

## Simulação do Modelo de Ising 2D

Agora que já fizemos uma exploração inicial do algoritmo de Metropolis aplicado ao modelo de Ising 2D, explorando os tempos de termalização necessários, estamos em condições de fazer uma simulação estimando grandezas termodinâmicas em um certo intervalo de temperaturas. Conforme deve ter ficado evidente, os dados gerados pelo método de Metropolis variam consideravelmente nos passos iniciais do algoritmo e, após certo tempo, convergem para um estado estacionário, passando a flutuar em torno de um valor médio bem definido. Assim, para estimarmos as grandezas termodinâmicas, devemos descartar os passos necessários para o algoritmo termalizar. O número exato de passos que devemos descartar não pode ser determinado. O que fazemos na prática é utilizar um número de passos consideravelmente maior que os estimados na tarefa anterior. De fato, há grande arbitrariedade nessas escolhas e deve-se sempre optar por estimativas mais conservadoras, no sentido de garantirem de forma mais consistente que a termalização será atingida.

Outro ponto que deve ser considerado com bastante cuidado são as fontes de erros nas simulações. Podemos dividir os erros em duas classes: Erros Estatísticos e Erros Sistemáticos. Os erros sistemáticos são aqueles advindos do método em si e, portanto, não temos meios muito eficazes de controlá-los e estimá-los. Talvez, a maior fonte de erros sistemáticos em métodos de Monte Carlo são os intervalos de termalização e as correlações existentes entre configurações consecutivas. Em parte, o que fizemos na tarefa anterior, serve basicamente para evitarmos a primeira fonte de erro mencionada. Apesar de tanto para simulações do modelo de Ising como de outros modelos termos meios de explorar com cuidado e atenção as fontes de erros sistemáticos, neste curso não entraremos nesses detalhes, ficando assim para pesquisas futuras dos interessados. Aqui, trataremos basicamente dos erros estatísticos, que são aqueles advindos das mudanças aleatórias em medidas feitas em execuções diferentes da simulação, advindas basicamente da natureza estatística (aleatória) do método de Monte Carlo.

### Erros estatísticos

Existem diversas formas para se estimar os erros estatísticos presentes numa simulação. Aqui, trataremos a forma mais simples e direta para estimar tais erros, o método de caixas. Ressalto, no entanto, que tratamentos mais elaborados devem ser usados em situações mais críticas. Para os mais interessados, recomendo pesquisar pelos métodos de bootstrap e jackknife.

Suponha que numa simulação do modelo de Ising queiramos determinar os valores da energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética. O calor específico é definido como

$$c_v = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2),$$

e a susceptibilidade é dada por

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2),$$

onde  $M = |\sum S_i|$  é a magnetização e  $E = -\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$  é a energia. Os valores de energia por spin e magnetização por spin são obtidos ao dividir o valor médio calculado para energia e magnetização pelo número de spins da rede. Perceba que utilizamos o módulo da magnetização uma vez que estados com todos spins em  $-1$ , o que equivale a magnetização  $M = -N$ , ou com todos spins em

$+1$ , o que equivale a magnetização  $M = +N$ , são completamente equivalentes. Note, ainda, que tais grandezas dependem dos valores esperados da magnetização e da energia. Como vimos, os valores de energia e magnetização obtidos após a termalização do sistema flutuam em torno de um valor médio, de forma que podemos estimar o valor médio da energia e da magnetização tomando a média aritmética simples destas grandezas dentre todos os valores gerados. Estes valores podem, então, serem usados para se obter estimativas do calor específico e da susceptibilidade.

Uma questão que deve ser notada é que mesmo sendo as estimativas do calor específico e da susceptibilidade tomados com base em valores médios da energia e magnetização, essas grandezas também estarão sujeitas a flutuações estatísticas. Resta, então, a pergunta: como estimar o erro estatístico de uma estimativa para  $c_v$ , por exemplo, numa simulação com  $N_{mcs}$  passos de Monte Carlo já que, a princípio, em cada simulação teremos apenas um valor para essa grandeza? Podemos pensar em duas formas distintas: 1) realizar várias simulações (chamaremos de amostras diferentes) e comparar as estimativas entre amostras distintas. Neste caso, em cada amostra usaríamos uma sequência diferente de números aleatórios e uma configuração inicial diferente e realizaríamos os  $N_{mcs}$  passos em cada uma dessas amostra. Obteríamos, assim, uma estimativa diferente para cada amostra considerada. Outra opção, 2), seria realizar uma simulação muito longa e dividi-la em  $n$  blocos, contendo  $N_{mcs}/n$  passos de Monte Carlo cada, e estimar as grandezas em cada um destes blocos e comparar estas estimativas. Estes métodos são, em muitos aspectos, equivalentes. O primeiro é capaz de diminuir um pouco possíveis erros sistemáticos. No entanto, no método que utilizaremos e com o conhecimento que já foi acumulado ao longo dos anos de simulações do modelo de Ising 2D pelo algoritmo de Metropolis, tais erros podem ser negligenciados sem efeitos significativos, de forma que utilizaremos o método 2, método de blocos para estimar os erros estatísticos. Da forma exposta aqui, também negligenciaremos o tempo de correlação entre passos de Monte Carlo, que deveria, a princípio, ser considerado. Ou seja, consideraremos que cada configuração obtida é estatisticamente independente das outras, o que não é verdade. Como frisado anteriormente, em situações mais delicadas estes fatores não poderiam ser desconsiderados e deveriam receber o tratamento adequado.

