Simulações Computacionais de Sistemas Complexos

Thadeu Penna

Instituto de Física
Universidade Federal Fluminense
tjpp@if.uff.br

V Escola do CBPF, 2004

Aula IV

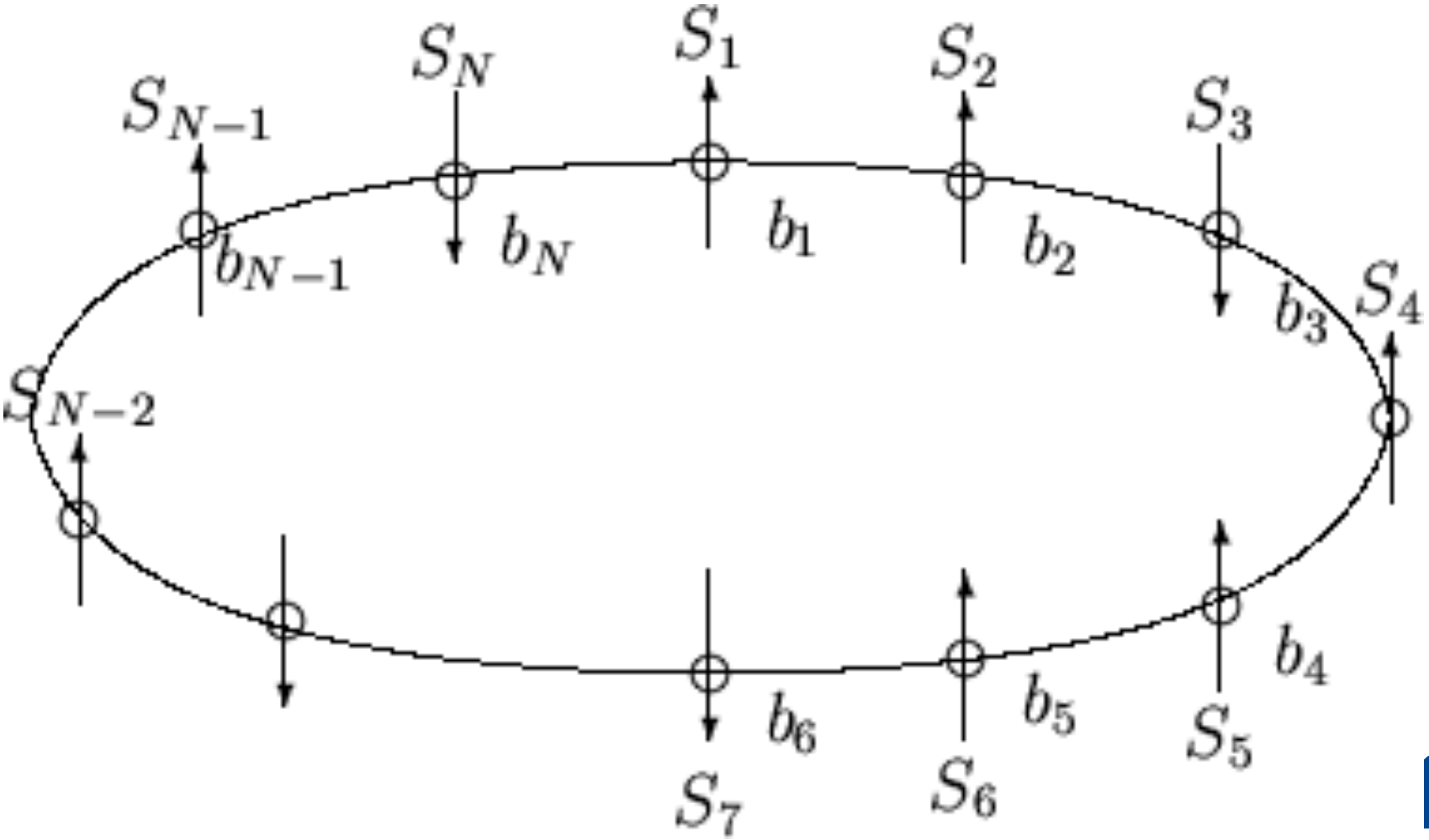
Aula IV

Universidade Federal Fluminense

Aula IV

Universidade Federal Fluminense

Modelo de Ising



Modelo de Ising

Definições

- Ligações entre primeiros vizinhos

Modelo de Ising

Definições

- Ligações entre primeiros vizinhos
