Aulas 3 e 4
Método de Monte Carlo para o estudo de transições de fase e fenômenos críticos

4 de fevereiro de 2023

Revisão

- Vimos que a enumeração exata das configurações é possível apenas para sistemas pequenos.
- Amostragem por importância: configurações com maior o peso $P_{eq}(\sigma) = Z^{-1} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}$ são mais frequentemente escolhidas; $P_{eq}(\sigma)$ varia com a temperatura. Aqui, seguimos a tradição da área e utilizamos a letra $\mathcal{H}$ para designar a "hamiltoniana", que nada mais é que a energia do sistema.
- Nesta aula aplicaremos o método de Monte Carlo e a amostragem por importância ao modelo mais simples que exibe transição de fase com quebra espontânea de simetria.

Revisão

- Hoje vamos continuar utilizando códigos em Python, que devem ser abertos em um editor como o Idle.
- Os arquivos para a aula de hoje estão disponíveis, via navegador, em https://bit.ly/3X78Jkl.

Modelo de Ising

- Modelo de Ising:

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i \in \{-1, +1\}, \quad \sigma \equiv \{\sigma_i\}.$$

  Para $J = 0$ recupera-se o resultado do paramagneto ideal: $\langle m \rangle \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle = \tanh(\beta H)$.

- Transição de fase ferromagnética-paramagnética em dimensão $d \geq 2$; solução exata, na ausência de campo, em $d = 2$ (Onsager).

- Vamos utilizar na simulação o algoritmo de Metropolis, mas há várias outras dinâmicas possíveis que são ergódicas e satisfazem o balanço detalhado, levando, em tempos longos, à distribuição de Boltzmann. Veja a bibliografia.

Modelo de Ising

- Em campo nulo, a fase ferromagnética quebra a simetria de inversão de todos os spins. Abaixo da temperatura crítica,

$$\mathcal{H}(-\sigma) = \mathcal{H}(\sigma), \quad \text{mas} \quad m_0 \equiv \lim_{H\to 0^+} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right\rangle > 0.$$

  Rigorosamente, essa *quebra espontânea de simetria* ocorre apenas no limite termodinâmico ($N \to \infty$).
- Em sistemas finitos, $m_0 = 0$ e é melhor trabalhar com

$$\langle |m| \rangle \equiv \left\langle \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right| \right\rangle .$$

- Analogamente ao calor específico, usamos as flutuações de m para estimar a suscetibilidade magnética:

$$\langle \chi \rangle = \frac{N}{k_B T} \left(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \right) .$$

Algoritmo de Metropolis e o modelo de Ising

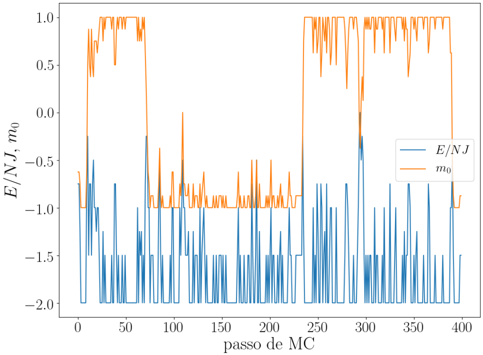
- Escolhemos um sítio i (sequencial ou aleatoriamente).
- Propomos inverter o spin do sítio escolhido: $\sigma_i' = -\sigma_i$.
- A probabilidade de transição é $w_{\sigma\to\sigma'} = \min\{1, e^{-\beta\Delta\mathcal{H}(\sigma)}\}$, em que $\Delta\mathcal{H}(\sigma) = \mathcal{H}(\sigma') - \mathcal{H}(\sigma) = 2\sigma_i(J\sum_\delta \sigma_{i+\delta} + H)$.
- Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, implementamos a inversão.
- Se $\Delta\mathcal{H} = 0$, implementamos a inversão com probabilidade igual a $1/2$.
- Se $\Delta\mathcal{H} > 0$, implementamos a inversão com probabilidade igual a $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}$.
- Repetimos o processo a partir da primeira etapa.

