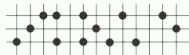




Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Grupo de Teoria da Matéria Condensada

Laboratório de Teoria
da Matéria Condensada



O Método de Monte Carlo

Aplicações do algoritmo de Metropolis no Modelo de Ising

Mateus Schmidt

Santa Maria - RS, 2012

- O Demônio de Laplace e o fator de Boltzmann;
- O Método de Monte Carlo;
- O algoritmo de Metropolis;
- Aplicação no modelo de Ising;
- Resultados;
- Conclusões;
- Referências;

Pierre Simon Laplace concebeu um experimento mental, conhecido como Demônio de Laplace, considerando que:

“De posse de todas as variáveis que determinam o estado do Universo em um instante t , é possível prever o seu estado no instante t' . Sendo $t' > t$.”



Pierre Simon Laplace (1749-1827).

"Nós podemos tomar o estado presente do Universo como o efeito do seu passado, e a causa do seu futuro. Uma inteligência que, em um dado momento, conhecesse todas as forças que dirigem a natureza e todas as posições dos componentes da natureza, e que tivesse também a capacidade de submeter todos estes dados à análise matemática, compreenderia em uma única fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e os do menor átomo. Para tal inteligência nada seria incerto, e o futuro, assim como o passado, estaria presente diante de seus olhos."

Seria possível construir tal máquina?

Para visualizar a possibilidade da existência de tal máquina, consideramos os computadores mais potentes de hoje, que realizam 10^{16} operações por segundo. Reduzimos o nosso propósito a análise de um sistema de spins de Ising, em uma rede bidimensional 10×10 .

São 100 spins que podem assumir dois estados cada um (± 1). Nosso sistema pode estar configurado de 2^{100} formas diferentes. Para obter cada uma destas configurações, usando o computador mais potente que existe, levaríamos, portanto,

$$\frac{2^{100}}{1 \times 10^{16} s^{-1}} = \frac{1,267 \times 10^{30}}{1 \times 10^{16} s^{-1}} = 1,267 \times 10^{14} s$$

Ou seja, aproximadamente 4.017.630,64 anos seriam necessários para observar as configurações de um sistema de 100 spins, usando o melhor computador da atualidade. Imagine trabalhar com um mol de partículas?

Portanto, sabemos que não é possível obter a velocidade e a posição de cada partícula, mesmo em uma porção pequena de matéria. Porém, através da mecânica estatística, para alguns sistemas é possível calcular uma média das grandezas microscópicas, com base nos estados acessíveis e, assim, obter resultados para as grandezas macroscópicas.

O fator de Boltzmann



Ludwig Boltzmann (1844-1906)

Juntamente com Maxwell e Gibbs, Boltzmann é considerado o fundador da mecânica estatística.

É interessante conhecer o fator de Boltzmann: um fator de ponderação que determina a probabilidade relativa de um estado i , em um sistema com múltiplos estados em equilíbrio termodinâmico a temperatura T .

$$\exp\left(\frac{-E_i}{K_B \cdot T}\right)$$

Onde K_B é a constante de Boltzmann e E_i é a energia do sistema no estado i .

Se a máquina idealizada por Laplace existisse, ainda que limitada a uma rede de spins pequena, veríamos que não faria sentido comparar os resultados obtidos nesta máquina, com os resultados obtidos experimentalmente.

Os resultados da máquina apresentariam enormes variações no tempo (pensemos em intervalos de 10^{-12} s), que, obviamente, nossas medidas macroscópicas não observam. “O remédio seria então realizar médias sobre intervalos de tempo e regiões espaciais comparáveis aos da resolução experimental.” (SCHERER, 2005)

Se a máquina idealizada por Laplace existisse, ainda que limitada a uma rede de spins pequena, veríamos que não faria sentido comparar os resultados obtidos nesta máquina, com os resultados obtidos experimentalmente.

