



Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Física Computacional 2019/2020

Trabalho Prático 10 Métodos de Monte Carlo

Introdução aos Trabalhos 10.1 e 10.2

Nos dois problemas que se seguem, vamos começar por determinar o valor do integral simples

$$I_2 = \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx.$$

O valor deste integral é o da área de um quadrante de um círculo de raio unitário, ou seja, $1/2^2$ da área desse círculo, pelo que o seu valor é dado por $I_2 = \pi/4$.

Em seguida, vamos estender o cálculo para integrais com $d - 1$ dimensões:

$$I_d = \int_0^1 \int_0^1 \cdots \int_0^1 \sqrt{1-x_1^2-x_2^2-\cdots-x_{d-1}^2} dx_1 dx_2 \cdots dx_{d-1}.$$

O valor deste integral é $1/2^d$ do volume de uma hiper-esfera de d dimensões:

$$I_d = \frac{1}{2^d} \cdot \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)} R^d,$$

com $R = 1$. Use a função `gamma` do MATLAB.

Vamos também analisar a dependência do erro com o número de pontos usados para o cálculo dos integrais.

Problema 10.1

- a) Para representar os valores de x_i , crie um vetor de N números aleatórios entre 0 e 1 com uma distribuição de probabilidade uniforme. Calcule explicitamente os valores $f(x_i) = \sqrt{1-x_i^2}$. Estime I_2 a partir do valor médio de $f(x_i)$ e compare com o valor exato.

- b) Para um valor de d não superior a 10, crie $d - 1$ conjuntos de N números aleatórios de maneira a obter os valores de $x_{1,i}, x_{2,i}, \dots, x_{d-1,i}$ com $i = 1, 2, \dots, N$. Calcule explicitamente os valores da função dada por

$$f_d(x_{1,i}, x_{2,i}, \dots, x_{d-1,i}) = \begin{cases} \sqrt{1 - \sum_{j=1}^{d-1} x_{j,i}^2} & \text{se } \sum_{j=1}^{d-1} x_{j,i}^2 \leq 1 \\ 0 & \text{se } \sum_{j=1}^{d-1} x_{j,i}^2 > 1 \end{cases}$$

Calcule o valor de I_d e compare com o valor exato. Repita para outros valores de d .

Problema 10.2

Para poder estudar corretamente a dependência do erro com N , deve, para cada valor de N , repetir várias vezes o cálculo do erro. Para o cálculo do erro use

$$\sqrt{\langle (I_{\text{num}} - I_{\text{exato}})^2 \rangle}.$$

- a) Verifique se o erro da estimativa de I_2 é proporcional a $N^{-1/2}$ e dado aproximadamente por $(1 - 0)\sigma N^{-1/2}$, onde σ é o desvio padrão dos valores de $f(x_i)$. Basta estimar σ uma vez, usando a função `std` do MATLAB.
- b) Verifique se o erro da estimativa de I_4 é dado aproximadamente por $V_3\sigma N^{-1/2}$, onde V_3 é o volume do domínio de integração. Neste caso, $V_3 = 1$ uma vez que é o volume de um cubo de aresta unitária.

Introdução aos Trabalhos 10.3 e 10.4

Nos dois trabalhos seguintes vamos calcular numericamente a magnetização média de um sistema bidimensional de 100×100 spins que se encontram nos locais de uma rede quadrada. Cada spin é descrito por um número quântico S que pode tomar apenas os valores -1 e $+1$. A interação entre os spins é descrita pelo modelo de Ising: a energia reduzida de uma dada configuração α do sistema é dada por uma soma sobre todos os pares de vizinhos próximos:

$$E^*(\alpha) = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j.$$

Para simplificar, vamos omitir os $*$ que habitualmente indicam que se está a trabalhar com grandezas reduzidas.

Como a energia é composta por parcelas de energia de interação entre vizinhos próximos, vamos analisar quais são os vizinhos próximos. A rede de $n \times n$ spins tem um total de $N = n^2$

spins. Para um spin em que nem i nem j tomam os valores 1 ou n , é fácil de ver que os vizinhos próximos têm os índices

$$(i - 1, j), (i + 1, j), (i, j - 1), (i, j + 1).$$

Como usamos condições fronteira periódicas, um spin junto a uma das fronteiras vai ter um dos seus vizinhos próximo junto à fronteira oposta. Esse problema resolve-se facilmente escrevendo:

```
aux=1:1:n;
menos=circshift(aux,[0_-1]);
mais=circshift(aux,[0_+1]);
```

Para um n pequeno, escreva estes comandos (sem “;”) na janela de comandos do MATLAB e confirme que os vizinhos próximos do spin (i, j) passam a ser dados por

$$(\text{menos}(i), j), (\text{mais}(i), j), (i, \text{menos}(j)), (i, \text{mais}(j)).$$