Atividade I: modelo na rede quadrada $L \times L$

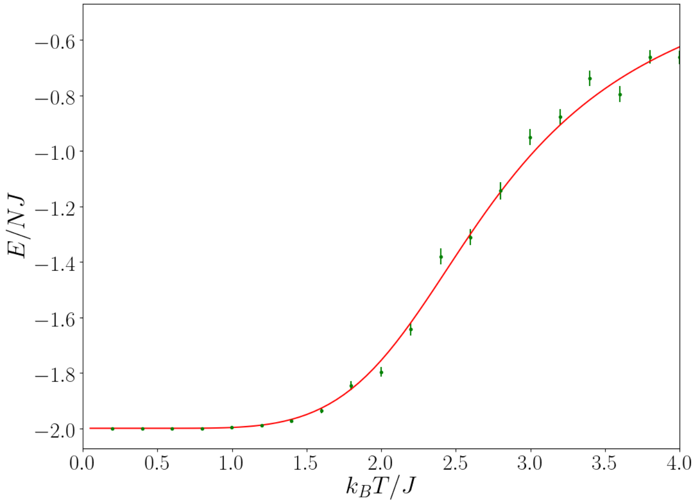
- Usando o código Python Ising2d_L4.py, simulem o modelo de Ising sem campo em uma rede de tamanho $L = 4$, de início sem alterar qualquer parâmetro. Lembrem que, no Idle, para executar o código basta pressionar F5.
- Primeiro aparecerá um gráfico mostrando a energia e a magnetização por spin ao longo dos passos de MC, para que se possa avaliar a equilibração.
- Fechem o gráfico para permitir que sejam exibidas as dependências com a temperatura de diversas grandezas termodinâmicas.

Etapa de equilibração

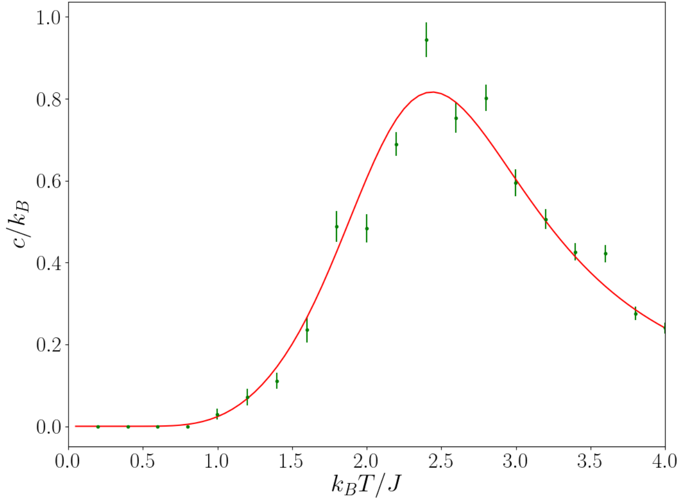
- Antes de fazer medidas, é necessário descartar passos de MC até que se atinja o equilíbrio.
- Dados para a rede $L = 4$ com $T/J = 2.2$. Note as inversões em m_0, características de um sistema finito.



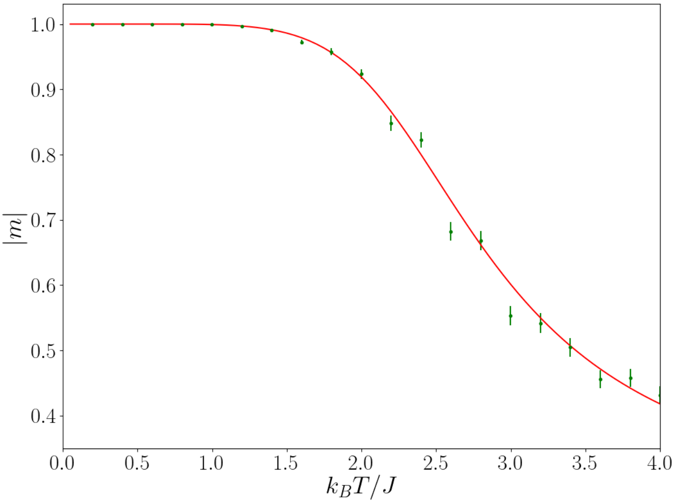
Comparação com resultado exato para $L = 4$



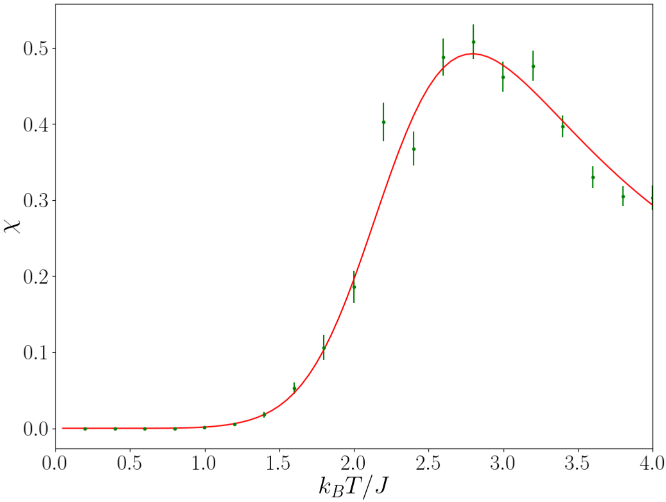
Comparação com resultado exato para $L = 4$