Os resultados da máquina apresentariam enormes variações no tempo (pensemos em intervalos de $10^{-12}s$), que, obviamente, nossas medidas macroscópicas não observam. “O remédio seria então realizar médias sobre intervalos de tempo e regiões espaciais comparáveis aos da resolução experimental.” (SCHERER, 2005)

Quando fazemos uma medida experimental, podemos considerar que o sistema passa por todos os estados acessíveis, e esta medida é resultado da média desses estados. Isso está intimamente ligado ao postulado fundamental da mecânica estatística em equilíbrio:

“Em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, todos os microestados acessíveis são igualmente prováveis.” (SALINAS, 2005)

“A ideia básica por trás da simulação de Monte Carlo é simular a flutuação aleatória térmica do sistema de estado para estado ao longo de um experimento.” (NEWMANN & BARKEMA, 1999, tradução nossa)

Quando fazemos uma medida experimental, podemos considerar que o sistema passa por todos os estados acessíveis, e esta medida é resultado da média desses estados. Isso está intimamente ligado ao postulado fundamental da mecânica estatística em equilíbrio:

“Em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, todos os microestados acessíveis são igualmente prováveis.” (SALINAS, 2005)

“A ideia básica por trás da simulação de Monte Carlo é simular a flutuação aleatória térmica do sistema de estado para estado ao longo de um experimento.” (NEWMANN & BARKEMA, 1999, tradução nossa)

Quando fazemos uma medida experimental, podemos considerar que o sistema passa por todos os estados acessíveis, e esta medida é resultado da média desses estados. Isso está intimamente ligado ao postulado fundamental da mecânica estatística em equilíbrio:

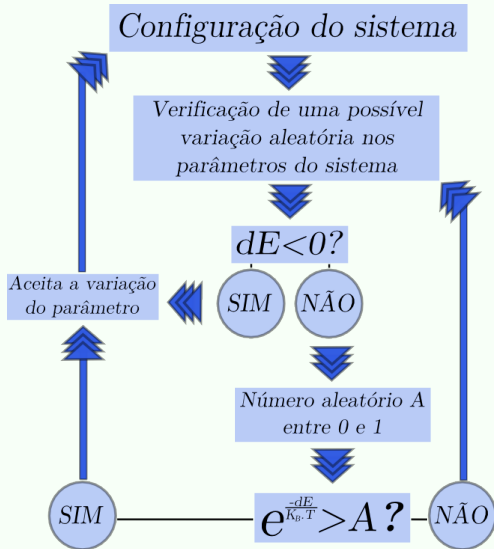
“Em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, todos os microestados acessíveis são igualmente prováveis.” (SALINAS, 2005)

“A ideia básica por trás da simulação de Monte Carlo é simular a flutuação aleatória térmica do sistema de estado para estado ao longo de um experimento.”(NEWMANN & BARKEMA, 1999, tradução nossa)

O algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis é o mais utilizado para simulação de sistemas físicos dentre os algoritmos do Método de Monte Carlo. Seu princípio de funcionamento é simples: observar como uma possível mudança na configuração do sistema implicaria na sua energia e, através de certa aleatoriedade, definir se essa mudança será feita ou não.

O algoritmo de Metropolis



O algoritmo de Metropolis é comumente utilizado em simulações do modelo de Ising para as mais diversas verificações de comportamentos, seja de redes de spins ou de sistemas sociais. A energia no modelo de Ising é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

O Hamiltoniano (\mathcal{H}) do modelo de Ising relaciona a interação de troca J com cada uma das interações entre sítios vizinhos ($\sigma_i \sigma_j$) que podem assumir os valores 1 ou -1. O termo H está relacionado ao campo sobre o sistema, que está associado a cada um dos spins (σ_i).

