Método de Monte Carlo para o estudo de transições de fase e fenômenos críticos

February 21, 2018

Revisão

- A enumeração exata das configurações é possível apenas para sistemas pequenos;
- Amostragem por importância $\rightarrow$ configurações com maior o peso $P_{eq}(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{\sum_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}$ são mais frequentemente escolhidas $\rightarrow$ $P_{eq}(\sigma)$ varia com a temperatura;
- Nesta aula aplicaremos o método de Monte Carlo no modelo mais simples exibindo transição de fase com quebra espontânea de simetria: modelo de Ising.

Transição de fase: Uma visão geral

- Um sistema homogêneo, isto é, totalmente uniforme quanto as suas propriedades específicas constitui uma fase termodinâmica;
- Transições de fase descontínuas (primeira-ordem) e contínua (segunda-ordem) $\rightarrow$ descontinuidades e divergências na primeira e segunda derivada da função energia livre, respectivamente;
- Uma maneira alternativa para caracterizarmos uma transição de fase é expressá-la em termos de uma quantidade denominada parâmetro de ordem $\psi \rightarrow$ numa fase $\psi \neq 0$ e na outra fase $\psi = 0$;
- Nas vizinhanças do ponto crítico, o parâmetro de ordem, suscetibilidade, calor específico apresentam o comportamento dado por $\psi \sim (-t)^{\beta}$, $\chi \sim (\pm t)^{-\gamma}$ e $C \sim (\pm t)^{-\alpha}$, onde $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ e β, γ e α são expoentes críticos associados;

- Verifica-se que diferentes sistemas apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos $\rightarrow$ classes de universalidade;
- Expoentes críticos dependem $\rightarrow$ ingredientes mais genéricos ao invés dos "detalhes" sobre os sistemas $\rightarrow$ dimensionalidade do sistema, simetria do parâmetro de ordem, alcance das interações e outros;

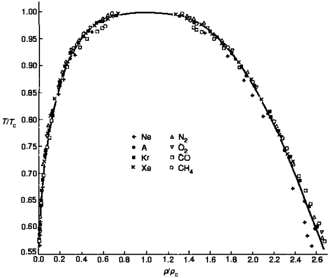


Fig. 2.2. The coexistence curve of eight different fluids plotted in reduced variables. The fit assumes an exponent $\beta = 1/3$. After Guggenheim, E. A. (1945). *Journal of Chemical Physics*, **13**, 253.

Modelo de Ising

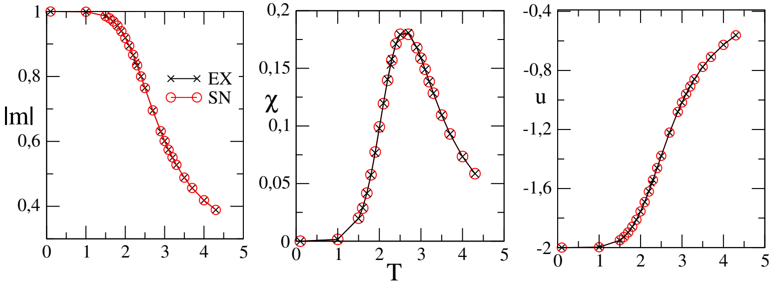
- Modelo de Ising $\to$ generalização do modelo para o cristal paramagnético $\to \mathcal{H} = -J\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j - H\sum_i \sigma_i \to$ para $J = 0$ recupera-se o resultado do paramagneto ideal $m = \tanh(\beta H)$, onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$.
- Transição de fase ferromagnética-paramagnética governada pela temperatura para dimensões superiores à $d \geq 2 \to$ solução exata para $d = 2$ (Onsager);
- Solução exata constitui uma exceção $\to$ importância das simulações numéricas;
- Diferentes dinâmicas nos levam à distribuição de Gibbs $\to$ satisfaz o balanço detalhado $\to$ algoritmo de Metropolis.

Algoritmo de Metropolis

- Sorteia-se aleatoriamente um sítio;
- Inverte-se o sinal do spin do sítio escolhido;
- $p_{\sigma \to \sigma'} = \min\{1, e^{-\beta \Delta \mathcal{H}(\sigma)}\}$ onde (modelo de Ising) $\Delta \mathcal{H}(\sigma) = \mathcal{H}(\sigma') - \mathcal{H}(\sigma) = 2\sigma_i(J \sum_\delta \sigma_{i+\delta} + H)$;
- Se $\Delta \mathcal{H} \leq 0$ a nova configuração será σ' com probabilidade 1;
- Se $\Delta \mathcal{H} > 0$ a nova configurção será σ' com probabilidade $e^{-\beta \Delta \mathcal{H}}$. Isso é feito gerando um número aleatório r entre 0 e 1. Se $r < e^{-\beta \Delta \mathcal{H}}$ aceitamos o novo valor do spin, caso contrário a nova configuração de spins é rejeitada;
- Repetimos o processo a partir da primeira etapa.

