

Simulações do Modelo de Ising 2D

Obtendo as propriedades termodinâmicas

- Devemos determinar a função de partição

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_{\sigma}} = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E}$$

- Médias termodinâmicas:

$$\langle A(E) \rangle = \frac{\sum_E A(E) \Omega(E) e^{-\beta E}}{Z}$$

- Precisamos obter $\Omega(E)$

Enumeração Exata

Enumeração Exata

- No processo de enumeração exata todos os estados acessíveis ao sistema são gerados
- Desvantagens
 - Tempo computacional cresce exponencialmente
 - Apenas sistemas muito pequenos podem ser estudados
- Vantagens
 - Resultados exatos

Enumeração Exata

- Primeira proposta
 - Usar representação binária para o estado do sistema
 - Calcular a energia de cada estado
 - Contar quantas configurações existem com cada valor de energia
 - Desvantagem - mais de um spin é flipado ao mudar a configuração. O “custo” de calcular a energia é alto

Enumeração Exata

- Segunda proposta - Grey code
 - Usar representação Grey
 - Calcular a diferença de energia entre os estados devido ao flip
 - Contar quantas configurações existem com cada valor de energia

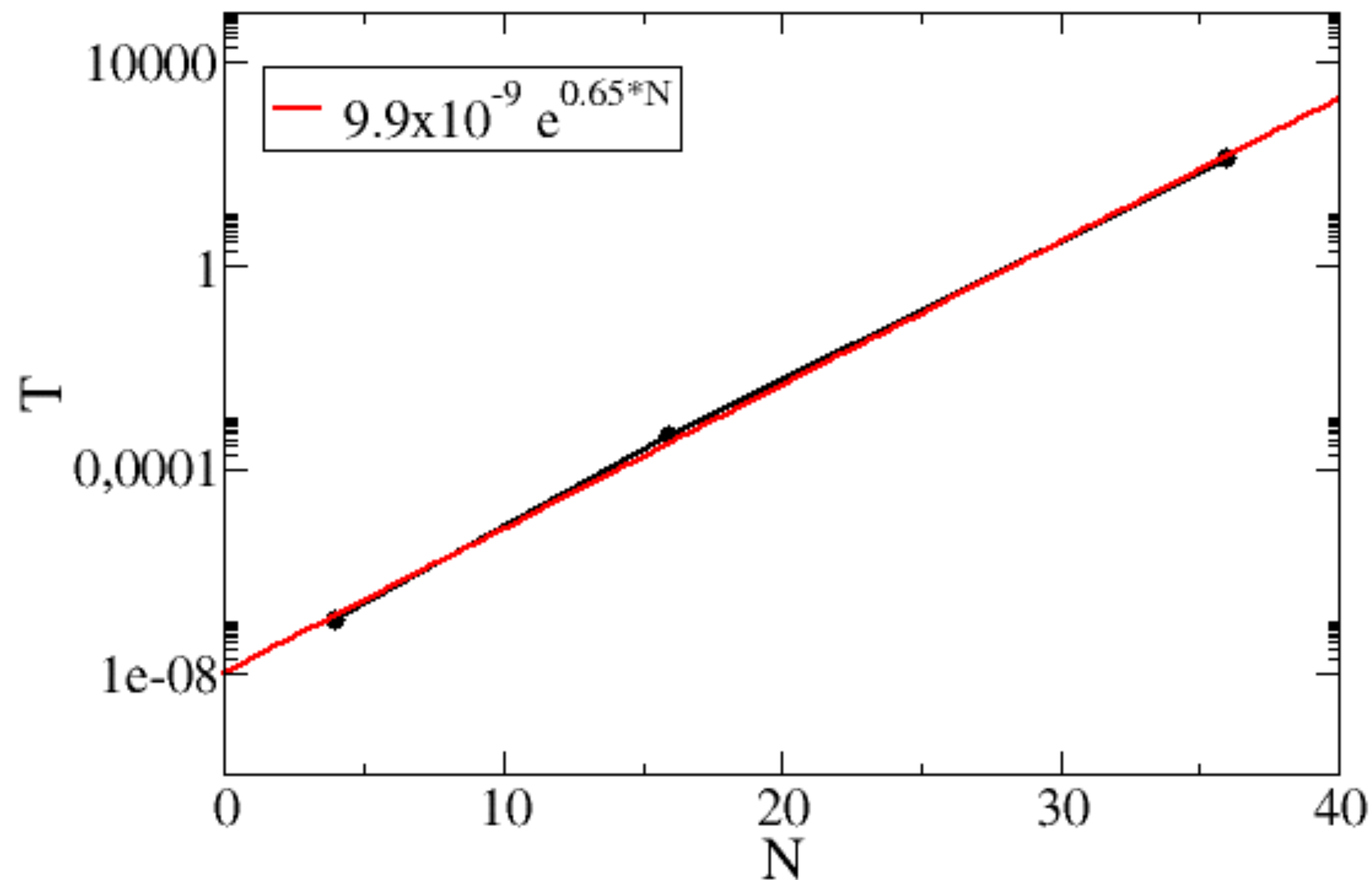
Enumeração Exata

Rotina *gray_flip*
Entrada $\{t_0, t_1, \dots, t_N\}$
 $k \leftarrow t_0$
Se $(k > N)$ **Saia**
 $t_{k-1} \leftarrow t_k$
 $t_k \leftarrow k$
Se $(k \neq 1)$ $t_0 \leftarrow 1$
Saída $k, \{t_0, t_1, \dots, t_N\}$

Inicialmente devemos ter $\{t_0, t_1, \dots, t_N\} = \{0, \dots, N\}$.

i	$\{\sigma_1, \dots, \sigma_4\}$			
1	—	—	—	—
2	+	—	—	—
3	+	+	—	—
4	—	+	—	—
5	—	+	+	—
6	+	+	+	—
7	+	—	+	—
8	—	—	+	—
9	—	—	+	+
10	+	—	+	+
11	+	+	+	+
12	—	+	+	+
13	—	+	—	+
14	+	+	—	+
15	+	—	—	+
16	—	—	—	+

Tempo de simulação

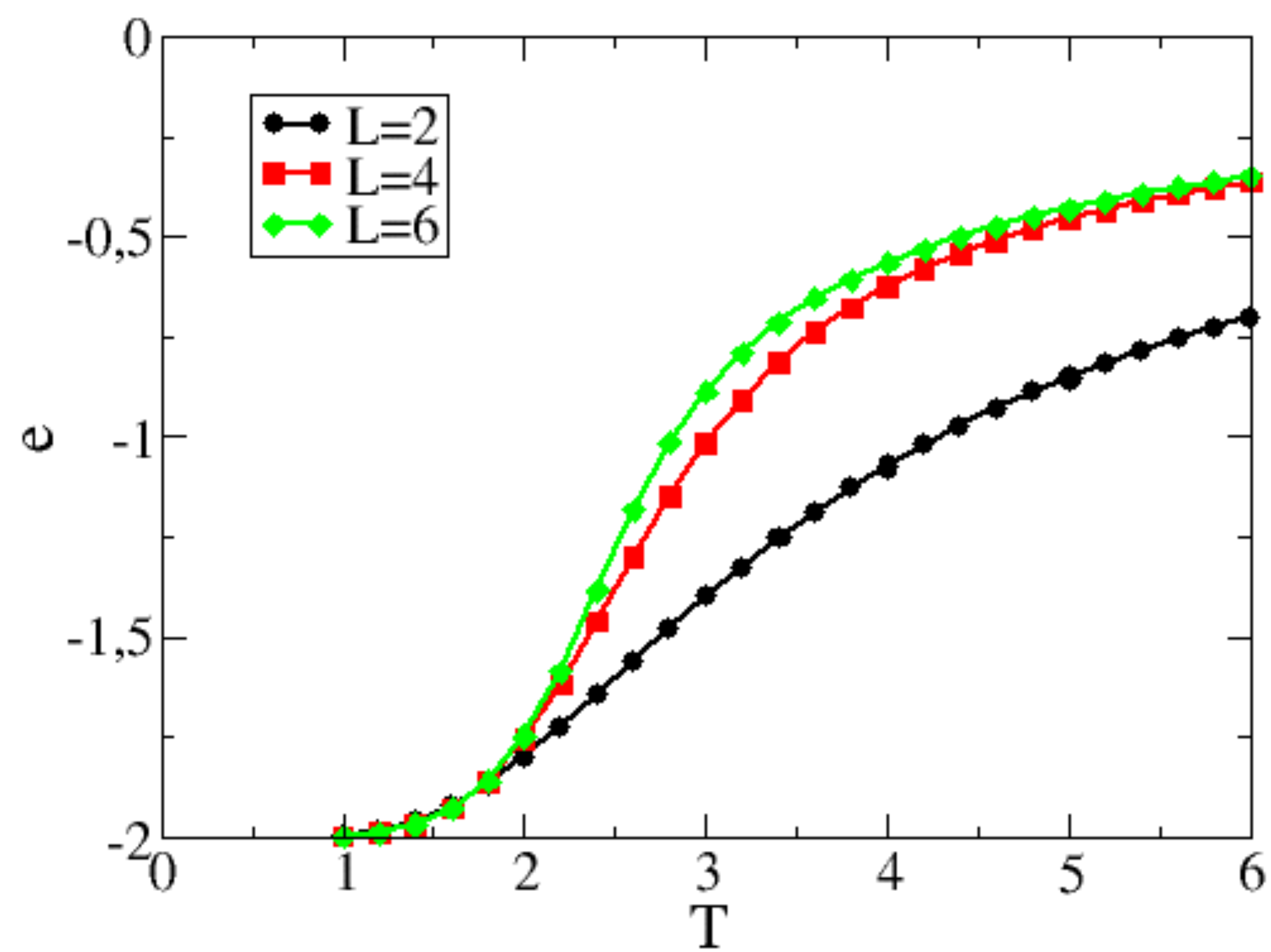
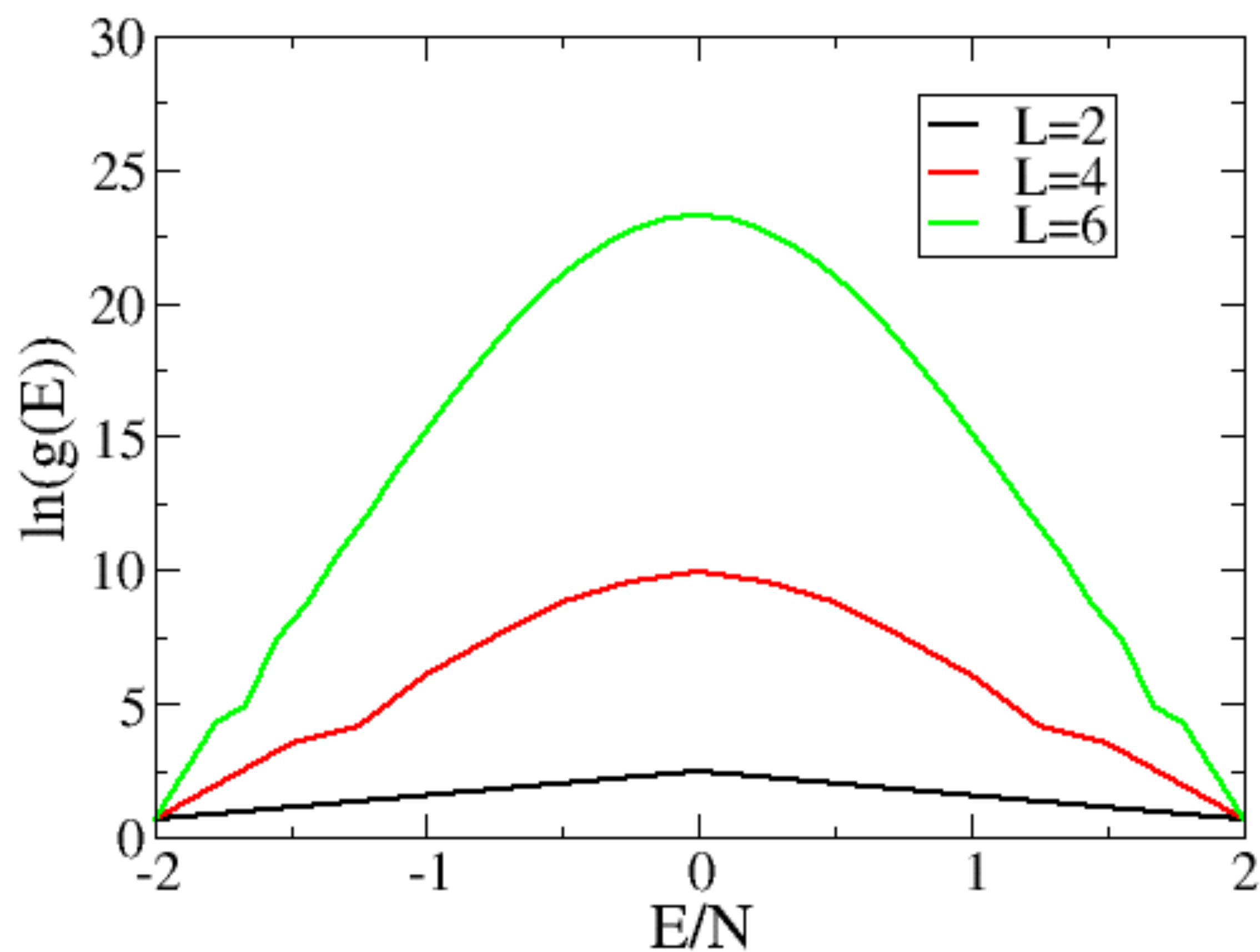


Da ordem de 10^{63} segundos
para um sistema com
 $N=16 \times 16$ spins!

