UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA

Monte Carlo dinâmico aplicado aos modelos de Ising e Baxter-Wu

Everaldo Arashiro

Dissertação de mestrado apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto – SP, como parte das exigências para obtenção do título de MESTRE EM CIÊNCIAS – Área: FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA.

RIBEIRÃO PRETO - SP
2001

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA

Monte Carlo dinâmico aplicado aos modelos de Ising e Baxter-Wu

Everaldo Arashiro

Dissertação de mestrado apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto – SP, Como parte das exigências para obtenção do título MESTRE EM CIÊNCIAS.

Área de Concentração:
Física Aplicada à Medicina e Biologia

Orientador:
José Roberto Drugowich de Felício

RIBEIRÃO PRETO - SP
2001

Resumo

Investigações da dinâmica crítica em modelos de magnetismo, para tempos curtos, têm aparecido com grande freqüência na literatura. Essa técnica foi descoberta por Li, Schülke e Zheng que, inspirados em trabalhos anteriores de Huse e Janssen et al., mostraram que generalizações de grandezas como a magnetização e o cumulante de Binder exibem comportamento universal já no início da simulação. O estudo da criticalidade em tempos curtos proporciona um caminho alternativo para a estimativa do expoente z, além de permitir o cálculo de um novo expoente dinâmico θ, associado ao comportamento anômalo da magnetização. Da mesma forma, simulações dependentes do tempo tornaram-se ferramenta útil para estudar transições de fase em autômatos celulares e modelos de spin. Em particular, as melhores estimativas para o expoente z do Ising bidimensional foram obtidas por meio da técnica de propagação de danos, introduzida por Kauffman no estudo de autômatos e mais tarde generalizada para modelos de spin.

Na primeira parte deste trabalho utilizamos o método Monte Carlo em tempos curtos para investigar o modelo de Baxter-Wu, definido em uma rede bidimensional triangular com variáveis do tipo Ising, acopladas por interações de três corpos. Obtivemos os expoentes críticos dinâmicos z e ? além dos índices críticos estáticos β e ν. Os resultados não corroboram aqueles recentemente obtidos por Santos e Figueiredo para o expoente z.

Na segunda parte do trabalho, investigamos a propagação de danos no modelo de Ising unidimensional submetido a duas dinâmicas propostas por Hinrichsen e Domany (HD). Em particular, nós estudamos o efeito da atualização síncrona (paralela) e assíncrona (dinâmica contínua) sobre o espalhamento do dano. Mostramos que o dano não se propaga quando a segunda dinâmica é implementada de forma assíncrona. Também mostramos que as regras para atualização do dano produzidas por essa dinâmica, quando a temperatura vai a infinito e um certo parâmetro λ é igual a zero, são equivalentes àquelas do bem conhecido autômato celular (modelo A) de Grassberger.

Abstract

Short-time simulations have been used with great frequency in the literature. That technique was discovered by Li, Shülke and Zheng that, inspired in previous works by Huse and Janssen et al., showed that generalizations of quantities like magnetization and the Binder´s cumulant exhibit universal behavior in the beginning of the simulation (early time behavior). The study of criticality in short-times provides an alternative way to estimate the dynamic critical exponent z, besides allowing the calculation of a new dynamic exponent ?, associated to the anomalous behavior of the magnetization. In the same way, time-dependent simulations became a useful tool to study phase transitions in cellular automata and also for spin models. In fact, the best estimates for the exponent z of the two-dimensional Ising model were obtained through the technique of damage spreading, introduced by Kauffman in the study of cellular automata, later widespread for spin models.

In the first part of this work we used short-time Monte Carlo simulations to investigate the Baxter-Wu model, defined in a triangular lattice whose variables are Ising-like coupled by triplet interactions. We have obtained estimates for the dynamic critical exponents z and ? besides static exponents β e ν. Our results do not corroborate recent estimates by Santos and Figueiredo for the critical exponent z.

In the second part of this work, we investigated the damage spreading in the one-dimensional Ising model under two dynamics introduced by Hinrichsen and Domany (HD). In particular, we study the effects of synchronous (parallel) and asynchronous (continuous dynamics) updating on the spreading properties. We showed that the damage does not spread when the second dynamic is implemented in an asynchronous way. We found that the rules for updating the damage produced by this dynamic, as the temperature goes to infinity and a certain parameter λ is zero, are equivalent to those of Grassberger’s well-known model A cellular automaton.