- Atividade I: Utilizando o código fortran ising-teste.f, simule o modelo de Ising para redes de tamanho $L = 4$ sem alterar qualquer parâmetro, a partir da temperatura inicial 1.0 até 4.0 em incrementos de $\Delta T = 0.1$. Para compilar o programa digite gfortran isingt-teste.f . Em seguida, para rodar use o comando ./a.out
- Compare com o cálculo exato (disponível no arquivo ativ1-enumeracao-L4.dat). Escolha uma das grandezas: magnetização por spin, suscetibilidade ou energia média. Para fazer o gráfico no xmgrace use o comando xmgrace -block ativ1-enumeracao-L4.dat -bxy 1:COLUNA -block isingL4.dat -bxy 1:COLUNA
- Grandezas relevantes $\langle |m| \rangle = \frac{1}{N} \langle | \sum_{i=1}^{N} \sigma_i | \rangle$, $\chi = \frac{N}{T} [\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2]$ e $u = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle$;
- Para magnetização use (1:2), suscetibilidade use (1:3) e energia média use (1:4);

Comparação com resultado exato para $L = 4$

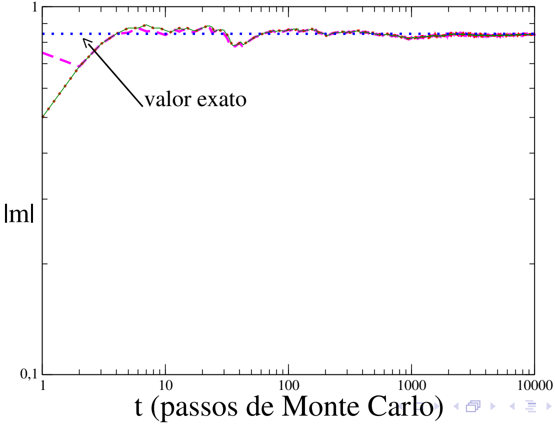


- Desafio 0 (para classe): Por que estamos calculando o módulo da magnetização ao invés da magnetização?

Alguns pontos importantes

- É necessário "descartar" as configurações iniciais $\rightarrow$ não são (em geral) configurações importantes (típicas) da temperatura em análise;

- Comparação para rede $L = 4$ para $T = 2.269$;

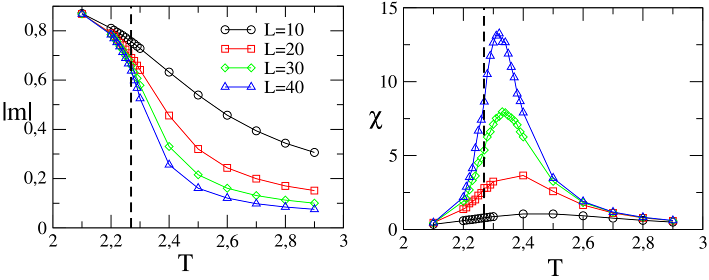


- Atividade II: Repita a simulação anterior, mas para uma rede de tamanho $L = 10$, também da temperatura inicial 2.0 até 3.0 com incrementos na temperatura de 0.02. Resultados para $L = 20$ e $L = 30$ encontram-se nos arquivos isingL20.dat e isingL30.dat, respectivamente.

- Faça o gráfico da magnetização e suscetibilidade versus temperatura para $L = 10, 20$ e 30. Lembrando: xmgrace -block isingL10.dat -bxy 1:COLUNA -block isingL20.dat -bxy 1:COLUNA -block isingL30.dat -bxy 1:COLUNA, onde deve-se usar 1:2 (1:3) para magnetização (suscetibilidade) versus temperatura.

Resultados

- Resultados para diferentes tamanhos de sistema;



- À medida que L aumenta $\rightarrow$ o máximo de χ aumenta e sua posição se desloca para esquerda $\rightarrow$ evidência de uma transição de fase;
- Entretanto seu máximo é diferente do ponto crítico $T_c \equiv \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.269\ldots$(Onsager);
- Como estimarmos o ponto crítico e expoentes críticos?