- Spin ± 1

Modelo de Ising

Definições

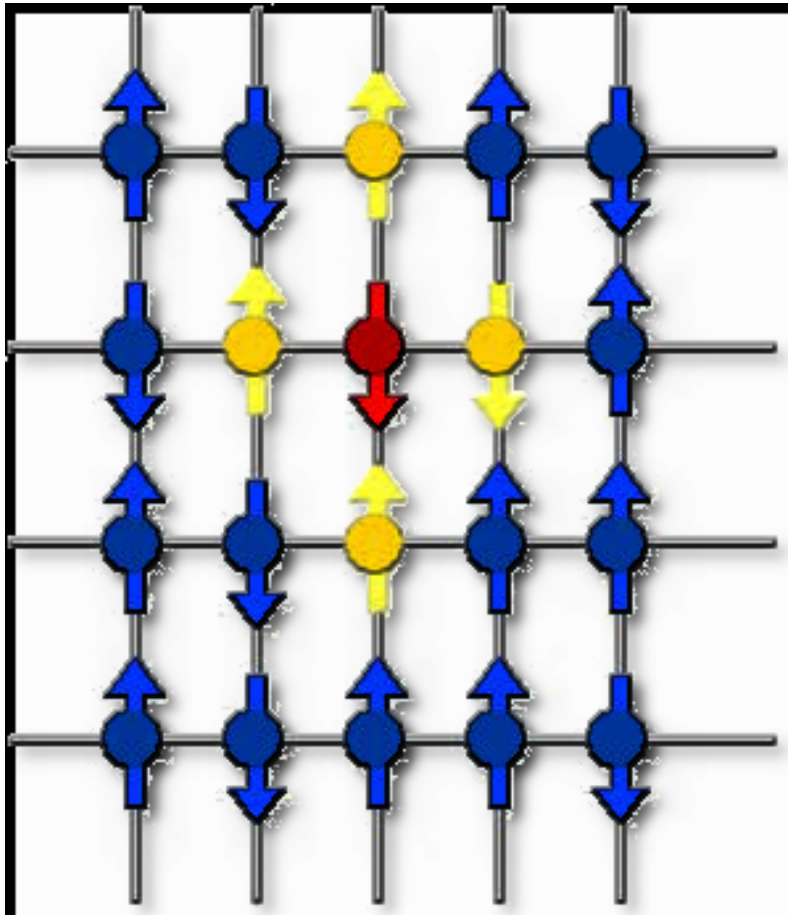
- Ligações entre primeiros vizinhos
- Spin ± 1
- $\mathcal{H} = -J \sum_{<ij>} S_i S_j$

Modelo de Ising

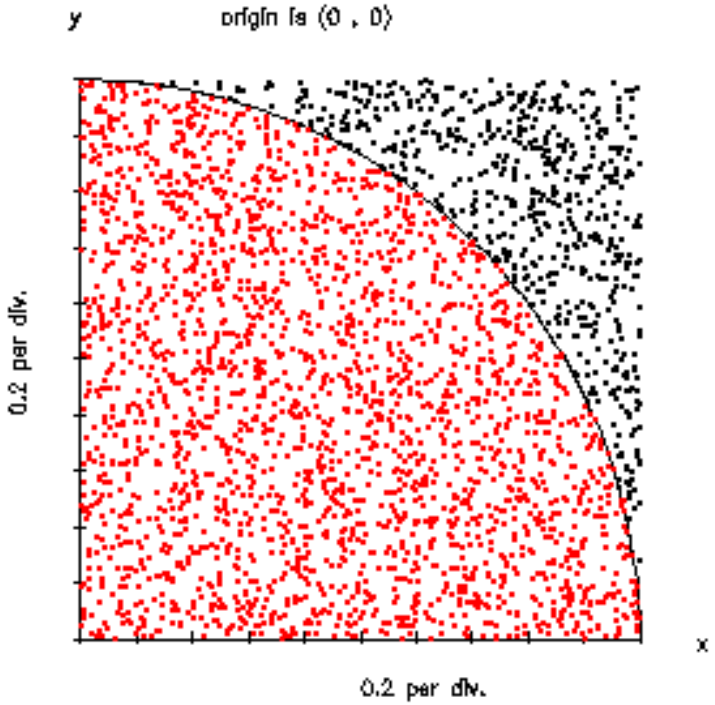
Definições

- Ligações entre primeiros vizinhos
- Spin ± 1
- $\mathcal{H} = -J \sum_{<ij>} S_i S_j$
- Não apresenta transição de fase em 1D

Modelo de Ising



Cálculo de Pi



Por que não usar uma grade ?