À minha Mãe, ao Kioshi e ao meu Avô pelo apoio em todos esses anos

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. J. R. Drugowich de Felício pela orientação e amizade.

À “tia” Claudinha pela amizade e sempre agradabilíssima companhia.

À Renatinha, Andréa Grupioni e ao Leandro Maranghetti
pelas constantes brigas, constantes discussões e principalmente
pela sincera amizade desde os tempos da graduação em Química.

Para todo pessoal da Eletroquímica
e especialmente a “dona” Paulinha e a “tia” Marlene.

À Tânia Lassali pela amizade e incrível paciência por me agüentar.

À Eleade e a Rosângela Tenório pelas tentativas,
sempre frustradas, de me endireitarem.

Aos meus amigos advogados, sempre muito úteis,
Elienai e Ricardo Santana.

À bióloga, cantora, escritora, poetiza, motoqueira.... e amiga Pierângeli.

Aos meio químicos, meio físicos, Cláudia e Parada.

À futura psicóloga Paula Garducci
por sempre esquecer de cobrar as minhas consultas.

À Carol que com o seu irresistível sotaque baiano
sempre alegra um pouco mais o meu dia.

Aos meus companheiros de copo de água mineral
e aos alunos da graduação de Física Médica.

Aos funcionários e técnicos do Departamento
(Sônia, Gisele, Rosângela, Rita, Marcílio, Júlio, Serginho, Bruçó, Lourenço, Aziane,
Élcio, Carlão, Dias...) e ao melhor psicoterapeuta de computadores Eldereis de Paula.

Ao Nagaki e a Joana.

Aos meus parentes de Campo Grande.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Capítulo 1

Introdução

Um dos eventos mais interessantes observados na natureza são as transformações entre os vários estados da matéria. Em tais transformações, conhecidas como transições de fase, foram descobertas regularidades[1] que desafiaram os estudiosos do campo por quase um século. Em contrapartida, o avanço conseguido nessa área foi tão importante que suas aplicações nos dias atuais incluem desde terremotos[2,3] até ecologia[4,5], passando por economia[6,7,8], saúde[9,10] e bioquímica[11,12].

As primeiras idéias consistentes a respeito de transições de fase são datadas de 1873, quando em tese de doutorado, van der Waals[13] apresentou uma teoria que descreve a continuidade dos estados líquido e gasoso. Os principais ingredientes daquela descrição estão presentes também na abordagem de Curie-Weiss[14] para a transição ferromagnética. Além disso, ao descrever a sua equação de estado em termos das variáveis reduzidas, van der Waals lançava as bases de uma teoria universal para as transições de fase. O significado dessa descoberta para a física de baixas temperaturas pode ser medido pelo prêmio Nobel concedido a Heike Kamerlingh Onnes pela liquefação do Hélio (1913).

Em 1925, Ernst Ising[15] publicou o artigo que se tornaria a base para uma grande quantidade de pesquisas contemporâneas no campo das transições de fase. O modelo de Ising foi na verdade proposto por Wilhelm Lenz em 1920 e resolvido analiticamente em uma dimensão por Ising e em duas dimensões por Onsager[16]. Tal modelo consiste em um sistema de átomos arranjados numa rede cristalina regular, os quais são descritos apenas por suas variáveis de spin $s_i = \pm 1$, interagindo entre si (primeiros vizinhos) de forma que a energia de spins paralelos seja menor do que a energia de spins anti-paralelos. Apesar da simplicidade desse modelo, a solução exata para o caso tridimensional, e mesmo para o caso bidimensional submetido à ação de um campo magnético externo, ainda se apresenta como desafio para a mecânica estatística. O modelo bidimensional é o primeiro caso não trivial, solúvel exatamente, em que a transição de fase é completamente explicada em termos das interações interatômicas, podendo-se afirmar que o comportamento singular observado é conseqüência de um fenômeno cooperativo intimamente relacionado com as interações microscópicas. O modelo de Ising apresenta uma multiplicidade de interpretações que o tornam uma ferramenta ainda mais poderosa e fascinante na investigação dos diversos tipos de transições de fase. Por exemplo, os estados do spin no modelo de Ising podem ser considerados como uma indicação de ocupação de diferentes tipos de átomos num dado sítio da rede cristalina. Tal abordagem permite a simulação do comportamento de ligas magnéticas. Por sua vez, quando o estado do spin assinala a presença ou ausência de uma molécula numa determinada célula tem-se um modelo conhecido como gás de rede[17].

