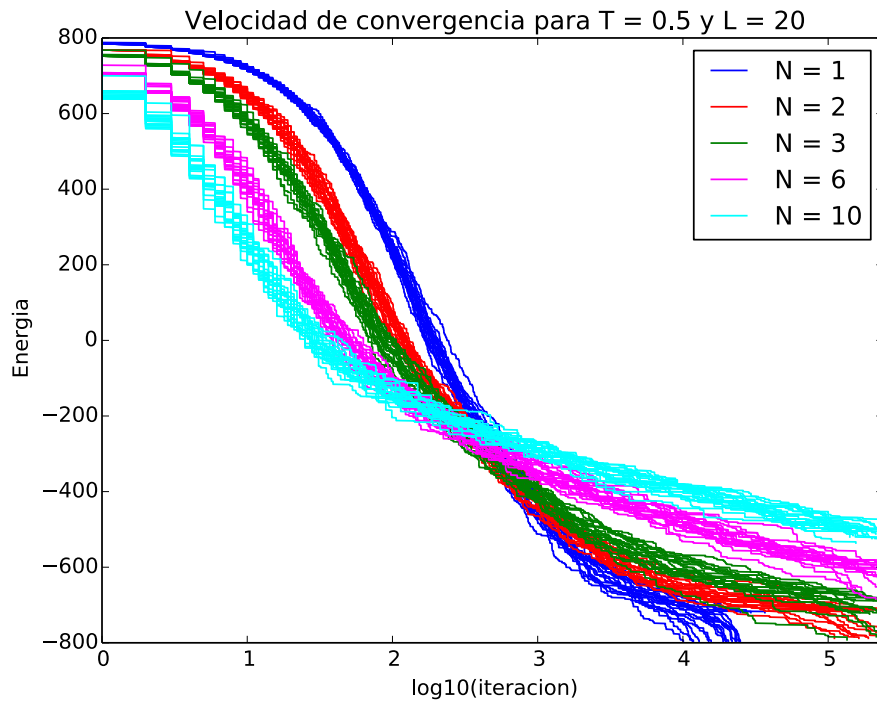


Figura 56.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=0.5$

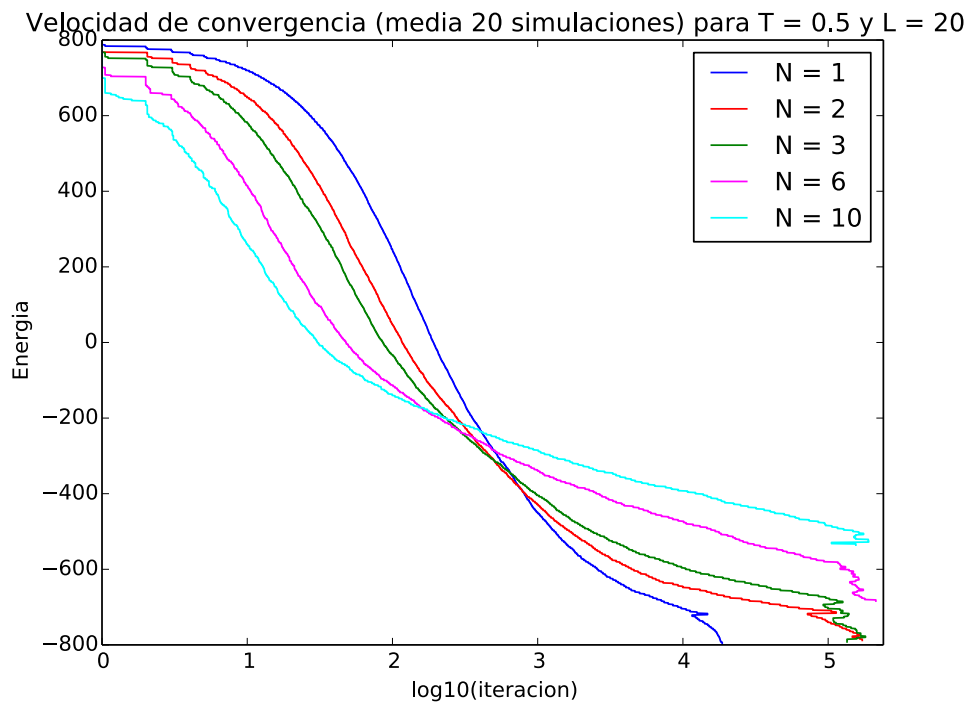


Figura 57.- Media de la Figura 56

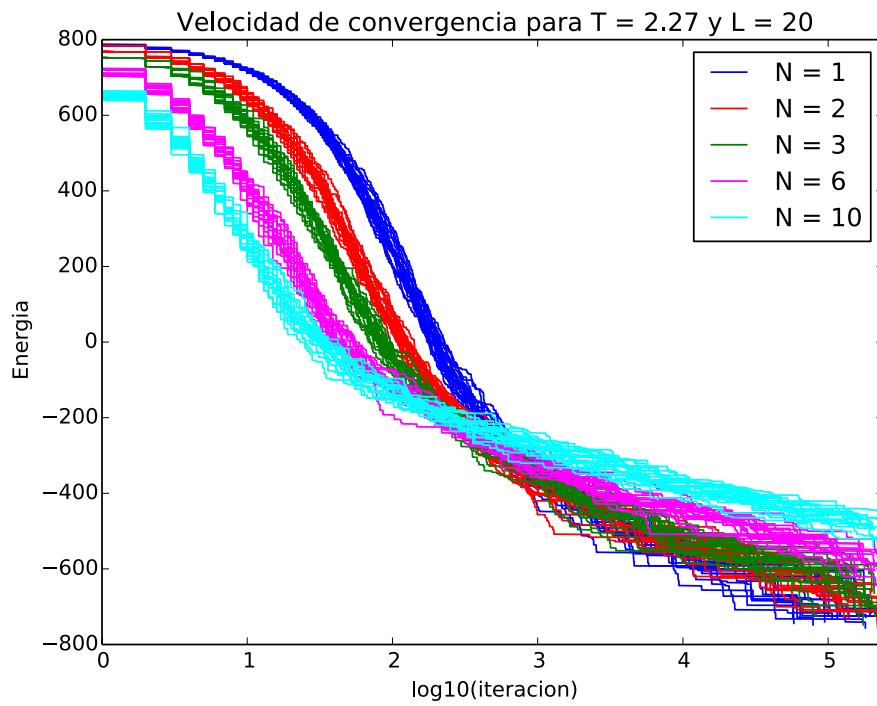


Figura 58.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=2.27$

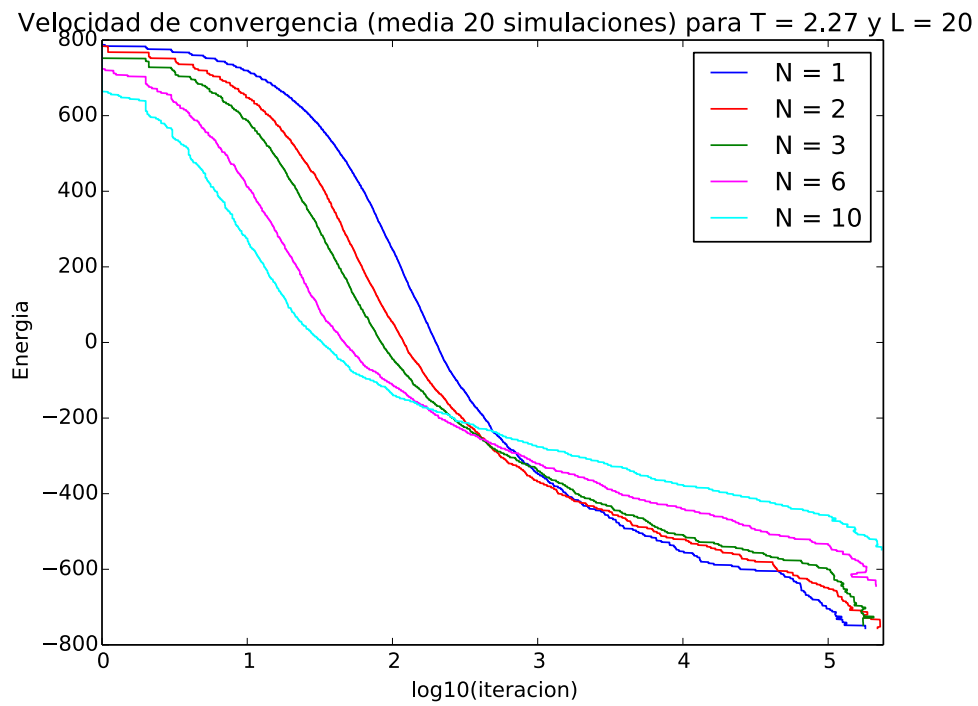


Figura 59.- Media de la Figura 58

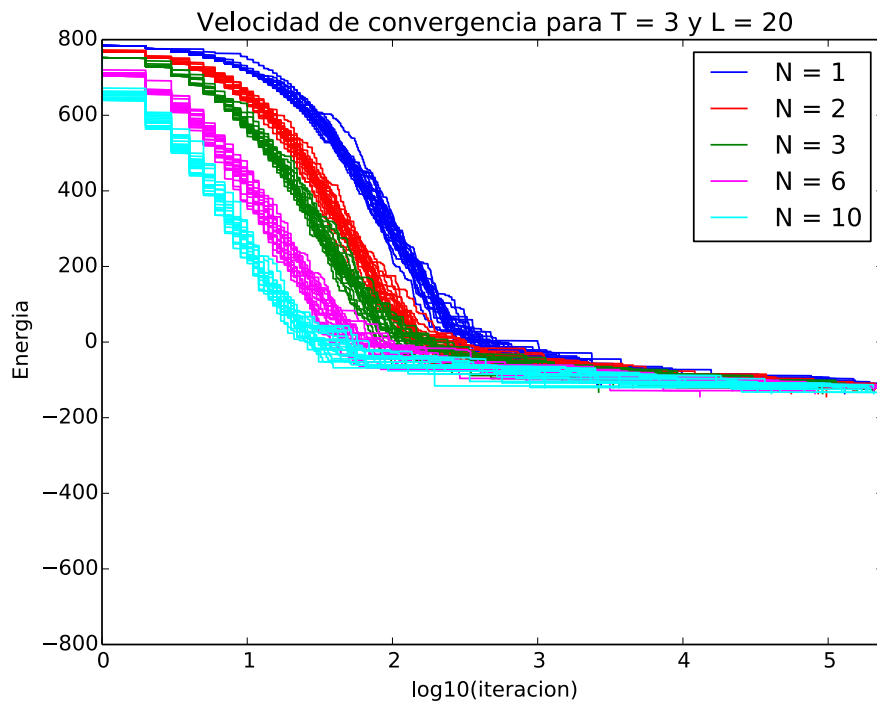


Figura 60.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=3$

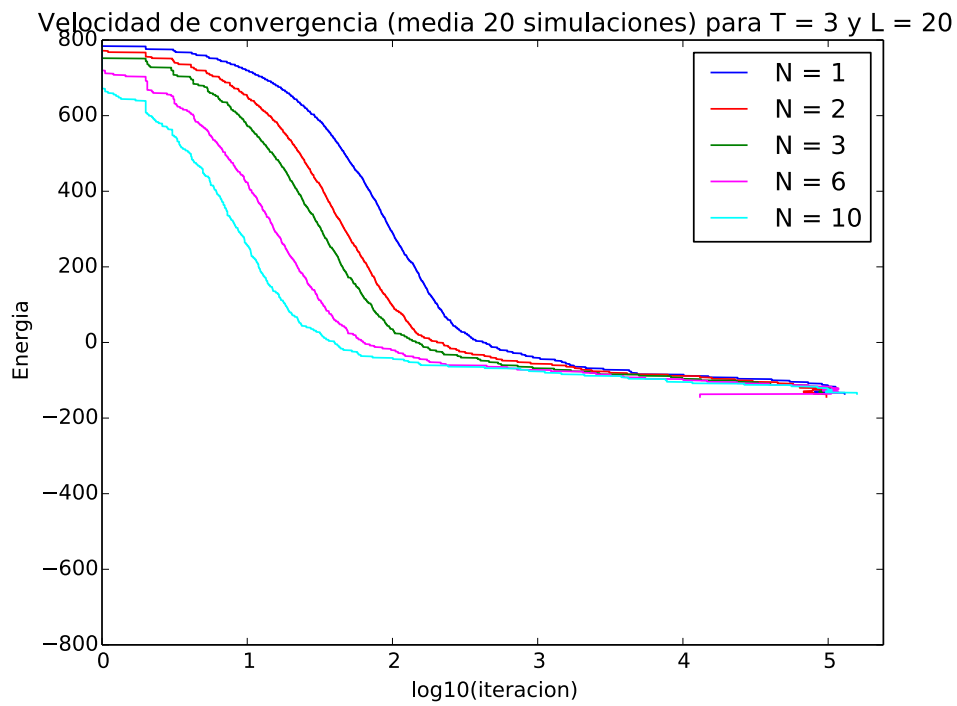


Figura 61.- Media de la Figura 60

AUTOCORRELACIÓN

En este apartado se realiza un análisis de la correlación entre las muestras de la energía media y entre las muestras de la magnetización media, para las simulaciones expuestas en la sección "Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"". Recordar que se tomaron las muestras del último 10% de la simulación, es decir, las últimas 60MCS, cuando se considera que el sistema está termalizado. El cálculo se realiza empleando la función de correlación que se muestra en la ecuación (60), siendo O un observable (energía media o magnetización media en este caso),

$$C_{OO}(t) = \left[\sum_s O(s)O(s+t) \right] - \langle O \rangle^2 \quad (60)$$

Que normalizada queda

$$\rho_{OO}(t) = \frac{C_{OO}(t)}{C_{OO}(0)} = \frac{C_{OO}(t)}{\text{var}(O)} \quad (61)$$

Finalmente se obtiene lo que se denominará **tiempo de autocorrelación** τ como

$$\tau = \sum_{-\infty}^{\infty} \rho_{OO}(t) \quad (62)$$

Este tiempo τ , *grosso modo*, es el tiempo necesario para producir en la simulación una configuración estadísticamente independiente, por lo que es deseable que sea bajo. En este contexto, tiempo hace referencia al número de iteraciones.

Con ello, los tiempos de autocorrelación, medidos en *Monte Carlo Steps* (MCS), para la energía media y la magnetización como observables, se muestran a continuación para tamaños $L^2 = [10 \times 10, 20 \times 20 \text{ y } 40 \times 40]$. Dado que se tienen 10 simulaciones para cada combinación de N , L y T , se muestra el valor medio de los tiempos de correlación, τ , de dichas 10 simulaciones.