Muito maior que a idade
estimada do universo $\sim 10^{17}$
segundos

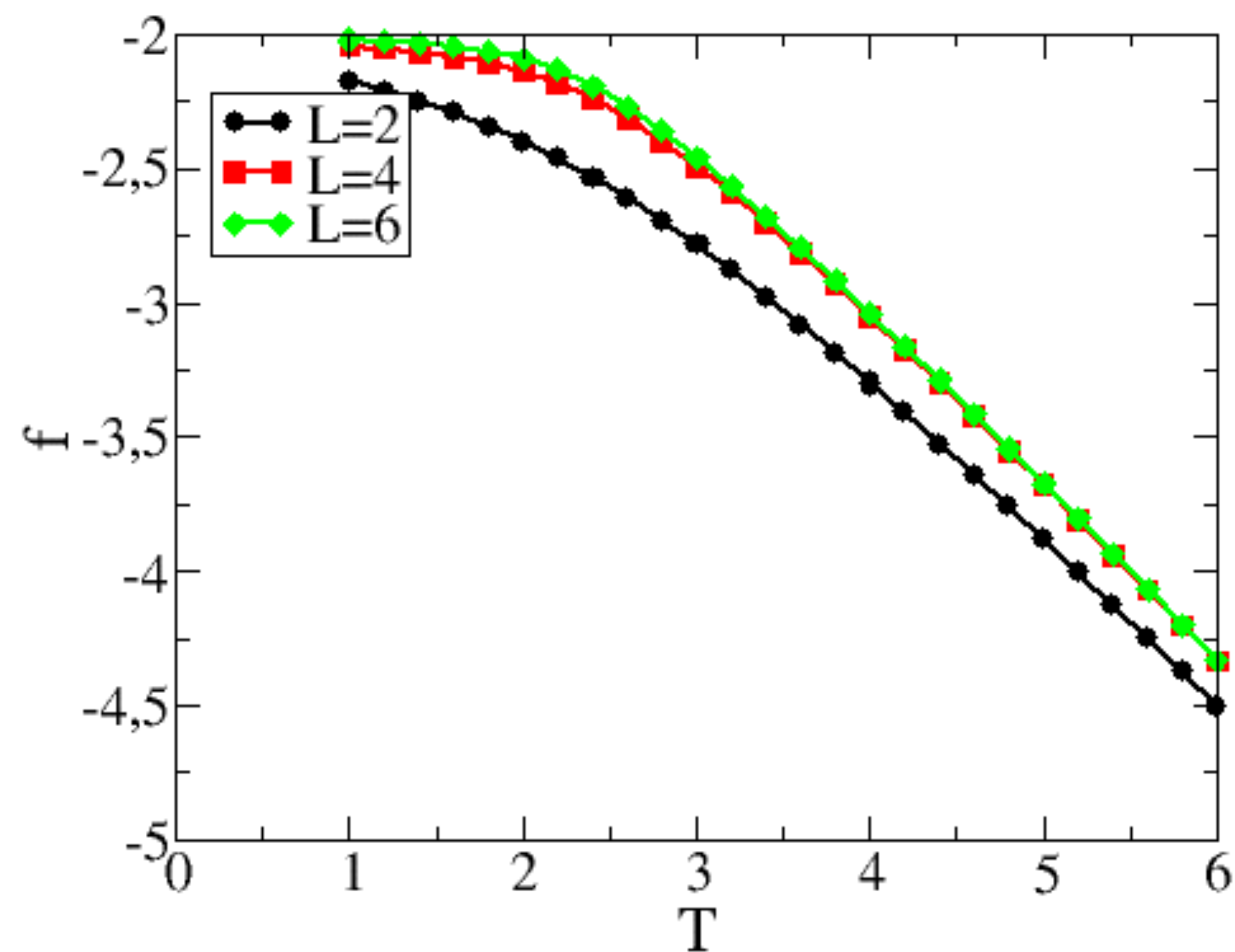
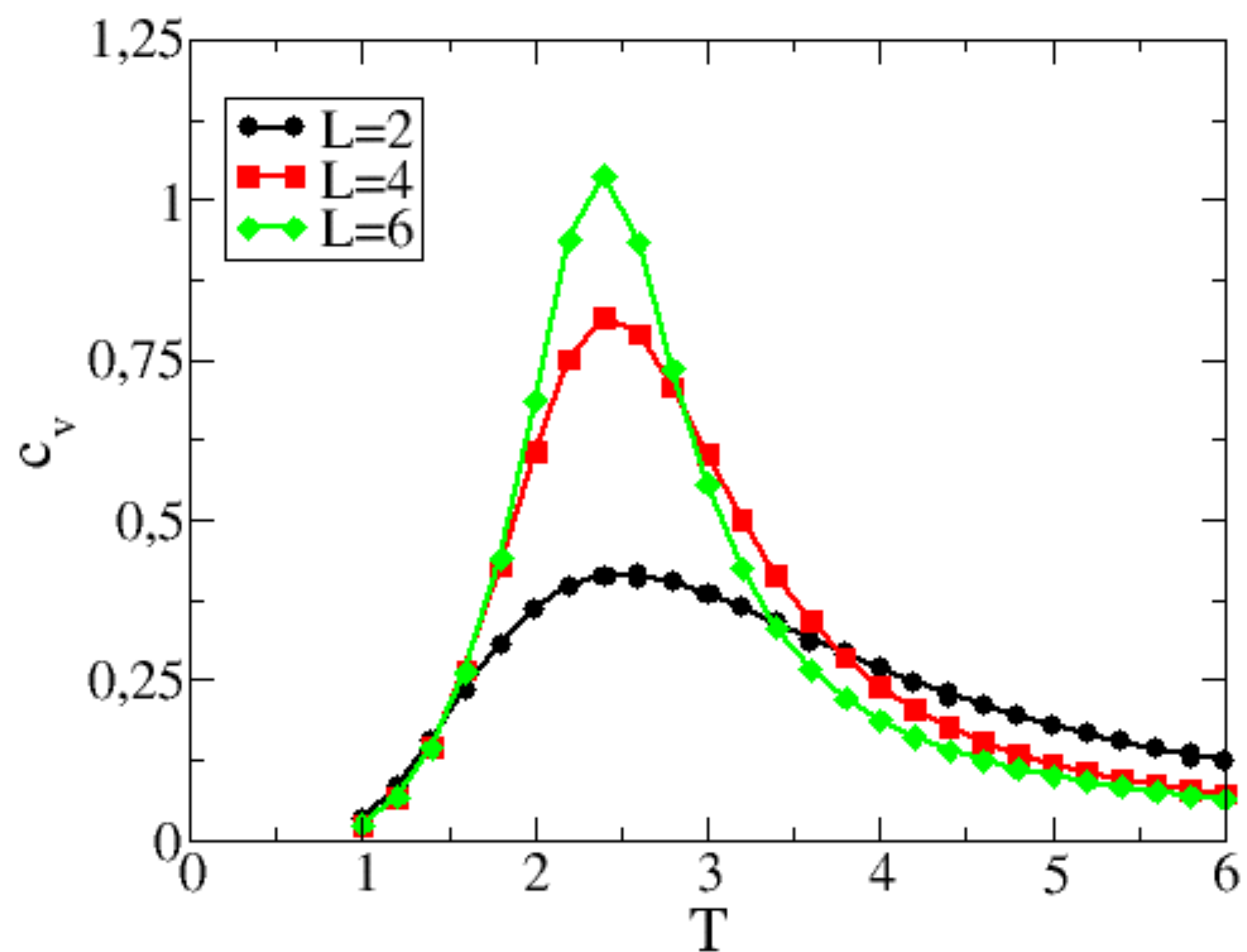
Grandezas termodinâmicas

Enumeração exata



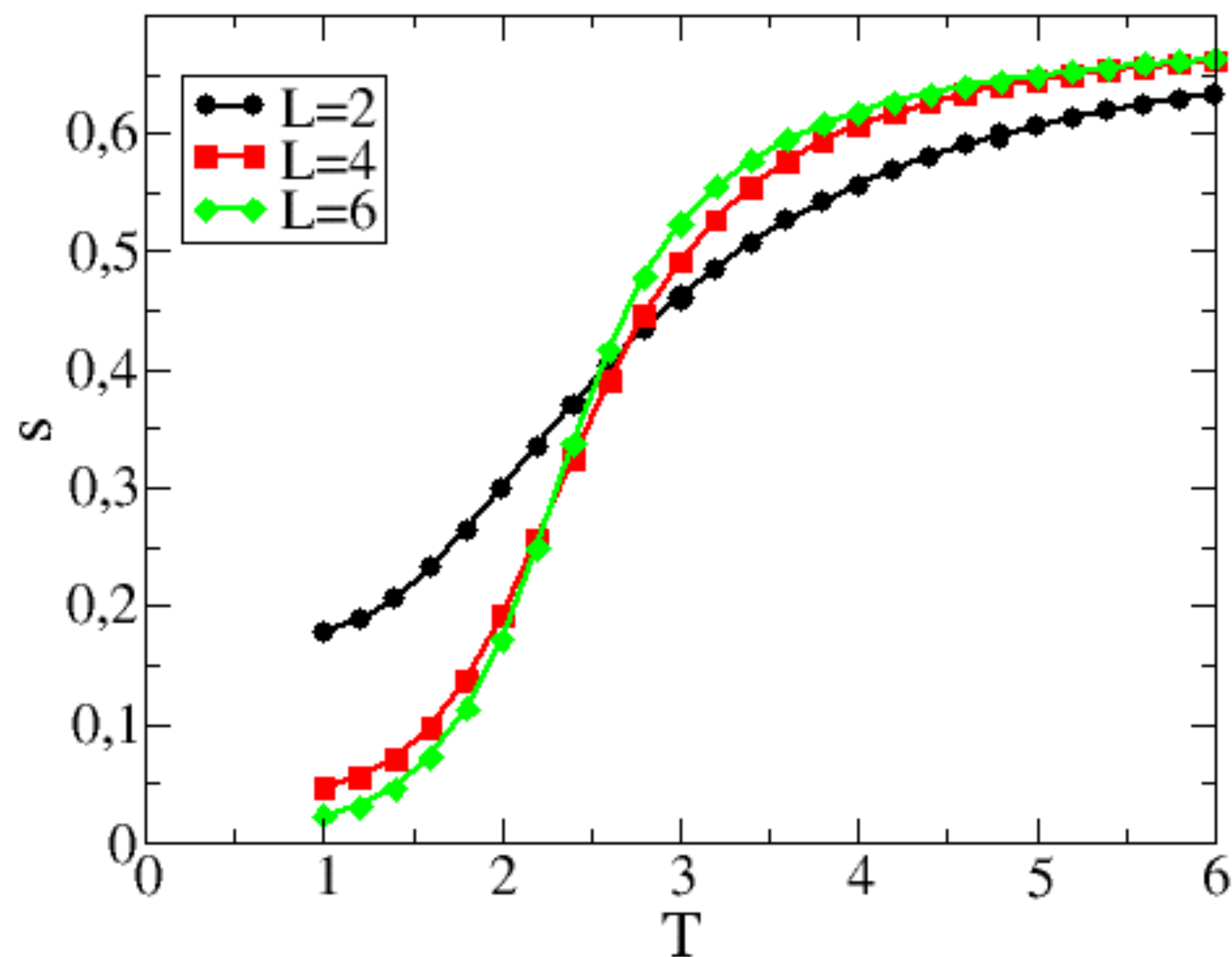
Grandezas termodinâmicas

Enumeração exata



Grandezas termodinâmicas

Enumeração exata



Em altas temperaturas tende a $\ln(2)=0.693$. Isto está relacionado ao fato de existirem 2^N estados acessíveis ao sistema. A entropia é proporcional ao logaritmo do número de estados acessíveis.

Wang-Landau

Métodos de Monte Carlo

O Algoritmo de Wang-Landau (2001)

Uma nova abordagem:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\}} Q_{\sigma} \exp(-\beta E_{\sigma})}{Z} = \frac{\sum_E \bar{Q}(E) g(E) \exp(-\beta E)}{Z},$$

Onde $g(E)$ é a densidade de estados (número de estados com uma dada energia,

$$\bar{Q}(E) = \frac{\sum_{\{\sigma\}} Q_{\sigma} \delta(E - E_{\sigma})}{\sum_{\{\sigma\}} \delta(E - E_{\sigma})},$$

$$Z = \sum_E g(E) \exp(-\beta E).$$

Se conhecemos $g(E)$ e \bar{Q} , temos $\langle Q \rangle$ para qualquer temperatura.

