

Introdução a Métodos Computacionais em Física Módulo 11

Leonardo Cabral

22 de Novembro de 2019



Método de Monte Carlo para simulações de sistemas físicos (*Ensembles* estatísticos):

- ▶ *Ensemble* microcanônico: algoritmo do demônio.
- ▶ *Ensemble* canônico: algoritmo do Metropolis.

Mais informações sobre este assunto podem ser encontradas em:

- ▶ H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian, "An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical systems", 3rd Ed, Capítulos 11 e 15.
- ▶ W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd Ed., Cap. 4 Cambridge University Press, 1992.



- ▶ Estado macroscópico do sistema de muitos corpos é descrito por grandezas tais como energia (E), volume (V), número de partículas (N), etc.
- ▶ Em nível microscópico existem muitas configurações diferentes do sistema capazes de realizar um dado estado macroscópico.
- ▶ No equilíbrio é razoável assumir que o sistema tenha iguais probabilidades de estar em qualquer um de seus microestados, i.e, se existirem Ω microestados acessíveis, há probabilidade $P_s = 1/\Omega$ de o sistema estar no microestado s .
- ▶ Se uma grandeza física A possui valor A_s quando o sistema estiver no microestado s , a média de *ensemble* desta grandeza é dada por

$$\langle A \rangle = \sum_{s=1}^{\Omega} A_s P_s$$

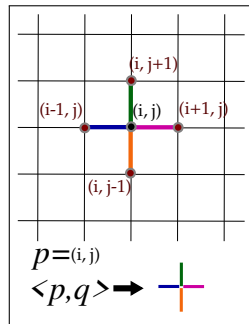
- ▶ Um *ensemble* é uma coleção abstrata de sistemas em diferentes microestados que representam um mesmo macroestado.
- ▶ Um *ensemble* especificado pelo conjunto de grandezas macroscópicas (E, V, N) recebe a denominação de *ensemble* microcanônico.
- ▶ Um *ensemble* especificado pelo conjunto de grandezas macroscópicas (T, V, N) recebe a denominação de *ensemble* canônico.

Modelo de *Ising*

- Rede de sítios interconectados, onde cada sítio pode assumir dois valores distintos, s_1 e s_2 . Este modelo é uma representação simples de um sistema magnético, onde o *spin*, s , pode assumir os valores -1 ou 1 .
- A energia, E , e a magnetização, M , do sistema são dadas por

$$E = -J \sum_{\langle p, q \rangle} s_p s_q - B \sum_{p=1}^N s_p, \quad M = \sum_{p=1}^N s_p,$$

onde $\langle p, q \rangle$ representa as interações entre (usualmente primeiros) sítios vizinhos, J é a constante de *troca* e B é um campo magnético externo.



- Para sistemas ferromagnéticos (antiferromagnéticos), $J > 0$ ($J < 0$).
- Esse sistema apresenta transição de fase do tipo ordem–desordem. Outros sistemas físicos que possuem este tipo de transição podem ser representados por este modelo, e.g. gás de rede.

Algoritmo do demônio

- ▶ O algoritmo do demônio pode ser utilizado para simular sistemas no *ensemble* microcanônico, onde a energia, o volume e o número de partículas são constantes.
- ▶ Ao sistema é adicionado um grau a mais de liberdade, chamado de *demônio*.
- ▶ Considere um dado sistema. O algoritmo é realizado da seguinte maneira:
 1. Teste uma modificação aleatória na configuração do sistema. Por exemplo, escolha uma partícula aleatoriamente e mude sua posição.
 2. Calcule a diferença de energia do sistema ΔE devido a esta modificação.
 3. Se $\Delta E \leq 0$, a nova configuração é aceita e o sistema transfere $-\Delta E$ para o demônio.
 4. Se $\Delta E > 0$ e o demônio tiver energia $E_d > \Delta E$, o demônio transfere esta energia ao sistema e a nova configuração é implementada. Se $E_d < \Delta E$, então a modificação teste é rejeitada e a configuração não muda.
- ▶ Esta sequência de passos deve ser repetida um número grande de vezes até que haja um valor médio de energia no sistema E e no demônio E_d , onde $E + E_d$ se mantém constante.
- ▶ Valores médios de grandezas de interesse podem ser calculados durante o processo.



Elabore um relatório em pdf contendo seus resultados referentes ao itens abaixo. Esboce gráficos quando necessário.

1. Elabore um programa (de preferência em C/C++ ou Fortran) para simular o modelo de Ising em uma rede quadrada em duas dimensões, implementando o algoritmo do demônio. Utilize a biblioteca OpenGL para visualizar a simulação em tempo real.

Escolha um sistema ferromagnético finito ou com condições de contorno periódicas.

2. Inicie a partir de diferentes configurações iniciais: *spins* aleatoriamente distribuídos; todos de mesmo valor; parte com valor s_1 , parte com s_2 . Observe o que acontece à medida que o algoritmo é executado em diferentes temperaturas (use $k_B T = \langle E_d \rangle$). Monitore o número de *passos de Monte Carlo*¹.

¹Um passo de Monte Carlo (mcs) será definido como um passo (itens 1 \rightarrow 4) dos algoritmos mencionados, embora esta definição não seja única.