Nas últimas décadas o estudo dos fenômenos críticos tem se expandido bastante e atualmente compreende diversos tipos de abordagem. A abordagem analítica prima pela construção de métodos matemáticos que conduzam à solução exata de modelos teóricos. As propriedades físicas dos sistemas são obtidas através das relações estabelecidas pela mecânica estatística. As soluções exatas de modelos não triviais como Ising 2-D[16], Heisenberg unidimensional[18] e os modelos de seis e de oito vértices[19] são as maiores conquistas no capítulo dos modelos solúveis exatamente.

Um método que explora exclusivamente a simetria do modelo e a analiticidade das transformações no espaço de parâmetros (J, J', H) foi desenvolvido por Wilson e Fisher[20] e se mostrou bastante eficiente na descrição dos fenômenos críticos. Esse tipo de abordagem não fornece soluções exatas, mas analisa como o sistema se comporta diante de certas transformações de escala, fornecendo informações relevantes acerca de suas propriedades universais[21]. O grupo de renormalização[20,22] pode ser considerado o responsável pelo importante avanço dentro do estudo de transições de fase e fenômenos críticos nas últimas décadas.

As simulações numéricas, por sua vez, manifestam-se como parceiras fundamentais no avanço das técnicas para investigação das transições de fase. Recentemente, a alta velocidade de processamento e o acesso fácil aos computadores permitiram que as simulações numéricas se tornassem ferramentas rotineiras da mecânica estatística. Ao contrário dos experimentos reais, as simulações investigam sistemas bem definidos microscopicamente onde todos os parâmetros são controlados e observados durante o experimento. Assim, em alguns casos, as simulações fornecem a base teórica para o entendimento de resultados conhecidos experimentalmente, ou seja, do ponto de vista macroscópico. Outras vezes geram os dados "experimentais", dificilmente obtidos em condições reais, que podem ser comparados à teoria. Além da sua relativa simplicidade de aplicação, as simulações computacionais ainda dispõem de uma habilidade única para ilustrar e iluminar relações conceitualmente básicas. Em particular, no estudo de fenômenos críticos pode-se obter informações mais detalhadas e precisas do que as disponíveis por sistemas investigados em experimentos reais.

Desde os primeiros avanços na área computacional até os dias de hoje, tanto a dinâmica molecular[23,24] quanto o método Monte Carlo[25,26,27,28] têm contribuído de forma significativa para a compreensão dos fenômenos críticos.

No caso das simulações Monte Carlo, por exemplo, para modelos que sejam reversíveis, qualquer uma das três formas de atualização dos spins (Metrópolis[25], Glauber[29] ou banho térmico) conduz, após um número suficiente de passos de Monte Carlo, a uma situação em que a probabilidade de encontrar o sistema em uma configuração com uma dada energia depende da densidade de estados (uma propriedade intrínseca do sistema) e do fator de Boltzmann. A partir desse conhecimento, é possível gerar médias das grandezas físicas de interesse para qualquer temperatura[30]. O problema com esses "updates" é que a atualização é feita em um spin de cada vez, significando portanto uma operação local. Quando o sistema está em uma temperatura próxima da temperatura crítica, o comprimento de correlação torna-se comparável ao tamanho do sistema e as configurações obtidas com essas alterações locais ficam muito correlacionadas ("critical slowing down")[31]. Isso dificulta o movimento no espaço de fases e faz com que em alguns casos apenas uma parte daquele espaço seja visitada, conduzindo a uma quebra artificial da ergodicidade. Para superar essas limitações, abordagens mais sofisticadas têm sido propostas, sendo as principais a técnica do "cluster" de Swendsen e Wang[32] e a do ensemble multicanônico[33].

