

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS (ICEx)

Programa Serial Base: HPC - I

Aluno:

Jansen Silva de Brito Pereira

Professor: Rodrigo Garcia

Amorim

Volta Redonda
2022



1 *Contextualização*

De modo a criar uma teoria microscópica das transições magnéticas, é interessante considerar um modelo que incorpore as interações de curto alcance numa rede com dimensão d . Com esse objetivo, *Lenz*, em 1920, propôs a seu aluno de doutorado *Ising*, um modelo de spins que se tornou, não somente um dos mais importantes, como um dos mais citados. Alguns anos mais tarde, *Ising* encontrou a solução exata para o caso unidimensional. O caso bidimensional, com o campo externo nulo, só foi resolvido analiticamente em 1944, por *Onsager*. Até hoje, não há solução analítica para o modelo em duas dimensões, com campo externo aplicado, ou para dimensões maiores.

2 *Definição do Modelo de Ising*

O modelo de *Ising* é um modelo matemático que não corresponde a um sistema físico real. É uma enorme rede (quadrada) de sites, onde cada site pode estar em um dos dois estados. Denotamos cada site com um índice i , e definimos os dois estados como sendo -1 e $+1$. Para dizer que o i 'ésimo site está no estado -1 , escrevemos $\sigma_i = -1$. O modelo de *Ising* foi obtido através de uma simplificação do modelo de *Heisenberg*, este é tido como um modelo dinâmico de transição de fase que incorpora interações de curto alcance numa rede d -dimensional.

Agora, essa definição é abstrata, então é extremamente útil ter um sistema real em mente, para que possamos nos referir a algo explícito e construir uma intuição física. Aqui estão alguns sistemas físicos que o modelo de *Ising* pode representar:

- Um ímã - Cada sítio representa um “spin” particular no material, que é -1 se o spin apontar para baixo ou $+1$ se o spin apontar para cima. Cada um dos giros funciona como um mini-ímã com seu próprio mini-momento magnético. Se todos os spins estiverem alinhados, então toda a rede de spins se comportará como um grande ímã com um momento magnético macroscópico líquido;
- Uma liga, por exemplo, latão - Cada um dos sítios é um átomo na rede. -1 representa um átomo de cobre nesse local e $+1$ representa o zinco;
- Um “gás de rede” - Cada um dos sítios é a possível localização de uma partícula. -1 significa que o site está vazio e $+1$ significa que o site está ocupado por uma partícula.

3 *Hamiltoniano do Modelo de Ising*

Se tivermos N sítios na rede, então a energia de um estado particular é dada pelo hamiltoniano de *Ising*:

Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

onde J representa a interação spin-spin, h representa o campo externo e o σ_i são os spins individuais em cada um dos sítios da rede. A primeira soma é sobre todos os pares de sítios de rede vizinhos (também conhecidos como ligações); Representa as interações entre os spins vizinhos (σ_i, σ_j). A segunda soma é sobre todos os sítios da rede; Ele representa o campo externo tentando alinhar todos os spins em uma direção.

4 *Algoritmo Metropolis*

O valor esperado de um quantidade A é dada pela a equação:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad (2)$$

Onde A_i é o valor da quantidade física A na configuração (estado) i , E_i é a energia deste estado. Usar a equação (2) para calcular não é o método mais eficiente computacionalmente. Por exemplo, dado uma grade 10×10 de spins, haveria 2^{100} estados para somar. Outro método é usar o algoritmo Metropolis que é o algoritmo mais conhecido para se gerar uma cadeia de Markov em sistemas de spins; Tipo Monte Carlo, são uma classe de algoritmos que utilizam amostragem aleatória repetida para encontrar resultados.

O algoritmo Metropolis funciona da seguinte forma. Primeiro, uma lista ou grade de spins é criada. Em seguida, um spin na grade é escolhido aleatoriamente e a mudança na energia (ΔE) devido ao giro do spin é calculada com base em suas interações com seus vizinhos mais próximos (os dois vizinhos mais próximos em $1D$, quatro mais próximos em $2D$) e o campo magnético. Se $\Delta E < 0$, o spin é sempre invertido. Se $\Delta E > 0$, então o spin é invertido com uma probabilidade (p) determinada pelo fator de *Boltzmann*, $p = e^{-\beta \Delta E}$. Depois disso, um número muito grande de outros spins aleatórios é amostrado, então o sistema é amostrado ainda mais para levar em conta o tempo que o sistema leva para se equilibrar.