O algoritmo de Metropolis é comumente utilizado em simulações do modelo de Ising para as mais diversas verificações de comportamentos, seja de redes de spins ou de sistemas sociais. A energia no modelo de Ising é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

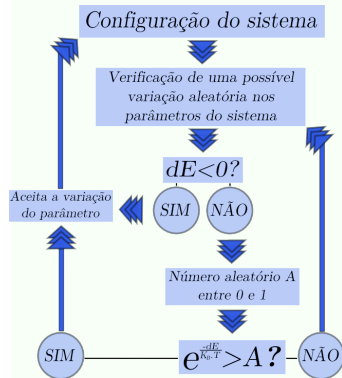
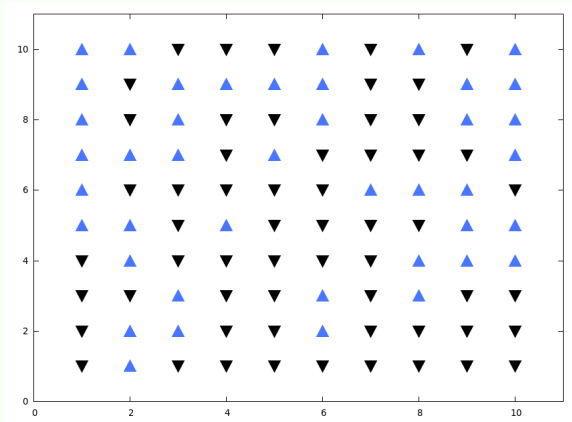
O Hamiltoniano (\mathcal{H}) do modelo de Ising relaciona a interação de troca J com cada uma das interações entre sítios vizinhos ($\sigma_i \sigma_j$) que podem assumir os valores 1 ou -1. O termo H está relacionado ao campo sobre o sistema, que está associado à cada um dos spins (σ_i).

Vamos aplicar o algoritmo de Metropolis à uma rede de spins quadrada (bidimensional), com 100 spins (10x10), configurados aleatoriamente.

Os passos de Monte Carlo ocorrerão à temperatura $T = 3J/K_B$.
A temperatura crítica para a rede quadrada é de $T_c \approx 2,269J/K_B$.

Consideramos condições periódicas de contorno, nas quais a última linha interage com a primeira linha da rede, bem como, a última coluna interage com a primeira coluna.

Aplicações no modelo de Ising



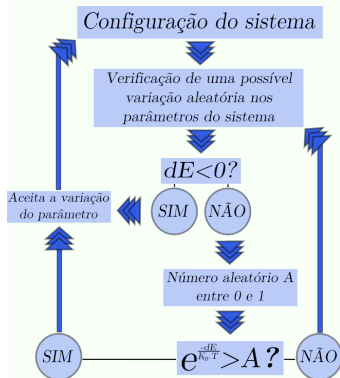
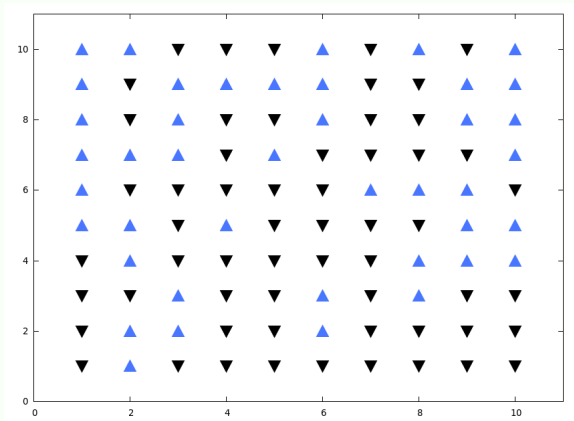
Apos a configuração aleatória inicial do sistema, é sorteado o primeiro spin, que está localizado na 3ª linha da primeira coluna.

É necessário calcular a variação da energia que ocorreria com a troca do spin.

Como a variação da energia não será negativa caso ocorra o flip do spin, usamos o fator de Boltzmann.

