Física Estatística

Ano lectivo 2023/2024

TPC2 - Cadeias de Markov

Atenção:

- Não deve escrever o seu nome nem nenhum código identificador em nenhum sítio.
- Deve entregar ESTE Notebook de Jupyter.
- O trabalho é individual. Podem e devem haver discussões com colegas mas o resultado entregue é individual.
- Não deve acrescentar ou apagar nenhuma célula.
- Todas as explicações devem ser claras e concisas.
- É preferível fazer menos e fazer bem que muito e mal.
- A não verificação de alguma destas regras leva ao anulamento e exclusão da prova.

1. Exercício

Nas aulas discutimos a solução do modelo de Ising de campo médio com N spins ($s = \pm 1/2$). Neste trabalho de casa vamos abordar o modelo de Ising de campo médio de spin um ($s_i = \pm 1, 0$) com anisotropia. Considere o Hamiltoniano,

$$H = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(1 - s_i s_j) + D\sum_{i=1}^{N} s_i^2 = \frac{N^2 - M^2}{N} + D(N - N_0)$$

onde a magnetização é dada por $M = \sum_{i=1}^{N} s_i$ e as variáveis de spin s_i são $\{\pm 1\}$. Para este modelo a energia é função apenas da magnetização e do número de partículas. A densidade de estados do sistema é obtida usando o número de spins $s_i = +1$ (N_+), o número de spins $s_i = -1$ (N_-) e o número de spins $s_i = 0$ (N_0):

$$\Omega(N_+, N_-, N_0) = \frac{N!}{N_+! N_-! N_0!} \qquad N_+ = \frac{N - N_0 + M}{2} \qquad N_- = \frac{N - N_0 - M}{2}$$

Com esta parametrização,

$$\Omega(M, N_0, N) = \frac{N!}{\left(\frac{N-N_0+M}{2}\right)! \left(\frac{N-N_0-M}{2}\right)! N_0!}$$

onde $M \in \{-(N - N_0), -(N - N_0) + 2, \ldots, (N - N_0) - 2, (N - N_0)\}$, $N_0 \in \{0, N\}$.

1. Calcule numericamente o valor médio exacto como função da temperatura do módulo da magnetização

para β entre 0.1 e 1.5 e para valores de $D \in \{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$

$$\left\langle \frac{|M|}{N} \right\rangle = \sum_{M,N_0} \frac{|M|}{N} \Omega(M, N_0, N) \frac{e^{-\beta E(M,N_0)}}{Z(\beta)}$$
$$Z(\beta) = \sum_{M,N_0} \Omega(M, N_0) e^{-\beta E(M,N_0)}$$

Sugestão: O cálculo da combinatórica envolve números muito grandes. O idela é usar a fórmula de Stirling,

$$\log(n!) = n \log(n) - n + \frac{1}{2} \log(2\pi n)$$

e notar que o valor médio fica inalterado se deslocar a energia $-\beta E(M, N_0) \to -\beta E(M, N_0) - C$ nas exponenciais.

2. Para cada temperatura a distribuição de probabilidades da magnetização é dada por,

$$P_{N,\beta}(M, N_0) = \frac{e^{\ln(\Omega(M,N_0,N)) - \beta E(M,N_0)}}{Z(\beta, N)} \tag{1.1}$$

e a distribuição de probabilidade da magnetização é dada por,

$$P_{N,\beta}(M) = \sum_{N_0} P_{N,\beta}(M, N_0)$$

Gere uma amostra de valores aleatórios de M e N_0 com a distribução pretendida usando o método von Neumann. Com esta amostra $\{M_1, M_2, \ldots, M_K\}$

(a) Represente o histograma da amostra aleatória gerada e compare com a distribuição teórica para $\beta \in \{0.1, 0.5, 0.75, 0.9, 1.0, 1.05, 1.1, 1.2, 1.5\}$ e $D \in \{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$.

(b) Meça a autocorrelação da magnetização para $\beta = 1.05$,

$$corr_M(\tau) = \frac{\langle M_i M_{i+\tau}\rangle - \langle M_i\rangle^2}{\langle M_i^2\rangle - \langle M_i\rangle^2}$$
$$\langle M_i M_{i+\tau}\rangle = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} M_i M_{i+\tau} \tag{1.2}$$

2. Exercício

Na pergunta anterior efectuamos uma simulação Monte Carlo gerando as amostras da variável M. Será que a amostra gerada corresponde à gerada por uma dinâmica do sistema de N spins com o Hamiltoniano

$$H = \frac{N^2 - M^2}{N} + D(N - N_0)$$

e com o algorítmo de Metropolis?

1. Para testar implemente o algoritmo de Metropolis para N spins:

   - Atribua a cada um dos N spins do sistema uma variável $\pm 1, 0$ com probailidade uniforme.
   - Considere um passo de tempo o seguinte algoritmo:

   - Escolha um spin com probabilidade uniforme.
   - Aceite inverter-lo com a probabilidade $\min\left(1, e^{-\beta \Delta E}\right)$ senão fique no mesmo estado.

2. Compare as distribuições de probabilidade assiptótica da magnetização para vários valores de β, D.

3. Os amostras geradas são equivalentes às do primeiro problema?

Bom Trabalho