

Quinta série de exercícios
problema adicional - método de Monte Carlo
Tópicos de Mecânica Estatística - Transições de Fases - 2020

5 - s2 - O algoritmo de Metropolis estabelece uma prescrição para gerar uma cadeia de configurações microscópicas que devem convergir para as tais “configurações representativas” do estado gibbsiano de equilíbrio.

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

(i) escolham uma configuração qualquer de spins da rede quadrada (por exemplo, todos os spins “para cima”). Seleccionem um sítio qualquer da rede. Adotem 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 ΔE , 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, seleccionando (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? Essas são questões difíceis. Nós sabemos que as flutuações estatísticas devem ser muito grandes para valores pequenos de N ou para temperaturas nas vizinhanças da criticidade. 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 de uma primeira abordagem desse método).

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 cem passos de Monte Carlo (percorrendo sequencialmente todos os sítios da rede, pelo menos cem vezes). A partir de uns cem passos de Monte Carlo, acionem o algoritmo durante mais uns dez 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 magnetização contra a temperatura (semelhante a um gráfico bem conhecido, que pode ser encontrado no artigo de David P. Landau, Finite-size behavior of the Ising square lattice, Phys. Rev. B **13**, 2997 (1976)).