Amostragem Simples

$$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT}}$$

Amostragem Simples

$$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT}}$$

$$\sum_{i=1}^{M} \qquad M \to \infty \approx \sum_{i=1}^{M}$$

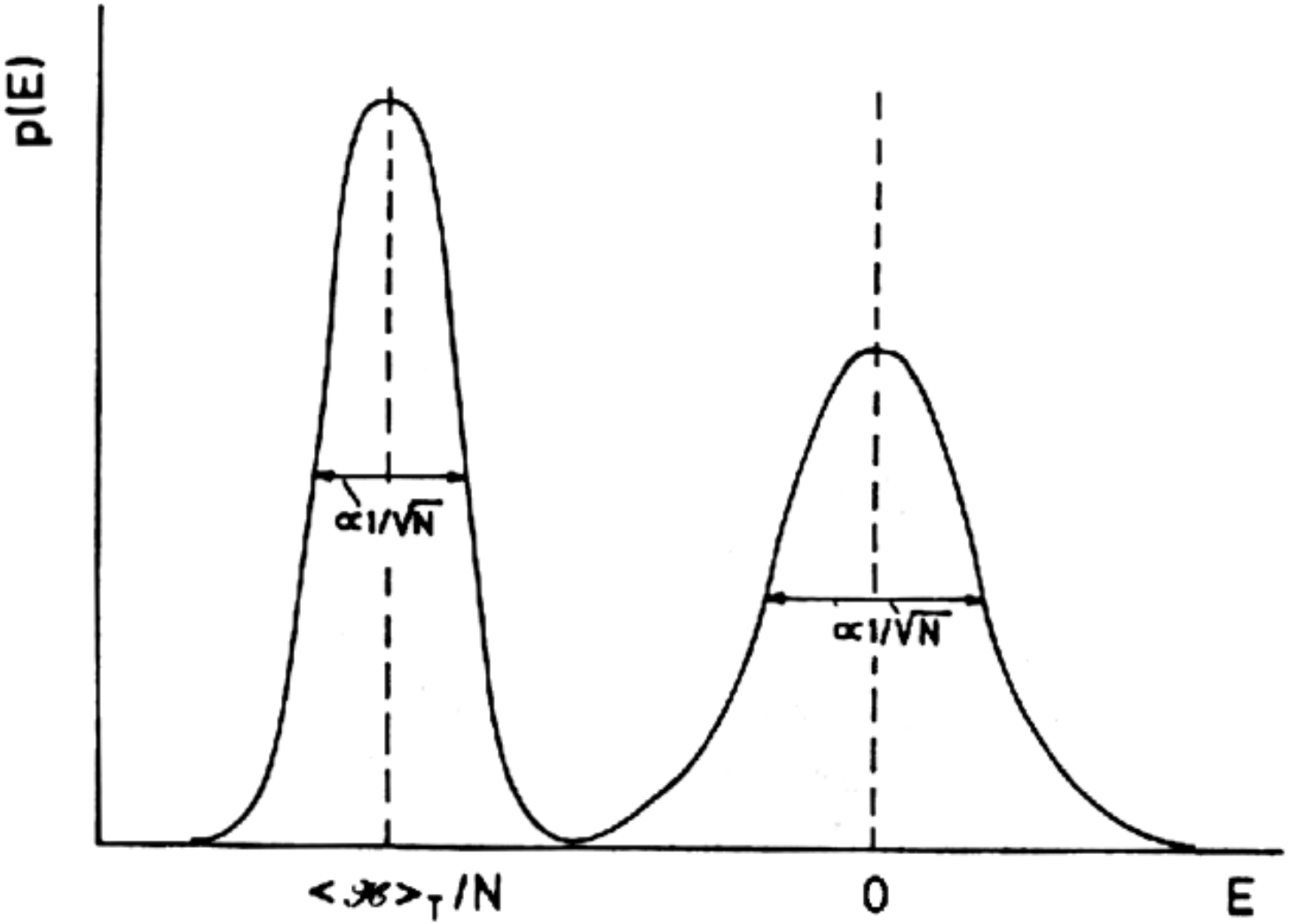
Amostragem Simples

$$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT}}$$

$$\sum_{i=1}^{M} \qquad M \to \infty \approx \sum_{i=1}^{M}$$

Gerar várias configurações r com ε_r e A_r

Por que não funciona ?



