

# PROJETO 5 - Física Estatística Computacional - IFSC - USP - 2023

## SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO

Francisco C. Alcaraz - IFSC - USP - São Carlos

Neste projeto faremos uma aplicação de Simulações de Monte Carlo, em sistemas clássicos de spins. A nossa aplicação será no chamado Modelo de Ising na rede quadrada, com condições periódicas de contorno.

### Modelo de Ising

O modelo de Ising é o modelo mais simples de muitos corpos que podemos imaginar. Nele as variáveis podem assumir apenas dois valores, e as interações diretas entre as mesmas são apenas entre os vizinhos mais próximos. Apesar desta interação direta ser apenas entre os vizinhos mais próximos, eles interagem com os demais spins, via o efeitos que os vizinhos vão propagando aos seus vizinhos mais próximos, e assim sucessivamente.

O modelo fixa as possíveis energias (os possíveis custos de uma forma geral), das várias configurações do problema de muitos corpos.

As variáveis do sistema  $s(ix, iy); ix = 1, \dots, Lx, iy = 1, \dots, Ly$ , estão localizadas nos sítios de uma rede retangular com  $Lx$  sítios na horizontal e  $Ly$  sítios na vertical, sendo o número total de sítios  $N = Lx \times Ly$ . Cada variável pode assumir dois valores possíveis, i. e.,  $s(ix, iy) = +1$  or  $s(ix, iy) = -1$ . Assim temos um conjunto de  $2^N$  configurações possíveis.

O modelo de Ising dá pesos diferentes para cada configuração. A interação entre as variáveis (muitas vezes chamadas spins) é introduzida dando um peso tanto maior quanto maior o número de variáveis, que sendo vizinhas próximas, possuem o mesmo valor. Ele quantifica esta energia dizendo que a energia de uma dada configuração seria dada por

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} s(i, j)[s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1)], \quad (1)$$

sendo  $J$  uma escala de energia (ou do custo no caso geral). Repare que o menor valor possível para  $E$  será  $-2JLxLy$  e isto ocorre quando todos os spins são  $+$  ou  $-$ .

Se pensarmos nas variáveis  $s(i, j)$  como sendo os valores de spins (relacionados a momentos magnéticos do sistema), então se tal sistema estiver no zero absoluto devemos esperar todo o sistema ordenado (todos  $+$  ou todos  $-$ ). Mas se o sistema estiver em uma temperatura absoluta  $T$ , esperamos que as flutuações térmicas permitam que configurações com maior energia possam ter uma probabilidade não nula de ocorrência. De fato, conforme vocês já devem ter visto, ou se não viram, verão, a probabilidade  $P(E)$  dos spins estarem em uma dada configuração de energia  $E$  será proporcional ao chamado fator de Boltzmann :

$$P(E) \sim e^{-\beta E}, \quad (2)$$

sendo  $\beta = 1/KT$ , e  $K$  a constante de Boltzmann ( $300K = \frac{1}{40}\text{ev}$ ), escala esta que governa as flutuações térmicas. Repare que se  $KT \ll J$  (baixas temperaturas), as configurações com alguma probabilidade de ocorrência seriam apenas aquelas em que alguns poucos spins estariam opostos a todos os outros. Por outro lado, se  $KT \gg J$  (altas temperaturas) configurações com energias arbitrárias terão chance de ocorrência. O sistema estará em configurações típicas que dependerão da relação entre estas duas escalas que competem: a escala  $J$ , que tenta privilegiar as configurações que os spins estariam ordenados, e a escala  $KT$  que tenta desordenar o sistema. Uma grandeza que quantifica esta ordenação do sistema é a *magnetização* do sistema por spin. A magnetização, por spin, de uma dada configuração, é dada por:

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} s(i, j). \quad (3)$$

Assim para a temperatura nula, onde o sistema estaria em apenas uma configuração totalmente ordenada teríamos  $m = 1$  ou  $m = -1$ , enquanto para que  $T \rightarrow \infty$ , todas as configurações teriam iguais chances e a magnetização dependeria da configuração que o sistema estivesse. Assim, como em uma dada temperatura várias configurações são

possíveis, definimos a magnetização média por spin do sistema como:

$$\langle m \rangle = \langle M/N \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} s(i, j) \right\rangle. \quad (4)$$

Isto é, para cada configuração  $\{s(i, j)\}$  temos uma energia  $E$  associada dada por (1), e a probabilidade de ocorrência desta configuração é dada por (2). Assim a expressão acima pode ser computada como

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} e^{-\beta E} s(i, j) \right) / Z, \\ Z &= \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} e^{-\beta E}, \end{aligned} \quad (5)$$

sendo  $Z = Z(\beta)$  uma constante de normalização. Esperamos assim que à medida que a temperatura aumenta a magnetização média (que era 1 em  $T = 0$ ), vai diminuindo e que com certeza para  $T \rightarrow \infty$  vai a zero. Na realidade o que deve acontecer (pelo menos em redes de dimensão maior que 1, como a quadrada), é que a magnetização fica nula a partir de uma temperatura especial  $T = T_c$  que chamamos de temperatura crítica. Esta temperatura separa duas fases: a de baixas temperaturas, quando o sistema fica com certa ordenação ( $\langle m \rangle \neq 0$ ) e a fase de altas temperaturas onde o sistema fica sem ordenação alguma ( $\langle m \rangle = 0$ ). Assim a física do sistema seria o que esperamos em materiais ferromagnéticos (como os ímãs de geladeira), onde abaixo de uma certa temperatura exibem magnetismo permanente (estão ordenados independente da presença de um campo magnético externo) e acima desta são paramagnéticos (só se ordenam na presença de um campo magnético externo).

Assim, se queremos calcular a magnetização média  $\langle m(T) \rangle$  para dada temperatura, temos que pensar num problema estatístico em que temos  $2^{LxLy}$  possibilidades ("face de dados") e cada uma delas ocorrendo com probabilidade proporcional à  $\exp(-\beta E)$  sendo  $E$  a energia correspondente da configuração.

Como podemos tratar este assunto? Se olhássemos todas as possibilidades seria um número muito elevado de configurações. Se tivéssemos uma pequena rede de  $Lx = Ly = 10$

teríamos  $2^{100} \approx 10^{30}$  configurações. Num computador em que demorássemos  $10^{-9}$  segundos para testar cada configuração, demoraríamos  $10^{21}$  segundos ou 32.5 trilhões de anos ou 3200 vezes a idade do Universo (14 bilhões de anos). Imagine se tivermos uma amostra de  $N = 10^{23}$  spins !!!.

A análise acima indica que não temos condição de visitar todas as configurações. O que podemos fazer é visitar as configurações, não com chances iguais, mas dando mais chances àquelas que realmente tenham mais chances de ocorrer. Esta é a idéia das simulações de Monte Carlo. Inventamos uma dinâmica (pois o modelo em si não tem dinâmica, ou seja não enche o tempo), tal que no estado assintótico (tempos longos desta dinâmica "cozinhada") o sistema esteja em dada configurações de energia  $E$  com probabilidade  $P(E) \sim \exp(-\beta E)$ . Uma vez atingido este estado assintótico deixamos o sistema mudar pela nossa dinâmica e vamos tomando médias da quantia que queremos medir, como por exemplo a magnetização.

A dinâmica que escolheremos envolve a mudança de um único spin por vez, podendo ser qualquer um deles. A nossa dinâmica consistiria nos seguintes passos:

a) Escolhemos um sítio  $(i, j)$  ao acaso (todos os sítios tem igual chance de serem escolhidos) que tem spin  $s = s(i, j)$ .