O número aleatório sorteado foi $A \approx 0,113301$, então não flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



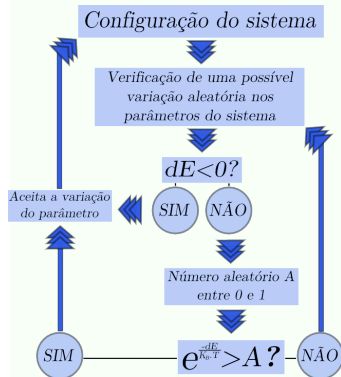
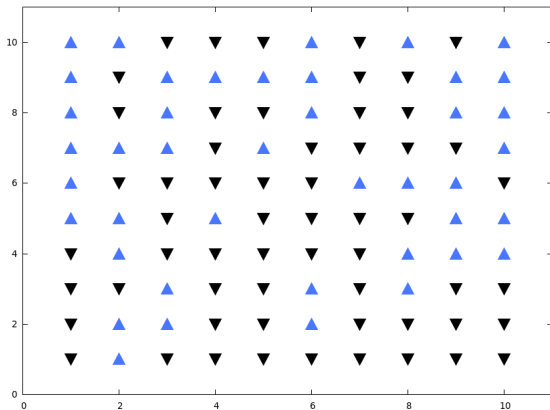
Após a configuração aleatória inicial do sistema, é sorteado o primeiro spin, que está localizado na 3ª linha da primeira coluna.

É necessário calcular a variação da energia que ocorreria com a troca do spin.

Como a variação da energia não será negativa caso ocorra o flip do spin, usamos o fator de Boltzmann.

O número aleatório sorteado foi $A = 0,113$, então não flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



Após a configuração aleatória inicial do sistema, é sorteado o primeiro spin, que está localizado na 3ª linha da primeira coluna.

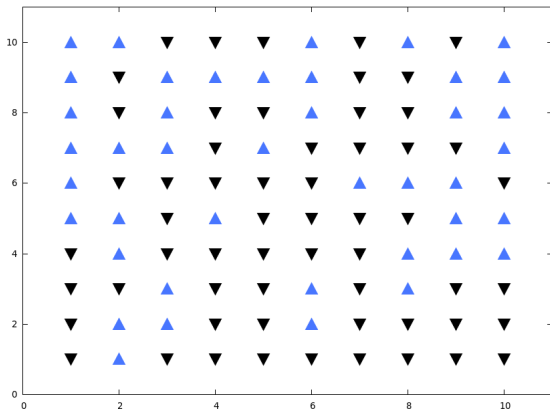
É necessário calcular a variação da energia que ocorreria com a troca do spin.

Como a variação da energia não será negativa caso ocorra o flip do spin,

usamos o fator de Boltzmann para obter a probabilidade P deste novo estado.

O número aleatório sorteado foi 0,45, portanto, aceitamos o flip.

Aplicações no modelo de Ising



Após a configuração aleatória inicial do sistema, é sorteado o primeiro spin, que está localizado na 3ª linha da primeira coluna.

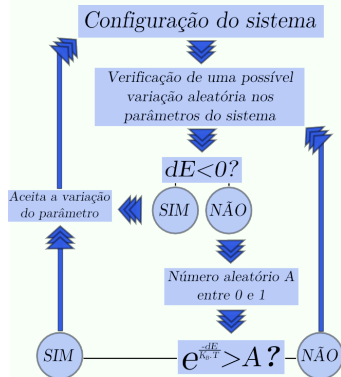
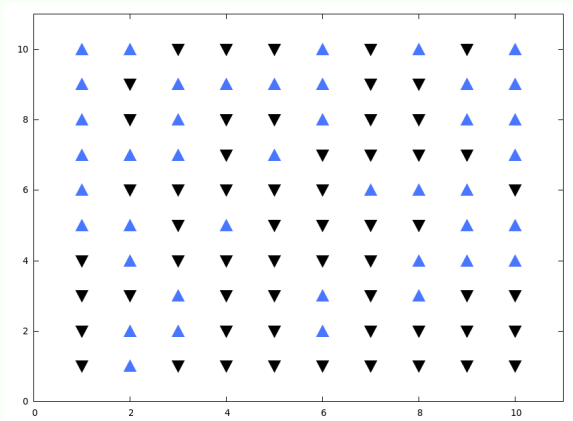
É necessário calcular a variação da energia que ocorreria com a troca do spin.

