LISTAS 12 E 13: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Considere o modelo de Ising em uma rede quadrada bidimensional ($d = 2$) com $N = L \times L$ spins cujo Hamiltoniano é dado por [1]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad ,$$

onde $s_i = \pm 1$ denota o spin da i-ésima partícula e a notação $\langle i, j \rangle$ indica que a soma em j é feita somente sobre os quatro primeiros vizinhos. Sabendo que cada spin também pode ser indicado por dois índices m e n, os quais denotam suas posições na rede ($m, n = 1, \dots, L$), podemos calcular a energia total do sistema como

$$E = -J \sum_{m=1}^{L} \sum_{n=1}^{L} s_{m,n}(s_{m+1,n} + s_{m,n+1}) \quad , \tag{1}$$

onde considera-se condições de contorno periódicas:

$$m + 1 \to 1 \quad \text{se} \quad m = L \qquad \text{ou} \qquad m - 1 \to L \quad \text{se} \quad m = 1$$

e

$$n + 1 \to 1 \quad \text{se} \quad n = L \qquad \text{ou} \qquad n - 1 \to L \quad \text{se} \quad n = 1 \quad .$$

a) Mostre que a diferença de energia para inverter um spin $s^{\nu}_{m,n} \to s^{\nu'}_{m,n} = -s^{\nu}_{m,n}$ pode ser escrita como

$$\Delta E = E_{\nu'} - E_{\nu} = 2J s^{\nu}_{m,n}(s^{\nu}_{m+1,n} + s^{\nu}_{m-1,n} + s^{\nu}_{m,n+1} + s^{\nu}_{m,n-1}) \quad . \tag{2}$$

b) Implemente um programa para realizar simulações de Monte Carlo desse modelo no ensemble canônico, isto é, utilizando o peso de amostragem $w(E) = e^{-\beta E}$ do algoritmo de Metropolis (vide Lista 11), o qual define a **probabilidade de aceitação** como

$$p(\nu \to \nu') = \min\left[1, \frac{w(E_{\nu'})}{w(E_{\nu})}\right] = \min\left[1, e^{-\beta \Delta E}\right] \quad , \tag{3}$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e ΔE é dada pela expressão 2. Assuma que a **regra** para propor uma nova configuração é definida pela inversão de um spin, isto é, $s^{\nu}_{m,n} \to s^{\nu'}_{m,n} = -s^{\nu}_{m,n}$ (dessa maneira 1 passo de Monte Carlo, ou 1 MCs, é definido como as tentativas de inverter o sentido de cada um dos N spins da rede). Realize simulações para $L = 32$ para obter séries da energia E_k e magnetização $M_k = \sum_m \sum_n s^k_{m,n}$ com $k = 1, 2, 3, \dots, 1.1 \times 10^6$ MCs para as seguintes temperaturas $T'_\alpha = 2 + (\alpha - 1)0.2$, onde $\alpha = 1, \dots, 5$ e $T' = k_B T/J$ (dica: utilize $k_B = 1$ e $J = 1$ para facilitar a implementação). Considere uma configuração inicial com todos os spins orientados aleatoriamente e, para as análises dos items abaixo, utilize as séries **descartando** os primeiros 10^5 MCs para *termalização* do sistema.
c) Obtenha os tempos de auto-correlação integrado $2\tau_{\text{int}}$ (vide Lista 10) das séries obtidas após os passos de termalização. Faça dois gráficos de $2\tau_{\text{int}}$ em função da temperatura T', um para a energia e o outro para a magnetização.
d) Faça dois gráficos dos histogramas das séries obtidas, um para a energia por spin $\varepsilon = E/(2N)$ e outro para a magnetização por spin $\mu = |M|/N$, incluindo em cada um deles os resultados para as cinco temperaturas simuladas. Note que no caso das energias os intervalos são de quatro unidades, isto é, as energias assumem valores $E_l = 4l - 2N$ com $l = 0, 1, 2, \dots, N$ e $H_l = H(E_l)$ define o número de configurações amostradas com energias no intervalo $[E_l, E_{l+1}[$. Já para os valores de magnetização M_l o intervalo é de duas unidades.

ser obtidas dividindo a série de dados x_k ($k = 1, \dots, N_{\text{dados}}$) em N_a subintervalos com n_a MCs cada, *i.e.* $N_{\text{dados}} = N_a \times n_a$. Com isso as médias térmicas e as flutuações de uma grandeza x amostradas utilizando um peso $w_\alpha = e^{-\beta_\alpha E}$ podem ser calculadas, respectivamente, como

$$\bar{x}(\beta_\alpha) = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \bar{x}_j(\beta_\alpha) \qquad \text{e} \qquad \bar{\chi}(\beta_\alpha) = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \bar{\chi}_j(\beta_\alpha) \quad , \tag{4}$$