b) A energia do sistema é  $E_i$ , e se o spin escolhido for mudado  $s \rightarrow -s$ , a nova energia seria  $E_f = E_i - 2J(s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1))$ . Assim a probabilidade do spin não mudar, ficando com a mesma energia  $E_i$  é  $P(E_i) \sim e^{-\beta E_i}$  e do sistema mudar seria  $P(E_f) \sim e^{-\beta E_f}$ . Ou seja, normalizando as probabilidades temos:

$$\begin{aligned} P(E_i) &= \frac{e^{-\beta E_i}}{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_f}}, \\ P(E_f) &= \frac{e^{-\beta E_f}}{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_f}}, \end{aligned} \quad (6)$$

onde é claro que  $P(E_i) + P(E_f) = 1$ , como deveria ser. Mas reparemos que  $E_i$  e  $E_f$  são dados por:

$$\begin{aligned} E_i &= E_0 + Js(i, j)[s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1)], \\ E_f &= E_0 - Js(i, j)[s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1)], \end{aligned} \quad (7)$$

sendo  $E_0$  os termos da energia que não envolvem o spin  $s(i, j)$ . Assim se substituirmos a última expressão em (6), temos que a probabilidade  $P(s)$  que o spin em  $s = s(i, j)$  permaneça com o seu valor  $s$ , e a probabilidade  $P(-s)$  que ele mude serão dadas por:

$$P(s) = \frac{e^{\beta s \Delta \tilde{M}}}{e^{-\beta s \Delta \tilde{M}} + e^{\beta s \Delta \tilde{M}}}, \quad P(-s) = \frac{e^{-\beta s \Delta \tilde{M}}}{e^{-\beta s \Delta \tilde{M}} + e^{\beta s \Delta \tilde{M}}},$$

$$\Delta \tilde{M} = J[s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1)]. \quad (8)$$

Assim para fazermos uma simulação de Monte Carlo, em uma dada temperatura, usando a dinâmica acima, iniciamos com uma configuração inicial e vamos medindo por exemplo a magnetização do sistema, até que o sistema atinge o equilíbrio, quando a magnetização fica flutuando em torno de seu valor de equilíbrio. A unidade de tempo de Monte Carlo, que definimos, é aquela em que  $N$  spins são testados aleatoriamente. Quando o sistema atinge o equilíbrio, por exemplo em  $t_1$  iterações de Monte Carlo, começamos a tomar as médias (por exemplo do tempo de Monte Carlo  $t_1$  até  $t_1 + T$ ), e tiramos a média por

$$\langle m \rangle = \frac{1}{T} \sum_{t=t_1}^{t_1+T} m(t) \quad (9)$$

Uma outra quantidade interessante e de fácil mensuração é a energia média do sistema.

$$\langle E \rangle = \sum_{E'} P(E') E' \quad (10)$$

### DICAS DE PROGRAMAÇÃO:

Nas simulações que faremos algumas dicas são interessantes:

a) Usaremos sempre, para facilitar  $Lx = Ly = L$  como um número par, e assumiremos que  $J = 1$ , ou equivalentemente  $\beta$  será dado em unidades de  $1/J$ .

b) Usaremos condições de contorno periódicas. É interessante definir-se o vetor  $iplus(i) = i + 1$  para  $(i = 1, \dots, L-1)$ , e  $iplus(L) = 1$ , e o vetor  $iminus(i) = i - 1$  para  $(i = 2, \dots, L)$ , e  $iminus(1) = L$ , porque assim podemos calcular facilmente a função  $\Delta \tilde{M}$ , acima definida, de uma forma homogênea na rede, sem a adição de condicionais.

c) Como estaremos calculando exponenciais inúmeras vezes para dada temperatura, então é interessante definirmos fora dos laços (DOs) onde estaremos varrendo as variáveis

da rede, um vetor com os possíveis valores destas exponenciais, como por exemplo  $fb(i) = \exp(-beta * i)$  com  $-4 \leq i \leq 4$  (veja que somente serão estes os valores que você precisará para uma rede quadrada).

d) Como suas variáveis de spins vão assumir apenas os valores +1 ou -1, é melhor defini-la como uma variável byte, como por exemplo: `byte l(100,100)`. A variável byte ocupará apenas 1 byte, diferentemente de uma variável inteira que consumiria 4 bytes (no mínimo).

e) No caso de escrita das configurações da rede, use uma variável auxiliar do tipo `character` de comprimento 1 como abaixo:

```
-----
character*1 isimb(-1:1)
isimb(1) = '+'
isimb(-1) = '-'
do ix=1,lx
    write(25,25)(isimb(l(ix,iy)),iy=1,ly)
25    format(200a1)
end do
-----
```

Assim a configuração será mais fácil de ser visualizada.