En primer lugar, es interesante notar que, para temperaturas bajas, por debajo de T_c , todas las gráficas muestran el mismo tiempo de autocorrelación, 60 MCS, independientemente del valor de N . Esto se debe a que, a estas temperaturas y cuando el sistema está termalizado, la energía y la magnetización no varían, con lo que la autocorrelación es máxima y el tiempo necesario para obtener una muestra estadísticamente independiente debe ser infinito. En el caso que se está considerando, el infinito se refiere el máximo número de

iteraciones que se están teniendo en cuenta, es decir, 60 MCS, último 10% de las simulaciones.

Por otra parte, también es interesante notar que el tiempo de autocorrelación siempre es menor para la magnetización media que para la energía media. Además, los resultados de la magnetización parecen independientes de L , mientras los resultados respecto a la energía muestran mayores tiempos de autocorrelación cuanto mayor es L . Esto último se debe a que el impacto que tiene variar N espines es menor cuanto mayor sea el sistema, además de lo expuesto en el capítulo "Antecedentes", sección "Problemática del algoritmo Metropolis y Otros algoritmos", donde se comenta que el tiempo de ejecución crece siguiendo L^4 , aunque este comportamiento no es el observado en esta sección, quizá debido a que se ha ejecutado el algoritmo un número insuficiente de iteraciones para observar este fenómeno.

En cuanto a la comparación respecto del valor N , la forma de las curvas en todos los casos expuestos es similar y es sólo en el entorno de la T_C que se aprecian las mayores diferencias, donde a mayor N mayores son los tiempos de autocorrelación, lo que implica que a mayor es N , mayor es el número de iteraciones que se necesitan para obtener muestras independientes. Esto último significa que la estimación que se realice sobre cualquier observable tendrá una mayor incertidumbre cuanto mayor sea N , para un mismo número de iteraciones.

Esta última observación es curiosa, en tanto en cuanto, uno esperaría que cuanto mayor es el número N de espines que se voltean al mismo tiempo, mayor es el cambio y, por tanto, más independientes las muestras obtenidas. Sin embargo, como ya se mostró en la sección "Estudio de la Variación de Energía ΔE con el valor de N ", la desviación σ cuando $\langle \Delta E \rangle = 0$, es más baja cuanto mayor es N .

Con intención de ser más gráficos y más concretos, en la Figura 62 se muestra $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ como se hiciese en la sección "Estudio de la Variación de Energía ΔE con el valor de N ", para $M < 80$ y a la temperatura crítica $T = 2.27$, entorno donde se aprecia la mencionada tendencia, que la correlación es mayor entre muestras cuanto mayor es N . Se observa cómo las variaciones son menores cuanto mayor es N . Más concretamente, atendiendo a la Figura 31 (Energía media para tamaño $L^2 = 10 \times 10$), la energía media a la que converge el sistema para $N = 10$, es $\langle E \rangle \approx -110$, que se corresponde con $M_{N=10} \approx 45$; y para $N=1$, la energía media converge a $\langle E \rangle \approx -140$, es decir, $M_{N=1} \approx 30$. En la Figura 62, se observa cómo en el entorno de $M_{N=10} \approx 45$, la variación para $N=10$ es muy baja; y en el entorno de $M_{N=1} = 30$, la variación para $N=1$ es mayor. Esto explica por qué la correlación entre muestras es mayor cuanto mayor

es N cuando el sistema está termalizado en el entorno de la temperatura crítica.

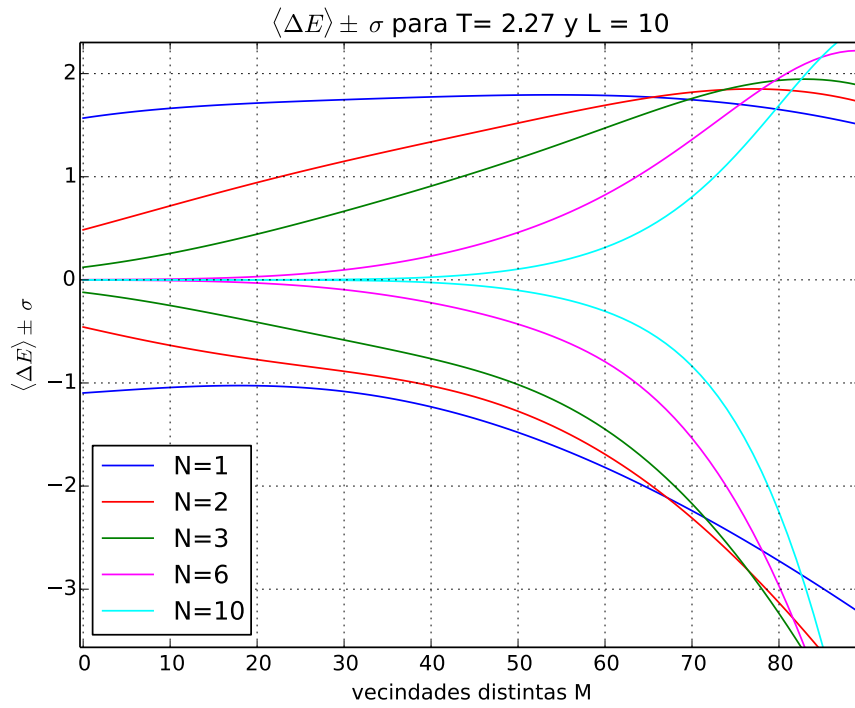


Figura 62.- $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ para $T=2.27$, $L=10$ y $M < 80$