Para além da matriz dos spins, S , com elementos $S(i, j)$, pode ser criada uma matriz com as mesmas dimensões, que pode ter o nome $SSVP$, e que tem como valor $SSVP(i, j)$ a soma dos spins vizinhos próximos do spin (i, j) . Vamos relacionar a variação de energia que resultaria da inversão do spin (i, j) com os valores dos elementos das duas matrizes. Note que a inversão do spin corresponde à mudança $S(i, j) \rightarrow -S(i, j)$.

$$\begin{aligned} \Delta E &= \{E_{\text{final}}\} - \{E_{\text{inicial}}\} \\ &= \{-[-S(i, j)] \cdot SSVP(i, j)\} - \{-S(i, j) \cdot SSVP(i, j)\} \\ &= 2 \cdot S(i, j) \cdot SSVP(i, j). \end{aligned}$$

Se a inversão de spin for aceite, é preciso alterar os valores $SSVP$ dos 4 vizinhos próximos. Por exemplo,

$$\begin{aligned} SSVP(i, \text{mais}(j)) &\rightarrow SSVP(i, \text{mais}(j)) - S(i, j) + [-S(i, j)] \\ SSVP(i, \text{mais}(j)) &\rightarrow SSVP(i, \text{mais}(j)) - 2S(i, j) \end{aligned}$$

Usando os procedimentos descritos acima, pode-se calcular a variação de energia resultante da inversão de um spin e proceder às alterações necessárias no caso dessa mudança ser aceite. Para aceitar ou não a inversão, é preciso calcular o valor de

$$\exp(-\Delta E/T),$$

e comparar o valor com um número aleatório com uma distribuição uniforme entre 0 e 1. É fácil de ver que não é necessário estar sempre a calcular estas exponenciais, pois elas só podem tomar um número muito reduzido de valores. Comece por verificar que os únicos valores possíveis de $SSVP(i, j)$ são $-4, -2, 0, +2$ e $+4$. Dado aquilo que já sabemos sobre

ΔE , pode-se escrever uma tabela com os seus valores em função dos valores de $S(i, j)$ e $SSVP(i, j)$ anteriores à eventual inversão:

$S(i, j) \backslash SSVP(i, j)$	-4	-2	0	+2	+4
-1	+8	+4	0	-4	-8
+1	-8	-4	0	+4	+8

Para usar no seu programa, escreva a seguinte matriz $comp(k, l)$:

$k \backslash l$	1	2	3	4	5
1	$e^{-8/T}$	$e^{-4/T}$	1	$e^{+4/T}$	$e^{+8/T}$
2	$e^{+8/T}$	$e^{+4/T}$	1	$e^{-4/T}$	$e^{-8/T}$

Analisando os valores de $S(i, j)$ e $SSVP(i, j)$ e os correspondentes valores dos índices k e l das duas tabelas acima, é fácil de ver que o termo a ser comparado com um número aleatório para decidir se a inversão é aceite é

$$comp((S(i, j)+3)/2, SSVP(i, j)/2+3)$$

Problema 10.3

Estude o sistema de $N = 10000$ spins para as seguintes temperaturas:

- $T = 1.8$
- $T = 2.7$

Sugere-se que siga os seguintes passos para obter a estimativa numérica da magnetização por partícula:

- Inicie os valores numéricos escalares.
- Crie os vetores **menos** e **mais**.
- Crie a matriz **comp**.
- Crie a matriz **S**, dando o valor inicial +1 a todos os seus elementos.
- Crie a matriz **SSVP**. Dado o ponto anterior, todos os seus elementos devem ter o valor inicial +4.
- Faça um número de tentativas de inversão de um spin (i, j) igual ao número de partículas do sistema. O spin deve ser sempre escolhido aleatoriamente (independentemente de já terem sido feitas tentativas, com ou sem sucesso, de inverter esse spin).

Se o valor de **comp** correspondente for maior que um número aleatório escolhido uniformemente entre 0 e 1, aceite a inversão e atualize **SSVP**(**i**, **j**) e os valores **SSVP** dos vizinhos próximos.

7. Registe o valor da magnetização total, ou seja, o valor da soma de todos os elementos da matriz S .
8. Repita os pontos 6 e 7 um total de 15000 vezes. Este é o número total de passos de Monte Carlo por partícula.
9. Represente graficamente a magnetização total em função do número de passos de Monte Carlo e calcule a magnetização média por partícula, desprezando um número suficiente dos registos iniciais, para garantir que só usa medidas obtidas em equilíbrio térmico à temperatura T .

Problema 10.4

Repita o Problema 10.3 para temperaturas entre 1.6 e 2.9, com espaçamento de 0.1. Represente graficamente a magnetização média por partícula obtida numericamente e os valores exatos do limite termodinâmico ($N \rightarrow +\infty$) obtidos por Onsager:

$$\frac{\langle M \rangle}{N} = \begin{cases} \left[1 - \sinh^{-4} \left(\frac{2}{T} \right) \right]^{1/8}, & \text{para } T \leq T_c, \\ 0, & \text{para } T > T_c, \end{cases}$$

com $T_c = 2 / \ln [1 + \sqrt{2}]$.