

APLICACION DE LA TEORIA DE CADENAS DE MARKOV EN EL MODELO DE ISING

por *N. R. Barraza, B. Cernuschi-Frias y F. Cernuschi*

Ftad. de Ingeniería. Univ. de Buenos Aires

RESUMEN

Se analiza la aplicación de la teoría de Cadenas de Markov en el modelo de Ising del Ferromagnetismo. Las probabilidades de transición del proceso de Markov están dadas por la probabilidad de que el spin de una partícula de un sitio de la red esté en un estado +1 o -1, condicionado al estado del spin de otra partícula vecina a la anterior, de acuerdo con una energía de interacción. Estas probabilidades se aplican sobre partículas que siguen una línea recta según uno de los ejes del cristal. La probabilidad de estados de esta cadena de partículas representa la Cadena de Markov. Este modelo permite expresar la pérdida del orden de largo alcance como una función de las probabilidades condicionales. Con este modelo se obtiene el conocido resultado de que no puede haber cambio de fase en un sistema de una dimensión, y sí puede ocurrir en un sistema de más dimensiones, ya que las probabilidades condicionales del proceso de Markov son función del número de vecinos. Las probabilidades de transición que definen el proceso de Markov se obtienen a partir de la equivalencia entre un Campo Aleatorio Markoviano y un sistema que esté gobernado por la distribución de Maxwell-Boltzmann de la Mecánica Estadística.

ABSTRACT

An application of Markov Chain Theory to the Ising Model is developed. The transition probabilities of the Markov Process are given by the probability of a spin taking a value of +1 or -1, conditioned to the probability of the value +1 or -1 of the previous neighbour. The spin of the neighbours are related by an interaction energy. The transition probabilities are applied to particles on a straight line corresponding to one of the principal axis of the crystal. The Markov Chain probability law is given on the spins of the particles on the imaginary straight line. The model gives a phase change, and formulation of the loss of the long range order as a function of the conditional probabilities. This model results a good approximation and it is not a unidimensional system, because the conditional marginal probabilities are different according to the number of nearest neighbours, which depends on the dimension. This is in agreement with the well known result that there is no phase change in one dimension, opposite to more dimension systems. The transition probabilities are obtained using the equivalence between Random Markov Fields and Gibbs distributions.

INTRODUCCION

El modelo de Ising [12] resulta adecuado para explicar el ferromagnetismo y muestra la existencia de una temperatura crítica, más allá de la cual la sustancia se vuelve paramagnética. Existen ciertas aproximaciones para encontrar la temperatura crítica del modelo, como las de Bragg-Williams [4] o la de Bethe [3]. Una solución exacta ha sido encontrada para el modelo bidimensional por L. Onsager [14]. Todas muestran que no

existe un estado ordenado para el caso unidimensional. En el presente trabajo proponemos un nuevo enfoque del modelo de Ising, con la teoría de Cadenas de Markov.

Este tipo de análisis ha sido desarrollado previamente para un gas que evoluciona en el espacio de las fases [6] [7]. Tal sistema constituye un componente de un "ensemble" canónico. En el trabajo mencionado no se consideraron cambios de fase, ya que se pretendía salvar los inconvenientes del Teorema de Liouville.

En el presente trabajo aplicamos la teoría de Cadenas de Markov a los estados del spin de las partículas, las cuales se consideran como elementos constituyentes de un "ensemble" microcanónico. Con el siguiente modelo se demuestra que en una dimensión no puede existir cambio de fase, lo cual es diferente del caso de más dimensiones ya que la expresión de las probabilidades condicionales depende del número de vecinos, lo cual depende también de la dimensión del sistema.

Para determinar las probabilidades de transición, utilizamos un importante teorema [2] que expresa la equivalencia de Campos Aleatorios Markovianos y sistemas gobernados por la distribución de Maxwell-Boltzmann. Tal equivalencia permite trabajar indistintamente con un modelo de Markov o con los resultados de la Mecánica Estadística. Eligiendo en cada caso el que resulte más apropiado, como ha sido realizado en varios trabajos [9] [10].