Comparação com resultado exato para $L = 4$



Comparação com resultado exato para $L = 4$



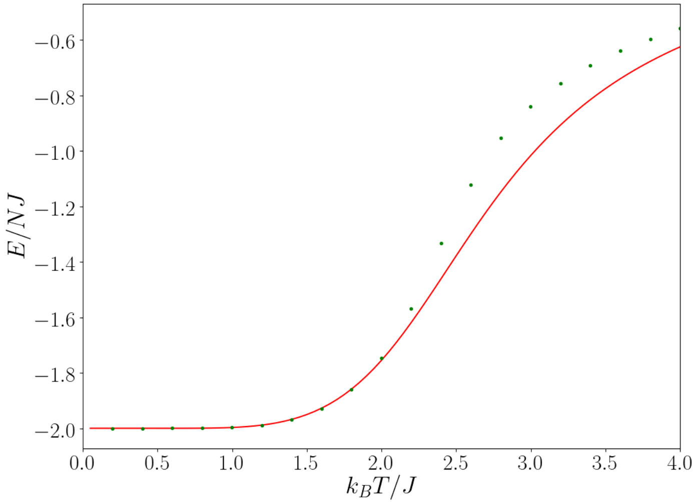
Melhorando a concordância

- A equilibração não parece ser um problema, mas a estatística das medidas, com apenas 400 tomadas, é pobre, como mostram as barras de erro.
- Executem novamente o programa, multiplicando sucessivamente por 2 o número de passos de MC a realizar (linha 19 do código), até que as barras de erro sejam quase imperceptíveis.

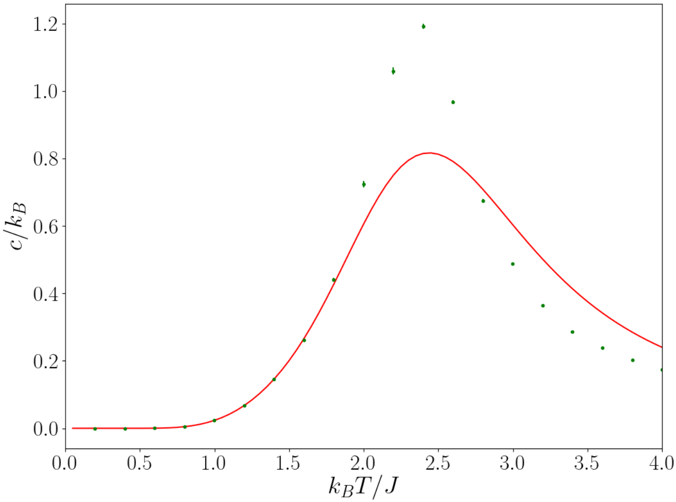
Melhorando a concordância

- Devem ter sido necessários cerca de 2×10^5 passos.
- Mantendo esse número, mudem agora o valor de L para 8 (linha 14 do código). O que vocês observam a respeito das barras de erro?