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$

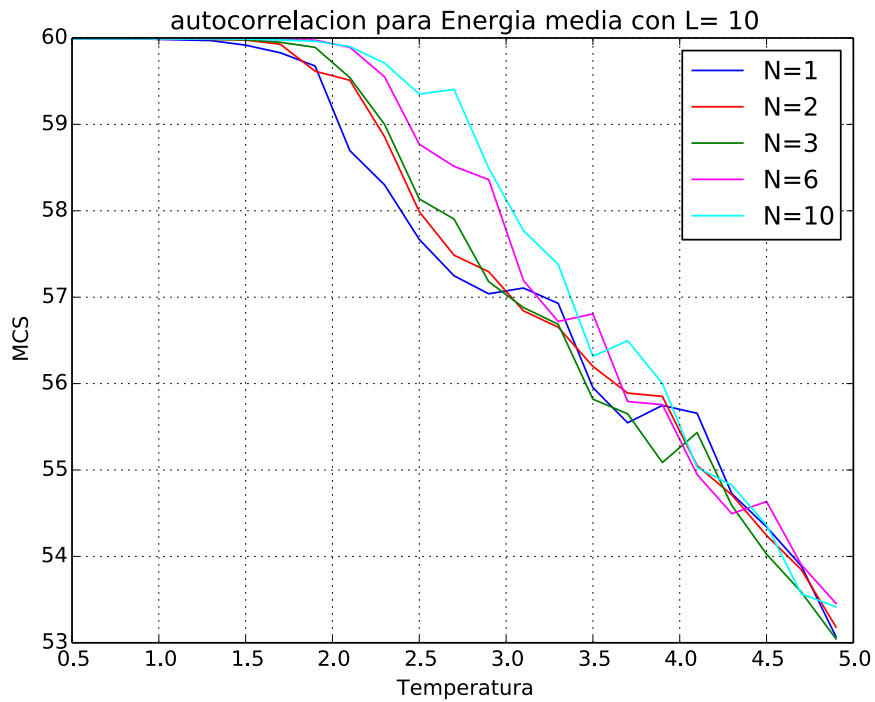


Figura 63.- tiempo de autocorrelación para Energía media con L=10

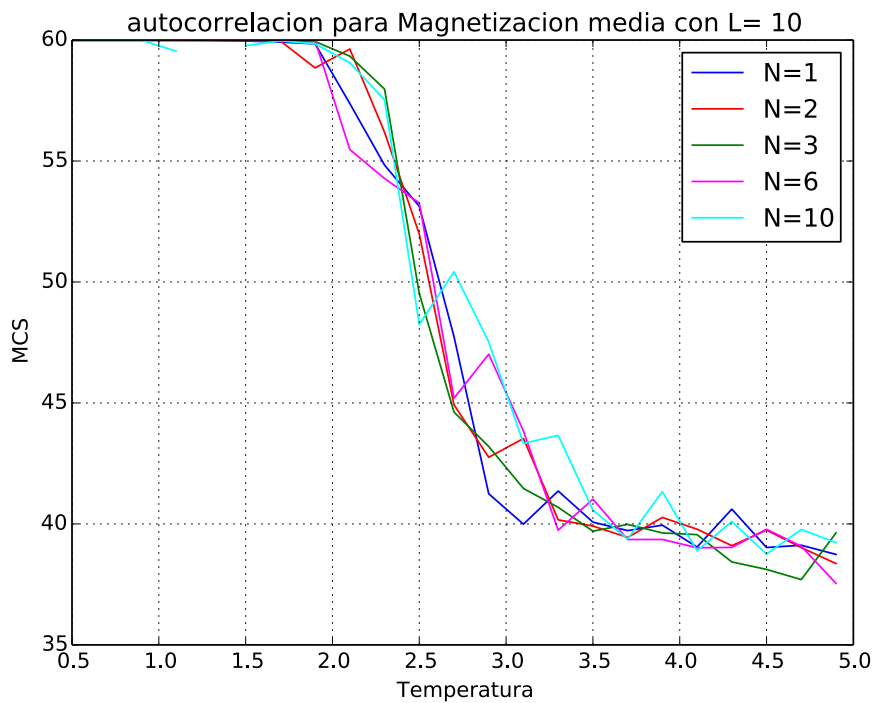


Figura 64.- tiempo de autocorrelación para Magnetización media con L=10

Tamaño $L^2 = 20 \times 20$

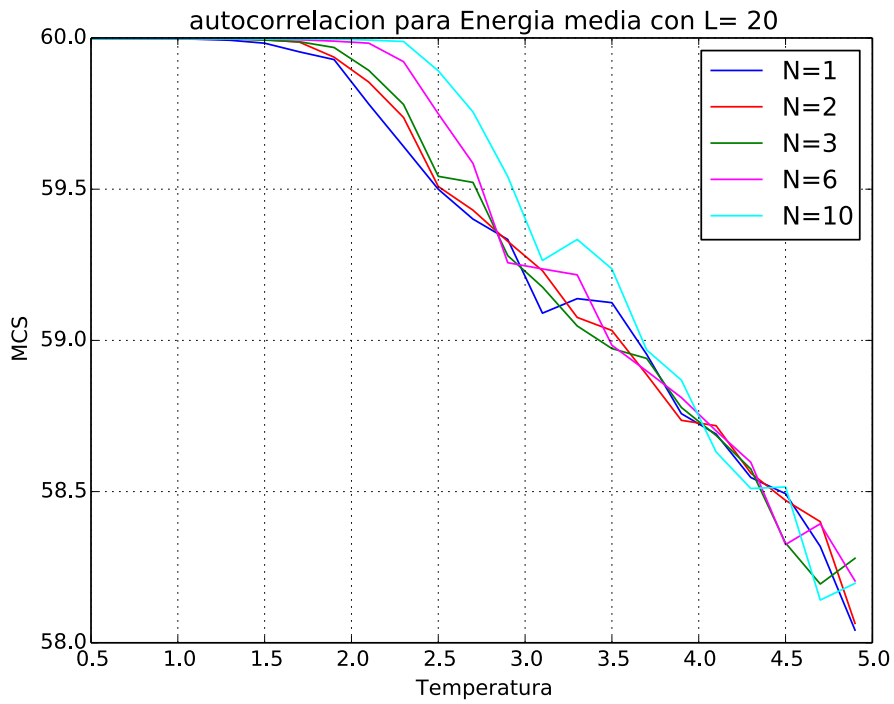


Figura 65.- tiempo de autocorrelación para Energía media con L=20

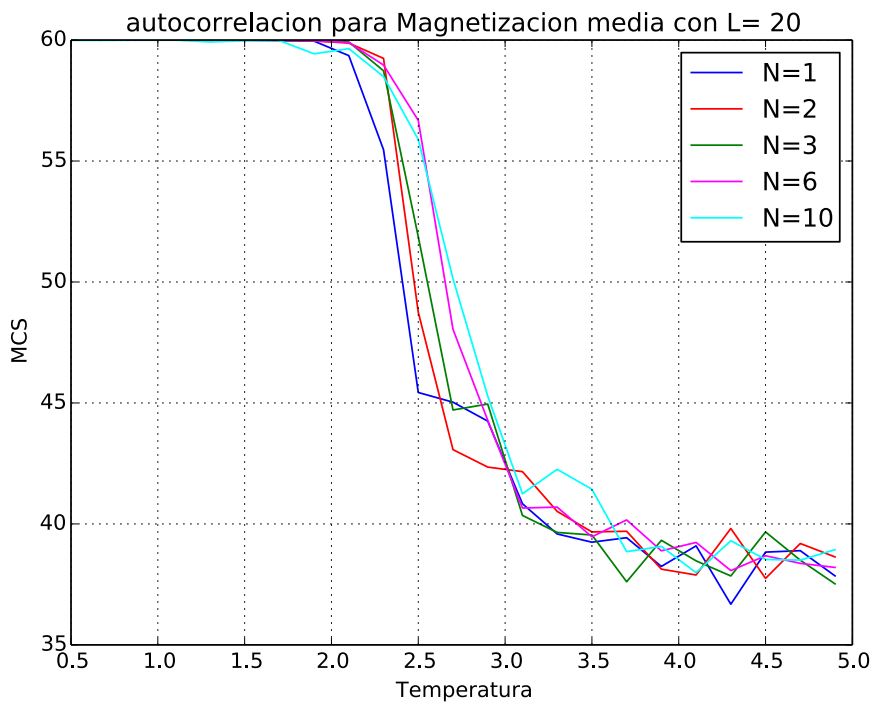


Figura 66.- tiempo de autocorrelación para Magnetización media con L=20

Tamaño $L^2 = 40 \times 40$

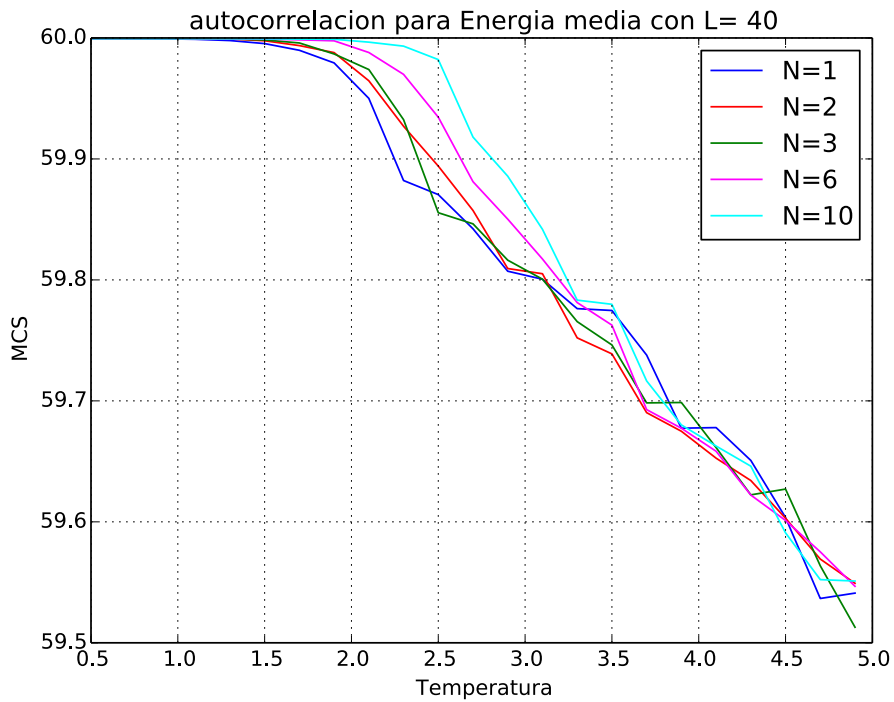


Figura 67.- tiempo de autocorrelacion para Energia media con L=40

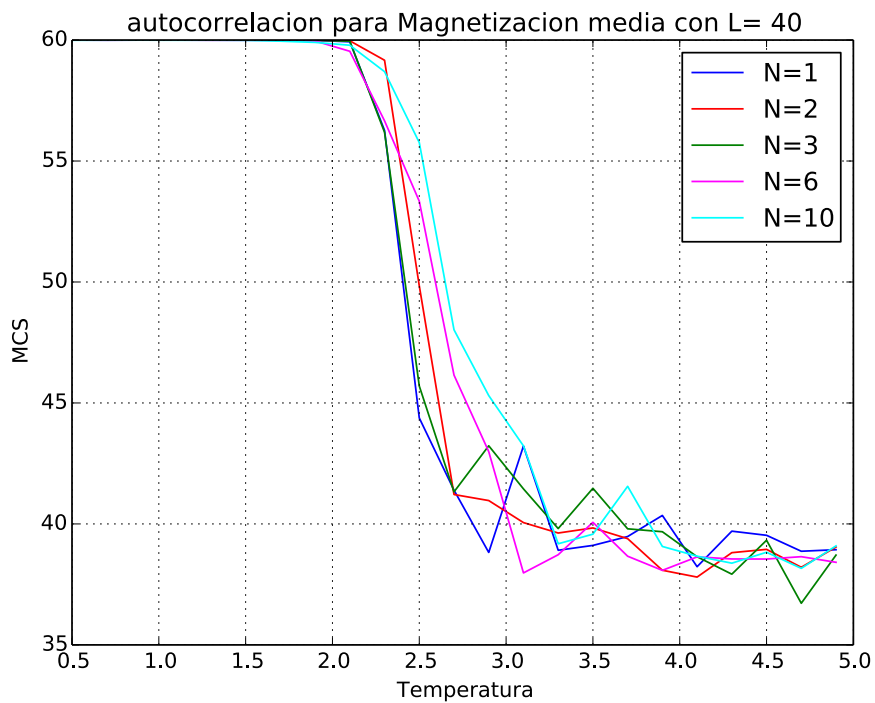


Figura 68.- tiempo de autocorrelación para Magnetización media con L=40

CALIDAD DE LA APROXIMACIÓN ESPINES NO VECINOS

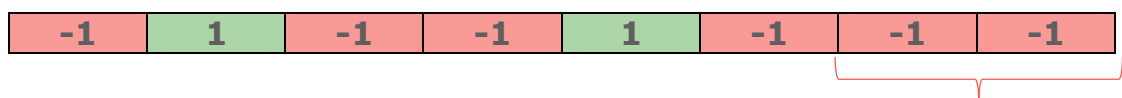
En este apartado se quiere justificar por qué asumir que los N espines que se evalúan en cada iteración no son vecinos entre sí es una buena aproximación, a pesar de que en las simulaciones se permite que los espines evaluados puedan ser vecinos entre sí.

En este apartado denominaremos "colisión" C al hecho de que dos espines seleccionados sean vecinos entre sí. La consecuencia importante de las colisiones es que provocan la existencia de vecindades inmutables, en concreto, dos vecindades inmutables por cada colisión, volteemos o no los espines al final de la iteración. Estas vecindades inmutables no introducen una diferencia de energía en el sistema y, en consecuencia, no afectan a la probabilidad de volteo. Se puede decir que, de alguna manera, las colisiones limitan las consecuencias del volteo y que el número de vecindades que afectarán al cómputo de energía será $4N - 2C$.

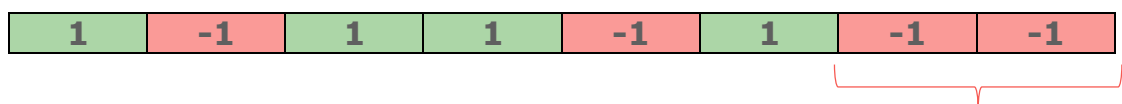
Con todo ello, y con la intención de continuar con el mismo paradigma seguido en este trabajo, se puede decir que una colisión es equivalente a una situación en la que no ha existido tal colisión pero cuyas vecindades asociadas a cada colisión son pares del tipo $\{-1, 1\}$ ó $\{1, -1\}$.

Ejemplo:

Supongamos que se toman dos espines que son vecinos entre sí y que están desalineados (los dos espines son diferentes). Sus $4N$ vecinos son los mostrados en el siguiente vector, siendo los dos últimos vecinos el par de vecindades asociados a la colisión.

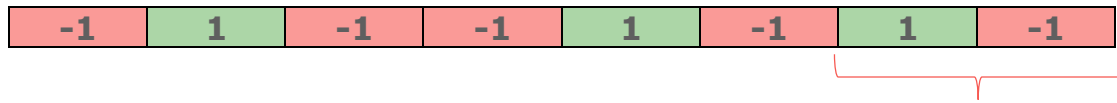


En caso de que se produzca el volteo, el vector resultante quedaría

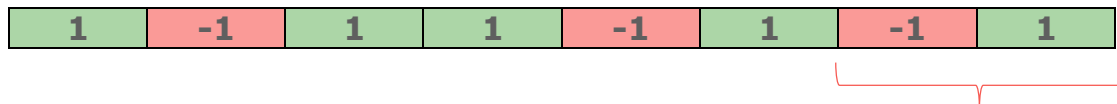


Se puede ver cómo las vecindades debidas a la colisión son vecindades inmutables y por tanto no afectan a la variación del número de vecindades distintas, que en este ejemplo pasa de tener valor $vd_t = 6$, a tener valor $vd_{t+1} = 4$, produciéndose un descenso de energía equivalente a $\Delta vd = -2$. Siguiendo la analogía descrita en el párrafo anterior al comienzo de este ejemplo, donde se afirma que el par de vecindades asociadas a una colisión es

equivalente a un par de vecindades del tipo $\{-1, 1\}$ ó $\{1, -1\}$ cuando los espines no son vecinos entre sí, el vector original quedaría como sigue:



Que en caso de volteo quedaría:



Con lo que se pasa de tener $vd_t=5$ a $vd_{t+1} = 3$, produciéndose un descenso de energía equivalente a $\Delta vd = -2$, igual que en el caso anterior, mostrando nuevamente que la colisión no introduce variación energética y probando así la analogía.

Visto el ejemplo, si se conociese el **número de colisiones** se podría calcular la probabilidad de que el resultado obtenido con dichas colisiones fuese exactamente equivalente a no haber colisiones.

La idea consiste en cuantificar la probabilidad de tomar C vecinos distintos (vecindades tipo -1) en $2C$ vecindades cualesquiera del sistema para un M dado, siendo C el número de colisiones y M el número de vecindades distintas en todo el sistema. Esto es equivalente a calcular la probabilidad de que la mitad de las vecindades asociadas a las colisiones sean de valor -1 y la otra mitad sean de valor +1. Siguiendo un razonamiento similar al expuesto para las ecuaciones (37) y (42), se tiene

$$p_{equivalente}(L, M, C) = \binom{2C}{C} \frac{\prod_{i=0}^{C-1} (M - i)(M' - i)}{\prod_{i=0}^{2C-1} (2L^2 - i)} \quad (63)$$

con $M' = 2L^2 - M$, es decir, el número de vecindades iguales (vecindades tipo +1) en todo el sistema.

Por otra parte, con el fin de cuantificar este fenómeno, se ha realizado un experimento de tipo Monte-Carlo para calcular el valor C en función de L y N , que son las variables de las que dependerá el número de colisiones. Intuitivamente, es fácil ver cómo para un mismo valor de L , a mayor N , mayor número de colisiones C ; y para un mismo N a mayor L , menor número de colisiones C .

Este experimento ha consistido en generar 500.000 matrices de tamaño $L \times L$; posicionar de forma aleatoria N espines en cada una de las matrices siguiendo una distribución uniforme; y contabilizar

cuántas colisiones se producen, permitiendo así calcular el número medio de colisiones C por iteración.

Los resultados obtenidos se reflejan en la Figura 69 y en la Tabla 3, donde se refleja claramente cómo para un mismo valor de L , a mayor N , mayor número de colisiones C ; y para un mismo N a mayor L , menor número de colisiones C . De hecho, a partir de la Tabla 3 se puede inferir la siguiente aproximación, que viene a decir que el número de colisiones para un N dado se puede aproximar como una relación lineal con el tamaño L^2 del sistema:

$$C(L, N) \approx \frac{C(L_0, N)}{(L/L_0)^2} \quad (64)$$

Ejemplo:

Para $N = 15$ y $L=10$ obtenemos de la tabla $C(L=10, N=15) = 4.23996$, con lo que si fijamos $L_0 = 10$ entonces

$$C(L=20, N=15) = \underline{1.050888} \approx C(10, 15) / (20/10)^2 = C(10, 15) / 4 = \underline{1.05999}$$

y

$$C(L=40, N=15) = \underline{0.262138} \approx C(10, 15) / (40/10)^2 = C(10, 15) / 16 = \underline{0.2649975}$$

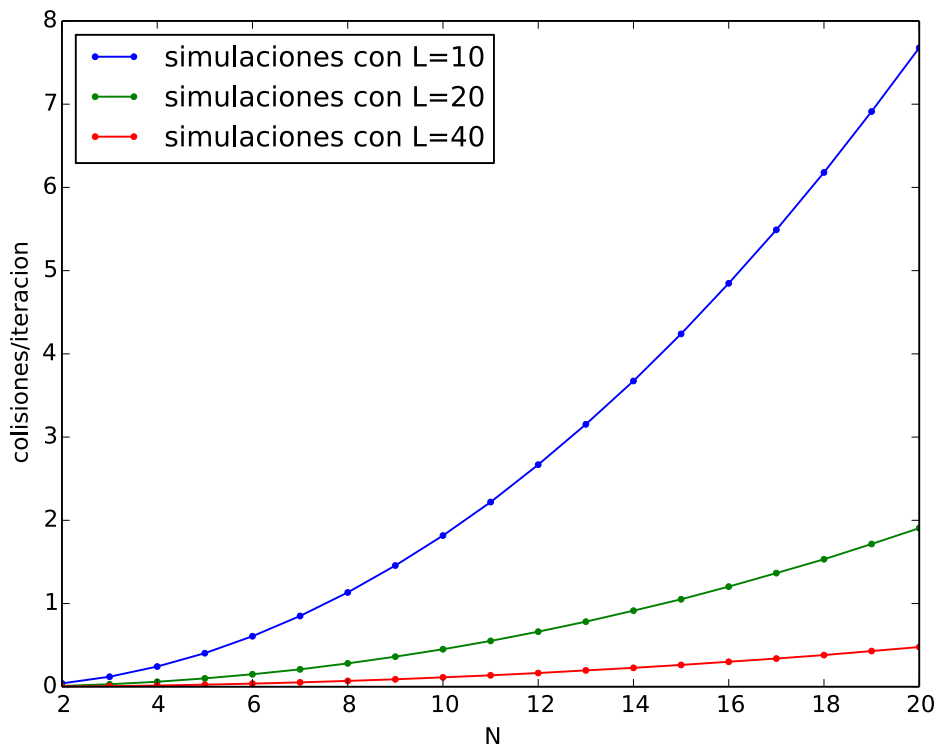


Figura 69.- Número medio de colisiones C por iteración

	L=10	L=20	L=40
N = 2	0.040518	0.009988	0.002512
N = 3	0.120434	0.030122	0.00744
N = 4	0.242842	0.060062	0.015126
N = 5	0.403328	0.100562	0.025072
N = 6	0.606972	0.150308	0.037688
N = 7	0.850302	0.20919	0.052624
N = 8	1.133092	0.280788	0.07015
N = 9	1.45667	0.361538	0.089562
N = 10	1.816872	0.450622	0.11298
N = 11	2.218754	0.550684	0.137384
N = 12	2.668626	0.66192	0.16495
N = 13	3.153552	0.782124	0.196602
N = 14	3.67414	0.914366	0.227262
N = 15	4.23996	1.050888	0.262138
N = 16	4.847484	1.203258	0.300384
N = 17	5.490408	1.365628	0.339006
N = 18	6.179822	1.531744	0.380828
N = 19	6.912048	1.715378	0.428934
N = 20	7.677228	1.90549	0.477056

Tabla 3.- Número medio C de colisiones por iteración en función de L y N

Al hacer media, *i.e.*, cuantificar las colisiones por iteración, los valores C obtenidos no son valores enteros y no podemos usarlos en la ecuación (63), ya que ésta sólo admite valores C enteros. Para salvar este problema, ahora y en lo sucesivo, se realiza una media ponderada entre los valores enteros superior e inferior siguiendo la siguiente expresión

$$\hat{f}(x) = (\lceil x \rceil - x)f(\lfloor x \rfloor) + (x - \lfloor x \rfloor)f(\lceil x \rceil) \quad (65)$$

Donde $\lceil x \rceil$ se refiere al valor entero más próximo por exceso y $\lfloor x \rfloor$ al valor entero más próximo por defecto.

Con ello, se ha evaluado la probabilidad de que el resultado de una iteración con posibles colisiones sea exactamente equivalente a una iteración sin colisiones, obteniéndose las siguientes gráficas (Figura 70, Figura 71 y Figura 72) en función de los valores de L , M y N empleados en las simulaciones de los apartados anteriores.