Desarrollo

En el modelo de Ising se considera un sistema de partículas fijas en sitios de una red. Asociado con cada una, existe una variable de spin s , que puede tomar valores 1 o -1. Es decir spin hacia arriba o hacia abajo.

La energía de una configuración del sistema se expresa:

$$E_{\{s\}} = \sum_{\langle ij \rangle} J s_i s_j + B \sum_i s_i \quad (1)$$

donde J es la energía de interacción dada por $J = \epsilon/kT$, T es la temperatura y k la constante de Boltzmann, B es el campo magnético externo, $\{s\}$ significa una configuración en particular, y $\langle ij \rangle$ significa suma sobre los vecinos más cercanos.

En nuestro modelo consideramos el estado s de las partículas situadas sobre una línea recta que siga uno de los ejes del cristal. Tal modelo resulta ser causal, ya que utilizamos la probabilidad marginal del estado de una partícula respecto del estado de la partícula anterior sobre la línea recta imaginaria.

A pesar que utilizamos un modelo de contagio que sigue una línea recta, esto es di-

ferente de un sistema unidimensional, como se verá, ya que el cálculo de la probabilidad marginal es distinto de acuerdo con el número de vecinos.

De este modo, en la Cadena de Markov establecida sobre las partículas en la línea recta imaginaria quedan determinadas las probabilidades de transición:

$P_{1/-1}$ Probabilidad de que una partícula esté en estado +1 dado que la anterior está en estado -1.

$P_{-1/1}$ Probabilidad de que una partícula esté en estado -1 dado que la anterior está en estado +1.

$$P_{-1/1} = 1 - P_{1/-1} \quad (2)$$

$$P_{1/1} = 1 - P_{-1/-1}$$

De esta manera, de acuerdo con la teoría de Cadenas de Markov [13], la probabilidad de que una partícula n , alejada n sitios de una partícula tomada como central, esté en estado 1 dado que la partícula central está en estado 1 se expresa:

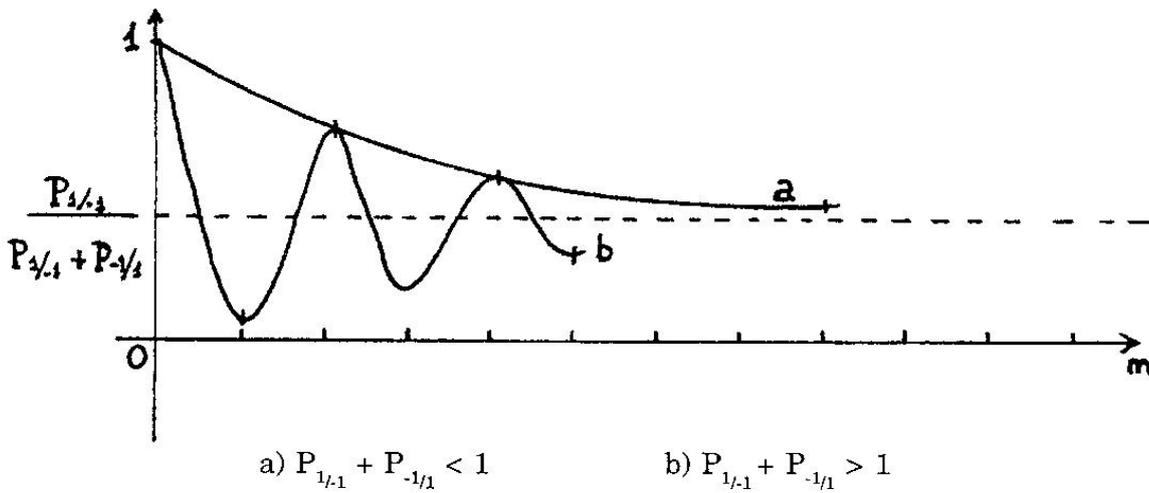
$$P(S_n = 1/s_{0=1}) = \frac{P_{1/-1}}{P_{1/-1} + P_{-1/1}} - \frac{P_{-1/1}}{P_{1/1} + P_{-1/-1}} [1 - P_{1/1} - P_{-1/1}] \quad (3)$$

De esta importante expresión, surgen distintos resultados de acuerdo al valor de las probabilidades de transición $P_{1/-1}$ y $P_{-1/1}$ como se muestra en el gráfico de la página siguiente.