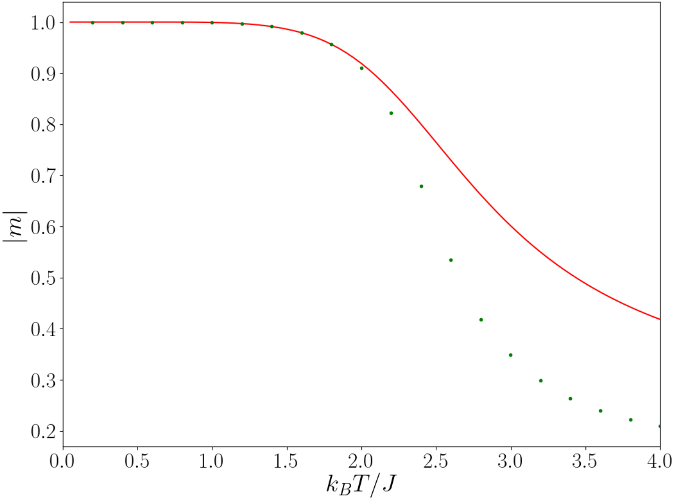
Resultados para $L = 8$



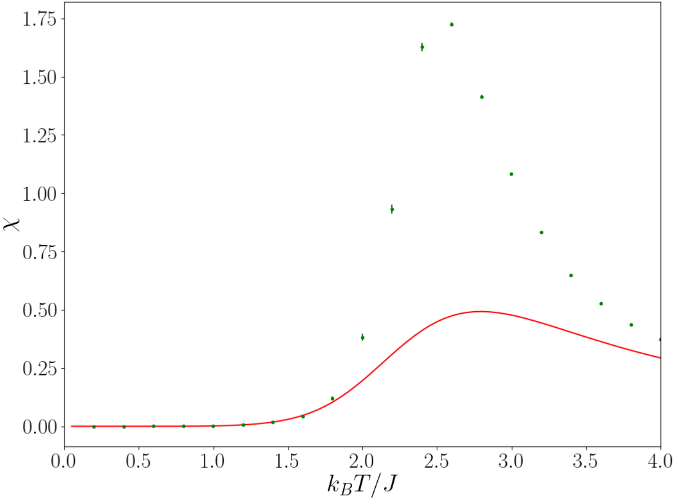
Resultados para $L = 8$



Resultados para $L = 8$



Resultados para $L = 8$



Resultados para $L = 8$

- Vocês devem ter notado barras de erro maiores do que com $L = 4$, o que é razoável, uma vez que há muito mais configurações possíveis com $L = 8$, exigindo mais passos para amostrá-las confiavelmente.
- Além disso, os picos no calor específico e na suscetibilidade são muito mais pronunciados com $L = 8$. Ambos os picos situam-se entre as temperaturas reduzidas $(k_B T/J)$ 2 e 3.

A transição de fase

- A solução exata mostra que, no limite termodinâmico, as grandezas termodinâmicas são singulares na temperatura crítica $T_c = 2J/\ln\left(1+\sqrt{2}\right) \simeq 2.269 \quad (J=1)$.
Definindo $t \equiv T/T_c - 1$, quando $|t| \to 0$ vale

$$m_0 \sim |t|^{\beta}, \quad \beta = 1/8 \quad (\text{para } T < T_c);$$

$$\chi = \frac{\partial m_0}{\partial H} \sim |t|^{-\gamma}, \quad \gamma = 7/4;$$

$$c \sim -\ln|t|;$$

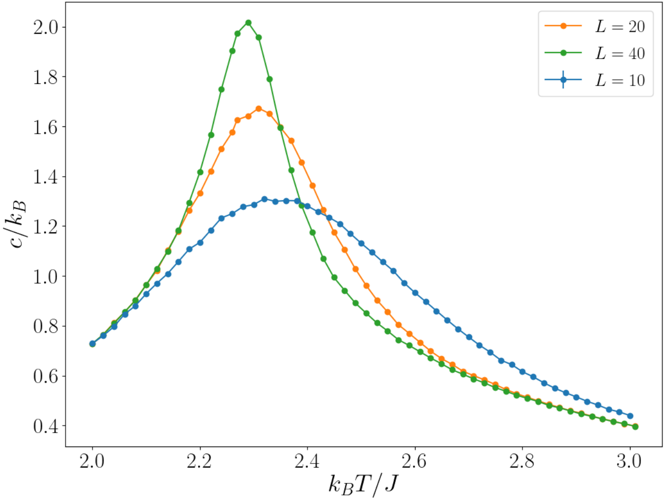
$$\left\langle \sigma(\vec{0})\sigma(\vec{r}) \right\rangle - m_0^2 \sim \exp\left(-|\vec{r}|/\xi\right),$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad \nu = 1.$$

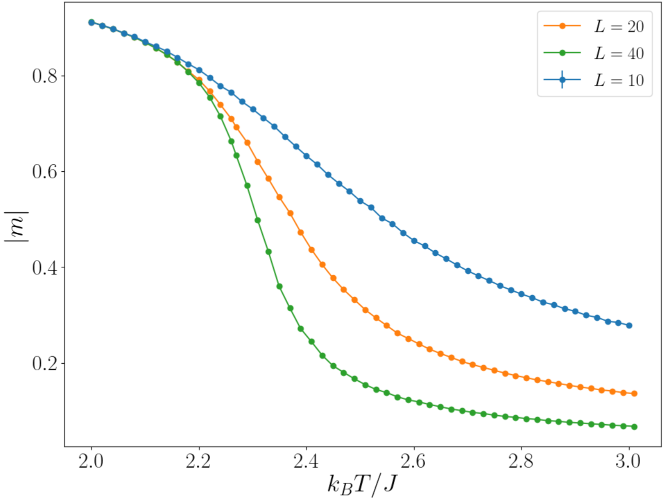
Atividade II: pistas da transição

- Utilizando o código Python Ising2d-alunos.py, façam a simulação para uma rede de tamanho $L = 10$, agora de uma temperatura inicial 2.0 até a temperatura final 3.0, com incrementos de 0.02. Resultados para $L = 20$ e $L = 40$ encontram-se nos arquivos L20simul.dat e L40simul.dat, respectivamente, e serão lidos quando o programa for executado.
- Observem especialmente os gráficos da magnetização e da suscetibilidade, em função da temperatura, para $L = 10$, 20 e 40.