Métodos de Monte Carlo

O Algoritmo de Wang-Landau (2001)

A ideia

- ✓ Ao escolher estados aleatoriamente, a chance de se escolher um estado com energia E é proporcional a $g(E)$
- ✓ Um histograma das energias visitadas fornece uma estimativa de $g(E)$
- ✓ **Impraticável**
- ✓ Se escolhermos estados com uma probabilidade inversamente proporcional a $g(E)$, o que obtemos?
- ✓ O viés por estados com maior $g(E)$ é anulada
- ✓ Num histograma de energias, todos estados seriam visitados igualmente!
- ✓ Mas não conhecemos $g(E)$

O Algoritmo de Wang-Landau

- ✓ **Solução:** “Chutar” um valor para $g(E)$ e ir melhorando este chute através de um parâmetro multiplicativo até atingir uma dada acurácia
- ✓ **Parâmetro de controle:** Histograma “flat”
- ✓ **Taxas de transição:**

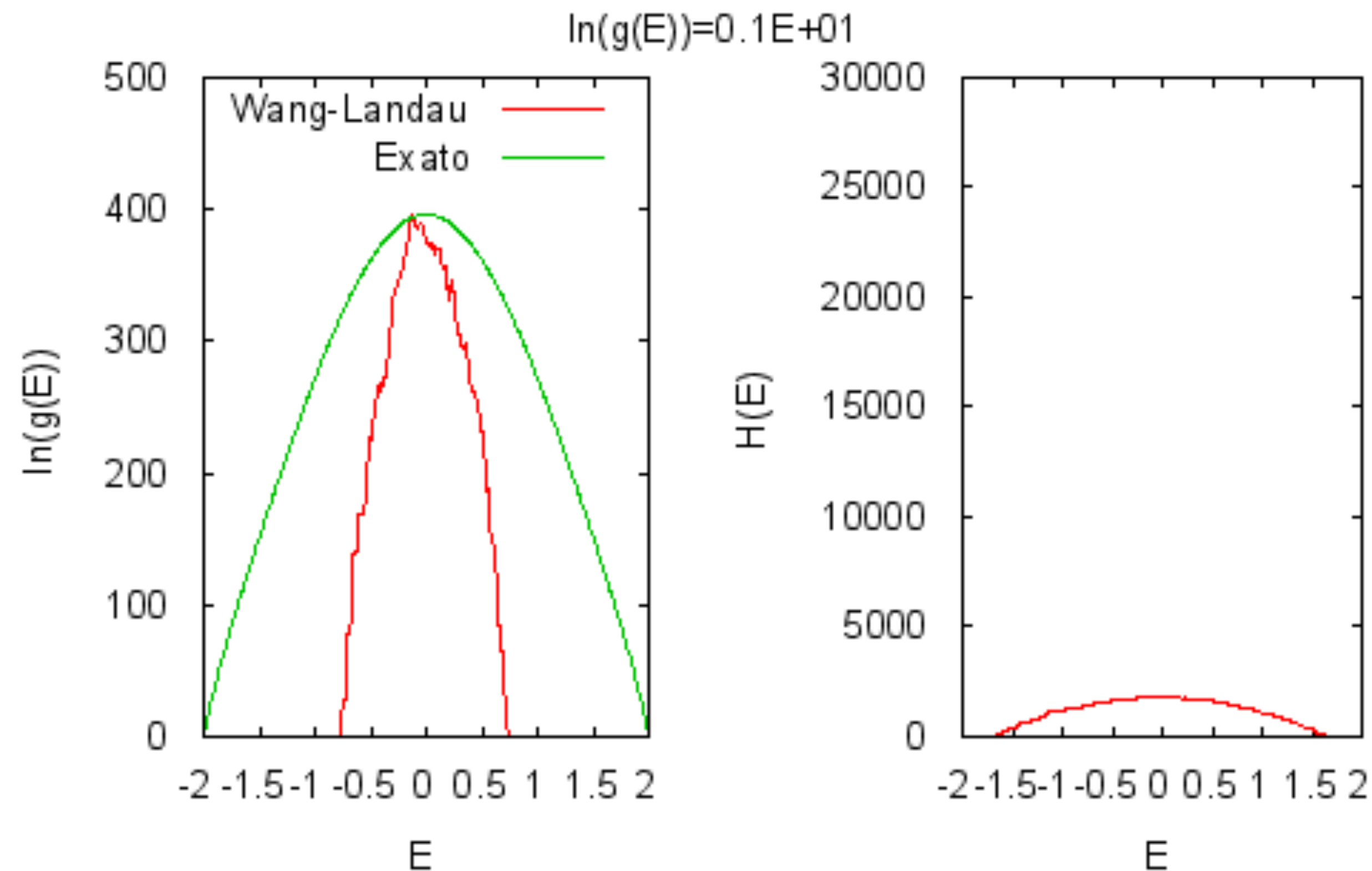
$$W_{E_1 \rightarrow E_2} = \min \left(\frac{g(E_1)}{g(E_2)}, 1 \right)$$

O Algoritmo de Wang-Landau

1. Faça $g(E) = 1$ para todas as energias (chute inicial)
2. Escolha uma configuração aleatória
3. Proponha uma modificação na configuração (flipe um spin)
4. Escolha um número aleatório, r , entre 0 e 1
 - a. se $r < g(E_1)/g(E_2)$ aceite o novo estado e faça, $g(E_2) = f g(E_2)$ e $H(E_2) = H(E_2) + 1$
 - b. se $r > g(E_1)/g(E_2)$ permaneça no estado 1 e faça, $g(E_1) = f g(E_1)$ e $H(E_1) = H(E_1) + 1$
5. Repita até que $H(E)$ esteja "flat"
6. Reduza o fator multiplicativo, f , zere o histograma e repita o procedimento
7. Quando $f=1$ o valor de $g(E)$ é exato, a menos de um fator multiplicativo.

O Algoritmo de Wang-Landau

- ✓ Aplicação ao modelo de Ising 2D
- ✓ Comparação com resultados exatos
- ✓ Cada vez que o histograma fica flat $\ln(f)$ é reduzido



O Algoritmo de Wang-Landau

Alguns detalhes

- ✓ $g(E)$ é determinado a menos de uma constante multiplicativa. O valor exato pode ser obtido se conhecemos o valor de $g(E)$ em algum estado específico, ou se conhecemos o número de estados acessíveis ao sistema.
- ✓ Consideramos que o histograma é “flat” se $H(E_i) > x \langle H \rangle \forall E$
 - ✓ Uma escolha razoável é $x = 0.8$ (80%)
- ✓ O erro contido em $g(E)$ é proporcional a $\ln(f)$
 - ✓ Em geral paramos a simulação quando $f = \exp(10^{-8}) \approx 1,000\,000\,01$
- ✓ $g(E)$ atinge valores muito altos na simulação, portanto, é mais conveniente usar $\ln(g(E))$ e $\ln(f)$, atualizando o valor da seguinte forma: $\ln g(E) = \ln g(E) + \ln(f)$

O Algoritmo de Wang-Landau

Alguns detalhes

- ✓ Pode-se utilizar qualquer valor inicial de $\ln(f)$ maior que 0
 - ✓ Em geral utilizamos $\ln(f)=1$
- ✓ O valor de f deve ser reduzido monotonicamente
 - ✓ Em geral utilizamos $f = \sqrt{f}$
- ✓ A condição de balanço detalhado não é satisfeita, rigorosamente, neste algoritmo.
- ✓ Mesmo não obtendo o valor exato de $g(E)$, podemos calcular médias, uma vez que o termo multiplicativo se cancela

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_E \bar{Q}(E) g(E) \exp(-\beta E)}{Z},$$

- ✓ \bar{Q} pode ser estimado através de uma média aritmética simples usando as configurações geradas durante a simulação

O Algoritmo de Wang-Landau

Desvantagem

- ✓ Lento
- ✓ Aplicável apenas a sistemas pequenos

O Algoritmo de Wang-Landau

Desvantagem

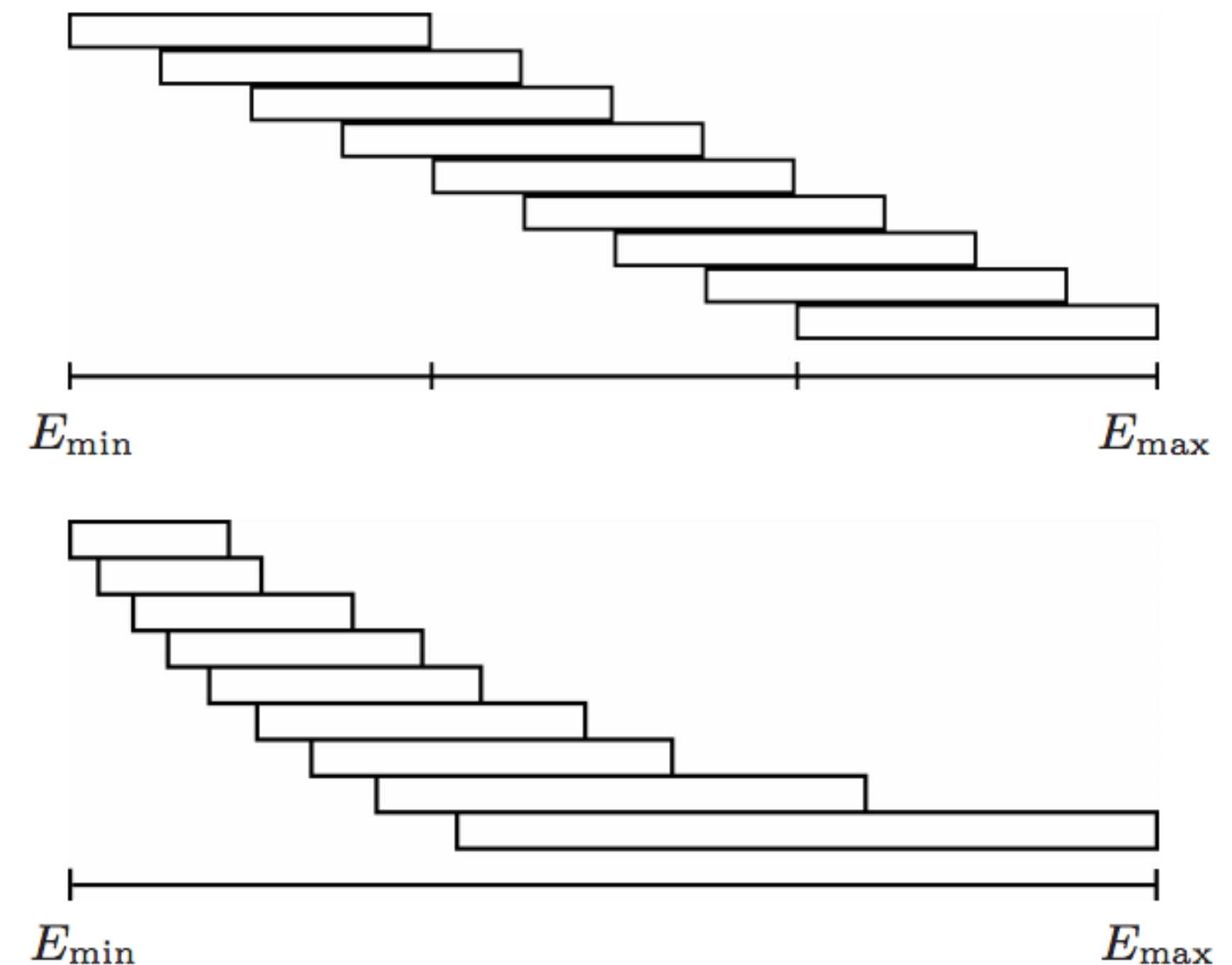
- ✓ Lento
- ✓ Aplicável apenas a sistemas pequenos

Solução

Replica Exchange Wang-Landau (REWL) (2013)

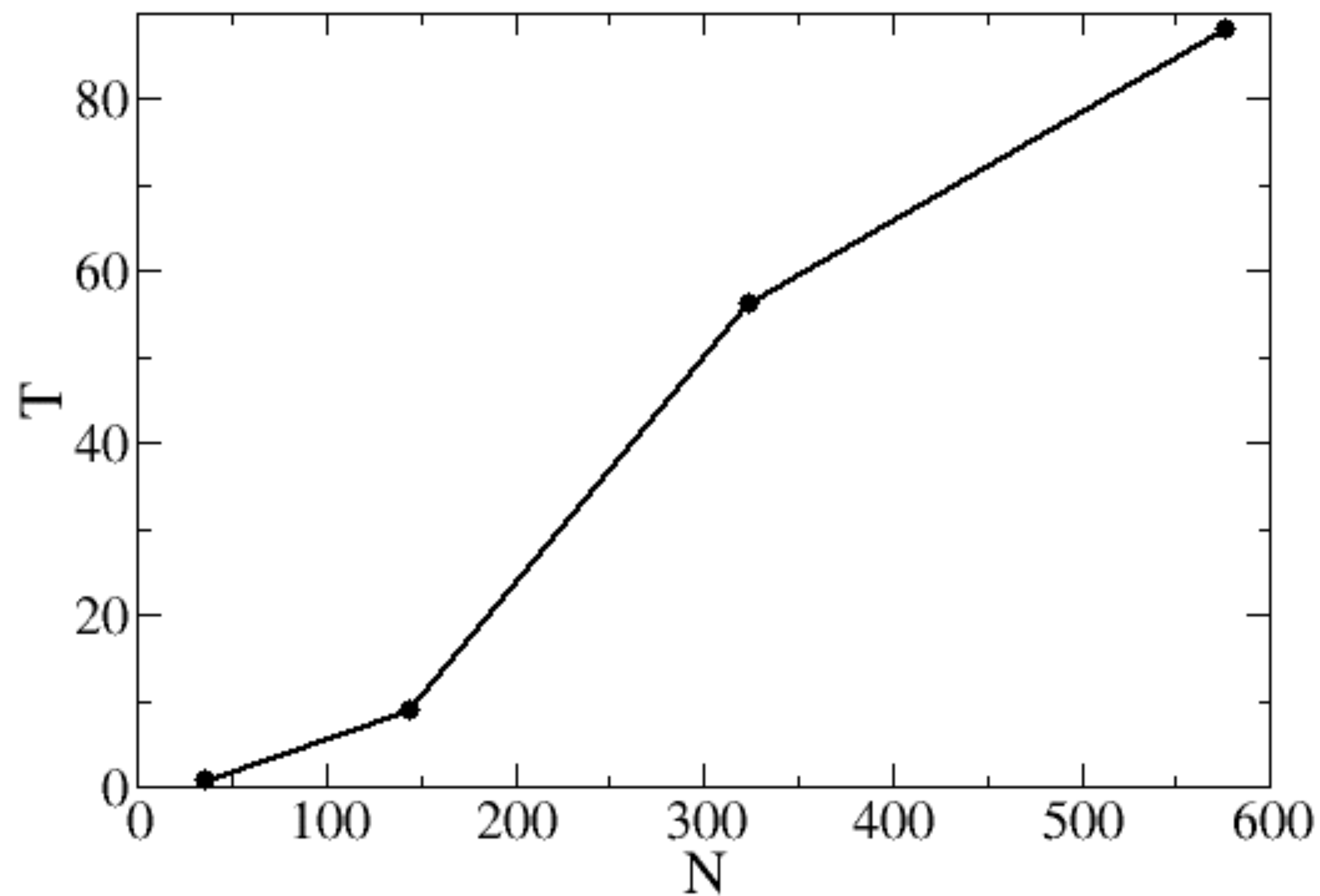
- Dividir o intervalo de energia em janelas superpostas
- Vários WL rodando em cada janela
- Trocar configurações em janelas vizinhas com probabilidade:

$$P_{ac} = \min \left(1, \frac{g_i^\mu g_j^\nu}{g_j^\mu g_i^\nu} \right)$$



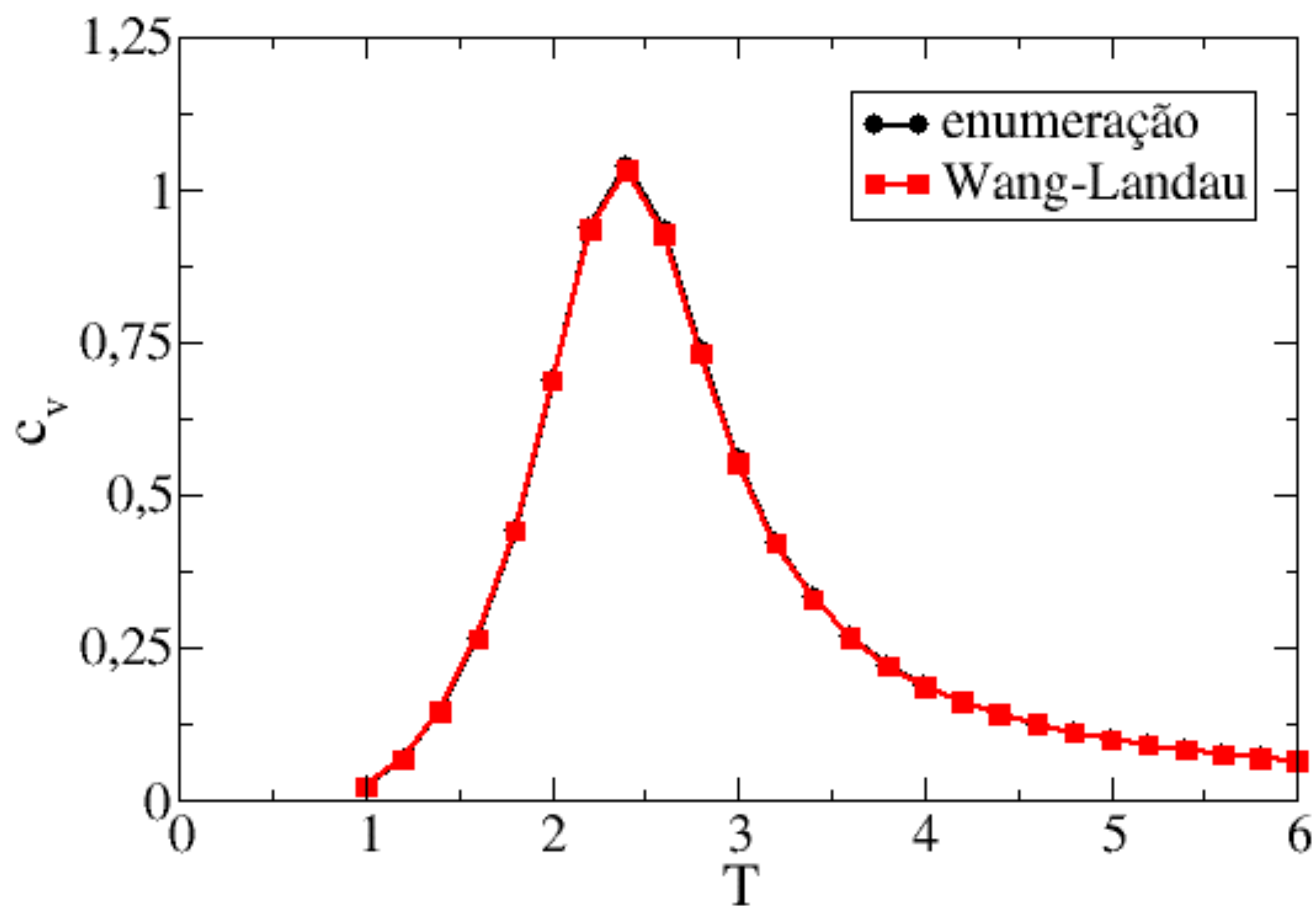
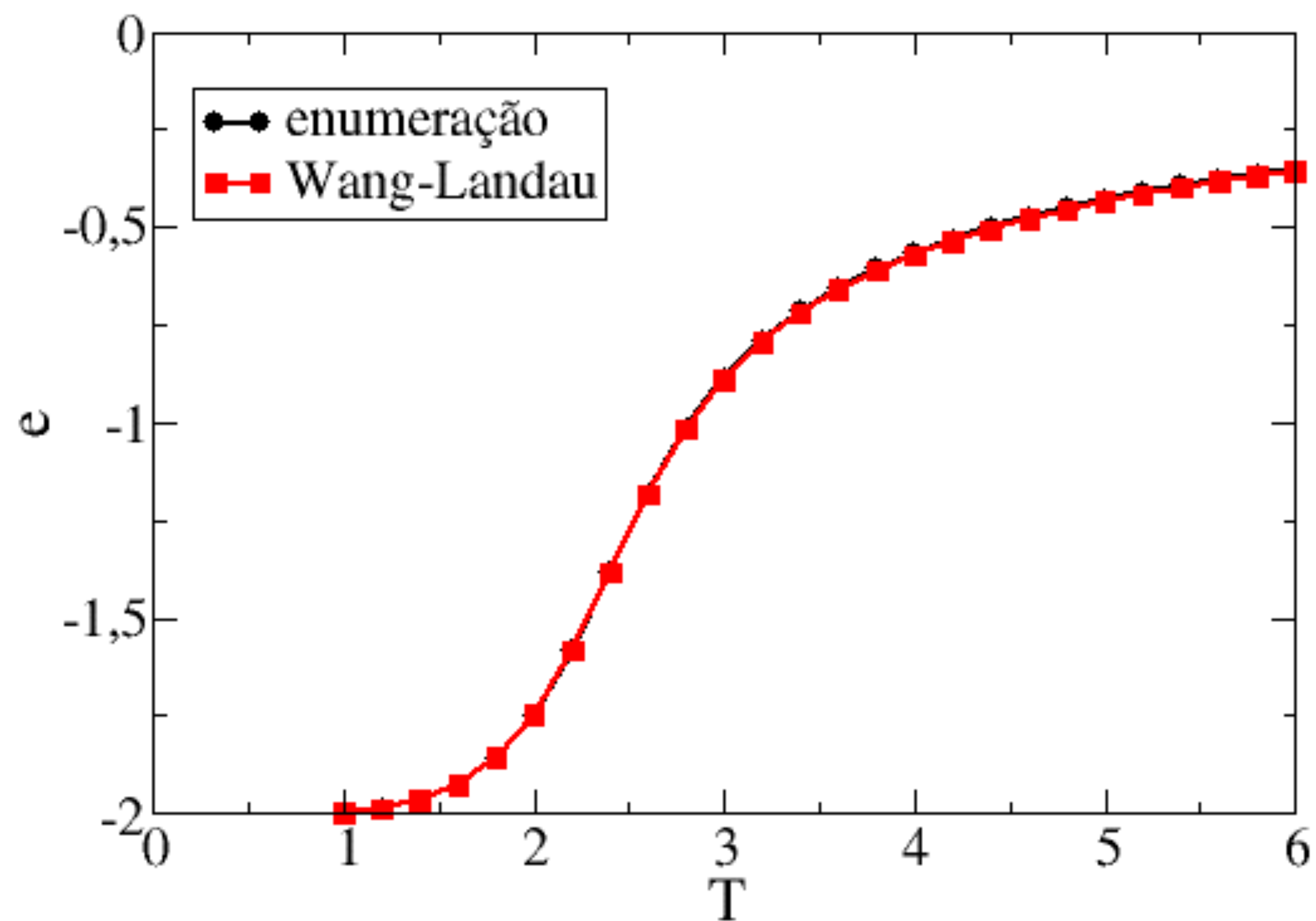
Tempo de simulação

Wang-Landau



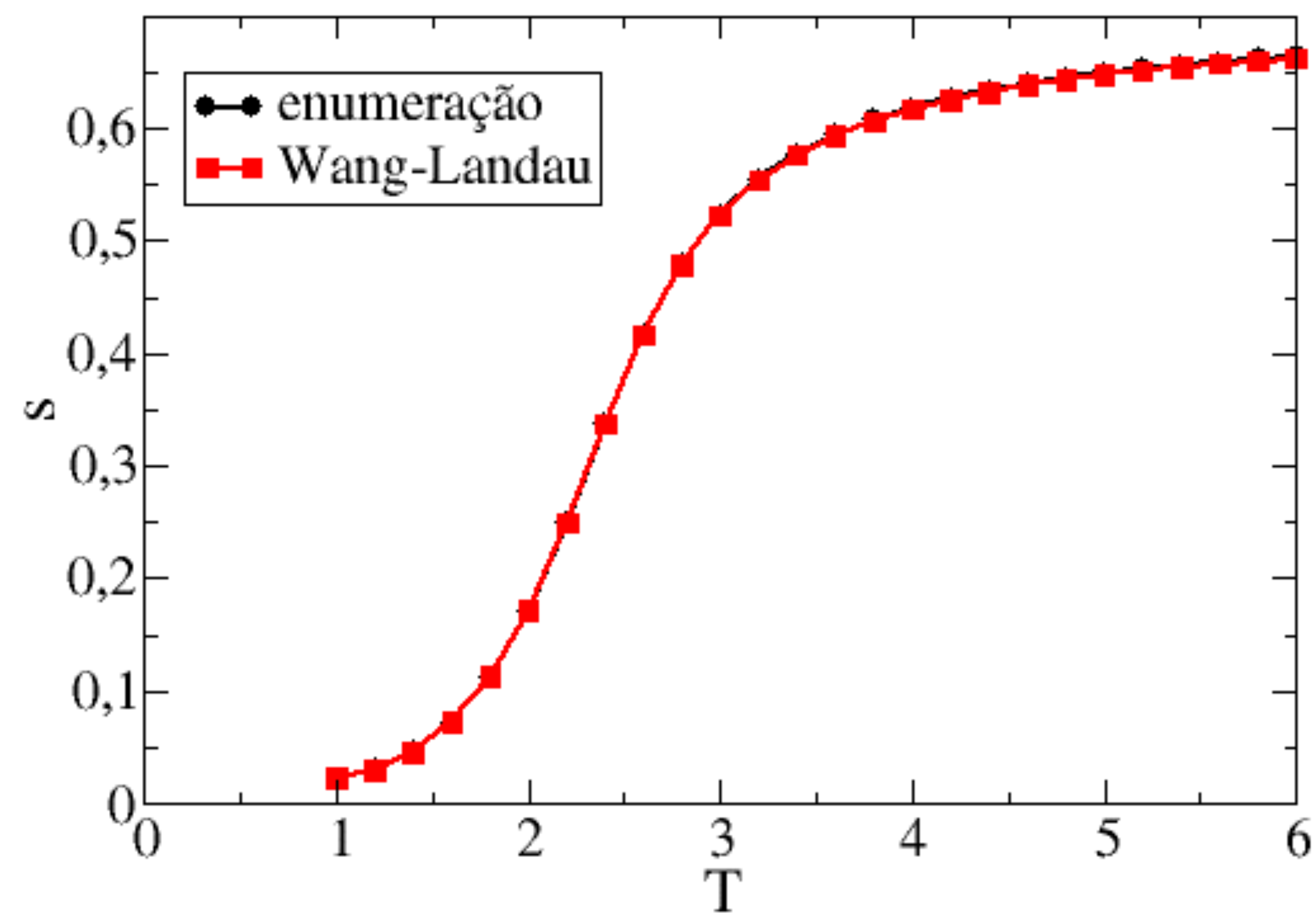
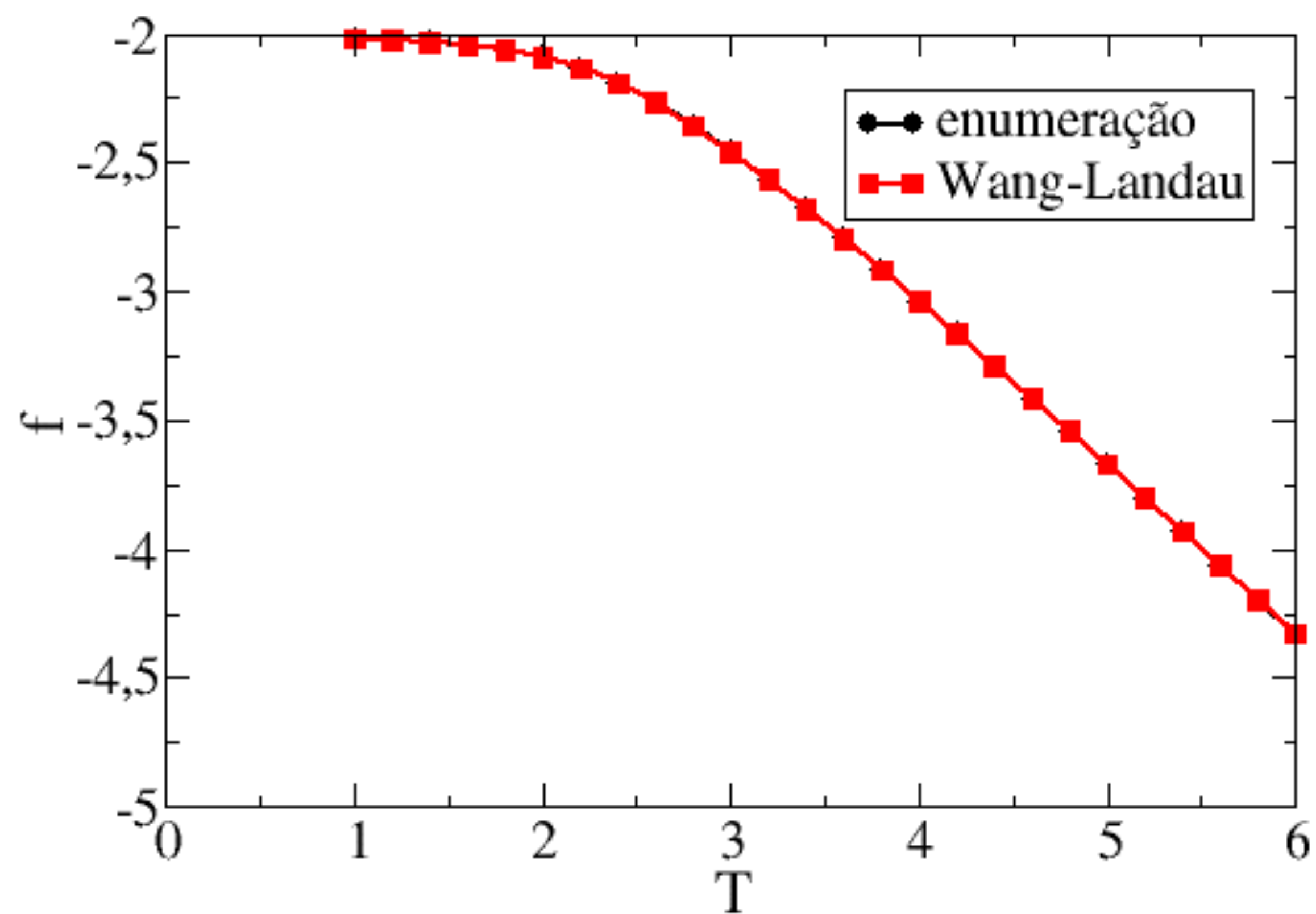
Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