La curva b) del gráfico es similar a la función de distribución radial obtenida para líquidos [1] [8], para la cual el presente modelo podría ser ajustado.

Ambas curvas muestran como es el orden de corto alcance, en la curva a) hay una tendencia a que los estados de partículas vecinas sean del mismo signo. La curva b) muestra una tendencia de los estados de partículas vecinas a ser de distinto signo.

De acuerdo con este modelo, el orden de corto alcance se perdería cuando:



$$\begin{aligned}
 P_{-1/1} &= P_{-1} \\
 P_{1/1} &= P_1
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

$$P_{\{s\}} = \frac{e^{-\sum_{\langle ij \rangle} J_{si} s_j}}{q}
 \tag{8}$$

el orden de largo alcance está determinado por:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(s_n = 1 / s_0 = 1) = \frac{P_{1/1}}{P_{1/1} + P_{-1/1}}
 \tag{5}$$

consecuentemente, el orden de largo alcance se pierde cuando la expresión 5 es igual a 1/2, es decir:

$$\frac{P_{-1/1}}{P_{1/1}} = 1
 \tag{6}$$

De esta manera, de acuerdo con nuestro modelo, el estado de la sustancia se determina conociendo las probabilidades:

$$P_{-1/1}, P_{1/1}, P_{-1}, P_1
 \tag{7}$$

las cuales dependen de la temperatura y del número de vecinos.

En lo que sigue, hacemos el cálculo de las probabilidades mencionadas en 7.

De acuerdo con la Mecánica Estadística y la expresión de la energía 1, la probabilidad que el sistema esté en un estado $\{s\}$ resulta: (en lo que sigue consideramos nulo el campo magnético exterior, $B = 0$).

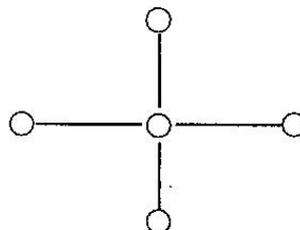
siendo q la función partición dada por:

$$q = \sum_{\langle \{s\} \rangle} e^{-\sum_{\langle ij \rangle} J_{si} s_j}
 \tag{9}$$

donde $\langle \{s\} \rangle$ significa suma sobre todas las configuraciones posibles.

De este modo podemos analizar el estado de un subsistema compuesto por una partícula y sus vecinos más cercanos.

Esquemáticamente, si se considera una red cuadrangular en dos dimensiones, el sistema estaría representado por:



donde la partícula del centro es la partícula en cuestión, y tiene 4 vecinos más cercanos. En lo sucesivo, indicaremos con z el número de vecinos más cercanos.

De acuerdo con el teorema de equivalencia entre Campos Aleatorios de Markov y la

Mecánica Estadística, la probabilidad de que el subsistema esté en un estado particular es equivalente a la probabilidad conjunta de que la partícula central y sus vecinas estén en dicho estado.

Consecuentemente, la energía del subsistema, cuando la partícula central está en un estado s_i y K de sus z primeras vecinas estén en estado -1 , es:

$$E = J s_i (z - 2k) \quad (10)$$

por lo tanto, la probabilidad de que el subsistema esté en el estado antes mencionado se expresa:

$$P_{|s_i|} = \binom{z}{k} e^{-J s_i (z - 2k)} \theta^K \quad (11)$$

dado que existen $\binom{z}{k}$ combinaciones de elegir k vecinos entre z .

Esta expresión es utilizada en [11] para desarrollar la aproximación de Bethe, e introduce el factor θ para tener en cuenta la interacción del resto de la red, y se justifica por ser un factor análogo a la fugacidad.