Mais recentemente, porém, um novo método foi proposto para evitar os problemas do alentecimento crítico ("critical slowing down"). Trata-se das simulações em tempos curtos, que consegue extrair informações acerca das propriedades críticas dinâmicas e estáticas das transições de fase quando o comprimento de correlação ainda é pequeno, quando comparado com o tamanho do sistema. Essa abordagem foi investigada depois que Janssen et al.[34], baseados na teoria do grupo de renormalização, mostraram a existência de universalidade e "scaling" muito antes do sistema atingir o equilíbrio termodinâmico. Esse comportamento foi também detectado em simulações feitas por Huse[35], que de forma independente também chegou a um novo expoente crítico dinâmico θ que caracteriza um comportamento anômalo da magnetização para tempos muito curtos. Esse comportamento ficou conhecido como o escorregão crítico inicial e decorre aparentemente da validade da teoria de campo médio para um intervalo muito curto de tempo no qual o comprimento de correlação ainda é pequeno, o que foi confirmado por Huse[35]. Ocorre porém que a teoria de Janssen et al.[34] contém muito mais do que o expoente θ . Eles desenvolveram toda uma teoria de escala que estende para a região de tempos curtos os célebres expoentes críticos estáticos (β e ν) além do expoente crítico dinâmico z. Com isso, tornou-se possível investigar tanto as propriedades críticas dinâmicas quanto as estáticas sem os incômodos do "critical slowing down".

Nesse trabalho, utilizamos o comportamento crítico em tempos curtos para investigar o modelo de Baxter-Wu[36,37], definido em uma rede bidimensional triangular cujas variáveis (tipo Ising) interagem por plaquetas (produto dos três spins). A motivação vem do fato de que esse modelo, embora exatamente solúvel, está na mesma classe de universalidade do modelo de Potts[38] de 4 estados e também do modelo bidimensional de Ising com interação de três spins em uma das direções[39]. A diferença significativa entre os modelos é que as estimativas numéricas para os índices críticos dos dois últimos estão sempre longe dos resultados esperados, o que aparentemente decorre da existência de um operador marginal[40] nesses casos e da sua ausência no modelo de Baxter-Wu[41]. Também nos interessa estabelecer um paralelo, algo como uma extensão da classe de universalidade, para esses modelos no tocante ao seu comportamento dinâmico (z e θ). Em estudo publicado recentemente por Santos e Figueiredo[42] o valor para o expoente z é completamente incompatível com resultados recentes para o modelo de Ising com interações de três spins[39] e não há estimativa para o expoente θ. Nossos resultados, obtidos por seis maneiras diferentes, não confirmam as primeiras estimativas[42] para o z e apontam para uma universalidade "dinâmica" entre os modelos. Já para o expoente θ, os resultados revelam uma diferença marcante entre o modelo de Baxter-Wu e o de Ising com interação de três spins.

Na segunda parte do trabalho, investigamos a propagação de danos em modelo de Ising unidimensional submetidos a dois tipos de "update", recentemente propostos por Hinrichsen e Domany (HD)[43]. No caso da primeira dinâmica, a existência de propagação decorre da semelhança entre as regras de evolução para o dano local, obtidas a partir do "update" dos spins, e as regras de evolução para o autômato de Domany-Kinzel[44]. Essa relação pode ser bem entendida no caso limite de temperatura infinita, conforme mostrado no trabalho original. Já para a segunda dinâmica, a existência da propagação e os expoentes estão fortemente associados com o autômato (modelo A) de Grassberger[45], mapeamento que obtivemos[46] no limite de temperatura infinita e parâmetro $\lambda = 0$. Estudamos, também, a influência da sincronização da atualização das variáveis sobre a propagação nos dois casos. O resultado é que para a primeira dinâmica a propagação ocorre independente da forma de atualização (síncrona ou assíncrona). Já para a segunda dinâmica, a forma de atualização síncrona (tipo autômato) é a única que leva à propagação do dano.

O trabalho está organizado da seguinte forma: no Capítulo 2 é feita uma rápida revisão da literatura a respeito das transições de fase e dos fenômenos críticos. Também nesse capítulo, introduz-se o método Monte Carlo convencional, as diferentes dinâmicas ("updates") e o método alternativo que explora as propriedades críticas em tempos curtos. No Capítulo 3, o modelo de Baxter-Wu é investigado por meio das simulações Monte Carlo em tempos curtos. No Capítulo 4, utilizamos simulações dependentes do tempo para acompanhar a evolução do dano em modelo de Ising unidimensional submetido às dinâmicas de Hinrichsen-Domany. Reproduzimos grande parte dos seus resultados e terminamos com um estudo original[46] que inclui o mapeamento do modelo no autômato (A) de Grassberger[45] e a caracterização da influência da sincronização sobre a propagação de dano em cada um dos casos. Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as nossas conclusões e algumas sugestões para trabalhos futuros.