### **TAREFA A**

Vamos fazer uma simulação a uma dada temperatura fixa, iniciando em uma configuração inicial e ver como a magnetização variará no tempo, e no final veremos a configuração final que o sistema atinge. Considere redes de tamanhos  $L = 60$  e  $L = 100$ .

**TAREFA A1:** Inicie com uma configuração totalmente ordenada (todos os spins iguais) e numa temperatura tal que  $\beta = 3$  (em unidades de  $1/J$ ). O sistema estará ordenado quando o equilíbrio for alcançado ou não? Escreva uma das configurações quando o sistema atingir o equilíbrio.

**TAREFA A2:** Inicie com uma configuração totalmente ordenada (todos os spins

iguais) e numa temperatura tal que  $\beta = 0.1$  (em unidades de  $1/J$ ). O sistema estará ordenado no equilíbrio ou não? Escreva uma das configurações quando o sistema atinge o equilíbrio.

### TAREFA B

Existem dois processos térmicos muito importantes em metalurgia (no caso das ligas aço-carbono, o nosso conhecido "aço"), tais processos determinam a dureza e ductilidade do mesmo. Tais processos são o *recozimento* (em inglês *annealing*) e a *têmpera* (em inglês *quenching*). No primeiro o sistema parte de uma temperatura inicial e vai variando-a muito vagarosamente ( $\Delta\beta/\beta \ll 1$ ), de forma que praticamente em todo o processo o sistema esteja bem próximo ao equilíbrio térmico. No caso da têmpera as mudanças de temperatura são rápidas, e o sistema durante o processo estará em geral em situações fora do equilíbrio térmico. Considere redes de tamanho  $L = 60$ .

**TAREFA B1:** Inicie sua rede na configuração correspondente a uma temperatura infinita ( $\beta = 0$ ), isto é, você sorteia aleatoriamente os spins com probabilidade  $1/2$  de ser  $+$  ou  $-$ . Com esta configuração inicial você faz uma simulação em que em cada tempo de Monte Carlo, você usa uma nova temperatura tal que  $\beta_n = \beta_o + \delta$ , sendo  $\beta_o$  a temperatura anterior e  $\beta_n$  a nova temperatura, com  $\delta = 0.001$ . Inicie na temperatura infinita (em que  $\beta = 0$ ) e proceda até a temperatura final em que  $\beta = 3$ . Neste caso você estará fazendo um recozimento. Como a variação da temperatura entre interações sucessivas é pequena, o sistema vai sempre evoluindo próximo à sua condição de equilíbrio, e alcança no final a sua condição de equilíbrio. **Grafique em função das iterações de Monte Carlos, a energia por spin do sistema  $E/N$  e escreva a sua configuração final de equilíbrio.**

**TAREFA B2:** Inicie sua rede na configuração correspondente a uma temperatura infinita ( $\beta = 0$ ), isto é, você sorteia aleatoriamente os spins com probabilidade  $1/2$  de ser  $+$  ou  $-$ . Com esta configuração inicial você faz uma simulação mantendo o sistema na temperatura fixa em que  $\beta = 3$ . Faça o mesmo número de iterações de Monte Carlo que no caso anterior ( $3/0.001 = 3000$ ). Neste caso você estará fazendo uma têmpera. Como a variação da temperatura foi brusca o sistema evolui bem longe do equilíbrio podendo

não atingi-lo. Grafique em função das iterações de Monte Carlos, a energia do sistema e escreva a configuração final de equilíbrio que você atingiu.