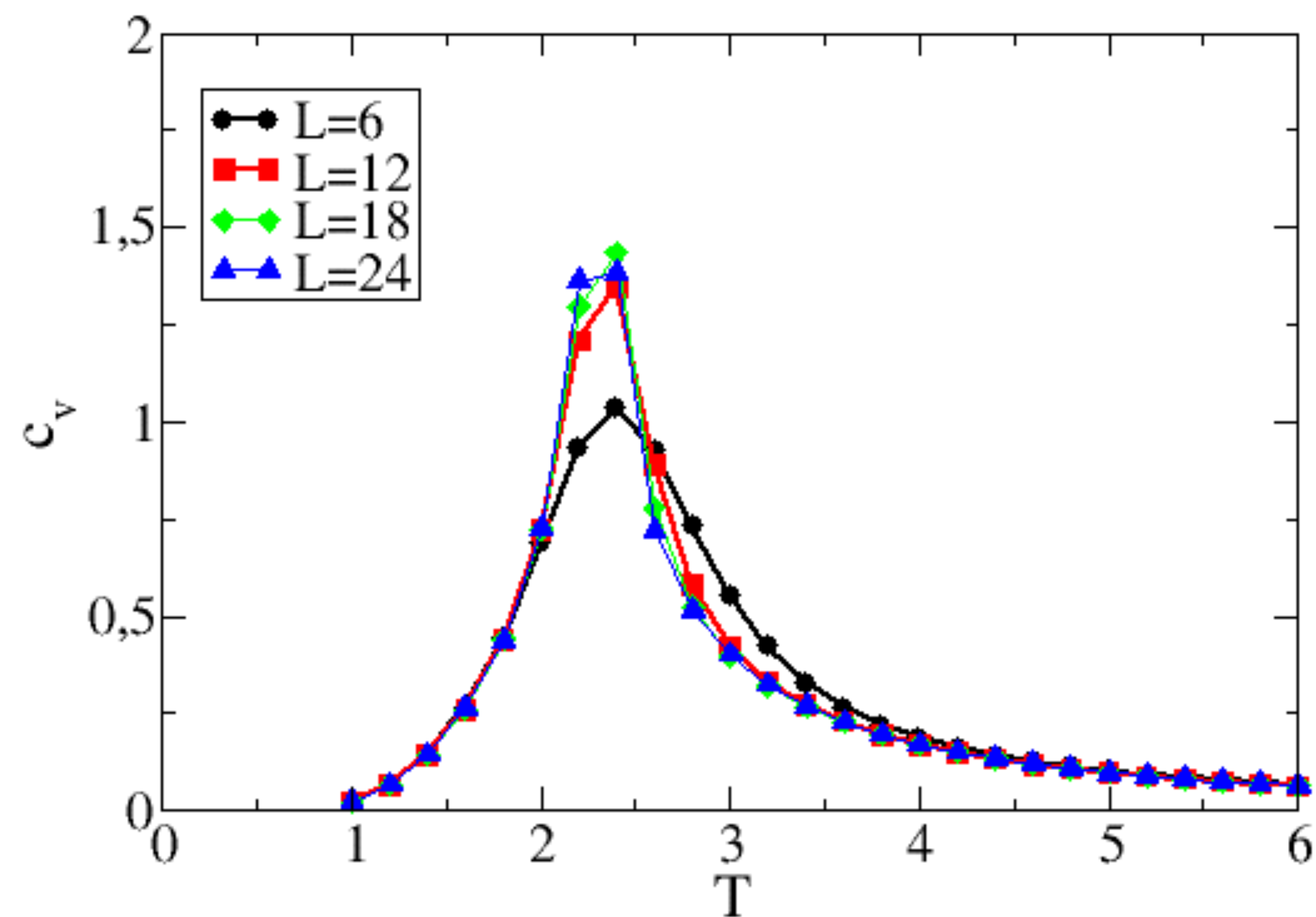
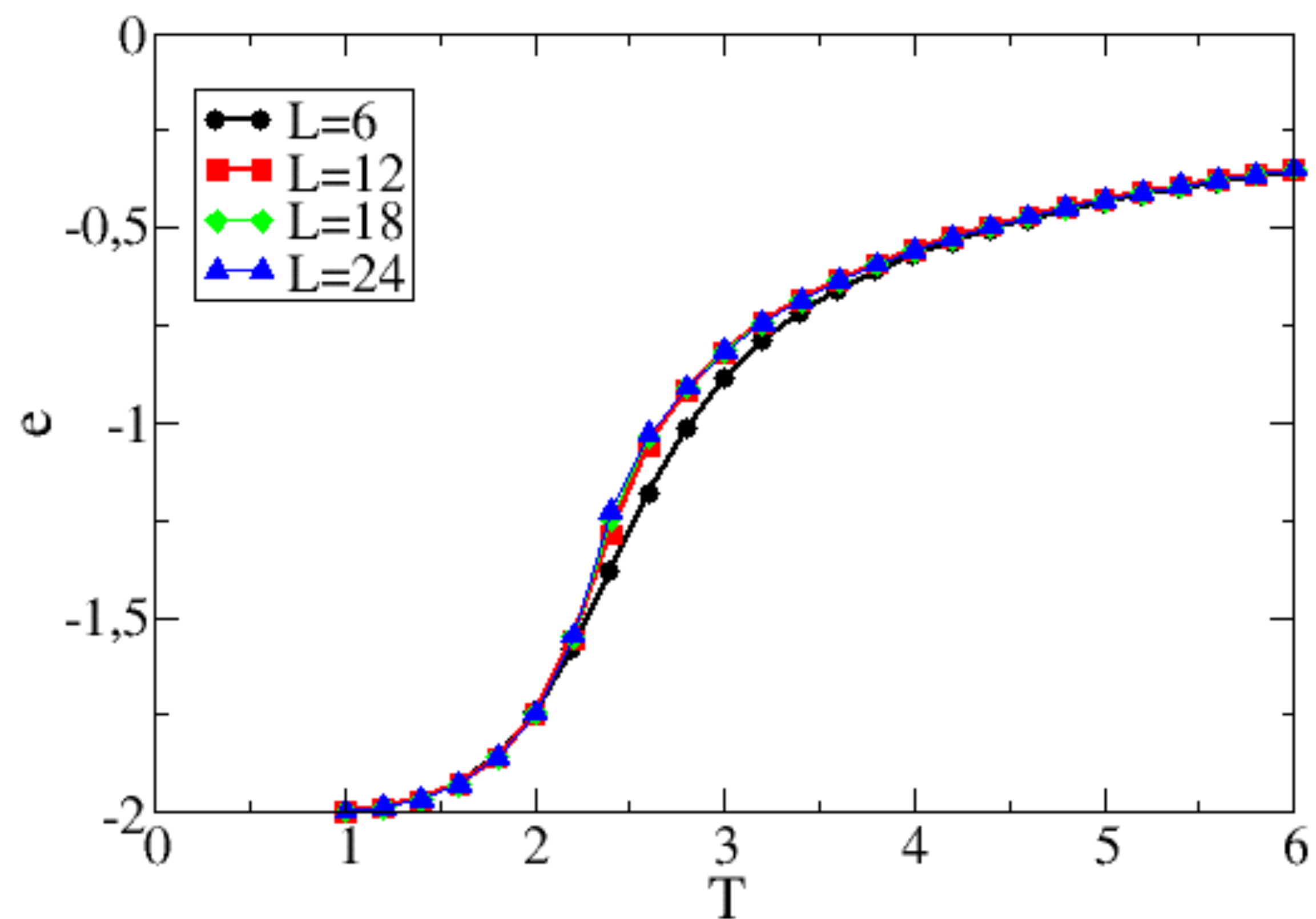
Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



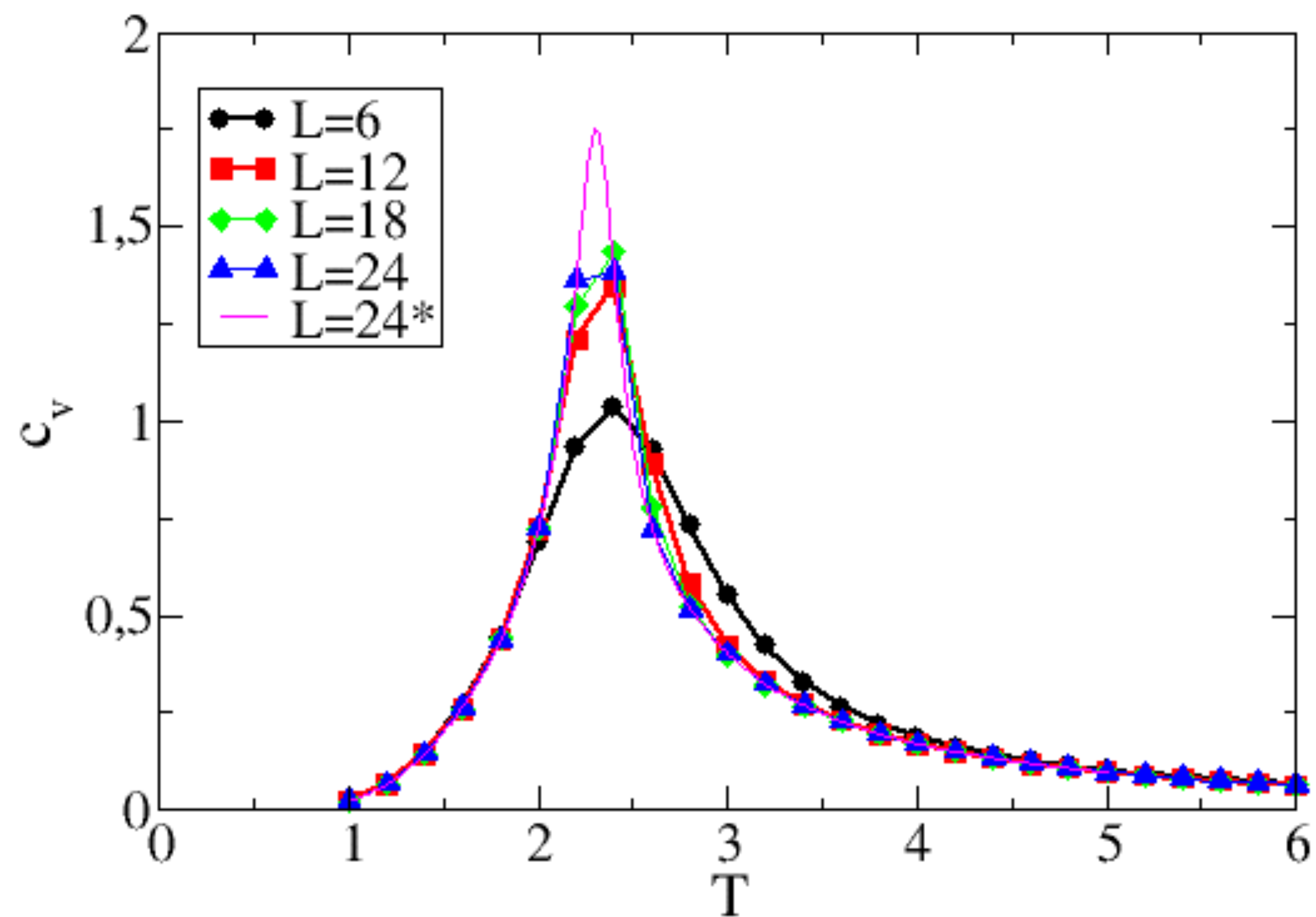
Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



