

## Cálculo de Monte Carlo para o modelo de Ising

IFUSP - Mecânica Estatística - 2023

Na mecânica estatística em equilíbrio nós estamos interessados no cálculo de médias (canônicas) da forma

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_C A(C) \exp[-\beta \mathcal{H}(C)]}{\sum_C \exp[-\beta \mathcal{H}(C)]}, \quad (1)$$

em que a soma é sobre todas as configurações microscópicas de um sistema associado à hamiltoniana  $\mathcal{H}$ . Por exemplo, no caso do modelo de Ising numa rede de  $N^d$  sítios, em  $d$  dimensões, temos que fazer uma soma sobre  $2^{N^d}$  configurações microscópicas, que se torna numericamente impraticável à medida que  $N$  aumenta.

A ideia do “método de Monte Carlo” consiste em obter uma estimativa para  $\langle A \rangle$  através de uma soma muito mais simples, uma média (aritmética) sobre um número relativamente pequeno, mas devidamente selecionado, de “configurações microscópicas representativas do equilíbrio”,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i. \quad (2)$$

Mais adiante podemos discutir as justificativas desse cálculo, as circunstâncias em que é possível substituir o valor canônico esperado da grandeza  $A$  pela média aritmética de  $A$  sobre  $M$  “configurações representativas”. Por enquanto vamos dar uma prescrição para a escolha dessas configurações representativas e fazer uma aplicação do método de Monte Carlo para calcular (numericamente) algumas grandezas termodinâmicas associadas ao modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada. O método de Monte Carlo foi utilizado pioneiramente em um problema de física estatística por Metropolis e colaboradores [Nicolas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller e Edward Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087, 1953], muito antes do uso corriqueiro de microcomputadores!!!

**A. Ferromagneto de Ising.** O ferromagneto de Ising na rede quadrada, a campo nulo, é dado pelo hamiltoniano de spin

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (3)$$

em que  $J > 0$ ,  $\sigma_i = \pm 1$ , para  $i = 1, 2, \dots, N$ , e a soma é restrita aos pares de sítios vizinhos mais próximos na rede (na rede quadrada, cada sítio tem quatro vizinhos mais próximos apenas). O único parâmetro desse problema é o produto  $\beta J$ , que define o inverso da temperatura, ou seja,  $T = 1/(\beta J)$  é a temperatura adimensional. Podemos começar os cálculos com uma rede pequena ( $4 \times 4$  ou  $6 \times 6$ ), de preferência com condições periódicas de contorno, e prosseguir até uma rede  $32 \times 32$  pelo menos.

Um dos objetivos das nossas simulações poderia ser o cálculo (numérico) da magnetização espontânea (abaixo de determinada temperatura crítica). Nesse caso podemos estabelecer comparações com os celebrados resultados exatos de Lars Onsager (no limite termodinâmico). De acordo com o resultado de Onsager [L. Onsager, Nuovo Cimento, Suppl., **6**, 621, 1949], confirmado por Yang [C. N. Yang, Phys. Rev. **85**, 808, 1952], a magnetização espontânea, adimensional, por sítio da rede,  $m_0$ , é dada por uma expressão surpreendentemente simples,

$$m_0 = \{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\}^{1/8} = \left\{1 - \left[\sinh\left(\frac{2}{T}\right)\right]^{-4}\right\}^{1/8}. \quad (4)$$

A temperatura crítica é dada por  $\sinh(2\beta_c J) = 1$ , ou seja,

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2,269185... \quad (5)$$

Façam um gráfico de  $m_0$  contra a temperatura  $T$ .

**B. Algoritmo de Metropolis.** O algoritmo de Metropolis estabelece uma prescrição para gerar uma cadeia de configurações microscópicas que (presumivelmente) devem convergir para as tais "configurações representativas" do estado gibbsiano de equilíbrio.