### **TAREFA C**

Faremos aqui o que chamamos de loop térmico. É um processo bastante interessante em que fazemos o sistema, via iterações de Monte Carlo, vir da temperatura infinita ( $\beta = 0$ ) até a uma temperatura próxima do zero absoluto, e depois fazemos a volta do sistema aquecendo-o, com os mesmos passos de diferenças de temperatura, até atingir novamente a temperatura infinita, percorrendo assim o loop térmico. O processo é feito por uma sequência de mini-têmperas em que a temperatura em cada iteração de Monte Carlo varia de  $\Delta\beta$ .

A física do loop térmico é a seguinte. Se estivermos longe do ponto crítico esperamos que os spins estejam pouco correlacionados (mudam quase que por vontade própria, não ligando para os spins mais distantes), assim uma pequena variação da temperatura por  $\Delta\beta$  não o tira do equilíbrio de forma que ao medirmos a energia da configuração a mesma é próxima à do equilíbrio térmico. Por outro lado se a temperatura for baixa, o sistema está se ordenando e os vizinhos próximos praticamente ditam o ordenamento preferencial do spin, assim apenas uma iteração ainda manterá o sistema perto da situação de equilíbrio. Contudo quando estamos no entorno do ponto crítico o sistema apresenta correlações de grande alcance e na situação de equilíbrio para mudar um dado spin ele precisaria saber como estão os spins à grandes distâncias, daí precisaríamos fazer várias iterações de Monte Carlo, para atingir o equilíbrio. Mas no loop térmico fazemos só uma interação e já mudamos a temperatura por  $\Delta\beta$ , e o sistema vai ficar portanto fora de equilíbrio, isto é, ele apresentará características de altas temperaturas, ou de baixas temperaturas, dependendo se está esfriando ou esquentando. Assim nesta região teríamos o sistema numa situação de super-resfriamento ou super-esquentamento. A média da energia por sítio  $\langle E \rangle / N$  durante o loop, apresentará ao redor do ponto crítico um loop de histerese, evidenciando a região crítica.

**TAREFA C1:** Faça para as redes de tamanhos  $L = 60, 80$  e  $100$ , os loop térmicos



usando  $\Delta\beta = 0.001$  e  $\Delta\beta = 0.0001$ . Faça  $\beta$  variar de zero até 1.75. Grafique no loop térmico a energia por sítio  $E/N$ . Repare que o range de variação de  $\beta$ , onde acontece a histerese, se estreita quando  $\Delta\beta$  diminui. Assim você pode estimar que a temperatura crítica ocorre na região da histerese.

**TAREFA C2:** Vamos determinar com maior precisão a temperatura crítica do modelo. Para isto selecione o range de  $\beta$  em que ocorreu a histerese (variações de 0.01), e faremos simulações fixando estas temperaturas para vermos se estamos em temperaturas maiores ou menores que a crítica. Como sabemos que na temperatura zero o sistema estará totalmente ordenado e na temperatura infinita todo desordenado, consideramos o sistema na condição inicial mista, em que metade dos spins estão ordenados (como em  $\beta \rightarrow \infty$ ) e a outra metade os spins estão desordenados (como em  $\beta = 0$ ). Ao medirmos a energias  $E/N$ , em função das iterações de Monte Carlo, verificaremos que os valores que saem sempre do mesmo valor inicial, possuem variação distintas para cada valor de  $\beta$ . Comparando-se num gráfico com as evoluções das várias temperaturas, a temperatura crítica estimada estaria entre as temperaturas que exibiram maior variação no comportamento. Grafique as evoluções nas várias temperaturas que estão no range de histerese, e estime a sua temperatura crítica. Utilize redes de tamanho  $L = 60, 80$  e  $100$ .

#### **TAREFA D**

Neste projeto podemos aproveitar e aprender um dos conceitos mais importantes da física contemporânea. O chamado efeito: *quebra espontânea de simetria*.