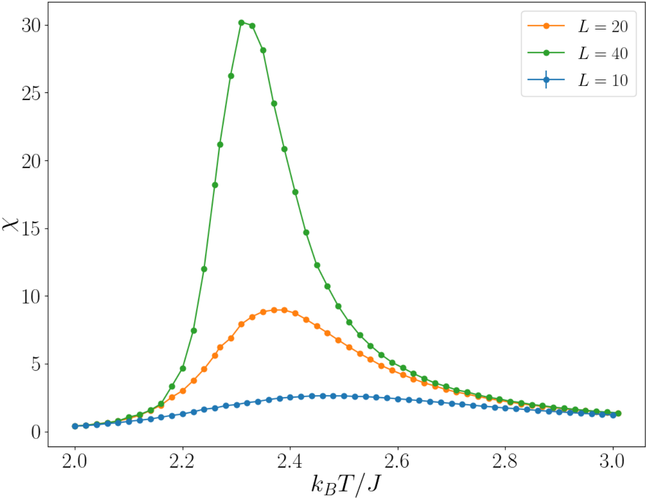
Resultados



Resultados



Resultados



Resultados

- À medida que L aumenta, o máximo de χ aumenta e sua posição se desloca para esquerda. Esse comportamento é evidência de uma transição de fase.
- Sendo móvel, a posição do máximo não corresponde ao ponto crítico $T_c \simeq 2.269$.
- Como estimarmos o ponto crítico e expoentes críticos?
- Discutiremos esse ponto na próxima aula.

Resultados

- À medida que L aumenta, o máximo de χ aumenta e sua posição se desloca para esquerda. Esse comportamento é evidência de uma transição de fase.
- Sendo móvel, a posição do máximo não corresponde ao ponto crítico $T_c \simeq 2.269$.
- Como estimarmos o ponto crítico e expoentes críticos?
- Discutiremos esse ponto na próxima aula.

Desafio

- Na presença de um campo externo, a energia de uma certa configuração dos spins no modelo de Ising é

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i \in \{-1, +1\}, \quad \sigma \equiv \{\sigma_i\}\,.$$

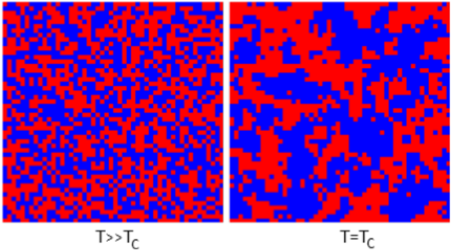
- Simule o modelo de Ising, na rede quadrada com $L = 20$, variando o campo magnético a uma temperatura fixa. Explore diferentes temperaturas, acima e abaixo de $T_c = 2J/\ln\left(1+\sqrt{2}\right)$, traçando para cada uma os gráficos de magnetização versus campo, desde $H = -0.5$ até $H = +0.5$. (Ainda é conveniente trabalhar com o módulo da magnetização?)

Aula 4

- Descarreguem os arquivos da aula de hoje no link https://bit.ly/3X3W0z4.

O comprimento de correlação em um sistema finito

- No limite termodinâmico, $\xi \sim |t|^{-\nu}$.
- Mas, em um sistema finito de dimensão linear L, o comprimento de correlação não pode crescer além de L quando $T \to T_c$, ou seja, $t \to 0$: $\xi \lesssim L$.



O comprimento de correlação em um sistema finito

- No limite termodinâmico, $\xi \sim |t|^{-\nu}$.
- Mas, em um sistema finito de dimensão linear L, o comprimento de correlação não pode crescer além de L quando $T \to T_c$, ou seja, $t \to 0$: $\xi \lesssim L$.
- Logo, as demais grandezas termodinâmicas também devem ser limitadas. Por exemplo:

$$m_0 \sim t^{\beta} \sim \xi^{-\beta/\nu} \gtrsim L^{-\beta/\nu},$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \sim \xi^{\gamma/\nu} \lesssim L^{\gamma/\nu}.$$

Teoria de escala de tamanho finito

- Partimos da seguinte hipótese plausível: em um sistema de dimensão linear L, que no limite termodinâmico teria comprimento de correlação ξ, vale

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu} f_\chi(L/\xi),$$

$$\text{com} \qquad f_\chi(x) = \begin{cases} \text{constante}, & \text{se } x \gg 1 \\ x^{\gamma/\nu}, & \text{se } x \to 0 \end{cases},$$

e analogamente para outras grandezas.

- Rearranjando em uma forma mais conveniente para uso nas simulações, definimos $f_\chi(x) \equiv x^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi\left(x^{1/\nu}\right)$, e lembrando que $\xi \sim |t|^{-\nu}$ podemos escrever

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi\left(L^{1/\nu} |t|\right).$$

Teoria de escala de tamanho finito

- Partimos da seguinte hipótese plausível: em um sistema de dimensão linear L, que no limite termodinâmico teria comprimento de correlação ξ, vale

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu} f_\chi(L/\xi),$$

$$\text{com} \qquad f_\chi(x) = \begin{cases} \text{constante}, & \text{se } x \gg 1 \\ x^{\gamma/\nu}, & \text{se } x \to 0 \end{cases},$$

e analogamente para outras grandezas.