Teoria de escala finita

- Uma vez que é possível simularmos apenas sistemas finitos, a teoria de escala finita nos permite localizar o ponto crítico e os expoentes críticos estudando sistemas finitos;
- Comprimento de correlação [$\xi \sim |t|^{-\nu}$, sendo $|t| \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$] é limitado pelo tamanho L finito do sistema $\rightarrow$ correções de escala nas grandezas como magnetização, suscetibilidade e outras;
- Quando $L/\xi >> 1$ os efeitos de tamanho finito não serão importantes. Por outro lado, $L/\xi << 1$ comportamento em torno do ponto crítico é afetado pelo tamanho finito;
- Ponto de partida $\rightarrow$ supor que ξ "escala" com L de forma que podemos trabalhar com a razão $L/\xi \propto L|t|^{\nu}$ ou ainda $L^{1/\nu}|t|$;

- Nas proximidades do ponto crítico supomos que $M_L = \xi^{-\beta/\nu} f(L/\xi)$, $\chi = \xi^{\gamma/\nu} g(L/\xi)$, sendo $f(x)$ e $g(x)$ funções de escala a serem determinadas. Tendo em vista os limites para $L/\xi >> 1$ e $<< 1$, definimos as funções f e g de forma que $M_L = L^{-\beta/\nu} \tilde{f}(L^{1/\nu}|t|)$ e $\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{g}(L^{1/\nu}|t|)$, onde $\tilde{f}$ e $\tilde{g}$ estão relacionadas com f e g,

- No ponto crítico ($T = T_c$ ou $|t| = 0$) obtemos $M_L = L^{-\beta/\nu} \tilde{f}(0)$ e $\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{g}(0)$, de forma que um gráfico di-log de M_L e χ versus L nos fornece os expoentes críticos β/ν e γ/ν, respectivamente.

- Mas como encontrar o ponto crítico $T = T_c$?

- A partir do resultado acima, podemos esperar que $M_L^2 = L^{-2\beta/\nu}\tilde{H}(L^{1/\nu}|t|)$ e $M_L^4 = L^{-4\beta/\nu}\tilde{U}(L^{1/\nu}|t|)$, sendo $\tilde{H}(x)$ e $\tilde{U}(x)$ funções ;

- É conveniente definirmos a quantidade $U_L = 1 - \frac{\langle M_L^4\rangle}{3\langle M_L^2\rangle^2}$, uma vez que na criticalidade ela é dada por $U_0 = 1 - \frac{\tilde{U}(0)}{3\tilde{H}(0)}$, que é independente do tamanho do sistema. Para o modelo de Ising $U_0 \sim 0.61$;

- Para $T < T_c$ e $L >> \xi$ temos que $U_L = 2/3$ quando $L \to \infty$. Quando $T > T_c$ e $L >> \xi$, temos $U_L \to 0$ quando $L \to \infty$. Isso pode ser entendido tendo em vista que na fase desordenada a distribuiçao de probabilidades $P_L(M)$ assoacidada a M é uma gaussiana de largura σ e centrada em $M = 0$. Neste caso temos que $\langle M_L^2\rangle = \sigma$ e $\langle M_L^4\rangle = 3\sigma^2$ e portanto $U_L \to 0$.

- Para $L << \xi$, o cumulante U_L é uma função que varia "suavemente" com a temperatura.

Dedução alternativa

- Vimos que ambos ξ e M_L escalam com L e $\xi^{\beta/\nu}$, respectivamente. Uma vez que $P(M_L)$ deve depender de L, M e T (por meio da dependência com ξ), assumimos a relação $P(M_L) = \xi^{\beta/\nu}\tilde{P}(L/\xi, M\xi^{\beta/\nu})$ ou ainda a expressão $P(M_L) = L^{\beta/\nu}\bar{P}(L/\xi, ML^{\beta/\nu})$;

- A partir da expressão acima, se calcularmos o valor médio $M_L = \int |M|P(M_L)dM$ chegaremos na expressão $M_L = L^{-\beta/\nu}\tilde{f}(L^{1/\nu}|t|)$, onde $\tilde{f}(L^{1/\nu}|t|) = \int |x|f(L/\xi, x)dx$;

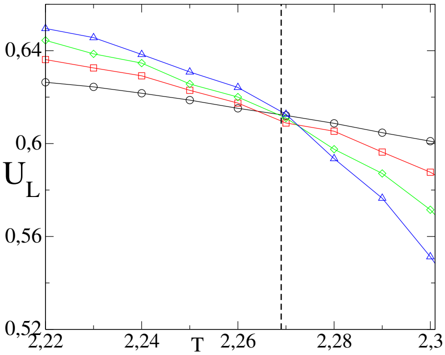
- Dessa forma, para qualquer potência de M_L obtemos $M_L^n = L^{-n\beta/\nu}\tilde{f}_n(L^{1/\nu}|t|)$ (onde $\tilde{f}_n(L^{1/\nu}|t|)$ é diferente em cada caso), de onde reobtemos os resultados anteriores.

Estimativa de T_c

- Atividade III: Faça o gráfico de U_L (5a coluna do arquivo de dados) versus a temperatura para $L = 10$, $L = 20$ e $L = 30$ (arquivos isingL20.dat e isingL30.dat). Faça uma estimativa de T_c e compare com o resultado exato.