Como cabría esperar, a mayor valor de L , mayor será la probabilidad de que el resultado obtenido sea exactamente equivalente. Esta tendencia también se intuía obvia a medida que N disminuye. En ambos casos, tanto al aumentar L , como al disminuir N , la probabilidad aumenta debido a un menor número de colisiones medio

por iteración. Sin embargo, es interesante notar cómo para un mismo L y N dados, la probabilidad de equivalencia aumenta a medida que nos aproximamos a $M = 50\%$. Esto se debe a que, en esta situación, con $M = 50\%$, es más probable que los pares de vecinos asociados a las colisiones sean del tipo $\{-1, 1\}$ ó $\{1, -1\}$. En el extremo, cuando $M=0\%$ ó $M=100\%$, será imposible tener pares del tipo $\{-1, 1\}$ ó $\{1, -1\}$. Si en estos extremos la probabilidad no toma valor 0 para un N dado se debe a que el número medio de colisiones por iteración es menor a 1. Es por ello que, en las figuras, sólo el caso $\{L=10, N=10\}$ toma valor 0 en los extremos debido a que es la única situación expuesta que tiene un número medio de colisiones por iteración mayor que 1.

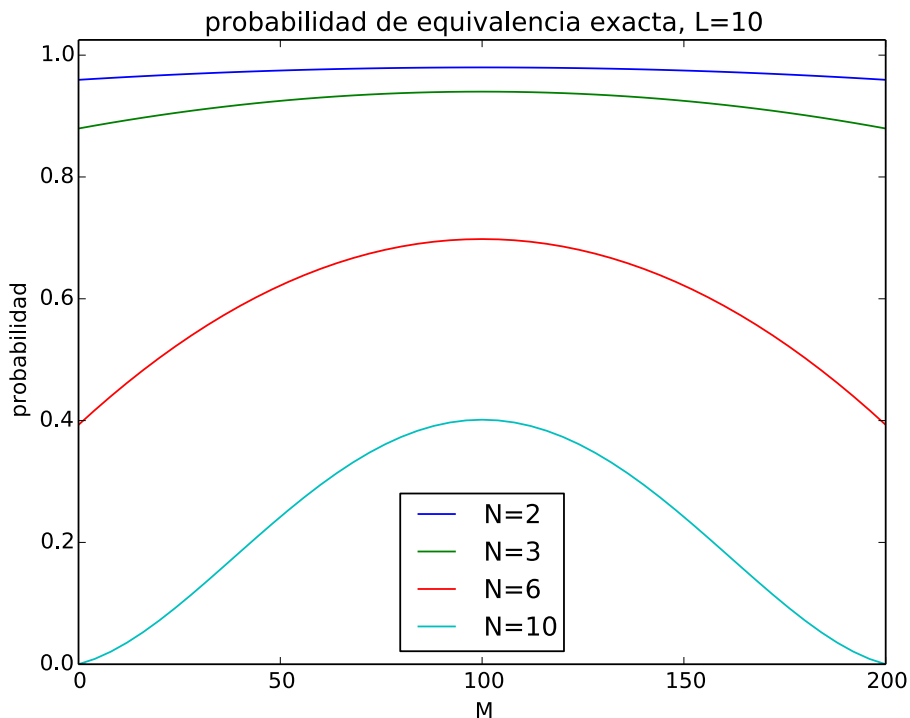


Figura 70.- Probabilidad de equivalencia exacta en función de M , con $L=10$ para $N=[2, 3, 6$ y $10]$

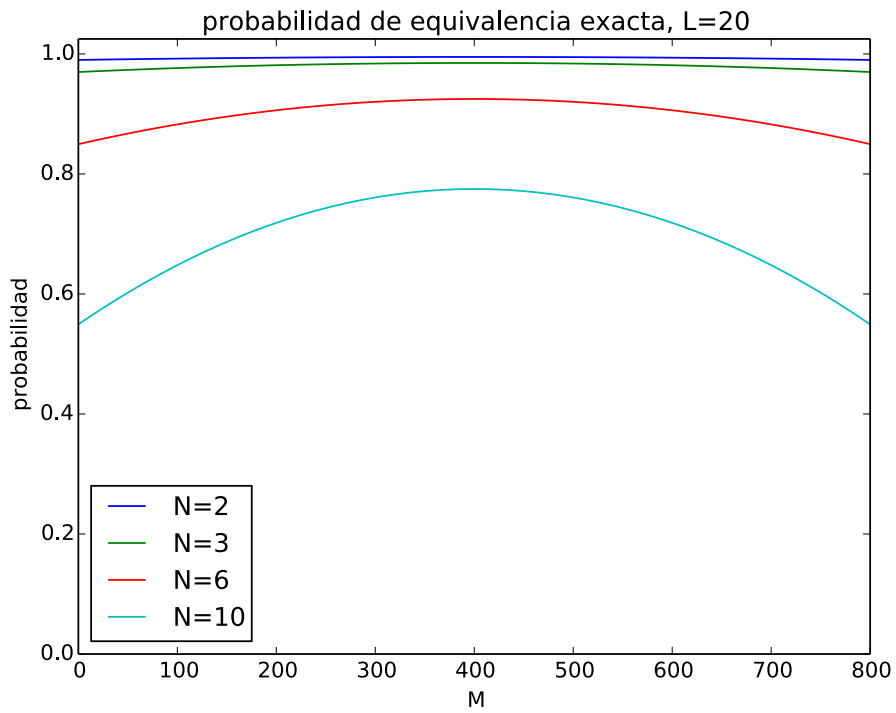


Figura 71.- Probabilidad de equivalencia exacta en función de M , con $L=20$, para $N=[2, 3, 6$ y $10]$

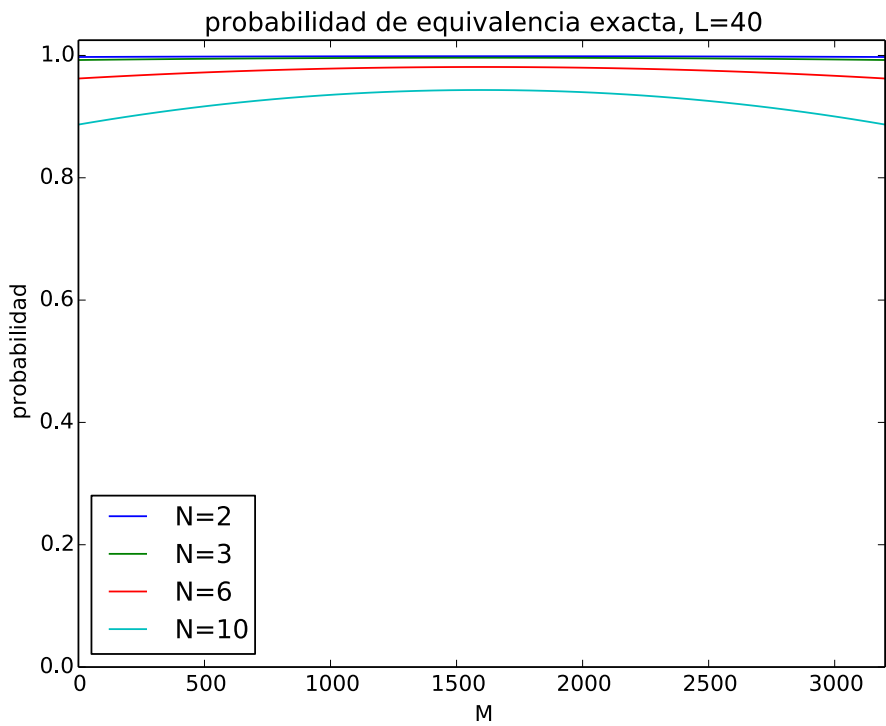


Figura 72.- Probabilidad de equivalencia exacta en función de M , con $L=40$, para $N=[2, 3, 6$ y $10]$

Por otra parte, el hecho de que las simulaciones no sean exactamente equivalentes no implica que el comportamiento en ambos contextos sea similar. Para mostrar esto, a continuación se realiza la comparativa siguiente en función de M con y sin colisiones:

- el valor esperado del número de vecindades distintas $\langle vd \rangle$,
- la probabilidad W de aceptar el volteo de los N espines y
- y la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$.

Valor esperado del número de vecindades distintas $\langle vd \rangle$

Recordando que cuando hay colisiones el número de vecindades mutables será $4N - 2C$; que por cada colisión existe un par $\{-1, 1\}$ ó $\{1, -1\}$, esto es, que se introducen C vecinos distintos; y tomando como referencia la ecuación (42) y (43) entonces

$$\langle vd \rangle = C + \sum_{i=0}^{4N-2C} i p_i \quad (66)$$

con

$$p_i = \binom{4N-2C}{i} \frac{\prod_{x=0}^{i-1} (M-x) \prod_{x=0}^{4N-2C-i-1} (M'-x)}{\prod_{x=0}^{4N-2C-1} (2L^2-x)} \quad (67)$$

siendo $M' = 2L^2 - M$ y cumpliéndose

$$\sum_i p_i = 1 \quad (68)$$

Probabilidad W de aceptar el volteo de los N espines

En este caso, se debe recordar que los pares de vecindades asociados a las colisiones son vecindades inmutables que no introducen una diferencia de energía en el sistema y que, por tanto, no afectan a la probabilidad de volteo.

Con ello, y siguiendo el razonamiento expuesto para el desarrollo de la ecuación (44) se tiene

$$W = \sum_{i=0}^{2N-C-1} p_i e^{\frac{-\Delta E_i}{KT}} + \sum_{i=2N-C}^{4N-2C} p_i \quad (69)$$

con

$$\Delta E_i = 4(2N - (i + C)) = 4(2N - C - i) \quad (70)$$

Variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$

Para este caso, será necesario acudir a la ecuación (50) y relacionar por inspección las ecuaciones (69) y (70) para obtener

$$\langle \Delta E \rangle = \sum_{i=0}^{4N-2C} q_i \Delta E_i \quad (71)$$

Siendo

$$q_i = \begin{cases} p_i e^{-\frac{\Delta E_i}{kT}} & \text{si } \Delta E_i > 0 \\ p_i & \text{si } \Delta E_i \leq 0 \end{cases} \quad (72)$$

Resultados para $L=10$, $N=[2 \text{ y } 10]$

En las siguientes figuras (73 a 76) se muestra la comparativa entre los valores obtenidos asumiendo que hay colisiones (lo que ocurre en las simulaciones) y asumiendo que no hay colisiones (teoría).

Se muestran los resultados para tamaño del sistema $L=10$ y para $N=[2 \text{ y } 10]$ porque son los dos casos con diferencias más notables de entre los valores que se han expuesto en este trabajo.

Los resultados son los referidos a las diferencias, respecto de M , en

- la estimación de la probabilidad de aceptar un nuevo estado
- la estimación de la variación media de energía

En ellas se observa que, las tendencias son las mismas en ambos casos, es decir, la forma de las funciones, considerando colisiones como si no las consideramos.

En cuanto a la probabilidad W de aceptar un estado nuevo, el error máximo que se comete con la aproximación es del 5.5% que se corresponde al caso $T=5$ y $N=2$, en el entorno $M=50$. Sin embargo, apoyándonos en la Figura 77, a temperatura $T=5$, el sistema oscila alrededor de $M=80$ donde el error desciende a $\sim 3\%$. Sin embargo, para el caso con $N=10$, el máximo error se comete para $T=5$ también y en el entorno de esta $M=80$, con lo que el error tiene más impacto para $N=10$ que para el caso $N=2$.

De hecho, para $N=2$, el error en la probabilidad W tiene mayor incidencia a temperatura $T=3$, ya que el máximo se encuentra en el entorno de $M=60$ (Figura 77) que es donde el sistema se encontrará cuando esté termalizado.

En cuanto a la variación de energía media $\langle \Delta E \rangle$, para el caso $N=2$, las diferencias máximas se aprecian para M bajo, y donde el sistema debe oscilar cuando está termalizado muestra una diferencia de 0.2 unidades de energía media por iteración para $T=3$ y $T=5$.

Para $N=10$, dado que con M alto las variaciones de energía son altas, las diferencias máximas se aprecian para M alto. Sin embargo, el sistema no se termaliza a M alto con lo que la incidencia de estas diferencias es despreciable.

Por último comentar que para todos los casos, cuando la temperatura $T=0$, los errores cometidos son despreciables, tanto en probabilidad W como en la variación media $\langle \Delta E \rangle$, ya que, el sistema, para $N=2$, está termalizado en $M=0$, y para $N=10$ está termalizado alrededor de $M=25$, donde las curvas muestran errores nulos.

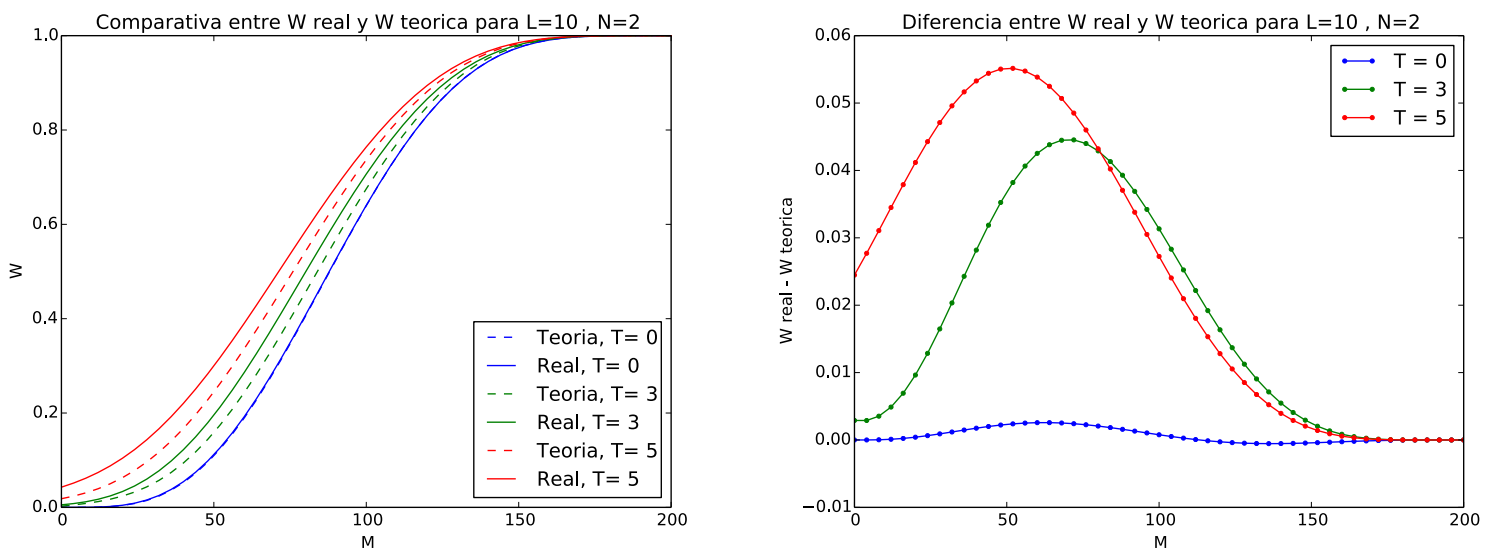


Figura 73.- Probabilidad W de aceptar un nuevo estado y diferencia entre teoría (sin colisiones) y real (con colisiones) para $L=10$, $N=2$ y temperaturas $T=[0, 3$ y $5]$.