Como a variação da energia não será negativa caso ocorra o flip do spin,

usamos o fator de Boltzmann para obter a probabilidade P deste novo estado.

O número aleatório sorteado foi $A \approx 0,443384$, então não flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



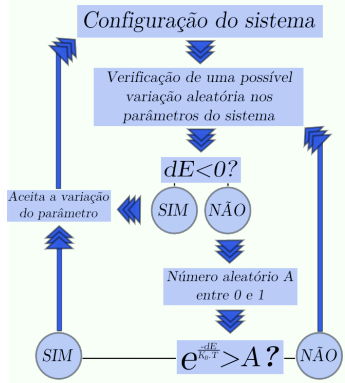
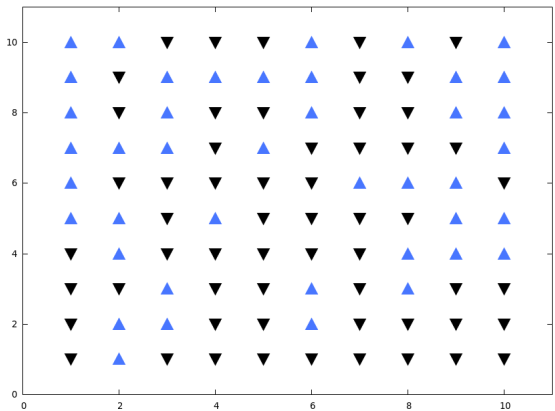
Aleatoriamente é feita uma nova escolha de spin. Desta vez, é selecionado o spin na 6ª linha da 3ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria positiva, usamos novamente o fator de Boltzmann para obter P .

O número aleatório sorteado foi $A \approx 0,021$, então flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



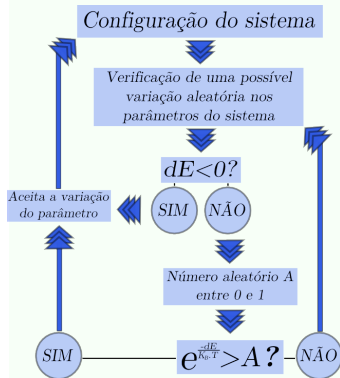
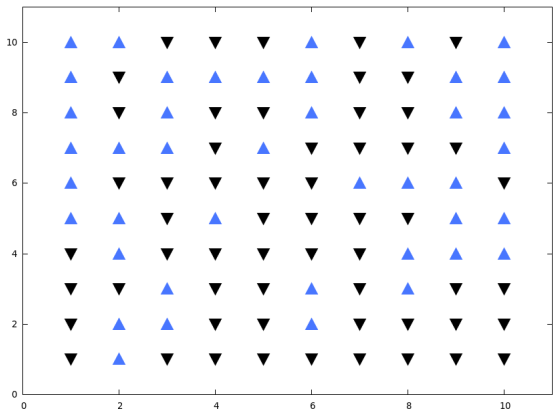
Aleatoriamente é feita uma nova escolha de spin. Desta vez, é selecionado o spin na 6ª linha da 3ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria positiva, usamos novamente o fator de Boltzmann para obter P .