Estimativa de T_c

- Do cruzamento entre as diferentes curvas, obtemos $T_c = 2.27(1)$, em proximidade com o valor exato $T_c = 2.269....$;

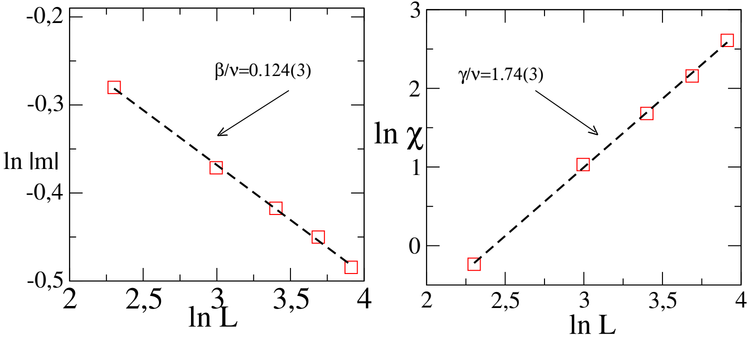


- Desafio II (para casa): Encontre o ponto crítico para o modelo de Ising na rede triangular. Este valor é igual ao da rede quadrada?

- Atividade IV: Usando o xmgrace e o arquivo Tc.dat, faça gráficos de M_L versus L (1:2) e χ_L versus L (1:3) em $T = T_c$;
- Lembrando que $M_L \sim L^{-\beta/\nu}$ e se tomarmos o logaritmo $\ln M_L = \ln A - \beta/\nu \ln L$, o expoente β/ν é obtido a partir do coeficiente angular;
- Idem para $\ln \chi_L \rightarrow \ln \chi_L = \ln B + \gamma/\nu \ln L$;

Estimativa dos expoentes críticos

- Obtemos os expoentes $\beta/\nu = 0.124(3)$ e $\gamma/\nu = 1.74(3)$, em concordância com os valores exatos $\nu = 1$, $\beta = 1/8$ e $\gamma = 7/4$.

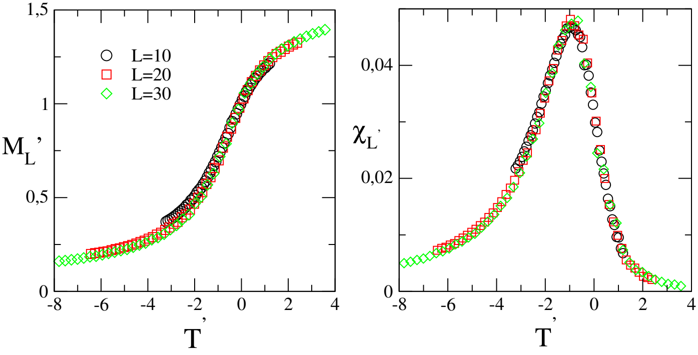


- O procedimento acima pode ser generalizado para outros sistemas apresentando transições de fases e que não apresentam resultados exatos.

- Desafio III (para casa): Obtenha os expoentes críticos para o modelo de Ising na rede triangular. Os expoentes críticos são os mesmos da rede quadrada?

- Considere novamente as relaçoes de escala: $M_L = L^{-\beta/\nu}\tilde{f}(L^{1/\nu}|t|)$ e $\chi = L^{\gamma/\nu}\tilde{g}(L^{1/\nu}|t|)$. Uma forma de estudarmos o alcance da validade das relações acima consiste em efetuarmos as transformações: $M_L' = M_L L^{\beta/\nu}$, $\chi_L' = \chi_L L^{-\gamma/\nu}$, $T' = (T - T_c)L^{1/\nu}$.

- Atividade V: De posse dos resultados para $L = 10, 20$ e 30 execute o código escalafinita.f para obter os dados para T', M_L' e χ_L' (1a, 2a e 3a colunas dos arquivos esctfL10.dat, esctfL20.dat e esctfL30.dat, respectivamente). Faça o gráfico das saídas de dados e discuta suas expectativas.



- Colapso de dados é uma análise importante para verificarmos não apenas a validade das relações de escala (e classe de universalidade), como também uma forma de estimarmos o ponto crítico com relativa precisão quando se conhece a classe de universalidade à qual pertence o modelo em estudo.

- Desafio IV (para casa): Faça o gráfico de M_L' versus T' e χ_L' versus T' para o modelo de Ising na rede triangular.
- Desafio V (para casa): Simule agora o modelo de Ising com campo magnético mantendo a temperatura fixa. Como ficam os resultados se $T < T_c$ e $T > T_c$? É necessário considerarmos o módulo da magnetização neste caso?

Bibliografia

- D. P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*.
- K. Binder, *Computational Methods in Field Theory*.
- S. Salinas *Introdução à Física Estatística*.