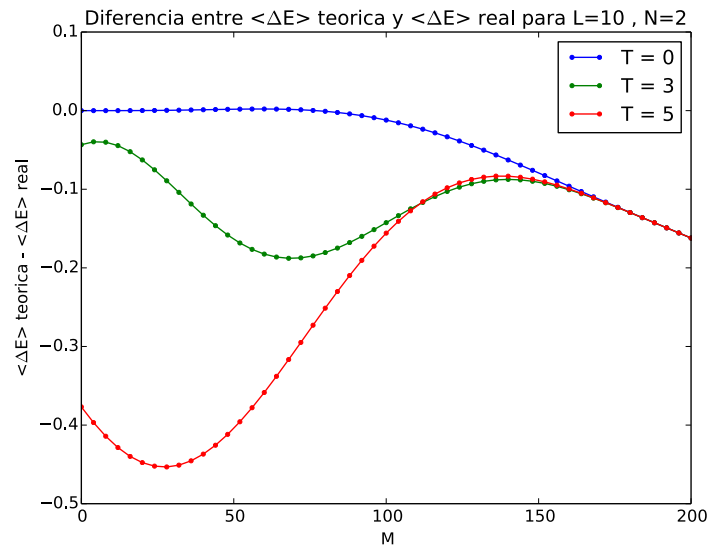
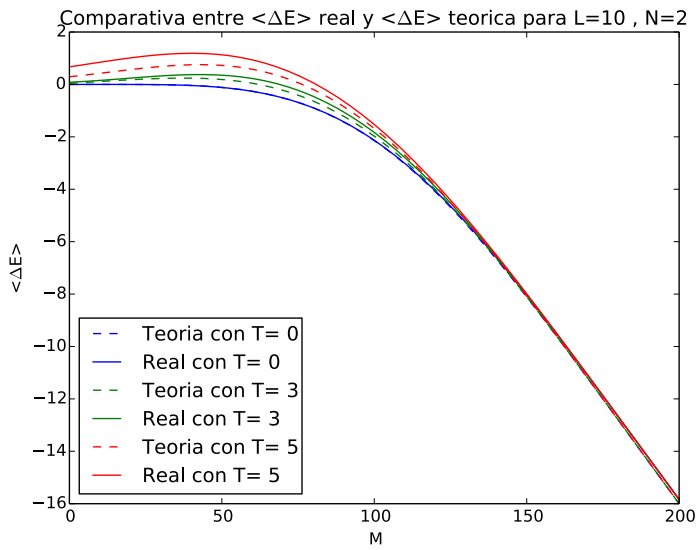


Figura 74.- Variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ y diferencia entre teoría (sin colisiones) y real (con colisiones) para $L=10$, $N=2$ y temperaturas $T=[0, 3$ y $5]$.

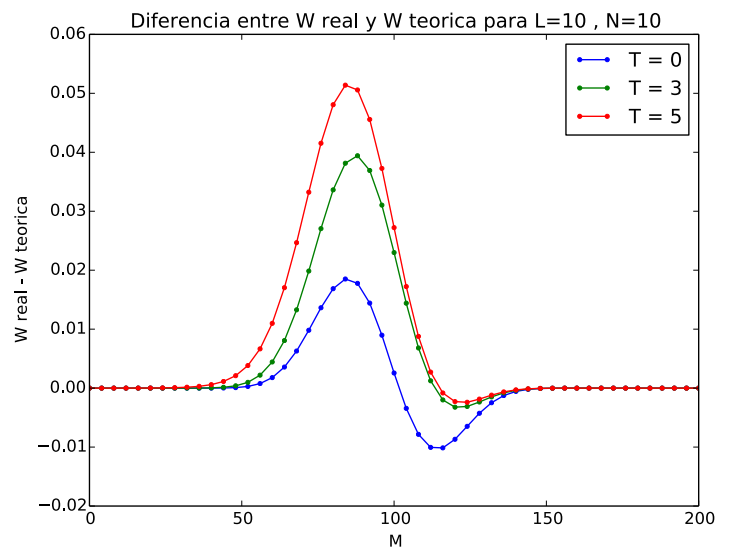
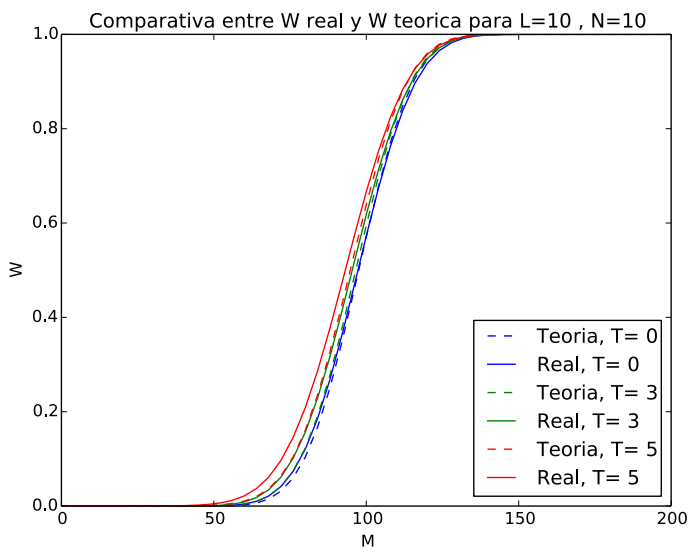


Figura 75.- Probabilidad W de aceptar un nuevo estado y diferencia entre teoría (sin colisiones) y real (con colisiones) para $L=10$, $N=10$ y temperaturas $T=[0, 3$ y $5]$

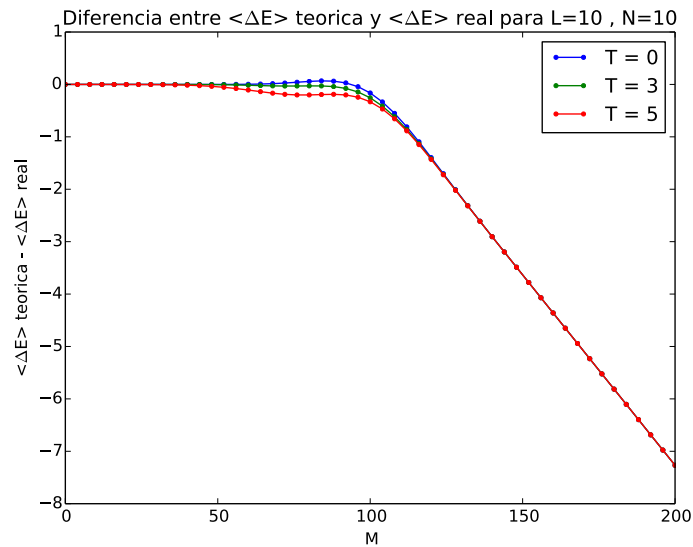
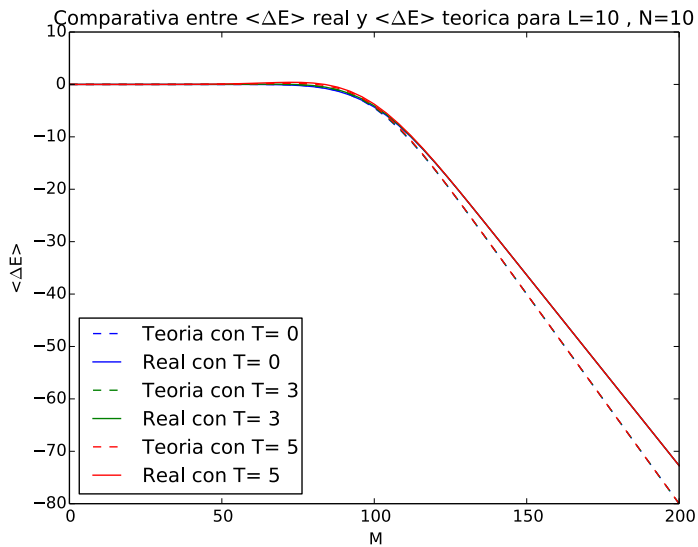


Figura 76.- Variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ y diferencia entre teoría (sin colisiones) y real (con colisiones) para $L=10$, $N=10$ y temperaturas $T=[0, 3 \text{ y } 5]$.

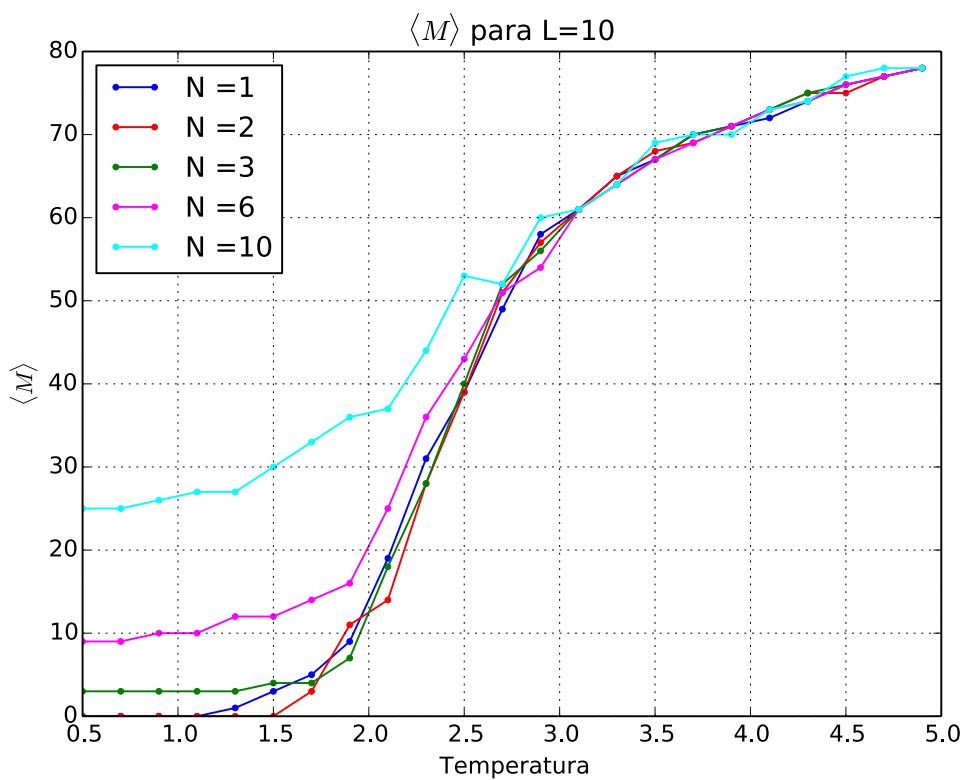


Figura 77.- $\langle M \rangle$ en función de la temperatura y N para $L=10$. Calculada a partir de la ecuación (58) y los resultados expuestos en la Figura 31..

Resultados para $L=10$, en condiciones de termalización

En este subapartado se exponen las diferencias entre el caso real (simulado) y la teoría, para la probabilidad W de aceptar un nuevo estado y la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$, en función de la temperatura T y para los distintos valores de N , pero particularizando a la $\langle M \rangle$ alrededor de la cual el sistema oscila cuando el sistema está termalizado a la temperatura dada (Figura 77).

De esta forma, en la Figura 78 y Figura 79 se cuantifica la magnitud de la diferencia que más se repite en las simulaciones, ya que es donde el sistema está termalizado.

Así, la diferencia máxima que encontramos en cuanto a la probabilidad W de aceptar un nuevo estado es de 0.025, es decir, un 2.5%, que corresponde a la temperatura $T=4.9$ y $N=10$. Además, cuanto mayor es N , mayores son las diferencias; y cuanto menor la temperatura, menores las diferencias, siendo despreciables para temperatura $T < 2.3$ para todo N .

En cuanto a las diferencias para la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$, éstas también son más acusadas cuanto mayor es N , siendo 0.0225 unidades de energía la mayor diferencia para $N=10$ y $T=3.9$. Nuevamente, las diferencias son despreciables para temperaturas $T < 2.3$ para todo N .

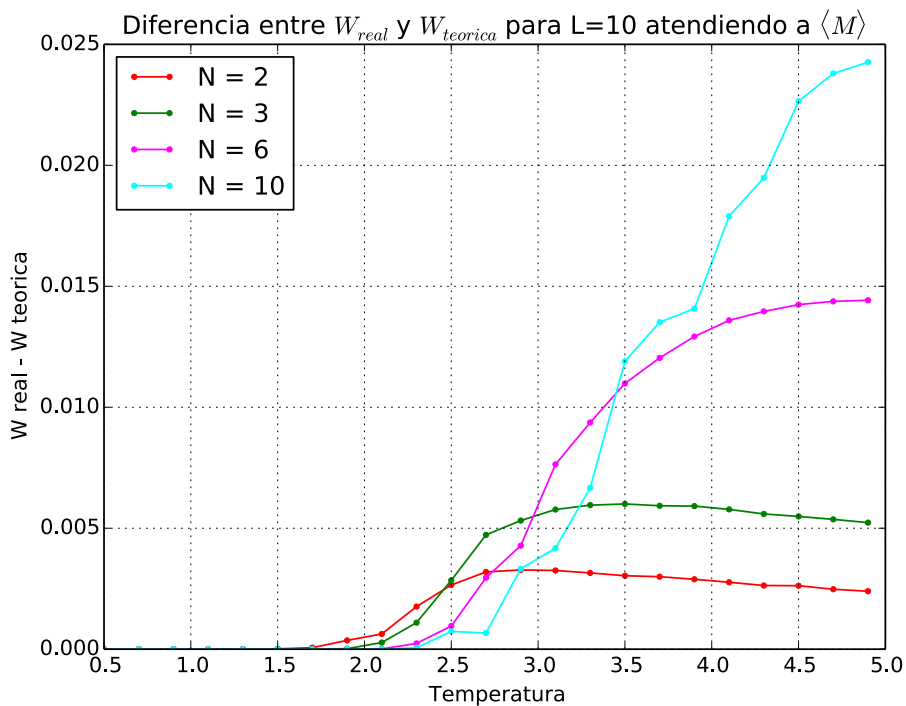


Figura 78.- Diferencia entre W real (simulada) y W teórica para $L=10$ y para el valor $\langle M \rangle$ que se tiene cuando el sistema está termalizado (Figura 77)

