Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
SFI 5704 - Mecânica Estatística A - 2013-2

Prof. Leonardo Paulo Maia

Tarefa computacional - Implementação do algoritmo
de Metropolis para simular o modelo de Ising

Um método de Monte Carlo com cadeia de Markov consiste em uma estratégia de amostragem baseada na evolução temporal numérica de uma cadeia de Markov. Esta é construída para que seu (único) estado estacionário seja a particular distribuição de probabilidade que se deseja amostrar. No caso da simulação de um modelo de Ising em equilíbrio com um banho térmico, essa é a distribuição de Gibbs.

O algoritmo de Metropolis adaptado para simular o modelo de Ising é, provavelmente, o mais simples método de Monte Carlo com cadeia de Markov aplicado a um sistema físico que se pode conceber, pois é muito fácil verificar que as 3 condições suficientes para garantir a convergência ao estado desejado (dinâmica Markoviana, ergodicidade e balanço detalhado) são satisfeitas.

Considere uma rede regular euclideana bidimensional $L \times L$, com condições periódicas de contorno. Cada sítio é ocupado por um *spin*, $S_i \in \{-1, +1\}$. Em geral, o Hamiltoniano de Ising é expresso como

$$\mathcal{H}(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i.$$

Considere $H = 0$, $k_B = 1$ e $J = 1$ (ou seja, a temperatura será medida em unidades de J).

1 Dinâmica da magnetização e da energia

Escolha $L = 100$, uma temperatura T, $2 < T < 3$, e um tempo máximo t^{END} ($\approx 10^4$).

(i) Escolha um estado inicial particular, atribuindo o valor $+1$ para cada *spin*. Isso corresponde a $M = L \times L$ e $E = -2 \cdot L \times L$ (por quê?). Embora a condição inicial não deva alterar o estado estacionário a ser obtido, essa estratégia (que corresponde à solução para $T = 0$) é eficiente por não requerer o sorteio de números pseudo-aleatórios.

(ii) $t \leftarrow 0$

(iii) Sorteie um sítio, i^*, uniformemente.

(iv) Determine a variação na energia $\Delta\mathcal{H}$ e a variação na magnetização ΔM do sistema caso i^* venha a ser "flipado". Note que você pode obter uma expressão simples para essas grandezas envolvendo apenas os vizinhos diretos de i^*.

(v) Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, a transição proposta é aceita com certeza: $S_{i^*} \leftarrow -S_{i^*}$, $E \leftarrow E + \Delta\mathcal{H}$ e $M \leftarrow M + \Delta M$. Se $\Delta\mathcal{H} \geq 0$, a transição proposta é aceita com probabilidade $\exp(-\Delta\mathcal{H}/T)$ e valem todos os *updates* da frase anterior. Se a transição não for aceita, nada ocorre.

(vi) Definindo $N = L \times L$, $u = E/N$ e $m = M/N$, salve (t, m) e (t, u) para posterior visualização da dinâmica temporal da magnetização e da energia por partícula.

(vii) $t \leftarrow t + 1$

(viii) Enquanto $t < t^{\mathrm{END}}$, retornar ao item (iii).

2 Transição de fase

O objetivo agora é construir um gráfico da média do valor absoluto da magnetização **de equilíbrio** por partícula em função da temperatura (tenha isso em mente ao estudar o algoritmo abaixo). Com base na observação dos resultados da dinâmica temporal da magnetização e da energia por partícula para várias temperaturas no intervalo $[2, 3]$, você deve ser capaz de estimar um período transiente t^{TRANS}, com $t^{\mathrm{TRANS}} < t^{\mathrm{END}}$, tal que as curvas $m \times t$ e $u \times t$ sugiram que o estado estacionário tenha sido obtido para $t > t^{\mathrm{TRANS}}$. Escolha $T_i = 2$, $T_f = 3$ e $\delta T = 0.01$.

(i) Escolha um estado inicial particular, atribuindo o valor $+1$ para cada *spin*. Isso corresponde a $M = L \times L$ e $E = -2 \cdot L \times L$.

(ii) $T \leftarrow T_i$

(iii) $t \leftarrow 0$ e $avM \leftarrow 0$

(iv) Sorteie um sítio, i^*, uniformemente.

(v) Determine a variação na energia $\Delta\mathcal{H}$ e a variação na magnetização ΔM do sistema caso i^* venha a ser "flipado".

(vi) Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, a transição proposta é aceita com certeza: $S_{i^*} \leftarrow -S_{i^*}$, $E \leftarrow E + \Delta\mathcal{H}$ e $M \leftarrow M + \Delta M$. Se $\Delta\mathcal{H} \geq 0$, a transição proposta é aceita com probabilidade $\exp(-\Delta\mathcal{H}/T)$ e valem todos os *updates* da frase anterior. Se a transição não for aceita, nada ocorre.

(vii) Se $t > t^{\mathrm{TRANS}}$, $avM \leftarrow avM + |M|$

(viii) $t \leftarrow t + 1$

(ix) Enquanto $t < t^{\mathrm{END}}$, retornar ao item (iv).

(x) $avM \leftarrow avM/[N(t^{\mathrm{END}} - t^{\mathrm{TRANS}})]$

(xi) Salve (T, avM) para posterior visualização do parâmetro de ordem *versus* o parâmetro de controle.

(xii) $T \leftarrow T + \delta T$

(xiii) Enquanto $T < T_f$, retornar ao item (iii).