De esta manera, eligiendo uno de los z vecinos como el anterior a la partícula central, la probabilidad conjunta de que la partícula central esté en el estado s_i y la anterior esté en estado -1 se expresa:

$$P_{s_i, -1} = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} \frac{k}{z} e^{-J s_i (z - 2k)} \theta^K \quad (12)$$

el factor k/z se debe a que hay una probabilidad k/z de que el vecino anterior a la partícula central sea uno de los k vecinos en estado -1 .

Análogamente, la probabilidad de que la partícula central esté en un estado s_i y la partícula anterior esté en estado 1 se expresa:

$$P_{s_i, 1} = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} \frac{z - k}{z} e^{-J s_i (z - 2k)} \theta^K \quad (13)$$

Calculando las sumas correspondientes, las expresiones 12 y 13 se expresan:

$$P_{s_i, -1} = \frac{1}{q} e^{J s_i} \theta (e^{-J s_i} + \theta e^{J s_i})^{z-1} \quad (14)$$

$$P_{s_i, 1} = \frac{1}{q} e^{-J s_i} \theta (e^{-J s_i} + \theta e^{J s_i})^{z-1} \quad (15)$$

De 14 y 15, se calcula P_{s_i} como:

$$P_{s_i} = P_{s_i, -1} + P_{s_i, 1}$$

resultando:

$$P_{s_i, 1} = \frac{1}{q} (e^{-J s_i} + \theta e^{J s_i})^z \quad (16)$$

El parámetro θ se calcula teniendo en cuenta que según la expresión 16 resulta:

$$P_{-1} = \frac{1}{q} (e^J + \theta e^{-J})^z \quad (17)$$

lo cual también debería poder obtenerse sumando 14 para ambos estados de S_i

$$P_{-1} = \frac{1}{q} \theta e^J (e^{-J} + \theta e^J) + \frac{1}{q} \theta e^{-J} (e^{-J} + \theta e^J) \quad (18)$$

Igualando 17 y 18 se obtiene el valor de θ :

$$\theta = \frac{(e^J + \theta e^{-J})^{z-1}}{(e^{-J} + \theta e^J)^{z-1}} \quad (19)$$

En [11] se analiza la expresión 19 y se observa que $\theta = 1$ siempre es solución, además, si θ_0 es solución, entonces $1/\theta_0$ también es solución.

En [11], se demuestra que cuando la derivada del término de la derecha de la expresión 19 es mayor que 1, $\theta = 1$ es la única solución, y ésta corresponde a la ausencia de ferromagnetismo.

La temperatura a la cual se obtiene la condición expresada previamente es:

$$J_c = -\frac{1}{2} \log \frac{Z}{Z-2} \quad (20)$$

es decir:

$$T_c = -\frac{2\varepsilon}{K \log \frac{Z}{Z-2}} \quad (21)$$

de 21 se observa que existe una temperatura crítica cuando $\epsilon < 0$, es decir cuando la energía es atractiva, y cuando $z > 2$. Esta resulta ser la aproximación de Bethe del modelo de Ising.

De acuerdo con nuestro modelo, nos interesa calcular la temperatura a la cual se pierde el orden de largo alcance, es decir la condición expresada en 6

$$\frac{P_{-1/1}}{P_{1/1}} = 1$$

$P_{-1/1}$ se obtiene de 15 y 16 como:

$$P_{1/1} = \frac{P_{1,1}}{P_{-1}}$$

análogamente, $P_{1/1}$ se obtiene como:

$$P_{1/1} = \frac{P_{1,1}}{P_{-1}}$$

resultando:

$$P_{-1/1} = \frac{\theta e^J}{e^{-J} + \theta e^J} \quad (22)$$

$$P_{1/1} = \frac{\theta e^J}{e^J + \theta e^{-J}} \quad (23)$$

de 22 y 23, y teniendo en cuenta 19, resulta:

$$\frac{P_{1/1}}{P_{-1/1}} = \theta^{1/z-1}$$

de 24, resulta que el orden de largo alcance, de acuerdo con nuestro modelo, se pierde cuando $\theta = 1$, es decir, coincide con la temperatura de Bethe. El resultado obtenido es coherente con el hecho de haber utilizado para el cálculo de las probabilidades 7 las fórmulas de la aproximación de Bethe, lo cual muestra que el modelo no introduce una nueva aproximación.