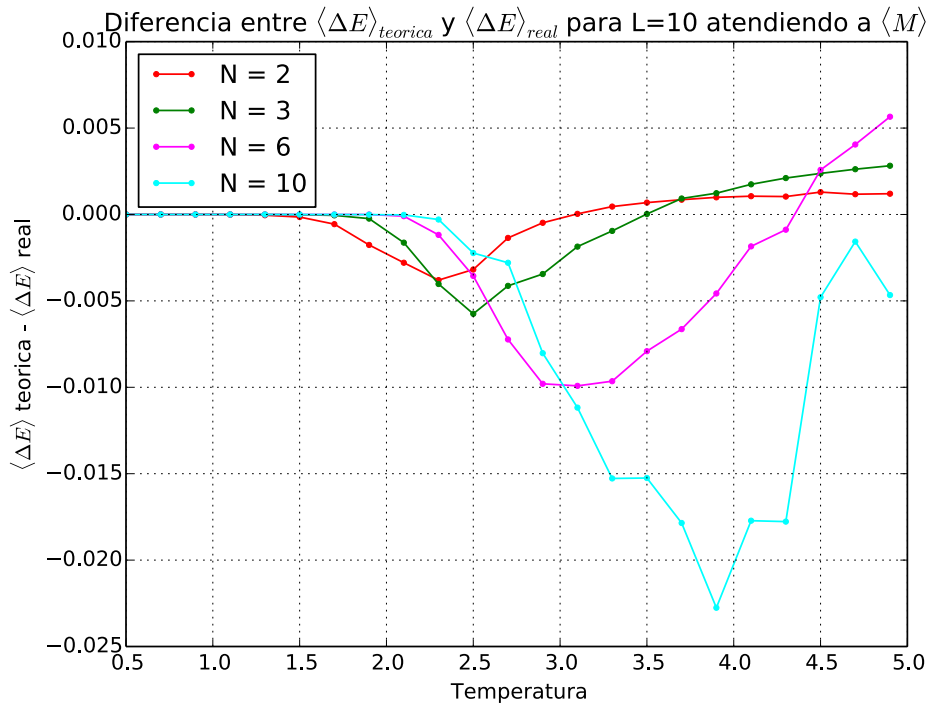


Figura 79.- Diferencia entre $\langle \Delta E \rangle$ teórica y $\langle \Delta E \rangle$ real (simulada) para $L=10$ y para el valor $\langle M \rangle$ que se tiene cuando el sistema está termalizado (Figura 77)

PROBANDO MÉTODO PARA AUMENTAR VELOCIDAD DE CONVERGENCIA

En esta sección se muestran los resultados obtenidos al tratar de aumentar la velocidad de convergencia del algoritmo Metropolis permitiendo que éste modifique el número N de espines a evaluar en cada iteración durante la ejecución de cada simulación.

Así, el método propuesto comienza con un valor $N_{inicio} > 1$ que, cumplido cierto criterio, variará a $N_{final} = 1$. El criterio seguido consiste en maximizar la variación negativa de Energía visto en el apartado "Estudio de la Variación de Energía ΔE con el valor de N ".

Con intención de aclarar este concepto, en la Figura 80 se muestra la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ en el entorno en el que se debería producir el cambio para $L = 10$, $T = 3$ comenzando con $N_{inicio} = 10$. Notar que se exponen los resultados considerando las colisiones y sin considerarlas. Las líneas verticales discontinuas marcan la energía en la que la variación de energía media comienza a ser menor (más negativa) para $N_{final} = 1$ cuando el método está descendiendo en energía. Se aprecia cómo la energía en la que se produce el cruce de las funciones es mayor cuando se consideran las colisiones que

cuando no se consideran. Para mejor entendimiento, a esta energía se le llamará E_{cambio} de ahora en adelante.

El método desarrollado y cuyos resultados se mostrarán en lo sucesivo, calcula en primer lugar E_{cambio} considerando que sí existen colisiones en las simulaciones, para la temperatura T y tamaño L en que se esté simulando. A continuación, se ejecuta el algoritmo Metropolis con $N = N_{inicio}$ hasta alcanzar el valor de energía E_{cambio} , momento en el cual se modifica el valor de N a $N_{final} = 1$. Una vez la variable N toma el valor $N_{final} = 1$, no se consideran más cambios de N , por lo que sólo se realiza un cambio en la simulación.

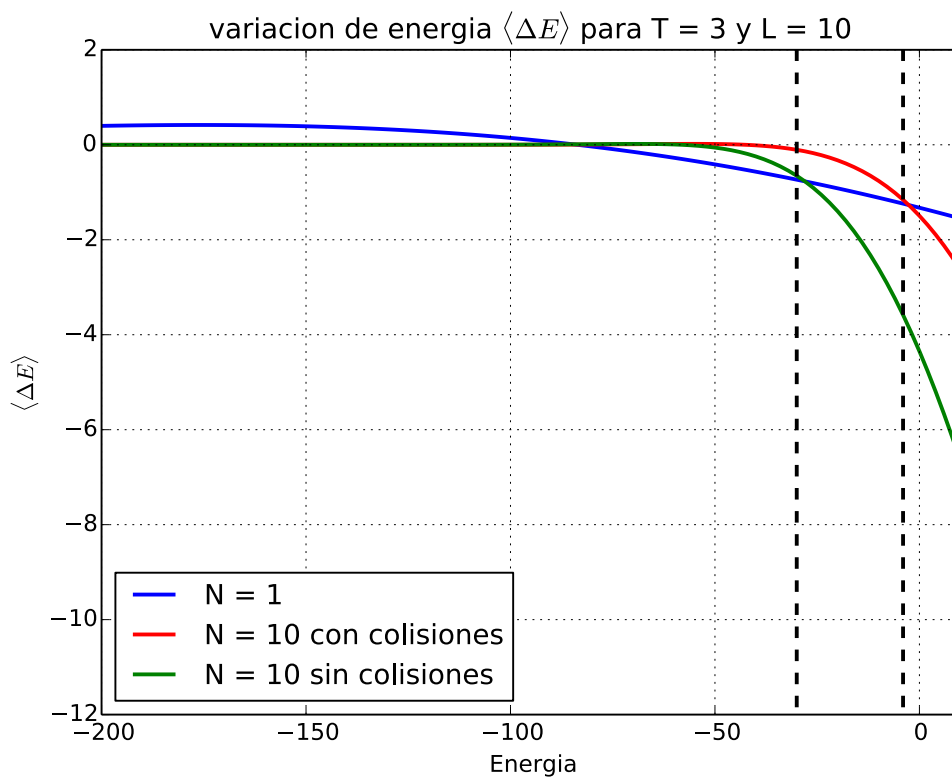


Figura 80.- Variación de energía $\langle \Delta E \rangle$ para $T=3$ y $L=10$ en función de N

Al final de esta sección se muestra la velocidad a la que descienden en energía las simulaciones con esta pequeña variación del algoritmo para tamaños $L^2 = [10 \times 10$ y $20 \times 20]$, y temperaturas $T = [0.5, 2.27$ y $3]$ con $N_{inicio} = 10$, partiendo de una distribución inicial "Tablero de Damas" (recordar que esta distribución asegura que se parte del máximo de energía). Además, se compara con los resultados que se obtienen con $N = [1$ y $10]$ en el algoritmo Metropolis sin variación.

Como se hiciese en el apartado "Termalización", la metodología seguida consiste en realizar 20 simulaciones para cada combinación de los parámetros mencionados L y T , en cada una de las cuales se almacena en qué iteración, de las 600MCS iteraciones, se alcanza por primera vez cada una de las energías a medida que se va realizando el descenso en energía. Además, este valor de iteración, se le asigna también a todas aquellas energías que, siendo menores a la energía actual, no tienen aún un valor de iteración asignado.

Los resultados se muestran con las energías en el eje Y y la primera iteración en la que se alcanza cada energía en el eje X en escala logarítmica. Además, se muestra una línea horizontal de color magenta que representa la energía E_{cambio} .

A la vista de los resultados, la observación más destacable es que, sin importar el tamaño L , los casos en que se modifica N durante la ejecución ($N=10-1$) logran converger de forma correcta, ya que converge igual que el caso $N=1$. Sólo se observa una mayor velocidad de convergencia al comienzo de la simulación, antes de alcanzar E_{cambio} , ya que para esos valores de energía la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ es mucho mayor en magnitud para $N=10$ que para $N=1$.

Sin embargo, particularizando al tamaño $L=10$, el caso $N=10-1$ cruza el umbral de energía en $\sim 10^1$ iteraciones y el caso $N=1$, lo hace en $\sim 10^2$ iteraciones, lo que significa que el caso $N=10-1$ alcanza el umbral ~ 90 iteraciones antes, número de iteraciones despreciable frente al total de $600MCS \times 10^2$ iteraciones, razón por la cual no se observa en las gráficas que el caso $N=10-1$ alcance el mínimo de energía con mayor velocidad que el caso $N=1$, a pesar de la mayor velocidad en el inicio.

Para los casos con temperatura $T = 3$ parece que el caso $N=10-1$ converge a igual velocidad que el caso $N = 10$ y ambos parece que lo hacen a los mismos valores que el caso $N=1$ y a mayor velocidad. Hay que recordar que se parte de la distribución inicial "Tablero de Damas" (máximo de energía) y la energía a la que se converge no coincide con la obtenida siguiendo el método expuesto en la sección "Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"" ya que en aquella sección se realiza una termalización mucho más lenta pues las simulaciones se ejecutan también durante 600MCS, pero se parte de la distribución obtenida al finalizar la simulación con la temperatura anterior e inmediatamente superior, 0.2 unidades mayor. No obstante, en aquella sección también se observó que con una termalización lenta las simulaciones convergían a los mismos valores de energía para cualquier N cuando la temperatura $T \geq 3$.

Por otra parte, se hace necesario comentar que se realizaron los experimentos con $N_{inicio}=10$ con la intención de buscar una diferencia notable, ya que $N=10$ es el valor más alto con el que se ha experimentado en este trabajo. Sin embargo, podría pensarse que los resultados pudieran ser diferentes si N_{inicio} fuese menor y es por esto que al final de la sección también se muestran los resultados para $L=10$ y $N_{inicio}=3$. En ellos se observa que en términos cualitativos, las conclusiones son las mismas y sólo se observa una menor velocidad de convergencia al inicio como cabía esperar ya que la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ es mayor en magnitud para $N=10$ que para $N=3$.

Así, la conclusión es que, en términos de velocidad de convergencia, no parece que merezca la pena implementar este método frente al caso $N=1$. Además, hay que tener en cuenta que cada iteración del algoritmo cuando $N>1$ es más costosa computacionalmente que las iteraciones cuando $N=1$.

No obstante, quedando más allá de los objetivos de este trabajo, podría ser interesante comprobar si las conclusiones varían o no al implementar un algoritmo en el que se fuese disminuyendo la N de forma paulatina, aunque es de esperar que las conclusiones no varíen dada la forma de la energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ en función de N vistos en la sección "Estudio de la Variación de Energía ΔE con el valor de N " pues las energías en las que se debe ir modificando la N de forma sucesiva están muy cercanas entre sí y lo único que harían es aumentar la complejidad del algoritmo a costa de un mínimo aumento de la velocidad para pocas iteraciones respecto al total de la simulación.

Por último, en la Figura 81 y Figura 82 se ha querido mostrar las energías E_{cambio} que se tendría para los distintos N_{inicio} , es decir, las energías en las que se realizaría la transición de $N = N_{inicio}$ a $N = 1$, contrastándola con las energías medias para $N=1$ obtenidas en la sección "Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"" para $L = [10 \text{ y } 20]$. Siguiendo la idea del método propuesto, esto es, maximizar la variación negativa de la energía, se haría necesario en todos los casos realizar la transición de $N = N_{inicio}$ a $N = 1$, ya que en todos los casos E_{cambio} es mayor a la energía a la que se debe converger siguiendo los resultados obtenidos para $N=1$ en la sección "Magnitudes Termodinámicas con distribución inicial "tablero de damas"".

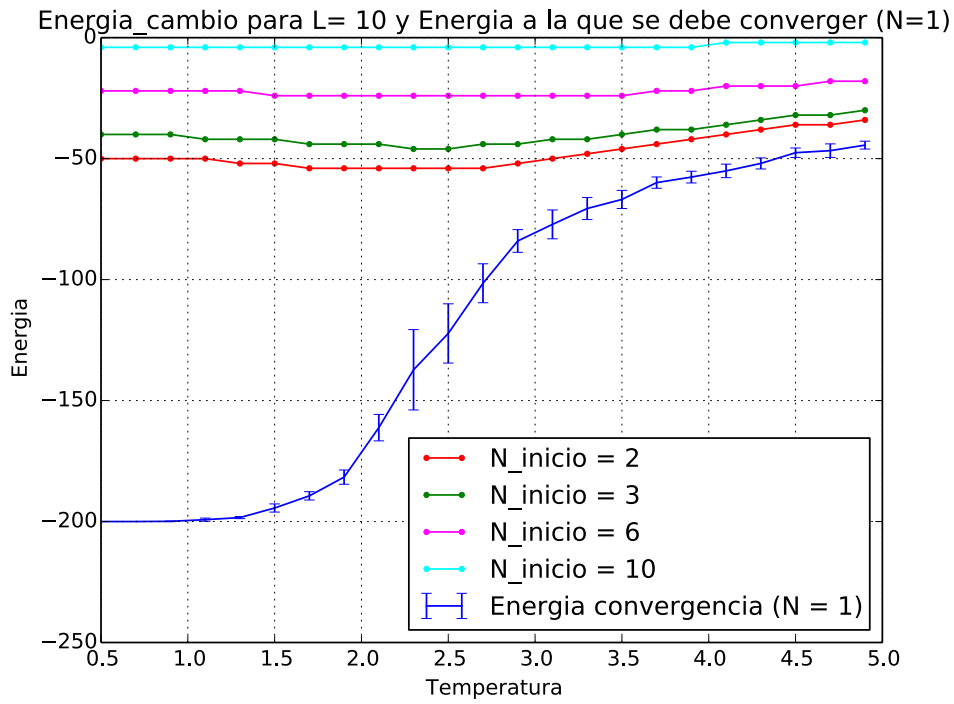


Figura 81.-Energías E_{cambio} en función de N_{inicio} para $T=[0.5 - 5]$ y $L=10$, contrastadas con la energía a la que se espera que converga la simulación con $N = 1$.