- Rearranjando em uma forma mais conveniente para uso nas simulações, definimos $f_\chi(x) \equiv x^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi\left(x^{1/\nu}\right)$, e lembrando que $\xi \sim |t|^{-\nu}$ podemos escrever

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi\left(L^{1/\nu}|t|\right).$$

Teoria de escala de tamanho finito

- A hipótese de escala de tamanho finito é então

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}\tilde{f}_\chi\left(L^{1/\nu}\,|t|\right), \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu}\tilde{f}_m\left(L^{1/\nu}\,|t|\right) \quad \text{etc.}$$

- Exatamente no ponto crítico ($t = 0$) deve valer

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu} \quad \text{etc.}$$

- Isso nos diz que, se conhecermos a temperatura crítica, podemos obter as razões γ/ν, β/ν etc. a partir das simulações.
- Mas, sem solução exata, como determinar T_c?

Teoria de escala de tamanho finito

- A hipótese de escala de tamanho finito é então

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}\tilde{f}_\chi\left(L^{1/\nu}|t|\right), \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu}\tilde{f}_m\left(L^{1/\nu}|t|\right) \quad \text{etc.}$$

- Exatamente no ponto crítico ($t = 0$) deve valer

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu} \quad \text{etc.}$$

- Isso nos diz que, se conhecermos a temperatura crítica, podemos obter as razões γ/ν, β/ν etc. a partir das simulações.
- Mas, sem solução exata, como determinar T_c?

Teoria de escala de tamanho finito

- A hipótese de escala de tamanho finito é então

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi \left(L^{1/\nu} |t| \right), \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu} \tilde{f}_m \left(L^{1/\nu} |t| \right) \quad \text{etc.}$$

- Exatamente no ponto crítico ($t = 0$) deve valer

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu} \quad \text{etc.}$$

- Isso nos diz que, se conhecermos a temperatura crítica, podemos obter as razões γ/ν, β/ν etc. a partir das simulações.
- Mas, sem solução exata, como determinar T_c?

O cumulante de Binder

- A partir da relação $m_0 \sim L^{-\beta/\nu}$, válida no ponto crítico, é razoável supor que, também no ponto crítico,

$$\left\langle m^{2n} \right\rangle \equiv \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right)^{2n} \right\rangle \sim L^{-2n\beta/\nu}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

- Com isso, construímos o *cumulante de Binder*, uma grandeza que, no ponto crítico, independe do tamanho do sistema simulado (desde que $L \gg 1$):

$$U_4 = 1 - \frac{\left\langle m^4 \right\rangle}{3 \left\langle m^2 \right\rangle^2}.$$

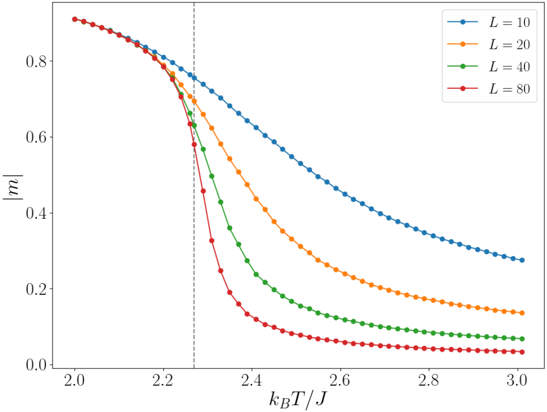
- Para $L \to \infty$, $U_4 \to 2/3$ se $T \ll T_c$ ($\left\langle m^4 \right\rangle, \left\langle m^2 \right\rangle \to 1$) e $U_4 \to 0$ se $T \gg T_c$ ($\left\langle m^4 \right\rangle \to 3 \left\langle m^2 \right\rangle^2$)

Atividade I: localizando o ponto crítico

- Executem o código Python escalafinita1.py, que mostrará uma sequência de gráficos da dependência de várias grandezas com a temperatura, produzidos a partir dos dados de simulações de redes quadradas com lados $L = 10$, $L = 20$, $L = 40$ e $L = 80$. Os dados estão nos arquivos L10simul.dat, L20simul.dat, L40simul.dat e L80simul.dat.
- Além desses dados, os gráficos também indicam por uma linha vertical tracejada o valor exato da temperatura crítica.

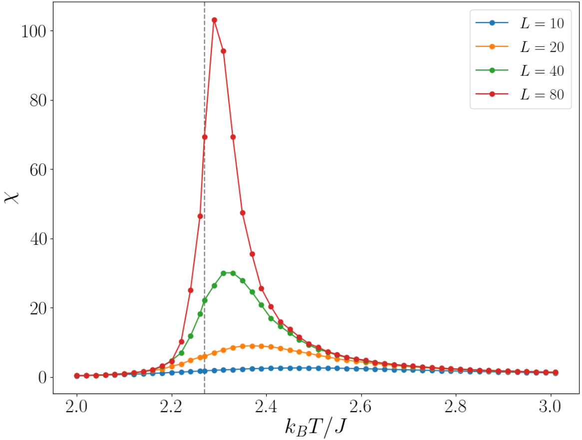
Atividade III: localizando o ponto crítico

- No primeiro gráfico, da magnetização, a temperatura crítica separa uma região em que os dados para tamanhos crescentes parecem convergir para valores não nulos de outra região em que a convergência parece ser para zero.