O modelo de Ising tem uma simetria por inversão global dos spins, também chamada por simetria global  $Z(2)$ . Esta simetria se dá pelo fato de que se invertemos todos os spins de dada configuração dos spins  $\{s(i, j)\}$  com energia  $E$ , a configuração resultante  $\{-s(i, j)\}$  também terá a mesma energia  $E$ . Como a probabilidade de ocorrência de dada configuração só depende de  $E$ , as duas configurações possuem a mesma chance. Assim esperaríamos que uma medida da magnetização média  $\langle m \rangle$  deveria ser sempre nula, e o sistema então não se ordenaria à baixas temperaturas, diferentemente do que já o verificamos. Isto quer dizer que o sistema por si só, através de sua dinâmica, quebra a simetria

de inversão (ou simetria  $Z(2)$ ) para  $T < T_c$ , preferindo ficar em uma das possibilidades de ordem. Na realidade, se estivermos com uma das ordenações e se esperarmos por tempo suficiente, verificaremos que o sistema vai para configurações de outra ordenação, e mais adiante viria para a ordenação antiga e assim sucessivamente. O problema é que o tempo característico para a mudança de ordenação cresce exponencialmente com o número de spins. Assim para sistemas grandes ficaremos apenas em uma das orientações. Em particular no limite termodinâmico em que  $L \rightarrow \infty$  nunca sairíamos de uma ordenação para outra, e dizemos que a simetria que havia no sistema foi espontaneamente quebrada. Este é o mecanismo da transição de fase, e vemos que rigorosamente uma transição de fase só ocorre no limite  $L \rightarrow \infty$ , e as transições de fases que observamos na natureza (por exemplo água-gelo, ou água-vapor), não são transições do ponto de vista rigoroso, mas se esperássemos por um tempo da ordem de muitas idades do Universo, poderíamos observar o gelo, em uma temperatura abaixo de zero, se tornar água, por si só.

**TAREFA D1:** Para apreciarmos este ponto vamos fazer uma simulação em que o sistema esteja na temperatura baixa  $T = 2/K$ , isto é  $\beta = 1/2$ , e vemos por quantas iterações o sistema ficaria com um dado sinal da magnetização. Iniciamos o sistema, por exemplo na situação desordenada, esperamos um certo número de iterações de Monte carlo (tipicamente 2000 iterações) e Fazemos uma média destes intervalos que separam as iterações em que a magnetização muda de sinal, que chamaremos de  $\langle T_{intervalo} \rangle$ . Faça simulações em redes com  $L = 4, 5, 6, 7, 8, 9$  e  $10$ . Faça um gráfico de  $\langle T_{intervalo} \rangle \times L$  e verifique que  $\ln(\langle T_{intervalo} \rangle)$  terá um crescimento exponencial, evidenciando assim o fenômeno da quebra espontânea de simetria, quando  $L \rightarrow \infty$ . Isto é, se o sistema se iniciar numa ordenação nunca atingirá a outra dando "bye-bye" à simetria de inversão do sistema.

Este é o mecanismo que se usa para explicar as assimetrias que existem em nosso Universo. A física mais fundamental (que regia o Universo no instante do Big-Bang tinha uma simetria enorme, inclusive com a ausência de massas, pois estas quebram simetrias) mas com uma dinâmica própria ("Dinâmica Divina") evolui. Acontece que esta dinâmica

de forma análoga à que estudamos, leva o sistema a não respeitar a simetria original (como os nosso modelo que abaixo de  $T_c$  fica apenas com uma das magnetizações desrespeitando a simetria de inversão original). Este desrespeito à simetria já estava embutido na dinâmica original do sistema. Ao quebrar estas simetrias surgem fases do sistema, como por exemplo as massas das partículas, e nestas fases as interações entre as partículas são características das mesmas, surgindo assim a Cromodinâmica e o Eletromagnetismo, por exemplo.

Assim se quisermos entender o universo no seu primórdio, temos que começar com uma teoria com muita simetria, e uma dinâmica que permitirá a quebra destas simetrias.