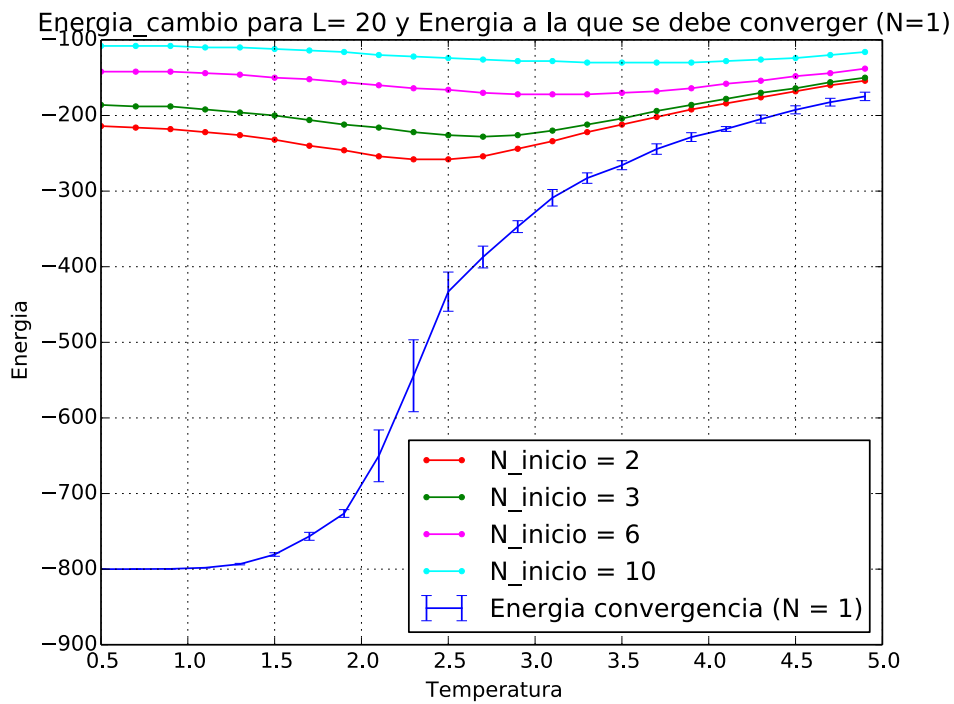


Figura 82.- Energías E_{cambio} en función de N_{inicio} para $T=[0.5 - 5]$ y $L=20$, contrastadas con la energía a la que se espera que converga la simulación con $N = 1$.

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$ y $N_{\text{inicio}} = 10$