Amostragem por Importância

$$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r / P(x_r) e^{-\varepsilon_r / kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r / kT} / P(x_r)}$$

Amostragem por Importância

- $$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r / P(x_r) e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT} / P(x_r)}$$
- escolha natural $P(x_r) = e^{-\varepsilon_r/kT}$

Amostragem por Importância

- $$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r / P(x_r) e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT} / P(x_r)}$$
- escolha natural $P(x_r) = e^{-\varepsilon_r/kT}$
- $$\overline{A} = \frac{1}{M} \sum_r A_r$$

  a dificuldade está em encontrar o procedimento para $P(r)$

Amostragem por Importância

- $$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r / P(x_r) e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT} / P(x_r)}$$
- escolha natural $P(x_r) = e^{-\varepsilon_r/kT}$
- $$\overline{A} = \frac{1}{M} \sum_r A_r$$

  a dificuldade está em encontrar o procedimento para $P(r)$
- Metropolis ($x_r \to x_{r+1}$) não independentes

Amostragem por Importância

- $$\overline{A} = \frac{\sum_r A_r / P(x_r) e^{-\varepsilon_r/kT}}{\sum_r e^{-\varepsilon_r/kT} / P(x_r)}$$
- escolha natural $P(x_r) = e^{-\varepsilon_r/kT}$
- $$\overline{A} = \frac{1}{M} \sum_r A_r$$

  a dificuldade está em encontrar o procedimento para $P(r)$
- Metropolis ($x_r \to x_{r+1}$) não independentes
- $W(x_r \to x_{r+1})$ probabilidade de transição

Amostragem por Importância

$$P_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\varepsilon_r / kT}$$

Amostragem por Importância

- $$P_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\varepsilon_r / kT}$$
- $$P(x_r) W(x_r \to x_{r+1}) = P(x_{r+1}) W(x_{r+1} \to x_r)$$

Amostragem por Importância

- $$P_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\varepsilon_r / kT}$$
- $$P(x_r) W(x_r \to x_{r+1}) = P(x_{r+1}) W(x_{r+1} \to x_r)$$
- $$\frac{W(x_r \to x_{r+1})}{W(x_{r+1} \to x_r)} = \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}\right)$$