A implementação do algoritmo de Metropolis, para uma rede  $N \times N$ , a uma dada temperatura  $T$ , pode ser feita de acordo com as seguintes etapas:

(i) escolham uma configuração qualquer de spins da rede (por exemplo, todos os spins "para cima"). Seleccionem um sítio qualquer da rede. Na maioria das simulações de Monte Carlo, em cada etapa da implementação do algoritmo escolhe-se um sítio da rede de acordo com uma ordem sequencial de posições;

(ii) selecionado o sítio da rede, mudem o valor do spin. A configuração microscópica inicial, com energia  $E_i$ , transforma-se numa configuração final,

com energia  $E_f$ . Calculem  $r = \exp(-\Delta E/T)$ , em que  $\Delta E = E_f - E_i$  (em unidades de  $J$ ). Para economizar tempo de computação, é conveniente fazer uma tabela com valores de  $\Delta E$ , que são muito poucos, pois cada spin da rede quadrada interage apenas com quatro spins vizinhos;

(iii) se  $\Delta E < 0$ , aceitem a nova configuração microscópica e continuem o processo, selecionando (sequencialmente) outro sítio da rede;

(iv) se  $\Delta E > 0$ , comparem o valor de  $r$  com um número aleatório  $z$  entre 0 e 1 (qualquer gerador de números aleatórios vai funcionar bem). Aceitem a mudança de sinal do spin escolhido se  $r > z$ ; mantenham o mesmo sinal se  $r < z$ . Utilizem a configuração microscópica produzida dessa forma a fim de escolher (sequencialmente) outro sítio e repetir de novo todo o processo.

Essa prescrição deve ser repetida “muitas vezes”. Normalmente se define um “passo de Monte Carlo” como uma rodada em que todos os sítios da rede são visitados. Continuem acionando as regras do algoritmo de Metropolis durante “muitos passos de Monte Carlo”. Quais seriam as “configurações representativas”? Quando é que se atinge o equilíbrio? Nós sabemos que as flutuações estatísticas devem ser muito grandes para valores pequenos de  $N$  ou para temperaturas nas vizinhanças da criticalidade. As análises de convergência ou dos erros envolvidos dependem de critérios às vezes pouco objetivos (e de uma análise de “efeitos de tamanho finito”, que está um pouco além das possibilidades do nosso curso).

Sugiro que vocês escrevam um programa para implementar o algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising na rede quadrada e façam alguns testes para redes pequenas e temperaturas bem mais baixas ou mais altas do que a temperatura crítica exata. Em seguida utilizem redes maiores, e acionem o programa durante pelo menos uns 100 passos de Monte Carlo (percorrendo sequencialmente todos os sítios da rede, pelo menos cem vezes). A partir de uns 100 passos de Monte Carlo, acionem o algoritmo durante mais uns 10 passos. As últimas configurações microscópicas produzidas já devem representar o estado de equilíbrio termodinâmico. Calculem a magnetização correspondente a cada uma dessas configurações. A média (aritmética) final deve ser feita sobre os módulos das magnetizações associadas às configurações representativas, pois há expectativas de uma “quebra espontânea de simetria”. Obtenham uma estimativa numérica da magnetização e tentem pensar sobre os erros envolvidos nesse processo ....