O número aleatório sorteado foi $A = 0,021$, então flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



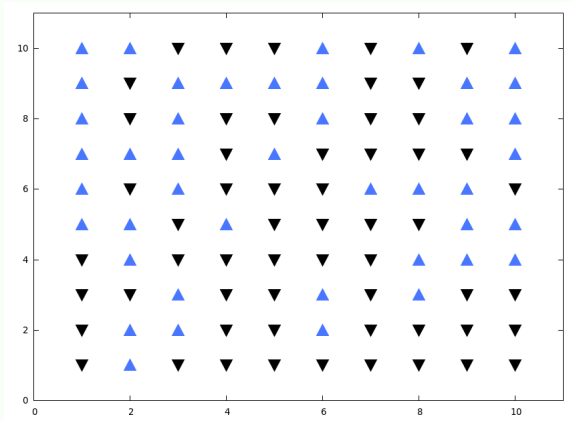
Aleatoriamente é feita uma nova escolha de spin. Desta vez, é selecionado o spin na 6ª linha da 3ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria positiva, usamos novamente o fator de Boltzmann para obter P .

O número aleatório sorteado foi $A \approx 0,024312$, então flipamos o spin.

Aplicações no modelo de Ising



Após a troca do spin é feito um novo sorteio.

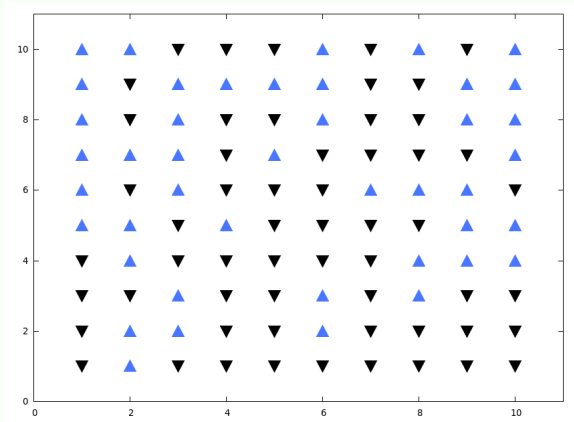
Agora observamos o spin na 8ª linha da 6ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria negativa, aceitamos a troca do spin.

Obs.: Nesta temperatura (3J / K_B) há uma probabilidade pequena de que variações de energia altas, como a de 8J, sejam aceitas.

Aplicações no modelo de Ising



Após a troca do spin é feito um novo sorteio.

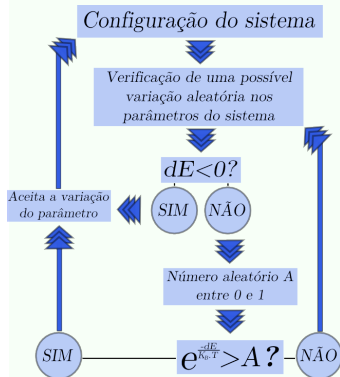
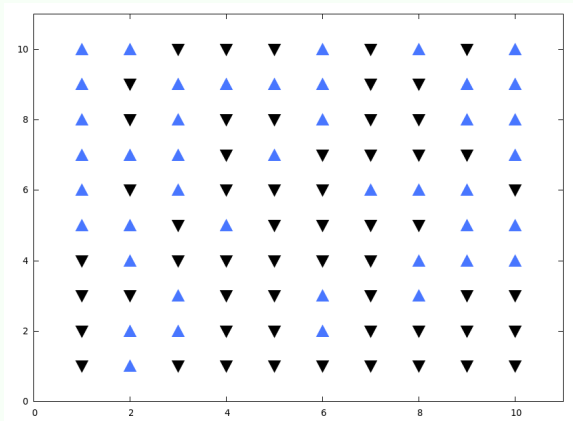
Agora observamos o spin na 8ª linha da 6ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria negativa, aceitamos a troca do spin.

Obs.: Nesta temperatura (307 / K) há uma probabilidade pequena de que variações de energia altas, como a de 87, sejam aceitas.

Aplicações no modelo de Ising



Após a troca do spin é feito um novo sorteio.