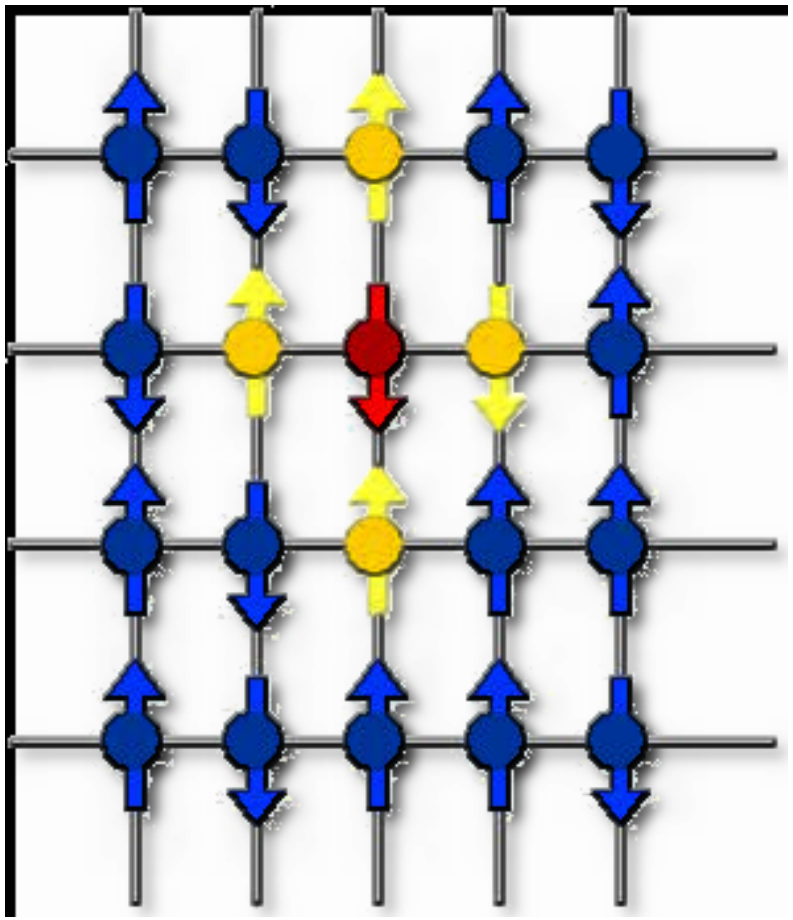
Soluções

$$
\begin{aligned}
W(x_r \to x_{r+1}) &= \tfrac{1}{2}\left[1 - \tanh\frac{\Delta\varepsilon}{2kT}\right] \\
&= \frac{e^{-\Delta\varepsilon_r/kT}}{\left[1 + e^{-\Delta\varepsilon_r/kT}\right]},
\end{aligned}
$$

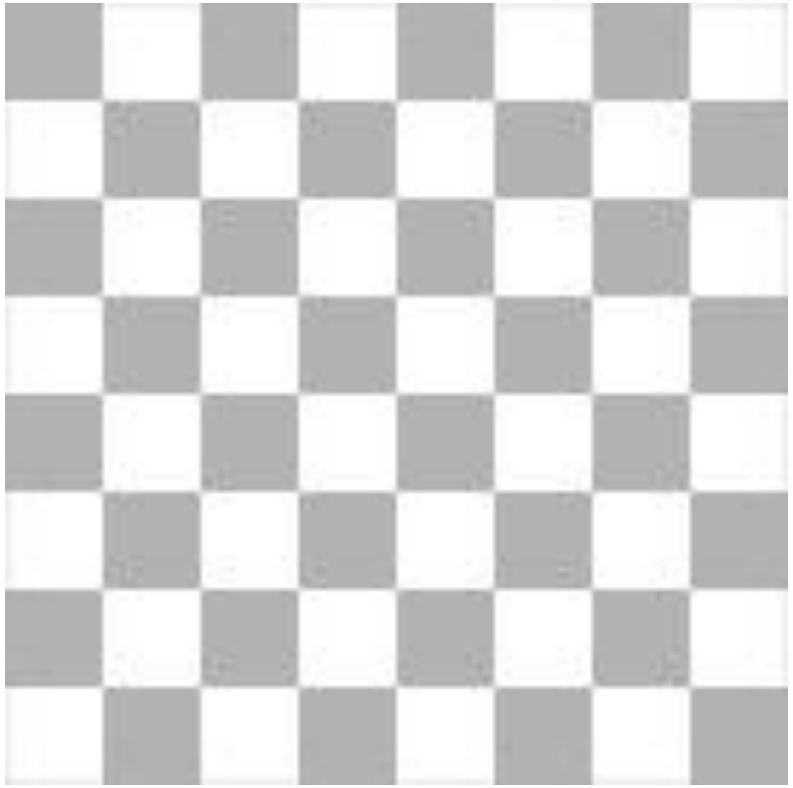
$$
W(x_r \to x_{r+1}) = \begin{cases} e^{-\Delta\varepsilon_r/kT} & \text{if} \Delta\varepsilon_r > 0 \\ 1 & \end{cases}
$$

Universidade Federal Fluminense

Single Spin Flipping



Implementação em MultiSpin



Implementação em MultiSpin

$$
\begin{array}{cccccc}
{}^{0}A[0] & {}^{0}B[0] & {}^{1}A[0] & {}^{1}B[0] & {}^{2}A[0] & {}^{2}B[0] \\
{}^{0}B[1] & {}^{1}A[1] & {}^{1}B[1] & {}^{2}A[1] & {}^{2}B[1] & {}^{2}A[1] \\
{}^{0}A[2] & {}^{0}B[2] & {}^{1}A[2] & {}^{1}B[2] & {}^{2}A[2] & {}^{2}B[2]
\end{array}
$$