Ensemble canônico e algoritmo de Metropolis

- ▶ Se um sistema não está isolado, mas em contato com um sistema muito maior a uma temperatura T com o qual pode trocar calor, temos que T (ao invés de E) passa a descrever um estado macroscópico do sistema, sendo descrito pelo *ensemble* canônico.
- ▶ Neste *ensemble*, quando em equilíbrio com o reservatório térmico, a probabilidade do sistema estar em um microestado s é

$$P_s = \frac{\exp(-\beta E_s)}{Z}, \quad \text{onde } Z = \sum_{s=1}^M \exp(-\beta E_s) \text{ e } \beta = 1/k_B T.$$

M é o número de microestados acessíveis para um dado conjunto (T, V, N) .

- ▶ O valor médio de uma grandeza A é dado por

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{s=1}^M A_s e^{-\beta E_s}}{Z}$$

- ▶ Em uma simulação são gerados um número $m \ll M$ de microestados, de modo que

$$\langle A \rangle \approx \langle A_m \rangle = \frac{\sum_{s=1}^m A_s e^{-\beta E_s}}{Z}$$

Ensemble canônico e algoritmo de Metropolis

- ▶ No *ensemble* canônico,

$$\langle A_m \rangle = \frac{\sum_{s=1}^m A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m e^{-\beta E_s}} = \frac{\sum_{s=1}^m \frac{A_s}{\pi_s} e^{-\beta E_s} \pi_s}{\sum_{s=1}^m \frac{1}{\pi_s} e^{-\beta E_s} \pi_s}$$

e π_s é uma dada distribuição de probabilidades.

- ▶ Se configurações são geradas com probabilidade π_s , então

$$\langle A_m \rangle = \frac{\sum_{s=1}^m \frac{A_s}{\pi_s} e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m \frac{1}{\pi_s} e^{-\beta E_s}} \quad (\text{importance sampling})$$

- ▶ O algoritmo de Metropolis utiliza $\pi_s = e^{-\beta E_s} / \sum_{s=1}^m e^{-\beta E_s}$ de modo que

$$\langle A_m \rangle = \frac{\sum_{s=1}^m A_s}{m}$$

Ensemble canônico e algoritmo de Metropolis

- ▶ A partir de uma configuração inicial o algoritmo é realizado da seguinte maneira:
 1. Teste uma modificação aleatória na configuração do sistema.
 2. Calcule a diferença de energia do sistema ΔE devido a esta modificação.
 3. Se $\Delta E \leq 0$, a nova configuração é aceita.
 4. Se $\Delta E > 0$, calcule $w = \exp(-\beta\Delta E)$ e gere um número aleatório $r \in [0, 1]$ uniformemente. Se $r \leq w$ a nova configuração é aceita. Se $r > w$ a modificação é descartada.
- ▶ Esta sequência de passos deve ser repetida um número grande de vezes até que o sistema *termalize*.
- ▶ Valores médios de grandezas de interesse podem ser calculados periodicamente durante a execução do algoritmo.
- ▶ Observe que o algoritmo resulta em probabilidade de transição entre os microestados i e j dada por $W(i \rightarrow j) = \min(1, e^{-\beta\Delta E})$.



Elabore um relatório em pdf contendo seus resultados referentes ao itens abaixo. Esboce gráficos quando necessário.

1. Elabore um programa (de preferência em C/C++ ou Fortran) para simular o modelo de Ising em uma rede quadrada em duas dimensões, implementando o algoritmo de Metropolis. Utilize a biblioteca OpenGL para visualizar a simulação em tempo real.

Escolha um sistema ferromagnético finito ou condições de contorno periódicas.

2. Para um dado N (rede $n \times n$) e $B = 0$ observe o que acontece com o sistema à medida que a temperatura T passa de valores altos para baixos².

Obs: Inicie a partir de diferentes configurações iniciais, *e.g.*, *spins* aleatoriamente distribuídos, todos com spin s_1 , parte com spin s_1 e outra com s_2 , etc. Monitore o número de *passos de Monte Carlo* (mcs).

3. Considere $B > 0$. O que você observa de diferente em relação ao caso em que $B = 0$.



²O valor exato para a temperatura de transição ordem–desordem em duas dimensões é $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269$.



Para responder aos itens abaixo, não se requer visualização em tempo real. Não a utilize, para diminuir o tempo de simulação.

1. Escolha $B = 0$ e um dado valor de N . Faça simulações para diferentes valores de T com 10^6 mcs, no mínimo.
2. Durante cada simulação calcule $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, $\langle M \rangle$ e $\langle M^2 \rangle$.

(!) São necessários um número razoável de mcs para o sistema termalizar ($\sim 10^3$ mcs a 10^4 mcs tipicamente, mas depende do tamanho do sistema) para começar a calcular estas médias.

(!!) Os valores de cada grandeza devem ser obtidos em intervalos de $N_m \sim 100$ mcs, para evitar configurações fortemente correlacionadas.

3. Calcule o calor específico C e a susceptibilidade magnética em campo zero χ , de acordo com

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}, \quad \chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}$$

Faça gráficos de ambos em função da temperatura, i.e., $k_B T / J$.

4. Determine o valor da temperatura, T_c , da transição ordem-desordem a partir dos gráficos e compare com o valor exato. É recomendável usar *Finite Size Scaling*, i.e., considerar sistemas de diferentes tamanhos (i.e., 8×8 , 16×16 , 32×32 , etc) para estimar T_c no limite em que $N \rightarrow \infty$.



Para responder aos itens abaixo, não se requer visualização em tempo real. Não a utilize, para diminuir o tempo de simulação.

1. Tópico adicional: considere um sistema antiferromagnético (ver. problema 15.22 do Tobochnik) e refaça os itens anteriores.

