

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
SFI 5704 - Mecânica Estatística - 2021-1

Prof. Leonardo Paulo Maia

Tarefa computacional - Implementação do algoritmo
de Metropolis para simular o modelo de Ising

Veja as aulas 30 e, principalmente, 31.

Um método de Monte Carlo com cadeia de Markov consiste em uma estratégia de amostragem baseada na evolução temporal numérica de uma cadeia de Markov. Esta é construída para que seu (único) estado estacionário seja a particular distribuição de probabilidade que se deseja amostrar. No caso da simulação de um modelo de Ising em equilíbrio com um banho térmico, essa é a distribuição de Gibbs.

O algoritmo de Metropolis adaptado para simular o modelo de Ising é, provavelmente, o mais simples método de Monte Carlo com cadeia de Markov aplicado a um sistema físico que se pode conceber, pois é muito fácil verificar que as 3 condições suficientes para garantir a convergência ao estado desejado (dinâmica Markoviana, ergodicidade e balanço detalhado) são satisfeitas.

Cada sítio é ocupado por um *spin*, $S_i \in \{-1, +1\}$. Em geral, o Hamiltoniano de Ising é expresso como

$$\mathcal{H}(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i.$$

Considere $H = 0$, $k_B = 1$ e $J = 1$ (ou seja, a temperatura será medida em unidades de J).

Considere uma rede regular euclídeana bidimensional $L \times L$, com **condições periódicas de contorno**. No limite termodinâmico, isso não será essencial para o resultado, você também poderia usar condições livres de contorno. De qualquer forma, você precisará descrever precisamente “quem é vizinho de quem” e essa exigência costuma causar alguma dificuldade a quem nunca estudou numericamente um sistema espacialmente distribuído. Uma alternativa interessante é investigar o **resto** da divisão das coordenadas de um certo *spin* por L para saber se o *spin* em questão encontra-se em uma aresta ou vértice do seu “quadrado que será fechado como um toro”.

As curvas dinâmicas devem ser expressas (prática usual) em termos do tempo de Monte Carlo. Cada passo de Monte Carlo corresponde ao número de iterações para que cada *spin* “flipe” uma vez, em média. Para um sistema de $L \times L$ *spins* e uma dinâmica de *single spin flip*, como Metropolis, um passo de Monte Carlo corresponde a exatamente $L \times L$ iterações. Explicitamente, se $L = 100$, um tempo máximo t^{END} de $\approx 10^4$ passos de Monte Carlo corresponde a 10^8 iterações básicas (tentativas de “flipagem”).

1 Tarefa 1: dinâmica da magnetização e da energia

Escolha $L = 100$, uma temperatura T , $2 < T < 3$, e um tempo máximo t^{END} ($\approx 10^4$ passos de Monte Carlo ou 10^8 “passos temporais elementares”).

- (i) Escolha um estado inicial particular, atribuindo o valor $+1$ para cada *spin*. Isso corresponde a $M = L \times L$ e $E = -2 \cdot L \times L$ (por quê?). Embora a condição inicial não deva alterar o estado estacionário a ser obtido, essa estratégia (que corresponde à solução para $T = 0$) é simples por não requerer o sorteio de números pseudo-aleatórios.
- (ii) $t \leftarrow 0$
- (iii) Sorteie um sítio, i^* , uniformemente. (Mas, principalmente longe do ponto crítico, o resultado estacionário não deve ser alterado se você “varrer a rede” deterministicamente.)
- (iv) Determine a variação na energia $\Delta\mathcal{H}$ (está nas notas de aula) e a variação na magnetização ΔM (calcule antes!) do sistema caso i^* venha a ser “flipado”. Note que você pode obter uma expressão simples para essas grandezas envolvendo apenas os vizinhos diretos de i^* . **Você não precisa varrer toda a rede para calcular as variações da energia e da magnetização do sistema!!!**
- (v) Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, a transição proposta é aceita com certeza: $S_{i^*} \leftarrow -S_{i^*}$, $E \leftarrow E + \Delta\mathcal{H}$ e $M \leftarrow M + \Delta M$. Se $\Delta\mathcal{H} \geq 0$, a transição proposta é aceita com probabilidade $p_* \equiv \exp(-\Delta\mathcal{H}/T)$ e são realizados todos os mesmos *updates* da frase anterior. Se a transição não for aceita (ou seja, você sorteou um pseudo-aleatório uniformemente entre 0 e 1 que foi *maior* do que p_*), nada ocorre.
- (vi) Definindo $N = L \times L$, $u = E/N$ e $m = M/N$, salve (t, m) e (t, u) para posterior visualização da dinâmica temporal da magnetização e da energia por partícula. Porém, na hora de realmente visualizar essa dinâmica, você não precisará de toda essa informação: para suavizá-las, as curvas dinâmicas normalmente são expressas em termos do tempo de Monte Carlo, andando de $L \times L$ no tempo.
- (vii) $t \leftarrow t + 1$ (este é o tempo “elementar”)
- (viii) Enquanto $t < t^{\text{END}}$, retornar ao item (iii).

2 Tarefa 2: observar a transição de fase

O objetivo agora é construir um gráfico da média do valor absoluto da magnetização **de equilíbrio** por partícula em função da temperatura (tenha isso em mente ao estudar o algoritmo abaixo). **Seu gráfico não será dinâmico!** Com base na observação dos resultados da tarefa1, da dinâmica temporal da magnetização e da energia por partícula para **várias temperaturas** no intervalo $[2, 3]$, você deve ser capaz de estimar um *único* período transiente t^{TRANS} , com $t^{\text{TRANS}} < t^{\text{END}}$, tal que as curvas $m \times t$ e $u \times t$ sugiram que o estado estacionário tenha sido obtido para $t > t^{\text{TRANS}}$ para todas as temperaturas do seu estudo. Escolha $T_i = 2$, $T_f = 3$ e $\delta T = 0.01$. Buscamos um gráfico de magnetização de equilíbrio em função da temperatura.

- (i) Escolha um estado inicial particular, atribuindo o valor +1 para cada *spin*. Isso corresponde a $M = L \times L$ e $E = -2 \cdot L \times L$.
- (ii) $T \leftarrow T_i$
- (iii) $t \leftarrow 0$ e $avM \leftarrow 0$
- (iv) Sorteie um sítio, i^* , uniformemente.
- (v) Determine a variação na energia $\Delta\mathcal{H}$ e a variação na magnetização ΔM do sistema caso i^* venha a ser “flipado”.
- (vi) Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, a transição proposta é aceita com certeza: $S_{i^*} \leftarrow -S_{i^*}$, $E \leftarrow E + \Delta\mathcal{H}$ e $M \leftarrow M + \Delta M$. Se $\Delta\mathcal{H} \geq 0$, a transição proposta é aceita com probabilidade $\exp(-\Delta\mathcal{H}/T)$ e valem todos os *updates* da frase anterior. Se a transição não for aceita, nada ocorre.
- (vii) Se $t > t^{\text{TRANS}}$, $avM \leftarrow avM + |M|$
- (viii) $t \leftarrow t + 1$
- (ix) Enquanto $t < t^{\text{END}}$, retornar ao item (iv).
- (x) $avM \leftarrow avM/[N(t^{\text{END}} - t^{\text{TRANS}})]$
- (xi) Salve (T, avM) para posterior visualização do parâmetro de ordem *versus* o parâmetro de controle.
- (xii) $T \leftarrow T + \delta T$
- (xiii) Enquanto $T < T_f$, retornar ao item (iii).