Implementação em MultiSpin

E0

$$E0 = (S\&I1\&I2\&I3\&I4) \mid (\sim S\& \sim I1\& \sim I2\& \sim I3\& \sim I4)$$

Implementação em MultiSpin

E0

$$E0 = (S\&I1\&I2\&I3\&I4) \mid (\sim S\& \sim I1\& \sim I2\& \sim I3\& \sim I4)$$

E1

$$E1 = \sim (S \wedge ((I1\&I2) \mid (I3\&I4))\,\&(I1 \wedge I2 \wedge I3 \wedge I4)$$

Implementação em MultiSpin

E0

$$E0 = (S\&I1\&I2\&I3\&I4) \mid (\sim S\& \sim I1\& \sim I2\& \sim I3\& \sim I4)$$

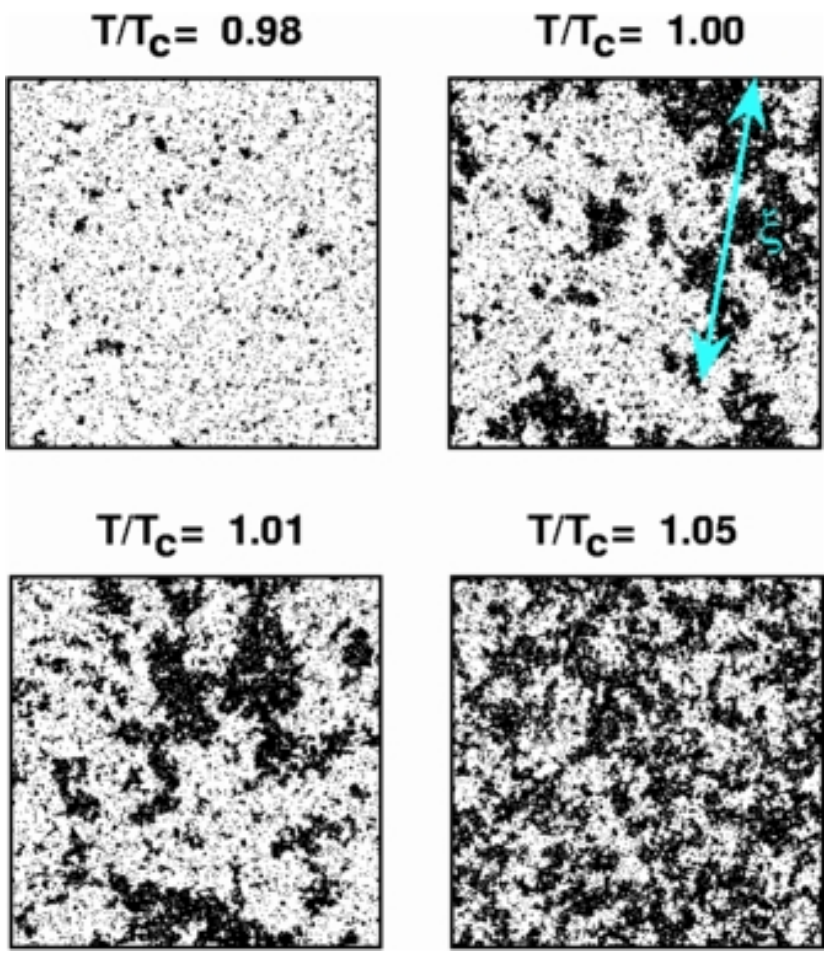
E1

$$E1 = \sim (S \wedge ((I1\&I2) \mid (I3\&I4))\,\&(I1 \wedge I2 \wedge I3 \wedge I4)$$

E2

$$E2 = ((I1 \wedge I2)\&(I3 \wedge I4)) \mid ((I1 \wedge I3)\&(I2 \wedge I4))$$

Evolução dinâmica



Grandezas de Interesse

Definições

- Magnetização (contabits)

Grandezas de Interesse

Definições

- Magnetização (contabits)
- Módulo da Magnetização e M^2

Grandezas de Interesse

Definições

- Magnetização (contabits)
- Módulo da Magnetização e M^2
- E e E^2

Grandezas de Interesse

Definições

- Magnetização (contabits)
- Módulo da Magnetização e M^2
- E e E^2
- $$C = \frac{1}{N}\frac{\partial < E >_T}{\partial T} = \frac{< E^2 >_T - < E >_T^2}{Nk^2T^2}$$