Se puede demostrar, aplicando las fórmulas 4, que con este tipo de interacción no existe temperatura a la cual se pierde el orden de corto alcance.

Por otra parte, aplicando leyes de teoría de probabilidad elemental, se demuestra que si

$$P_{-1/1} = P_{1/1}$$

entonces

$$P_1 = P_{-1} = \frac{1}{2}$$

lo cual demuestra que si no hay orden de largo alcance, no existe preferencia por spin hacia arriba o spin hacia abajo, lo cual está de acuerdo con el fenómeno físico.

Conclusiones

El presente modelo, cuyo resultado es la fórmula 3 resulta adecuado para analizar cambios de fase con pérdida de orden de corto y largo alcance. La fórmula 3 es general, y válida para cualquier tipo de interacción entre partículas, la cual determina las probabilidades de transición.

Por ejemplo, proponemos que el presente modelo puede ser aplicado a un líquido, si se consideran como estados posibles de un sitio de la red, el de ocupado $S_i = 1$, o vacante $S_i = 0$. Lo cual está de acuerdo con la teoría de agujeros en líquidos [5]. De esta manera, introduciendo la expresión adecuada de θ , la presión y el volumen, podría obtenerse teóricamente la función de distribución radial para un líquido, de acuerdo con la curva b de la fig. 2, lo cual será desarrollado en un futuro trabajo.

Además, todavía puede mejorarse el modelo si en lugar de considerar la probabilidad condicional del estado de una partícula respecto del estado de la anterior, se condiciona respecto del estado del conjunto de partículas situadas de un lado de la partícula central, a partir de un plano que contiene a dicha partícula.

Referencias

1. BARKER, J. A. "Lattice Theories of the Liquid State", The International Encyclopaedia of Physical Chemistry and Chemical Physics, vol. 1, Macmillan Co. 1963.
2. BESAG, J. "Spatial interaction and the statistical

- analysis of lattice systems", *J. Roy. Stat. Soc. B*, vol. 36, pp. 192-236. 1974.
3. BETHE, H. A. *Proc. Roy. soc. (London)*, A150. 552, 1935.
 4. BRAGG, W. L. and WILLIAMS, E. J., *Proc. Roy. Soc., A* 145, 699. 1934.
 5. CERNUSCHI, F. and EYRING, H. J. *Chem. Phys.*, 7, 547, 1939.
 6. CERNUSCHI, F. "Consideraciones Críticas de los fundamentos de la Mecánica Estadística, Nueva Solución al Problema Ergódico", Academia Nacional de Ciencias de Buenos Aires. 1988.
 7. CERNUSCHI-FRIAS, B. y CERNUSCHI, F. "Aplicación de la Teoría de Cadenas de Markov al Equilibrio Termodinámico de un Gas", Academia Nacional de Ciencias de Buenos Aires. 1988.
 8. EYRING, H., HENDERSON, D., STOVER, B. J. and EYRING, E. M. "Statistical Mechanics and Dynamics", J. Wiley & Sons. 1982.
 9. GEMAN, S. and GEMAN, D. "Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of Images" *IEEE Trans. Patt. Anal. Machine. Int.*, vol. PAMI-6, no. 6, pp. 721-741, Nov. 1984.
 10. HEBERT, T. J. and LEAHY, R. "Statistic-Based MAP Image Reconstruction from Poisson Data Using Gibbs Priors". *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 40, no. 9, Sep. 1992.
 11. HUANG, K. "Statistical Mechanics", John Wiley & Sons 1963.
 12. ISING, E. Z. *Phys.*, 31, 253 1925.
 13. LARSON, H. J. and SHUBERT, B.O. "Probabilistic Models in Engineering Sciences", John Wiley & Sons. 1979.
 14. ONSAGER, L., *Phys. Rev.*, 65, 117. 1944.

Manuscrito recibido en julio de 1993