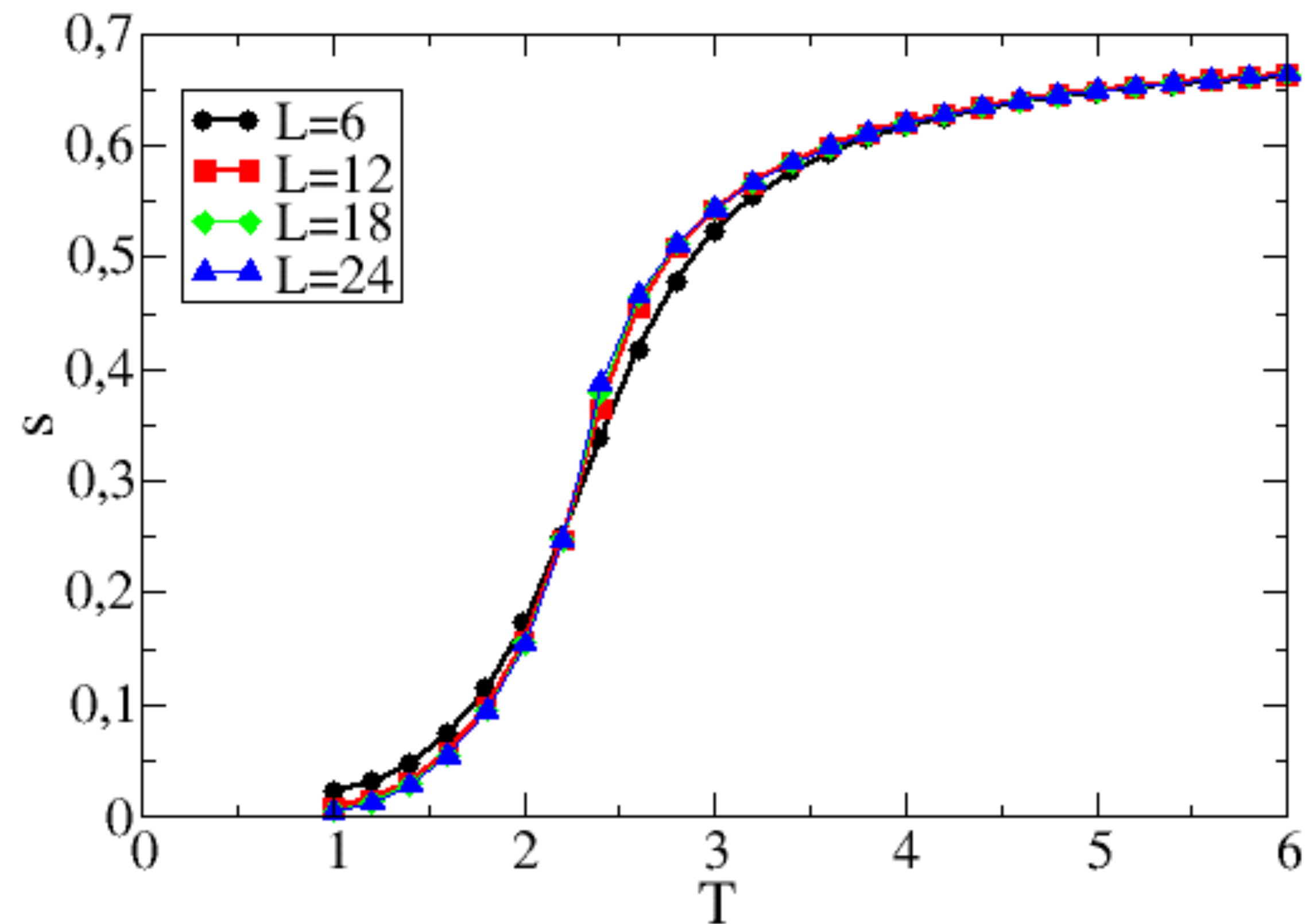
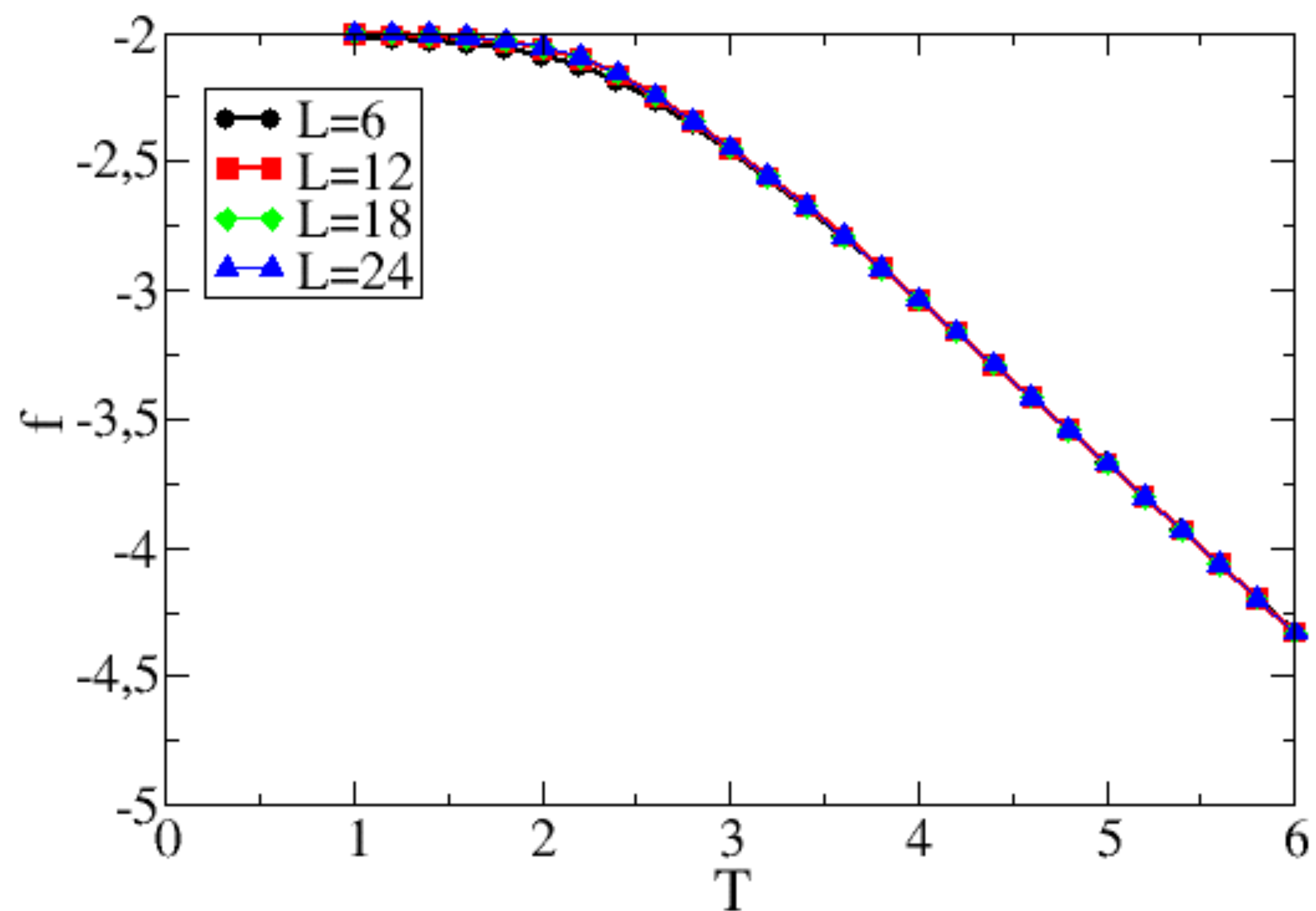
Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



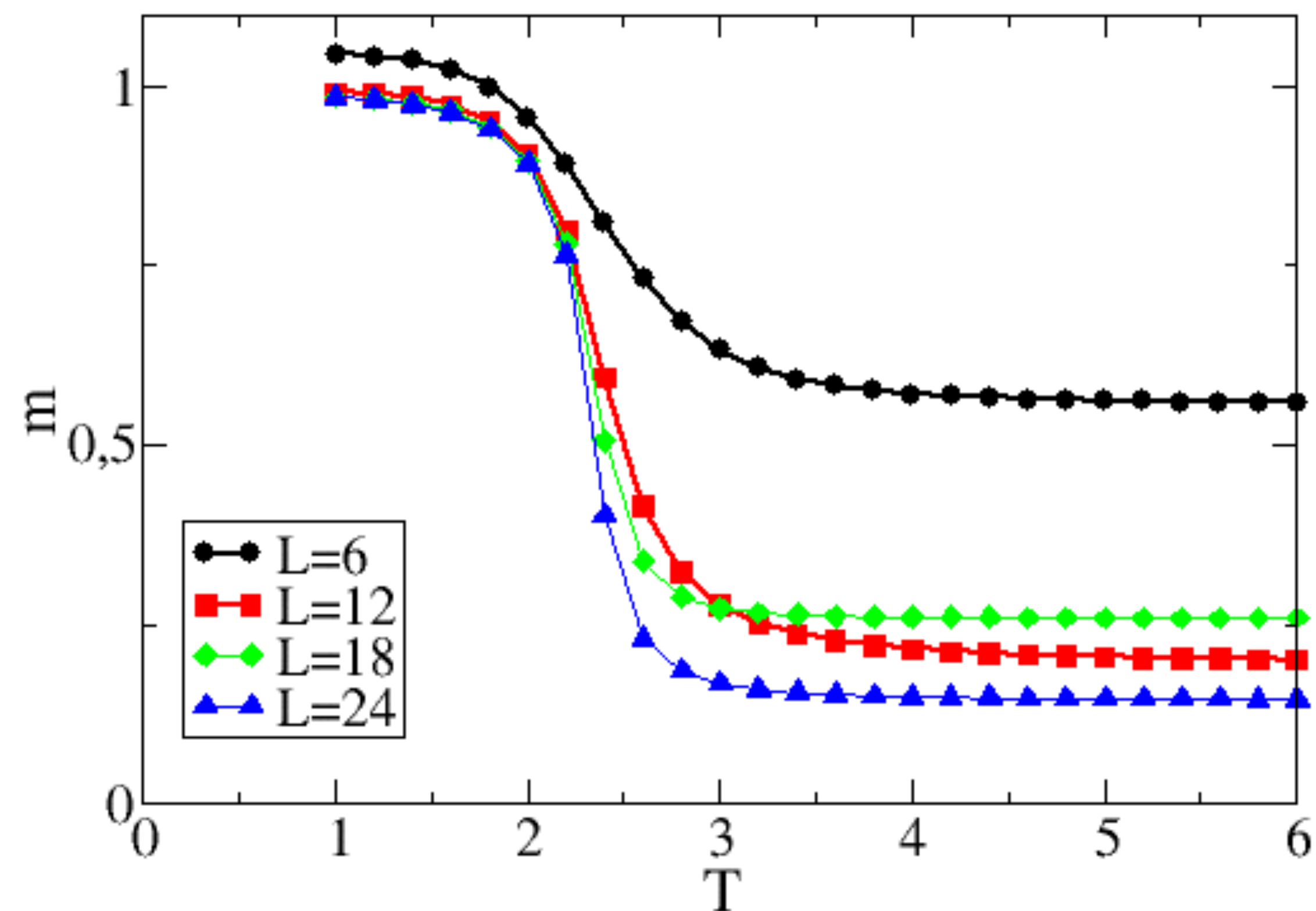
Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