O método das caixas consiste, então, em estimar, no caso do calor específico, valores para  $\langle E \rangle_i$  e para  $\langle E^2 \rangle_i$ , correspondendo aos  $m = N_{mcs}/n$  passos da caixa  $i$ , em cada uma das caixas e combinar os  $n$  valores assim obtidos para calcular a estimativa final de  $c_v$ , permitindo assim estimar o erro estatístico associado. Assim, a estimativa da energia relacionada à caixa  $i$  será

$$\langle E \rangle_i = \frac{1}{m} \sum_{j=im}^{(i+1)m-1} E_j,$$

onde  $E_j$  corresponde ao valor da energia da configuração  $j \in \{N_{mcs}\}$ . Na expressão acima, assumi que o índice  $j$  varia de 0 a  $N_{mcs} - 1$  e que o índice  $i$  varia de 0 a  $n - 1$ , de acordo com os índices de arrays em python que começam em 0. De forma equivalente, podemos obter uma expressão para  $\langle E^2 \rangle_i$ , bastando para isso trocar  $E$  por  $E^2$  na expressão acima. O calor específico correspondente à caixa  $i$  será, então,

$$(c_v)_i = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle_i - \langle E \rangle_i^2).$$

O valor médio do calor específico será

$$\langle c_v \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (c_v)_i,$$

e o erro estatístico associado será dado por

$$err(c_v) = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{n-1} (\langle c_v \rangle - (c_v)_i)^2}{n(n-1)}}.$$

Esse mesmo procedimento pode ser replicado para as demais quantidades, inclusive para a energia e magnetização, onde para determinar o erro estatístico associado utilizaremos os valores médios encontrados em cada uma das  $n$  caixas.

### Atividade:

Vamos explorar as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising 2D fazendo simulações pelo algoritmo de Metropolis. Para realizar as simulações você deverá escolher valores para os parâmetros da simulação. Especificamente, você deverá escolher o tamanho do sistema,  $L$ , a temperatura de simulação,  $T$ , o número de passos de Monte Carlo para termalização,  $N_{Term}$ , e o número de passos de Monte Carlo para calcular as médias termodinâmicas,  $N_{MCS}$ .

- 1) Quais critérios você utilizou para escolher os valores dos parâmetros descritos acima? Provavelmente suas escolhas iniciais precisarão ser revistas, não há problemas! Pelo contrário, o ideal é que ao longo do trabalho você vá revendo suas escolhas, aprimorando-as, mas quero saber quais os principais fatores que nortearam suas escolhas finais.
- 2) Descreva o comportamento observado para as principais grandezas termodinâmicas – Energia por spin, Magnetização por spin, calor específico e susceptibilidade magnética – em função da temperatura. Ou seja, ao variar a temperatura, o que acontece com o valor destas grandezas? Quais são os limites para baixas e altas temperaturas? Há algum pico ou vale? O comportamento está em acordo com o que você esperava?
- 3) Ao variar o tamanho do sistema, como as curvas destas grandezas em função da temperatura se modifica? Há algum intervalo de temperaturas no qual as grandezas são independentes do tamanho do sistema? Em regiões onde há variação com o tamanho do sistema, como a grandeza é modificada quando  $L$  aumenta?
- 4) Como é o comportamento dos erros estatísticos à medida que a temperatura varia? Tem algum valor de temperatura em torno do qual os erros são maiores? Você enxerga algum motivo para isso? Os erros estatísticos dependem do tamanho do sistema? Como?
- 5) Com base no comportamento encontrado, identifique possíveis fases do sistema, descrevendo as principais características das fases encontradas.
- 6) Estime, utilizando os dados das suas simulações, a temperatura de transição de fase do sistema no limite termodinâmico, i.e., para o limite em que o tamanho do sistema é infinito.

Para embasar suas respostas, apresente gráficos das grandezas que você estudou, representando adequadamente as barras de erro encontradas.

### Algumas dicas:

Ao iniciar uma simulação em uma temperatura alta com uma configuração aleatória, esperamos que a configuração esteja “mais próxima” da região do espaço de configurações correspondente às configurações de equilíbrio desta temperatura. De forma semelhante, se reduzirmos a temperatura considerando como configuração inicial a última configuração gerada na temperatura maior que foi simulada anteriormente, esperamos que estejamos mais próximos à região de equilíbrio do espaço de configurações, de forma que este procedimento, i.e., se manter a última configuração da temperatura anterior como primeira configuração da próxima temperatura a ser estudada, tende a

reduzir o tempo necessário para o sistema termalizar. Mesmo assim, ao variar a temperatura é necessário refazer o processo de termalização, preferencialmente com o número de passos estimados para o caso independente da configuração inicial.

#### Referências:

- M. Newman, G. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Claredon Press (1999)
- D. Landau, K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", Cambridge University Press (2014)
- W. Krauth, "Statistical Mechanics: Algorithms and Computations" Oxford University Press (2006)