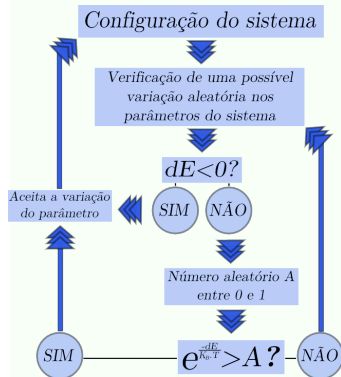
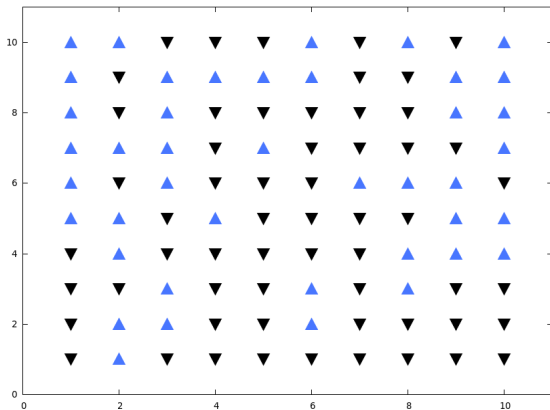
Agora observamos o spin na 8ª linha da 6ª coluna.

Calculamos a variação da energia dada pela possível troca do spin.

Como a variação da energia seria negativa, aceitamos a troca.

Obs.: Nesta temperatura (100 K) há uma probabilidade pequena de que variações de energia altas, como a de 17, sejam aceitas.

Aplicações no modelo de Ising



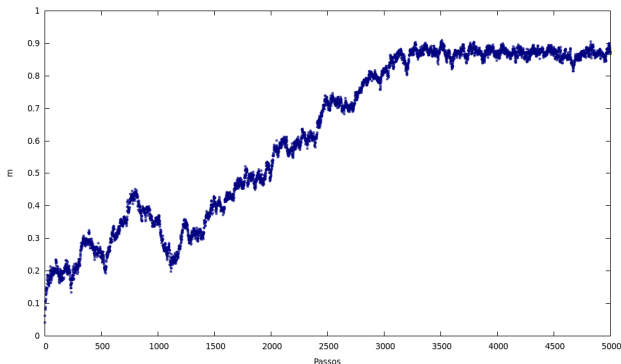
Os passos de Monte Carlo, portanto, utilizam certas probabilidades para definir se aceitam ou não uma troca de spin a uma dada temperatura T .

Nesta temperatura $3J/K_B$, por exemplo, há uma probabilidade pequena de que variações de energia altas, como a de $8J$ sejam aceitas.

Quanto mais próximo da T_c menor será P , portanto, próximo de uma transição de fase, o sistema aceita cada vez menos variações positivas de energia.

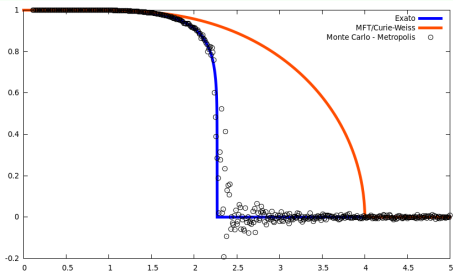
Aplicações no modelo de Ising

O objetivo dos passos de Monte Carlo é fazer com que o sistema termalize, ou seja, que a configuração do sistema seja adequada à sua temperatura.

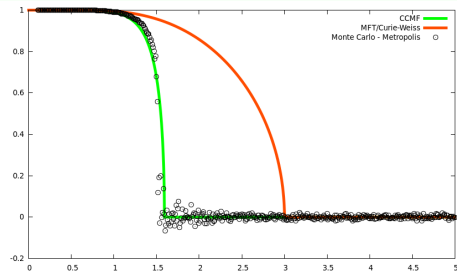


Este gráfico esboça a variação da magnetização por spin (m) a cada troca de todos os spins (passo) do sistema em uma rede 100×100 , a uma temperatura de $2,1J/K_B$.