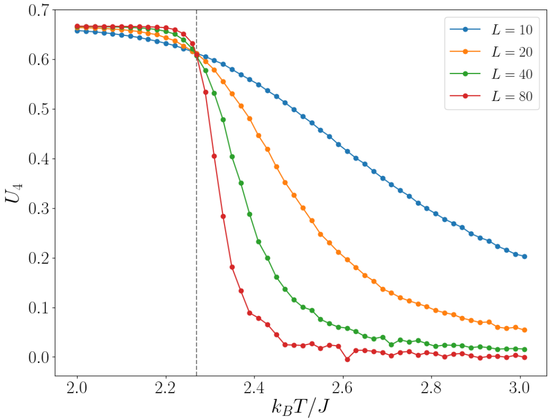
Atividade I: localizando o ponto crítico

- No segundo gráfico, da suscetibilidade, a posição do pico parece tender para T_c à medida que o tamanho da rede aumenta.



Atividade I: localizando o ponto crítico

- O terceiro gráfico mostra justamente o cumulante de Binder. Notem como as curvas todas se cruzam bem próximo a T_c. Utilizem o recurso de ampliação (o ícone em forma de lupa) para confirmarem isso.



Atividade II: obtendo expoentes críticos

- Em uma simulação de um sistema cuja temperatura crítica não seja conhecida a priori, uma estimativa de T_c é então fornecida pelo cruzamento das diversas curvas de U_4. Aqui vamos utilizar o valor exato conhecido.
- Executem o código Python dadosvsL_Tc.py, que mostrará gráficos da magnetização, da suscetibilidade e do calor específico, simulados na temperatura T_c para diversos tamanhos de sistema.

Atividade II: obtendo expoentes críticos

- Em uma simulação de um sistema cuja temperatura crítica não seja conhecida a priori, uma estimativa de T_c é então fornecida pelo cruzamento das diversas curvas de U_4. Aqui vamos utilizar o valor exato conhecido.
- Executem o código Python dadosvsL_Tc.py, que mostrará gráficos da magnetização, da suscetibilidade e do calor específico, simulados na temperatura T_c para diversos tamanhos de sistema.

Atividade II: obtendo expoentes críticos

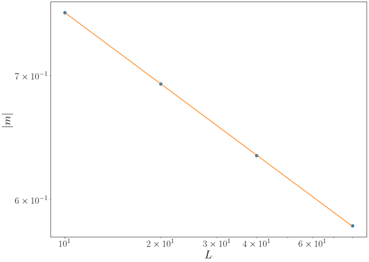
- Para a magnetização e a suscetibilidade, a previsão da teoria de escala de tamanho finito é de que essas grandezas comportem-se em T_c como leis de potência, $\langle|m|\rangle \sim L^{-\beta/\nu}$ e $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$, de modo que, em escala log-log, os gráficos devem ser linhas retas com inclinações dadas por $-\beta/\nu$ e γ/ν.
- O código, ao ser executado, efetua ajustes com as funções apropriadas a partir dos dados das simulações, e retorna os valores estimados para as combinações de expoentes críticos da magnetização e da suscetibilidade. Estudem o código e comparem os resultados obtidos com os valores exatos $\beta/\nu = 1/8$ e $\gamma/\nu = 7/4$.

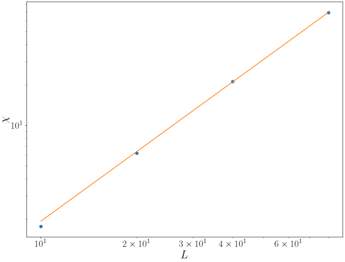
Atividade II: obtendo expoentes críticos

- Para a magnetização e a suscetibilidade, a previsão da teoria de escala de tamanho finito é de que essas grandezas comportem-se em T_c como leis de potência, $\langle|m|\rangle \sim L^{-\beta/\nu}$ e $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$, de modo que, em escala log-log, os gráficos devem ser linhas retas com inclinações dadas por $-\beta/\nu$ e γ/ν.
- O código, ao ser executado, efetua ajustes com as funções apropriadas a partir dos dados das simulações, e retorna os valores estimados para as combinações de expoentes críticos da magnetização e da suscetibilidade. Estudem o código e comparem os resultados obtidos com os valores exatos $\beta/\nu = 1/8$ e $\gamma/\nu = 7/4$.