Utilizem os valores obtidos para fazer um gráfico do módulo da magneti-

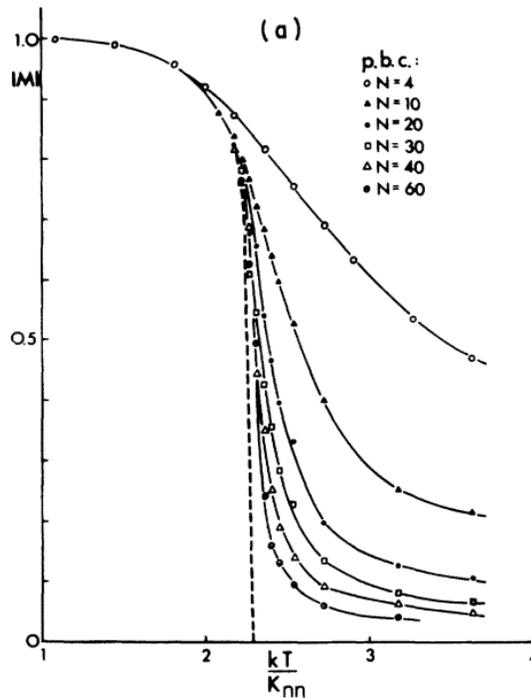


Figure 1: Variação do módulo da magnetização espontânea (parâmetro de ordem) com a temperatura. As linhas tracejadas representam o resultado exato para a rede quadrada (figura copiada do artigo citado de D.P. Landau).

zação contra a temperatura (semelhante ao gráfico que eu copiei da literatura .... notem que se trata do módulo da magnetização contra  $k_B T/J$ , e que a curva pontilhada corresponde à solução exata). Um estudo numérico bem completo sobre o modelo de Ising na rede quadrada pode ser encontrado em David P. Landau, Phys. Rev. **B13**, 2997 (1976). Por mera curiosidade, vejam o trabalho mais antigo de J. R. Ehman, L. D. Fosdick e D. C. Handscomb, J. Math. Phys. **1**, 547, 1960.

**C. Justificativa “estocástica”.** De acordo com o método de Monte Carlo, nós escolhemos uma sequência de configurações microscópicas independentes, que constituem uma “cadeia de Markov”. Algumas configurações iniciais podem estar muito longe do equilíbrio. Mas, com o passar do tempo,

vamos acabar gerando um número predominante de configurações de equilíbrio, que podem então ser utilizadas para fazer a “média aritmética”.

Vamos escrever uma equação mestra, muito semelhante à equação que escrevemos para descrever a evolução temporal das probabilidades no modelo das urnas de Ehrenfest. Então temos

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = \sum_{y'} [w(y' \rightarrow y) P(y', t) - w(y \rightarrow y') P(y, t)], \quad (6)$$

em que  $y$  designa uma configuração microscópica do sistema,  $P(y, t)$  é a probabilidade de ocorrência de  $y$  no instante de tempo  $t$ , e  $w(y \rightarrow y')$  é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, da configuração  $y$  para a configuração  $y'$ . No equilíbrio devemos ter a forma de Gibbs,

$$P(y, t) \rightarrow P_o(y) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta \mathcal{H}(y)], \quad (7)$$

em que  $Z$  é a função canônica de partição (para um sistema em contato com um reservatório térmico a temperatura  $T$ ). Uma condição suficiente para o equilíbrio global é dada pela condição de equilíbrio microscópico (conhecida também como “balanço detalhado”, do inglês “detailed balance”),

$$P_o(y) w(y \rightarrow y') = P_o(y') w(y' \rightarrow y). \quad (8)$$

Portanto, para atingir o equilíbrio gibbsiano as probabilidades de transição devem ser escolhidas tal que

$$\frac{w(y \rightarrow y')}{w(y' \rightarrow y)} = \exp(-\beta \Delta \mathcal{H}), \quad (9)$$

em que  $\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(y') - \mathcal{H}(y)$  é a diferença de energia entre as configurações  $y'$  e  $y$ .

Essa última equação tem uma certa ambiguidade, pois há várias escolhas das taxas de transição que levariam ao mesmo equilíbrio gibbsiano. Uma escolha particular, mas muito simples, é dada pelo algoritmo de Metropolis,

$$w(y \rightarrow y') = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\beta \Delta \mathcal{H}) & , \quad \Delta \mathcal{H} > 0, \\ \frac{1}{\tau} & , \quad \Delta \mathcal{H} < 0, \end{cases} \quad (10)$$

em que o tempo  $\tau$  é interpretado como “uma jogada de Monte Carlo”.