onde

$$\bar{x}_j(\beta_\alpha) = \frac{1}{N_{\text{dados}} - n_a} \sum_{k \notin \{j\}}^{N_{\text{dados}}} x_k \quad , \qquad \bar{x^2_j}(\beta_\alpha) = \frac{1}{N_{\text{dados}} - n_a} \sum_{k \notin \{j\}}^{N_{\text{dados}}} x_k^2 \qquad \text{e} \qquad \bar{\chi}_j(\beta_\alpha) = \bar{x^2_j} - \bar{x}_j^2 \quad , \tag{5}$$

sendo que a notação $k \notin \{j\}$ indica que k percorre toda a sequência com N_{dados} valores, **exceto** os n_a pontos que pertencem ao j-ésimo subintervalo. Além disso, os erros para essas quantidades podem ser estimados a partir da raíz quadrada dos seus respectivos desvios padrão, os quais são dados por

$$\sigma^2_{\bar{x}}(\beta_\alpha) = \frac{N_a - 1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \left[\bar{x}_j(\beta_\alpha) - \bar{x}(\beta_\alpha)\right]^2 \qquad \text{e} \qquad \sigma^2_{\bar{\chi}}(\beta_\alpha) = \frac{N_a - 1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \left[\bar{\chi}_j(\beta_\alpha) - \bar{\chi}(\beta_\alpha)\right]^2 \quad . \tag{6}$$

Definindo o número de pontos em cada subintervalo como $n_a \approx 2\tau_{\text{int}}$, onde $2\tau_{\text{int}}$ é o valor máximo do tempo de auto-correlação para as séries de energia obtido dentre as cinco temperaturas simuladas, utilize as expressões 4 e 5 para calcular estimativas para a energia média por spin $\varepsilon(T'_\alpha) = \bar{x}(\beta_\alpha)/(2N)$ e calor específico $C_v(T'_\alpha) = (Nk_B {T_\alpha}^2)^{-1}\bar{\chi}(\beta_\alpha)$, com $x_k = E_k$; e também para a magnetização por spin $\mu(T'_\alpha) = \bar{x}(\beta_\alpha)/N$ e a susceptibilidade magnética $\chi(T'_\alpha) = (NT_\alpha)^{-1}\bar{\chi}(\beta_\alpha)$, com $x_k = |M_k|$. Faça os quatro gráficos dessas quantidades em função das temperaturas simuladas T'_α $(\alpha = 1, \ldots, 5)$ incluindo os erros dessas grandezas estimados pelas raízes quadradas dos desvios padrão (Eqs. 6).

f) Em geral, podemos obter estimativas paras as médias térmicas e flutuações de uma grandeza x em temperaturas β_i próximas à β_α utilizando a técnica de **repesagem de histogramas**. Considere, por exemplo, a série obtida à uma temperatura $T'_\alpha = 1/\beta'_\alpha$ com um peso de amostragem $w_k^\alpha = e^{-\beta_\alpha E_k}$, é possível obter médias térmicas e flutuações de uma grandeza x em uma outra temperatura $T'_i = 1/\beta'_i$ reescrevendo as expressões em 5 como

$$\bar{x}_j^\alpha(\beta_i) = [Z_j^\alpha(\beta_i)]^{-1} \sum_{k \notin \{j\}}^{N_{\text{dados}}} x_k [w_k^\alpha]^{-1} e^{-\beta_i E_k} \quad , \quad \bar{x_j^{\alpha 2}}(\beta_i) = [Z_j^\alpha(\beta_i)]^{-1} \sum_{k \notin \{j\}}^{N_{\text{dados}}} x_k^2 [w_k^\alpha]^{-1} e^{-\beta_i E_k} \quad \text{e} \quad \bar{\chi}_j(\beta_i) = \bar{x_j^{\alpha 2}} - (\bar{x}_j^\alpha)^2 \quad , \tag{7}$$

onde $Z_j^\alpha(\beta_i) = \sum_{k \notin \{j\}}^{N_{\text{dados}}} [w_k^\alpha]^{-1} e^{-\beta_i E_k}$. Assim, relações similares às expressões 4 e 6 podem ser definidas utilizando as relações em 7 para fornecer médias térmicas $\bar{x}(\beta_i)$ e flutuações $\bar{\chi}(\beta_i)$ (e os seus respectivos desvios padrão e erros) em uma temperatura arbitrária $T'_i = 1/\beta'_i$ a partir da série obtida à uma temperatura T'_α. Considerando a série obtida na temperatura $T'_3 = 2.4$, utilize a técnica de repesagem para obter estimativas para $\varepsilon(T'_i)$, $C_v(T'_i)$, $\mu(T'_i)$ e $\chi(T'_i)$ nas temperaturas $T'_i = 2 + (i-1)0.04$ com $i = 1, \ldots, 21$. Faça os gráficos dessas quatro quantidades em função de T'_i incluindo as barras de erro estimadas pela raíz quadrada dos respectivos desvios padrão, $\sigma^2_{\bar{x}}(\beta_i)$ e $\sigma^2_{\bar{\chi}}(\beta_i)$.