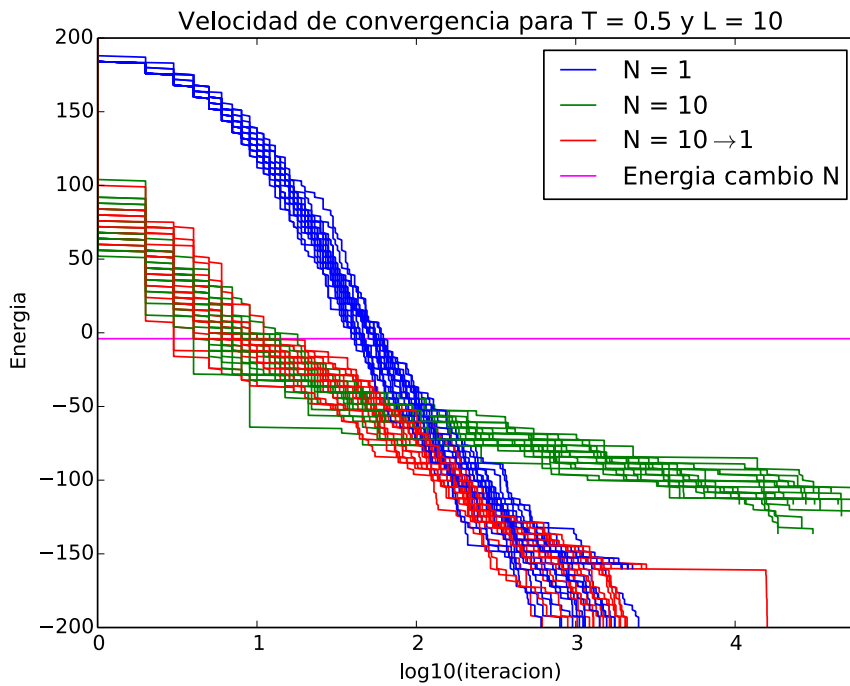


Figura 83.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=0.5$

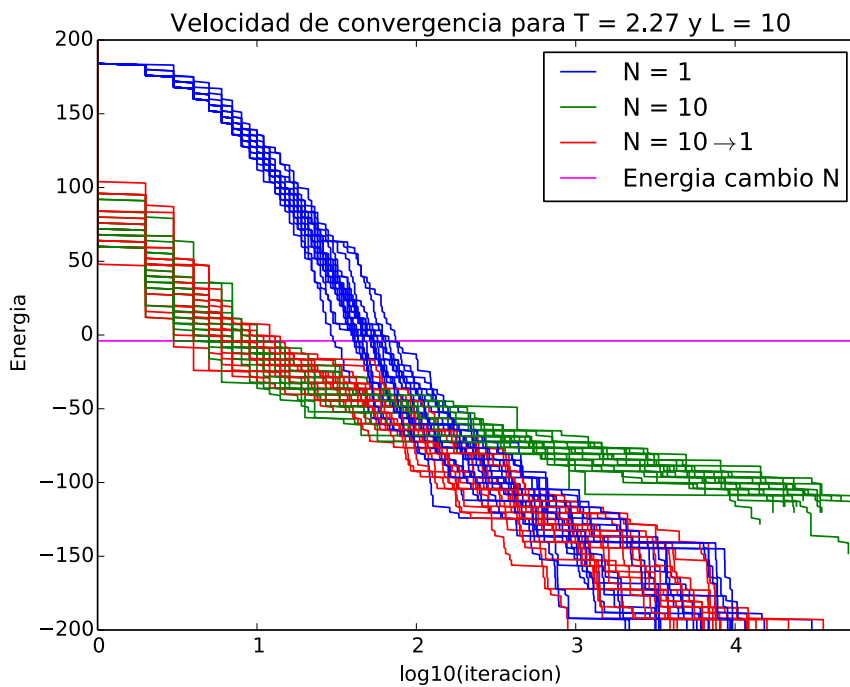


Figura 84.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=2.27$

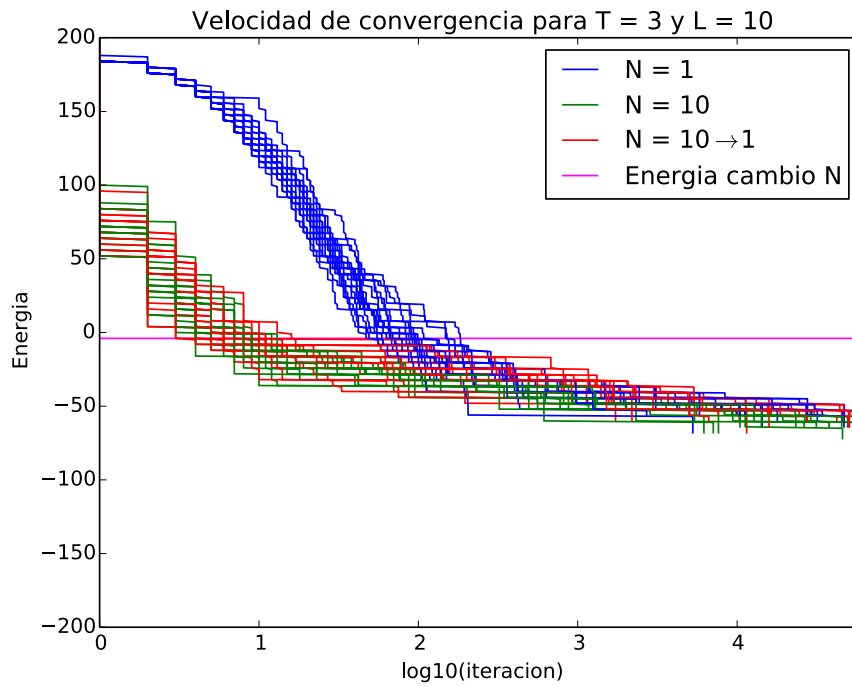


Figura 85.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=3$

Tamaño $L^2 = 20 \times 20$ y $N_{\text{inicio}} = 10$

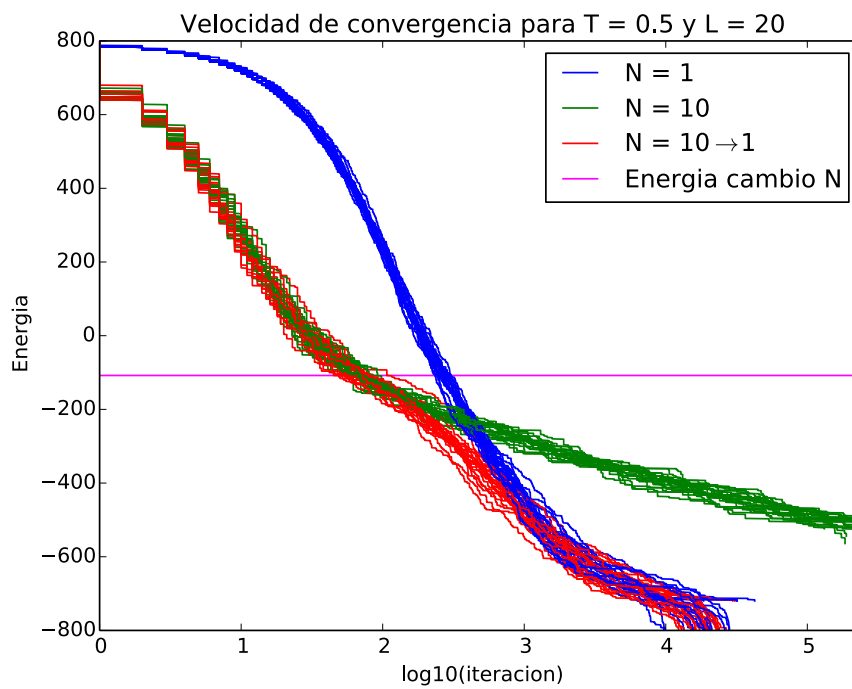


Figura 86.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=0.5$

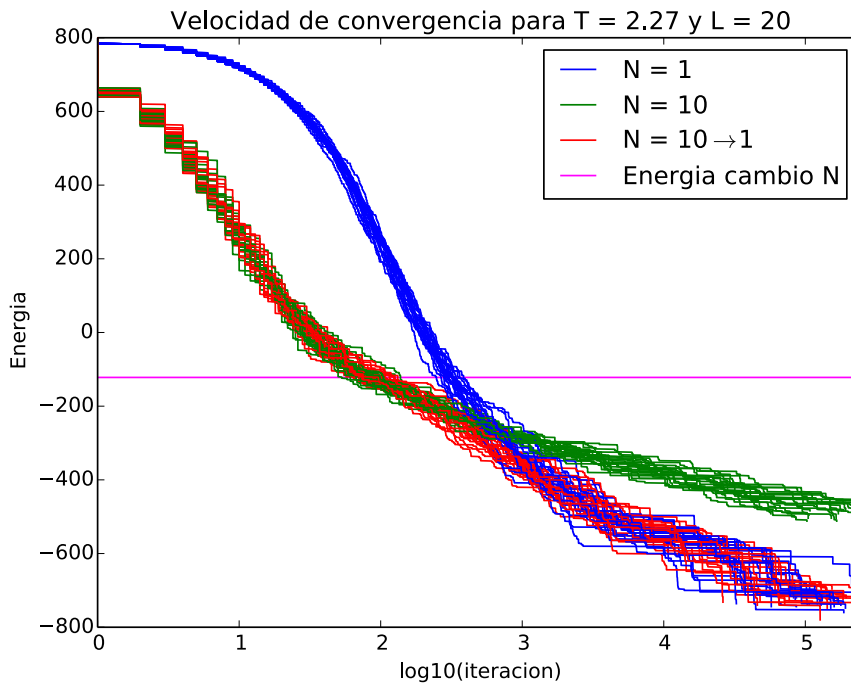


Figura 87.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=2.27$

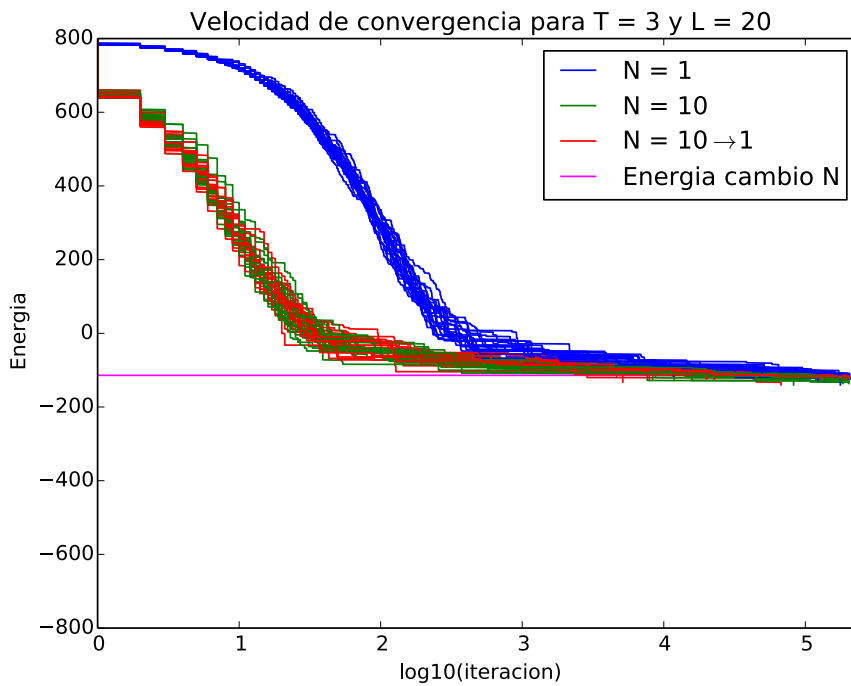


Figura 88.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=3$

Tamaño $L^2 = 10 \times 10$ y $N_{\text{inicio}} = 3$

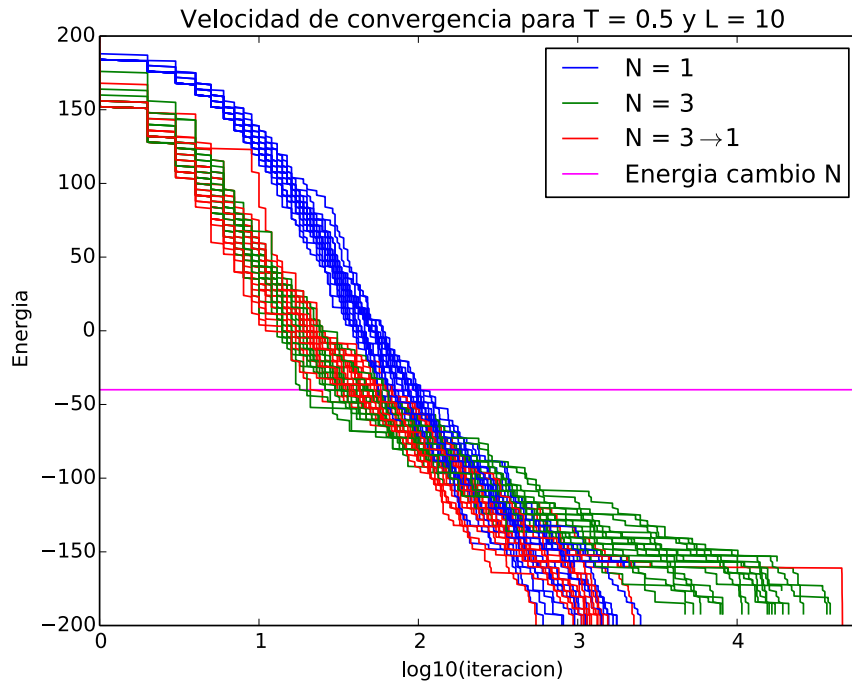


Figura 89.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=0.5$

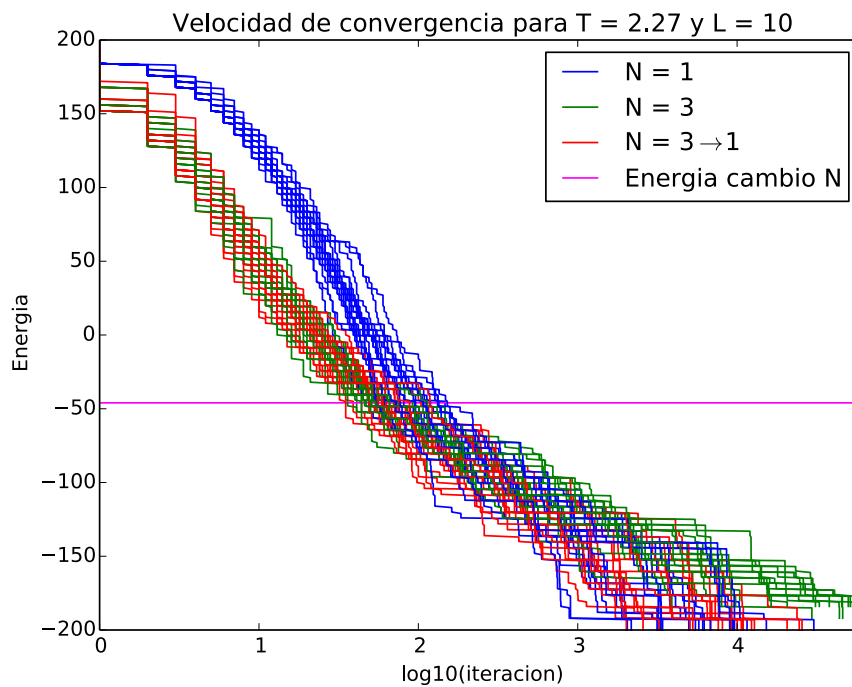


Figura 90.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=2.27$

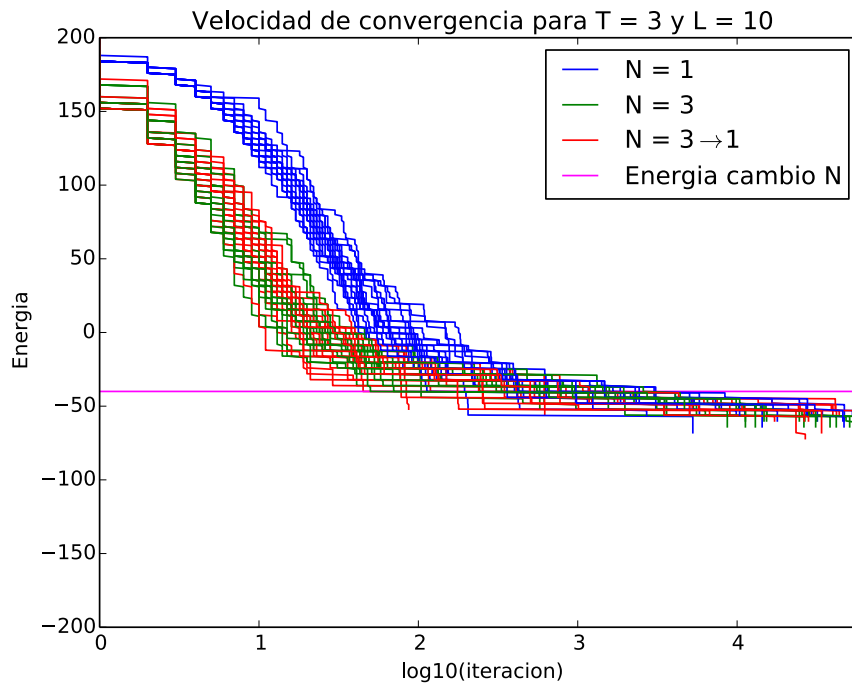


Figura 91.- Evolución de la energía en 600MCS para temperatura $T=3$

CONCLUSIONES

Este trabajo ha comenzado con el desarrollo de un marco teórico que parte de la aproximación de la función p_i (ecuaciones (37) y (42)) que cuantifica la probabilidad de que, seleccionados N espines, estos tengan en total i vecinos distintos. Ésta ha demostrado ser una buena aproximación en términos cuantitativos y sobre todo en términos cualitativos.

En términos cualitativos ha permitido entender el comportamiento del algoritmo Metropolis-Hastings en función de la temperatura T , el tamaño L del sistema y el número N de espines seleccionados que se prueba si se voltean en cada iteración.

En términos cuantitativos se ha explicado que es una buena aproximación especialmente en el entorno de las energías donde el sistema tiende a converger, pero que para las situaciones en las que el número M de vecindades distintas en toda la red es alto, la aproximación propuesta para p_i subestima los casos en que i es bajo ya que la función p_i aproxima el número de vecindades distintas suponiendo que están distribuidas de forma uniforme por la red. Sin embargo, la forma en que se distribuyen depende de consideraciones espaciales, aunque este fenómeno se ve atenuado cuanto mayor es N y L .

Se ha introducido el concepto "Colisión" para cuantificar el error que se comete en el marco teórico al suponerse que los N espines seleccionados no son vecinos entre sí cuando en las simulaciones sí se permite que sean vecinos. Esta suposición se tomó con la intención de simplificar las ecuaciones desarrolladas. El error así cuantificado demostró ser lo suficientemente pequeño para que esta suposición no fuese un problema para entender el comportamiento del algoritmo.

Con el marco teórico definido y basado en éste, se ha comparado la probabilidad W_N de aceptar un nuevo estado cuando se seleccionan N espines en una misma iteración con la probabilidad W_1^N de aceptar los N espines en N iteraciones. Se demostró que era más probable voltear los N espines en una única iteración que voltear los mismos N espines en N iteraciones sucesivas, lo que permite alcanzar estados que sería más improbable alcanzar volteando los espines de forma individual.

Sin embargo, también se estudió la variación de energía $\langle \Delta E \rangle$ en función de N , esto es, cuánto se espera que varíe la energía del sistema en cada iteración, y se demostró que la variación de energía es mayor en magnitud volteando los espines de forma individual tras N iteraciones que volteando los mismos N espines en una misma iteración. Además, cuando se trata de voltear los N espines en una iteración se demostró que hay mayores dificultades para converger a estados de baja energía. Este fenómeno se constató al mostrar las magnitudes termodinámicas calculadas en las secciones "Magnitudes Termodinámicas con Distribución Inicial "Tablero de Damas"" y "Magnitudes Termodinámicas con Distribución Inicial "Homogénea"". En esas secciones se pudo observar cómo, cuanto mayor es N , más rígido es el sistema a temperaturas bajas, alcanzándose soluciones que no son correctas, especialmente para temperaturas por debajo de la temperatura crítica T_C .

Por otra parte, también se propuso una estimación original de cuál es la energía media de un sistema ya termalizado atendiendo a la variación de energía $\langle \Delta E \rangle$ calculada siguiendo el marco teórico, ya que se presupone que el sistema oscilará alrededor de aquella energía en la que $\langle \Delta E \rangle = 0$. Esta estimación se comparó con la energía media calculada mediante la estimación de la densidad de estados $g(E)$ que existe para una energía dada del sistema, obteniéndose una coincidencia prácticamente exacta (Figura 30). Sin embargo, aunque estas estimaciones parecen ser buenas para temperaturas elevadas al compararlo con los resultados calculados mediante el algoritmo Metropolis-Hastings, no lo es para temperaturas en el rango $T = [1, 2.5]$. El estudio de estas diferencias queda más allá de los objetivos de este trabajo, aunque se cree que pueda deberse a que ambas aproximaciones no tienen en cuenta las limitaciones espaciales del modelo como se ha venido comentando.

Se ha estudiado también el tiempo de autocorrelación, definido en (62) y calculado entre las muestras de la energía media y entre las muestras de la magnetización media. La conclusión más destacable se refiere a que los tiempos de autocorrelación en el entorno de la temperatura crítica T_C , una vez el sistema se considera termalizado, son más altos cuanto mayor es el valor de N . Esto implica que, a mayor N , mayor es el número de iteraciones que se necesitan para

obtener muestras estadísticamente independientes, lo que lleva a una mayor incertidumbre en las estimaciones de valores grandes de N para un mismo número de iteraciones. Este fenómeno se explicó atendiendo a las curvas $\langle \Delta E \rangle \pm \sigma$ (Figura 62) a la temperatura $T_C = 2.27$ donde se observa una menor variación energética cuanto mayor es N , lo que significa que los cambios de estados se producirán con menor probabilidad, exhibiendo, nuevamente, una mayor rigidez cuanto mayor es N .

En cuanto al proceso de termalización, se mostró la velocidad a la que descienden en energía las simulaciones, partiendo del máximo de energía y en función de N . El comportamiento observado es coherente con el predicho al estudiar la variación de energía ΔE siguiendo el marco teórico definido. Para altos estados de energía, con muchas vecindades distintas en la red, la variación de energía es mayor cuanto mayor es N ya que en esta situación la probabilidad de aceptar un nuevo estado es alta independientemente de N .

Sin embargo, a medida que se va descendiendo en energía, aceptar nuevos estados va volviéndose más improbable hasta llegar a la situación en la que la velocidad de descenso energético es mayor cuanto menor es N ya que, como se viene comentando, cuanto mayor es N mayor es la rigidez, especialmente a temperaturas bajas, para las que no llega a converger siquiera a las energías adecuadas.

Así, cabe destacar que, la mayor velocidad al descender energéticamente para N alto y que se aprecia en las primeras iteraciones cuando la energía del sistema es alta, no puede considerarse una ventaja de las simulaciones con N alto, ya que las simulaciones con $N = 1$ alcanzan los mismos estados de energía en un número de iteraciones varios ordenes de magnitud menor al número total de iteraciones de la simulación.

Además, hay que tener en cuenta que la complejidad algorítmica de las simulaciones aumenta cuanto mayor es N , pues hay que realizar más operaciones en cada iteración al implicar un mayor número de vecindades a tener en cuenta para el cálculo de la variación de energía; y un mayor control para asegurar que se toman N espines diferentes entre sí.

Finalmente, con la intención de combinar la mayor variación de energía para estados de energía alta cuando N es alto y la mejor convergencia del algoritmo para estados de energía baja cuando N es bajo, se propone un método en el que se modifica el número N de espines a evaluar en cada iteración durante la ejecución del algoritmo.

El método consiste en partir con un valor de N alto (en el trabajo se experimenta con $N=10$ y $N = 3$), que, llegado el sistema a una energía umbral previamente calculada, se modifica a $N = 1$.

La energía umbral en la cual se altera el valor N inicial a $N = 1$ se ha definido como aquella energía en la que la variación de energía esperada $\langle \Delta E \rangle$ es mayor para $N = 1$ que para el valor N inicial. Aunque éste haya sido el criterio seleccionado para este trabajo, otros criterios son posibles, como cambiar a $N = 1$ en aquella iteración en la que se cumpla que la aportación energética individual de cada uno de los N espines en media sea mayor en magnitud que la aportación energética colectiva.

Así, el método propuesto converge bien ya que siempre termina con $N = 1$, pero no lo hace en número de iteraciones menor que el caso en que $N = 1$ durante toda la ejecución, ya que, como ya se ha comentado, la mayor velocidad que se obtiene al comienzo de la simulación con N alto, hasta alcanzar la energía umbral, sólo se produce para un número de iteraciones muy inferior al número total de iteraciones de las simulaciones.

Por último, se enumeran algunas líneas futuras que se han planteado pero que han quedado más allá de los objetivos del trabajo:

- *Estudiar el comportamiento del algoritmo, especialmente el proceso de termalización, mediante la función de correlación entre dos puntos(ecuación (24)) y el concepto de longitud de correlación vistos en el capítulo Antecedentes.*
- *Estimar p_i por método Montecarlo o analíticamente teniendo en cuenta las limitaciones espaciales de la red de espines.*
- *Relacionada con la anterior, buscar la forma de calcular $g(E)$ [ecuación (59)] teniendo en cuenta el número de configuraciones realmente posibles para un M dado siguiendo las limitaciones espaciales de la red de espines o mediante el muestreo Wang-Landau visto en el capítulo Antecedentes.*

BIBLIOGRAFIA

[LANDAU76] D. P. Landau, 1976, "Finite-size behavior of the Ising square lattice", *Physical Review B*, Volume 13, Number 7, p2997.

[LANDAU04] D. P. Landau, Shan-Ho Tsai and M. Exler, 2004, "A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling", *Am. J. Phys.* 72, 1294.

[MARTINO12] Luca Martino, Victor Pascual del Olmo, Jesse Read, 2012, "A multi-point Metropolis scheme with generic weight functions", *Statistics and Probability Letters* 82 1445-1453.

[METROPOLIS53] Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A., Teller, E., 1953. "Equations of state calculations by fast computing machines". *Journal of Chemical Physics* 21, 1087-1091.

[NEWMAN99] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Oxford University Press, Oxford, 1999.

[NIGHT96] Nightingale, M. P. and Blöte, H. W. J. 1996 "Dynamic Exponent of the Two-Dimensional Ising Model and Monte Carlo Computation of the Subdominant Eigenvalue of the Stochastic Matrix" *Phys. Rev. Lett.* 76, 4548.

[OSSOLA04] G. Ossola and Alan D. Sokal, 2004. "Dynamic critical behavior of the Swendsen-Wang algorithm for the three-dimensional Ising model", *Nuclear Physics B* 691, 259-291.

[TAMAYO90] P. Tamayo, R.C, Brower and W. Klein, 1990, "Single-Cluster Monte Carlo Dynamics for the Ising Model", *Journal of statistical Physics*, Vol. 58, Nos. 5/6.

[THIJSSSEN07] J. M. Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press, 2007.

[TROSTER05] A. Tröster and C. Dellago, 2005, "Wang-Landau sampling with self-adaptive range", Physical Review E 71, 066705.

[VOGEL13] T. Vogel, Ying Wai Li et al., 2013, "A generic, hierarchical framework for massively parallel Wang-Landau sampling", Phys. Rev. Lett. 110, 210603.