Comparativos

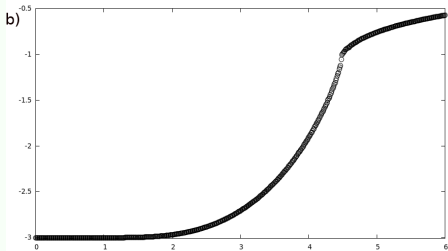
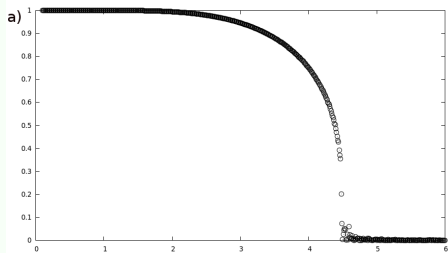


Magnetização em função da temperatura em uma rede quadrada: a linha azul mostra o resultado exato obtido analiticamente por Lars Onsager; a linha laranja mostra a curva segundo a Teoria de Campo Médio; os círculos são a compilação dos dados obtidos através da simulação do método de Monte Carlo.
(Rede 100x100 - com 10.000 passos de Monte Carlo)

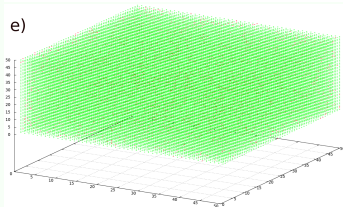
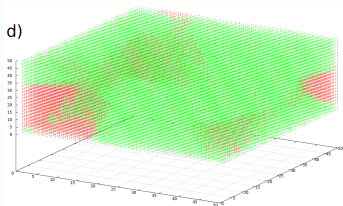
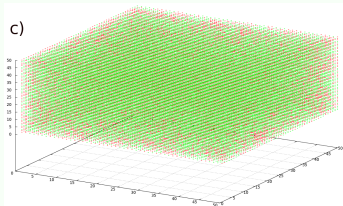


Magnetização em função da temperatura em uma rede em formato favo de mel: a linha verde mostra a relação obtida com a Teoria de Campo Médio com Clusters Correlacionados; na linha laranja a curva é dada pela Teoria de Campo Médio; os círculos são a compilação dos dados obtidos através da simulação do método de Monte Carlo.
(Rede 200x200 - com 25.000 passos de Monte Carlo)

Simulação para estrutura tridimensional



Simulação utilizando o Método de Monte Carlo para rede cúbica (50x50x50), com 500 passos: a) Magnetização em função da Temperatura; b) Energia em função da Temperatura; c) Fase paramagnética; d) Formação de ilhas de correlação; e) Fase ferromagnética;



O algoritmo de Metropolis é uma poderosa ferramenta no tratamento de sistemas estatísticos, contudo, trata-se apenas da ponta do iceberg das técnicas envolvendo o método de Monte Carlo. Inclusive, segundo Newman & Barkema (1999, tradução nossa), “embora este algoritmo famoso seja muito fácil de programar, ele raramente é a forma mais eficiente para realizar uma simulação.”

Os métodos estocásticos são muito importantes para o tratamento de modelos matemáticos de sistemas físicos, biológicos, econômicos, sociais, dentre outros. Portanto, a simulação é um recurso valioso no meio acadêmico, fazendo parte do tripé que sustenta o entendimento que temos da natureza, juntamente com os experimentos e os recursos teóricos.

NEWMAN, Mark & BARKEMA, Gerard. **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**. Oxford: Clarendon Press, 1999. 474 p.

SALINAS, Sílvio Roberto de Azevedo. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: Edusp, 2005. 464 p.

SCHERER, Claudio. **Métodos Computacionais da Física**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005. 284 p.

YAMAMOTO, Daisuke, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 144427.