g) A técnica de repesagem também permite combinar as estimativas fornecidas em cada uma das simulações (*e.g.* item anterior) para as médias térmicas $\bar{x}_\alpha(\beta_i)$, flutuações $\bar{\chi}_\alpha(\beta_i)$, e seus respectivos desvios padrão, $\sigma^2_{\bar{x}_\alpha}$ e $\sigma^2_{\bar{\chi}_\alpha}$, para fornecer estimativas únicas através de expressões como

$$\bar{x}(\beta_i) = \sum_\alpha c_\alpha^x \bar{x}_\alpha(\beta_i) \quad , \quad \bar{\chi}(\beta_i) = \sum_\alpha c_\alpha^\chi \bar{\chi}_\alpha(\beta_i) \tag{8}$$

e

$$\sigma^2_{\bar{x}}(\beta_i) = \sum_\alpha c_\alpha^x \sigma^2_{\bar{x}_\alpha} \quad , \quad \sigma^2_{\bar{\chi}}(\beta_i) = \sum_\alpha c_\alpha^\chi \sigma^2_{\bar{\chi}_\alpha} \tag{9}$$

sendo os coeficientes definidos pelos pesos $c_\alpha^x = C_x/\sigma^2_{\bar{x}_\alpha}(\beta_i)$ e $c_\alpha^\chi = C_\chi/\sigma^2_{\bar{\chi}_\alpha}(\beta_i)$, com as constantes C_x e C_χ calculadas impondo as condições de normalização $\sum_\alpha c_\alpha^x = 1$ e $\sum_\alpha c_\alpha^\chi = 1$, respectivamente. Utilize essa técnica de repesagem combinada para obter estimativas para $\varepsilon(T'_i)$, $C_v(T'_i)$, $\mu(T'_i)$ e $\chi(T'_i)$ nas temperaturas $T'_i = 2 + (i-1)0.04$ com $i = 1, \ldots, 21$ utilizando as séries de todas as simulações realizadas nas cinco temperaturas T'_α. Faça os gráficos dessas quatro quantidades em função de T'_i incluindo as barras de erro estimadas pela raíz quadrada dos respectivos desvios padrão, $\sigma^2_{\bar{x}}(\beta_i)$ e $\sigma^2_{\bar{\chi}}(\beta_i)$.

h) Plote configurações significativas para cada uma das cinco temperaturas simuladas (*i.e.* indicando o valor de energia E_k e de magnetização M_k específicos para cada uma delas) e discuta qual a transição de fase é observada levando em consideração os gráficos das quantidades obtidas no item anterior.

Exercício 2. Utilizando o logaritmo da densidade de estados exata do modelo de Ising bidimensional, $\ln \Omega(E)$, para a rede quadrada de lado $L = 32$ do arquivo `LNgE.txt`, escreva um programa que implemente um algoritmo de amostragem uniforme com probabilidade de aceitação definida como na relação geral da Eq. 3, porém considerando

$$\frac{w(E_{\nu'})}{w(E_\nu)} = \exp\left[-\Delta S(E)\right] \quad ,$$

onde $\Delta S(E) = S(E_{\nu'}) - S(E_\nu) = \ln \Omega(E_{\nu'}) - \ln \Omega(E_\nu)$.

a) Realize uma simulação utilizando esse algoritmo para obter as séries de energia E_k e magnetização M_k com $N_{\text{dados}} = 10^7$ MCs, as quais devem ser utilizadas nos items abaixo.

b) Forneça os tempos de auto-correlação integrado $2\tau_{\text{int}}$ (vide Lista 10) para as séries de energia e de magnetização.

c) Grafique separadamente os dois histogramas das séries obtidas, isto é, para a série de energias, $H(E_l)$ por $\varepsilon_l = E_l/(2N)$, e para a série de magnetizações, $H(M_l)$ por $\mu_l = |M_l|/N$.

d) Utilizando a **técnica de repesagem** (vide item (f) do Exercício 1 com $w_k^\alpha = \exp[-\ln \Omega(E_k)]$) aplicada para séries obtidas pelo algoritmo de amostragem uniforme (tal como mencionado acima), calcule as estimativas para a energia média por spin $\varepsilon(T_i) = \bar{x}(\beta_i)/(2N)$ e calor específico $C_v(T_i) = (Nk_B {T_i}^2)^{-1}\bar{\chi}(\beta_i)$, com $x_k = E_k$; e também para a magnetização por spin $\mu(T_i) = \bar{x}(\beta_i)/N$ e a susceptibilidade magnética $\chi(T_i) = (NT_i)^{-1}\bar{\chi}(\beta_i)$, com $x_k = |M_k|$. Faça os quatro gráficos dessas quantidades em função das temperaturas $T_i = 2 + (i-1)0.04$ com $i = 1, \ldots, 21$ e $\beta_i = 1/T_i$. Inclua os erros dessas grandezas estimados pelas raízes quadradas dos desvios padrão. Compare $\varepsilon(T_i)$ e $C_v(T_i)$ com as estimativas obtidas no item (f) do Exercício 1.

Referências:

[1] Newman&Barkema. Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Oxford University Press, 1999)
[2] B. A. Berg. Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis (World Scientific, 2004).