Universidade Federal Fluminense

Resultados

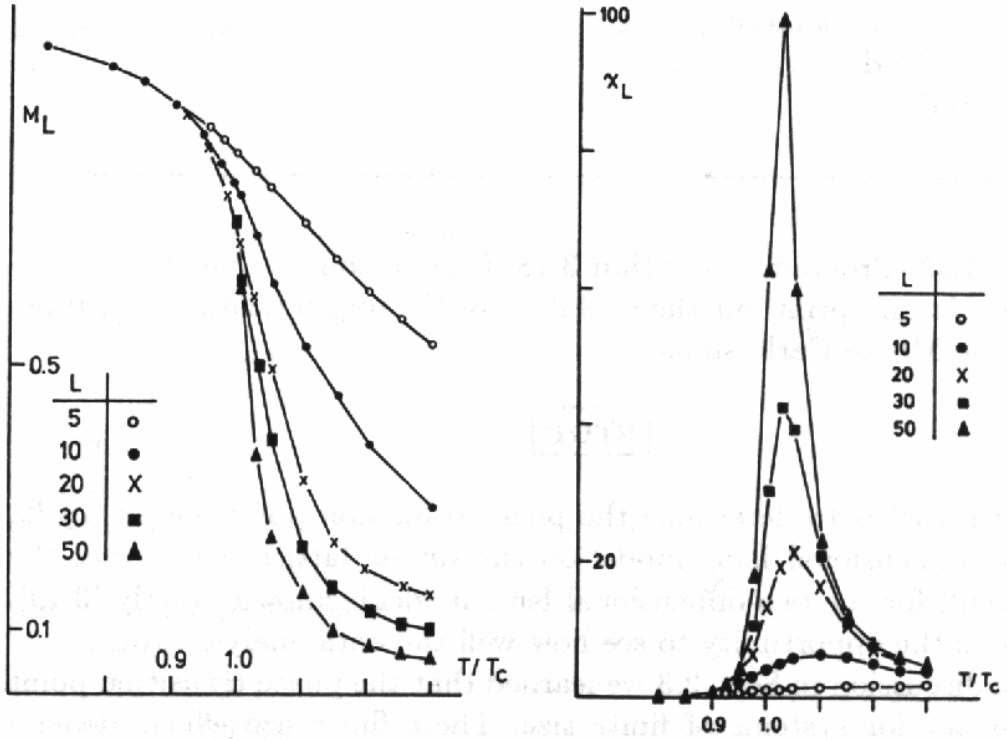
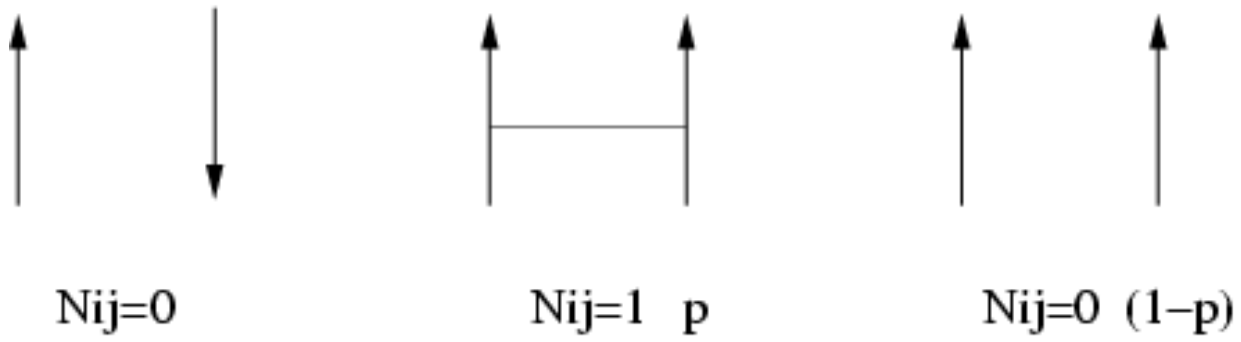


Fig. 3.9. Dependence of the magnetization and susceptibility on the linear lattice size L. The data shown are for the two-dimensional Ising model

Wolff



$$p = 1 - e^{-2\beta}$$

Wolff