Estimativa dos expoentes críticos

- Obtemos os expoentes $\beta/\nu = 0.127$ e $\gamma/\nu = 1.72$, próximos dos valores exatos $\nu = 1$, $\beta = 1/8$ e $\gamma = 7/4$. Simulações feitas para tamanhos maiores e com mais passos de MC produzem expoentes ainda mais próximos dos exatos.





Atividade III: colapsando os dados

- Agora vamos testar as hipóteses da teoria de escala de tamanho finito para outras temperaturas além de T_c:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \tilde{f}_\chi \left(L^{1/\nu} \left| t \right| \right), \quad m_0 \sim L^{-\beta/\nu} \tilde{f}_m \left(L^{1/\nu} \left| t \right| \right) \quad \text{etc.}$$

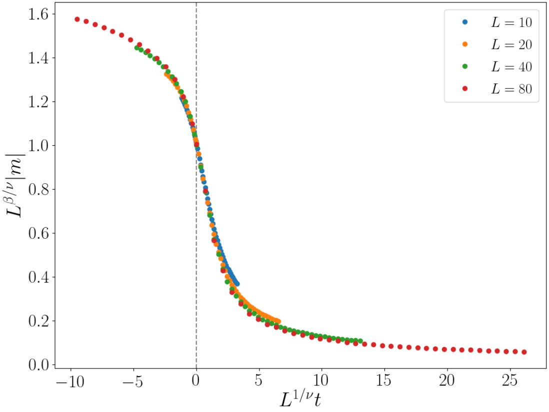
- Note que a análise em T_c só produz estimativas para as razões β/ν e γ/ν, e não para os expoentes β, γ e ν separadamente. A teoria de escala de tamanho finito sugere que ν pode ser estimado pelo comportamento da temperatura de pico T^* da suscetibilidade (ou do calor específico) para tamanhos crescentes de sistema, que deve seguir a forma $T^* - T_c \sim L^{-1/\nu}$. Estimativas cuidadosas indicam, em concordância com o resultado exato, que $\nu = 1$.

Atividade III: colapsando os dados

- Baixem o programa escalafinita2.f e o abram para substituir os dados de expoentes críticos pelas estimativas que fizemos.
- Executando o programa, surgem gráficos em que as abscissas são as temperaturas reescaladas $L^{1/\nu}|t|$ e as ordenadas são a magnetização reescalada $L^{\beta/\nu}|m|$ ou a suscetibilidade reescalada $L^{-\gamma/\nu}\chi$.
- Façam testes com outros valores de T_c e dos expoentes, para se convencerem de que o "colapso de dados" somente ocorre quando são utilizados valores suficientemente próximos dos corretos.

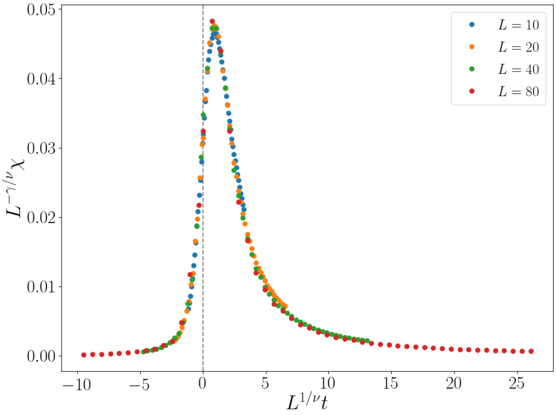
Colapso de dados

- Com os parâmetros exatos, todos os pontos da magnetização reescalada tendem a cair sobre a curva universal $\tilde{f}_m\left(L^{1/\nu}\left|t\right|\right)$.



Colapso de dados

- Com os parâmetros exatos, todos os pontos da suscetibilidade reescalada tendem a cair sobre a curva universal $\tilde{f}_\chi\left(L^{1/\nu}|t|\right)$.



Comentários

- O algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising padece do fenômeno de lentidão crítica (*critical slowing down*): o tempo de equilibração cresce aproximadamente com o quadrado do tamanho do sistema nas vizinhanças do ponto crítico. Isso torna proibitivas simulações para tamanhos muito grandes. Para minorar esse problema, foram formulados algoritmos de aglomerados (*clusters*), como os de Wolff e de Swendsen–Wang. Consulte a bibliografia para maiores detalhes.
- É possível formular algoritmos eficientes que simulam várias temperaturas simultaneamente, acelerando muito as simulações. Veja a bibliografia.

Desafio

- Simule o modelo de Ising em uma rede triangular, em que cada spin interage com 6 vizinhos. (Dica: parta da rede quadrada e para cada spin acrescente interações com seus segundos vizinhos ao longo de uma só diagonal fixa.) Ainda é possível utilizar o cumulante de Binder para estimar a temperatura crítica? Essa temperatura é a mesma que na rede quadrada? E quanto aos expoentes críticos?