Grandezas termodinâmicas

Wang-Landau



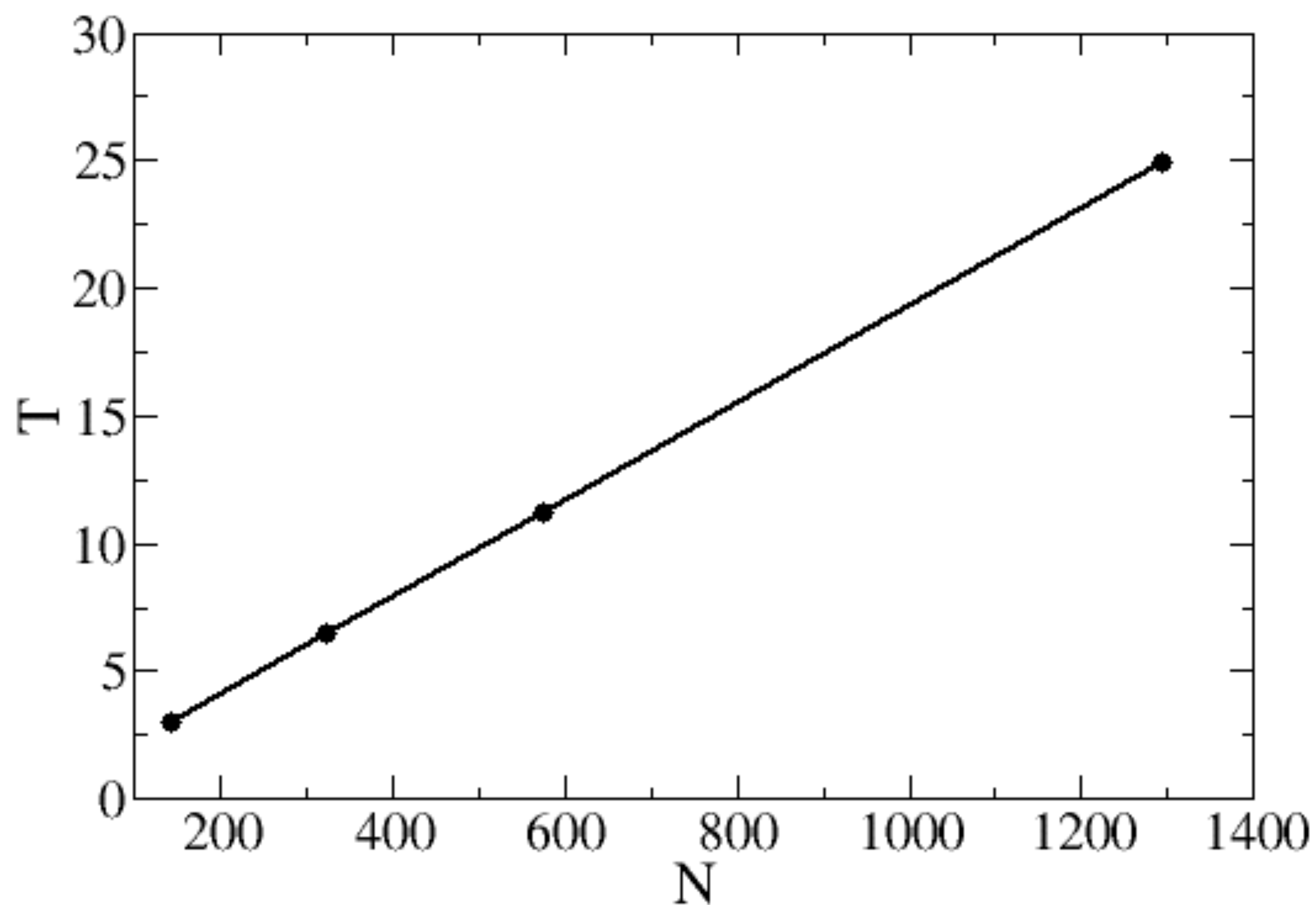
Metropolis

Metropolis

- Escolhe estados de acordo com a distribuição de Boltzmann-Gibbs
- Desvantagens
 - Processo de termalização
 - Critical slowing down
 - Uma simulação distinta para cada temperatura
- Vantagens
 - Relativamente rápido e eficiente.
 - Fácil de prever o tempo computacional

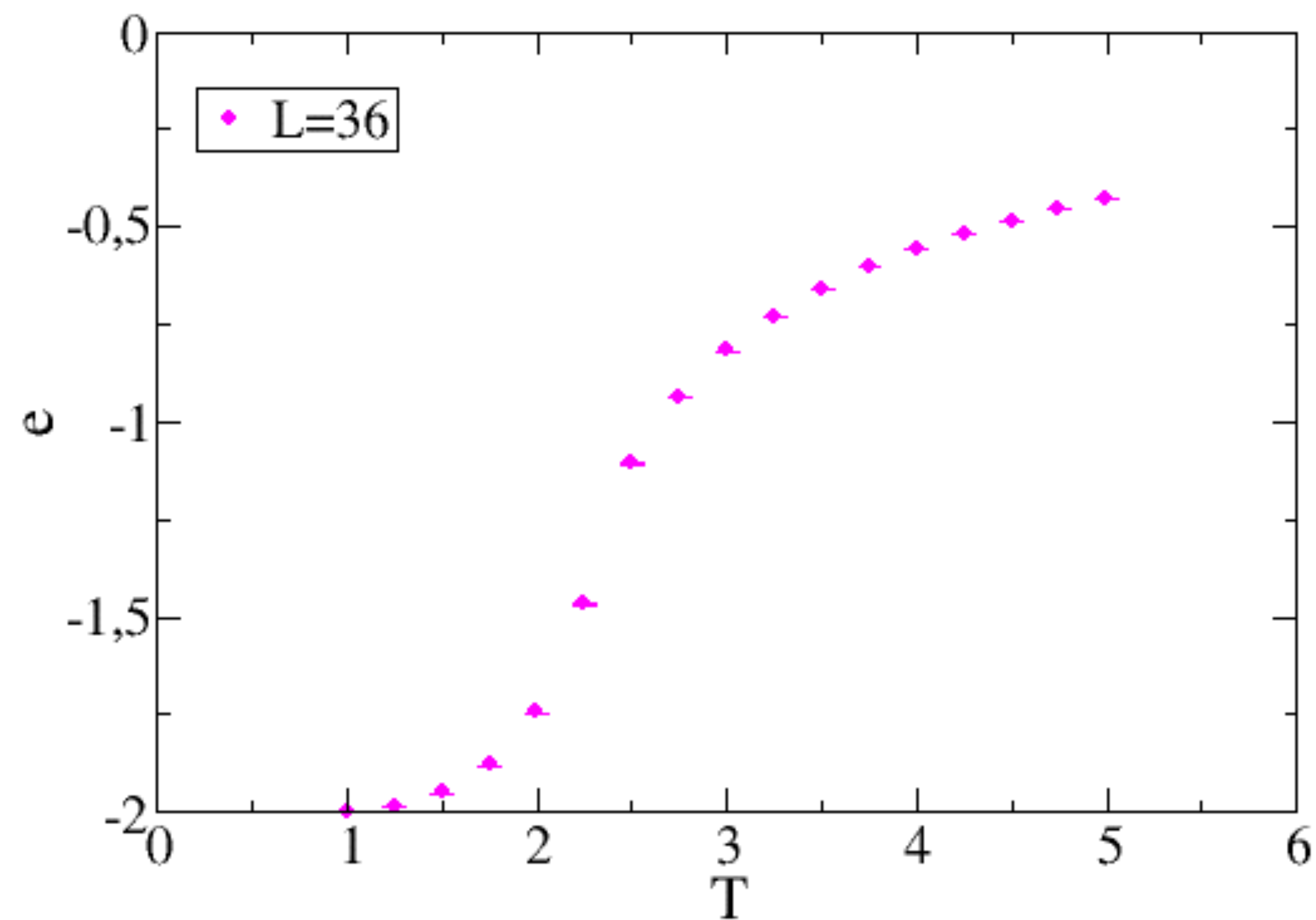
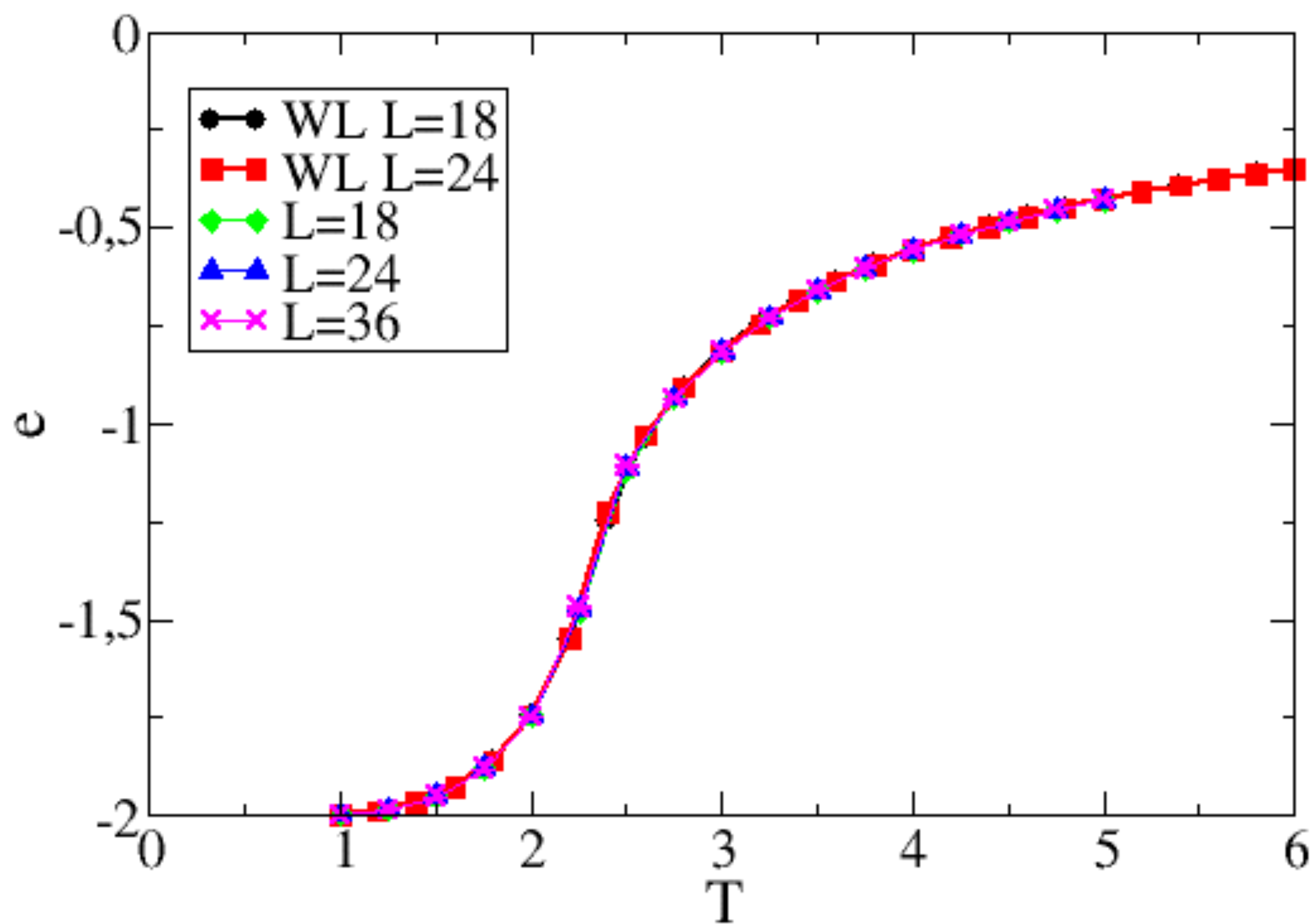
Tempo de simulação

Metropolis - 10^6 passos



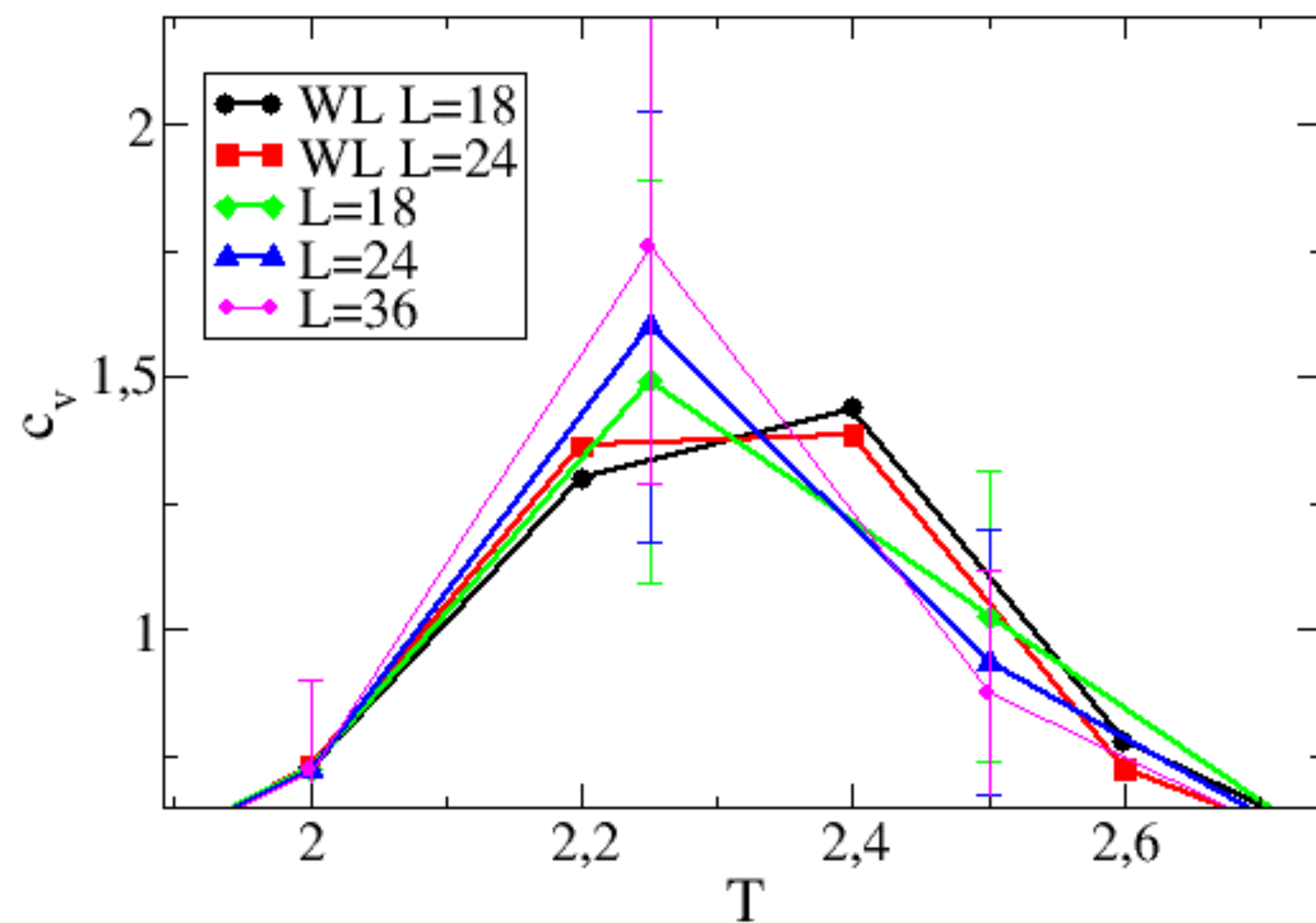
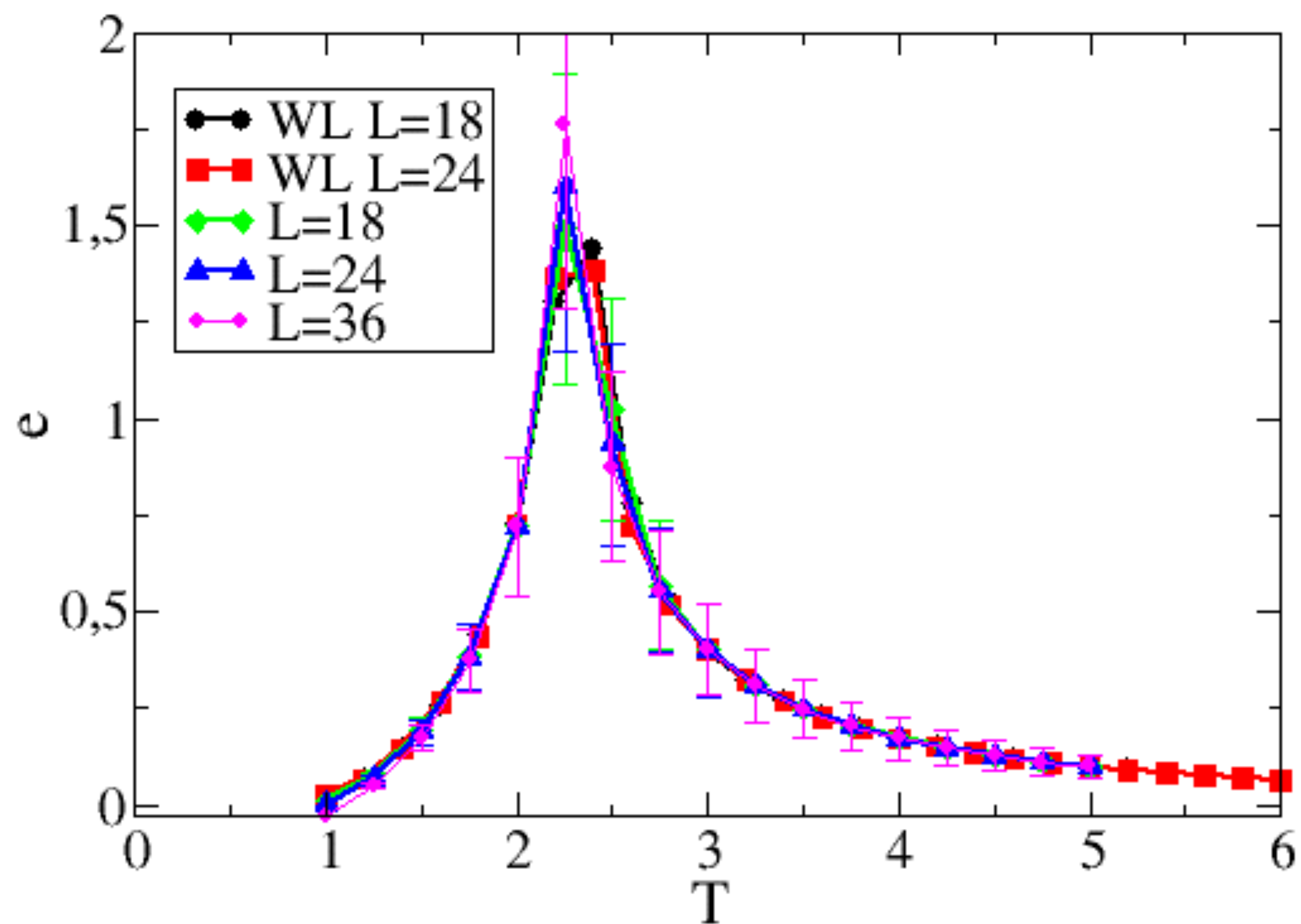
Grandezas termodinâmicas

Metropolis



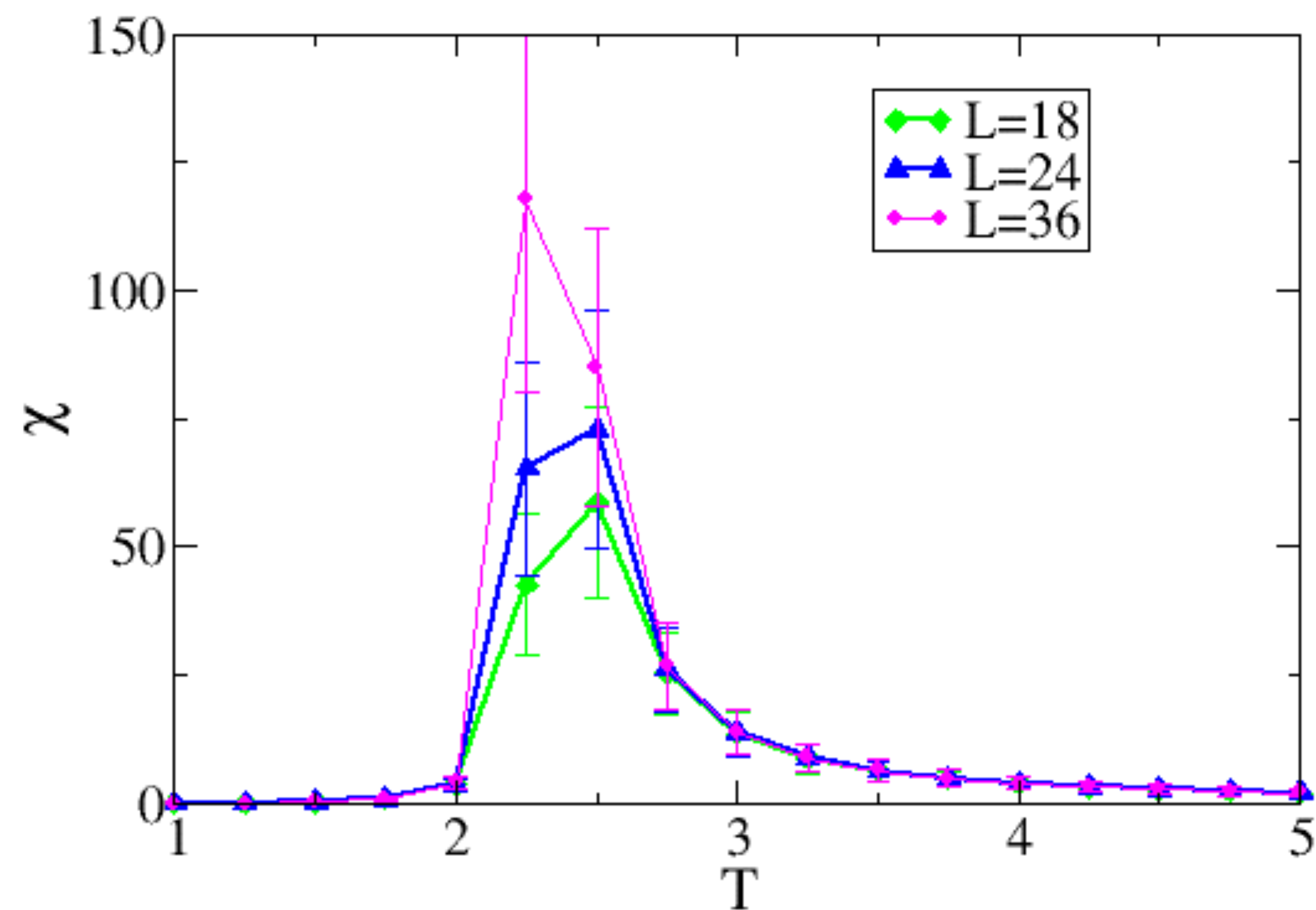
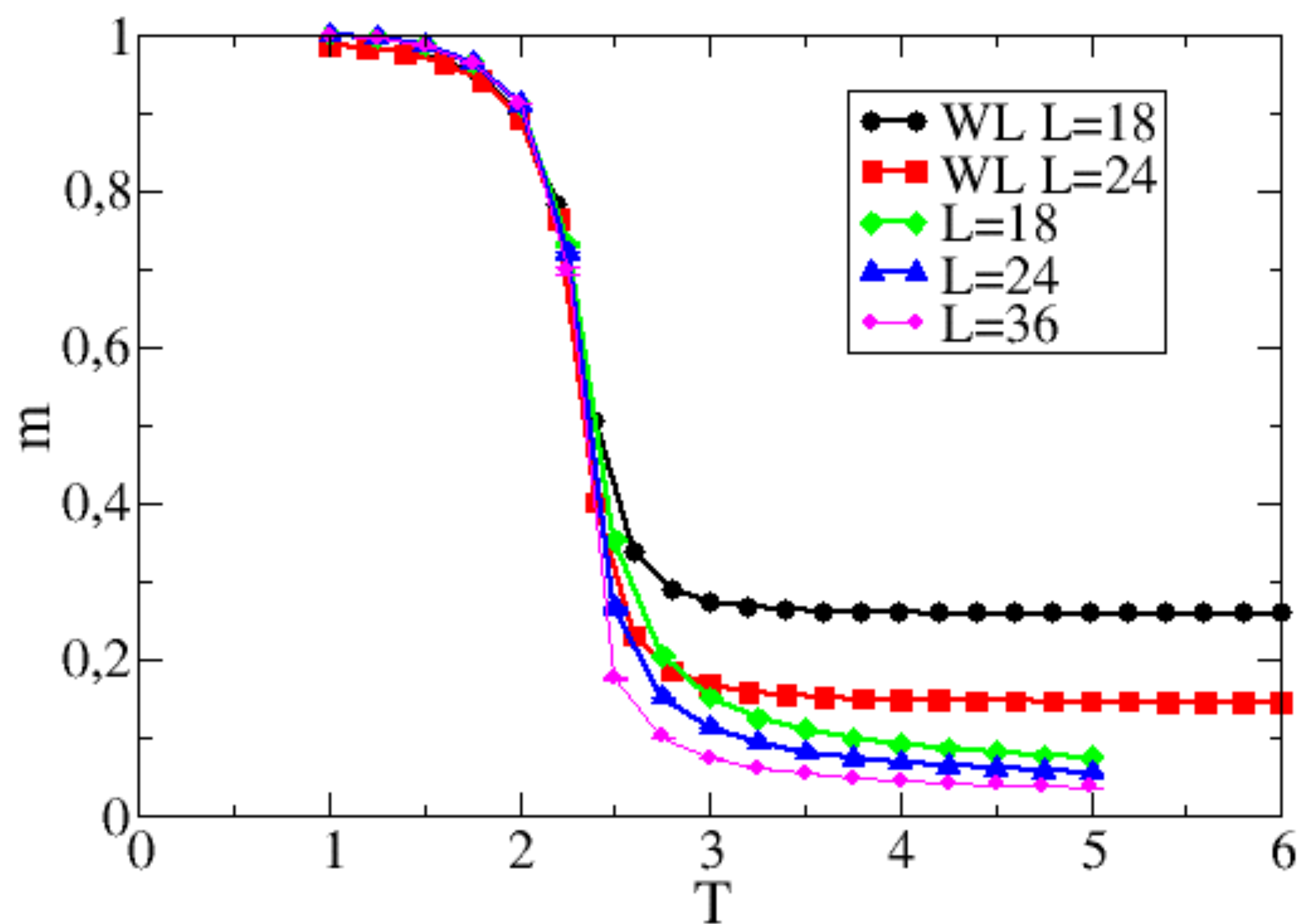
Grandezas termodinâmicas

Metropolis



Grandezas termodinâmicas

Metropolis



Estudo de transições de fase

- Precisamos descobrir o comportamento no limite termodinâmico
 - Teoria de escala de tamanho finito
 - Teoria que permite tomar o limite de L tendendo a infinito
- Conveniente olhar o comportamento de várias grandezas
- Simulações longas para reduzir erros