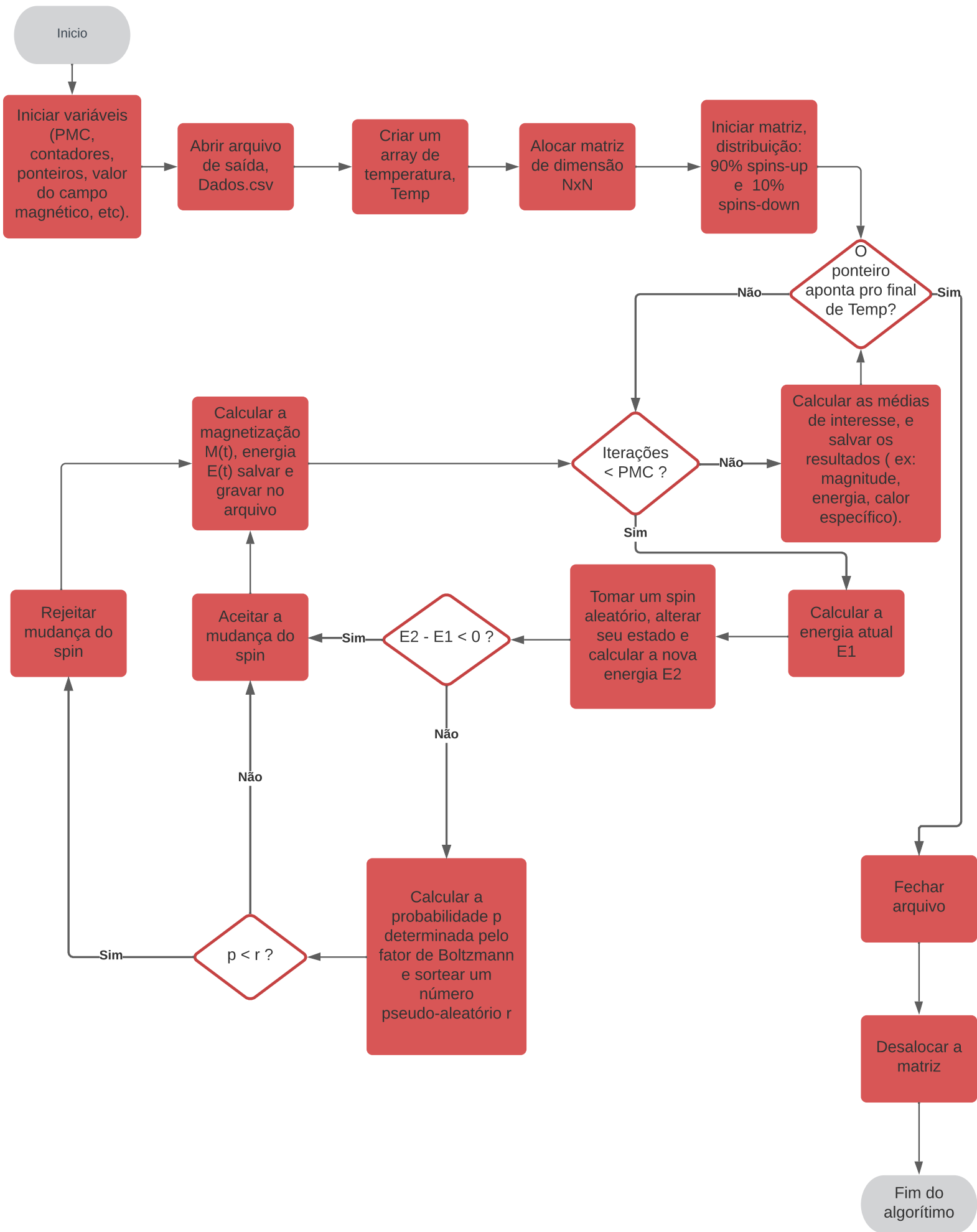
4.1 *Exemplo de uma aplicação do Modelo de Ising Bidimensional*

Dada uma rede quadrada de lado L , com condições periódicas de contorno, a fim de eliminar os efeitos de superfície. Identificamos os spins dessa rede pelo par de inteiros (x, y) e seu valor por $s(x, y)$. Escolhemos como configuração inicial todos os spins alinhados, ou seja, por exemplo atribuindo para todos o valor $s(x, y) = +1$. Dessa forma, o algoritmo de Metropolis pode ser sistematizado da seguinte forma:

1. Fazemos uma varredura sequencial na rede (x, y) , sendo que a nova configuração é obtida pela inversão do spin da vez $s(x, y)$ (troca de sinal);
2. Calculamos a diferença de energia ΔE_{ij} , entre as configurações com e sem a troca de sinal de $s(x, y)$;
3. Se $\Delta E_{ij} < 0$, aceitamos a transição, alterando a configuração para aquela com $-s(x, y)$ e atualizamos a energia $E_j = E_i + \Delta E_{ij}$ e a magnetização $M_j = M_i + 2s(x, y)$ (bem como outras grandezas termodinâmicas de interesse; como por exemplo, o calor específico (C_v) e a suscetibilidade magnética (χ) em um campo magnético constante podem ser obtido em termos da variância da energia e magnetização). Seguimos então para o passo 7;
4. Caso $\Delta E_{ij} > 0$, calculamos $p_{ij} = e^{-\Delta E_{ij}/k_B T}$, sortearmos um número pseudo-aleatório r e o comparamos com o valor de p_{ij} ;
5. Caso $p_{ij} < r$, rejeita-se a transição e voltamos para o passo 1;
6. Caso $p_{ij} > r$, aceita-se a transição, atualiza-se a energia e a magnetização, e seguimos para o passo 7;
7. Após varrer toda a rede, temos um passo de Monte Carlo. Guardamos a energia $E(t)$ e a magnetização $M(t)$, onde t conta o número de passos de Monte Carlo.
8. Após um número de passos de Monte Carlo (PMC), que é convenientemente escolhido dependendo da temperatura, tamanho de rede etc., podemos calcular as médias de interesse.

Observação: O algoritmo acima deve ser rodado para cada temperatura considerada.

5 *Fluxograma*



6 Resultados

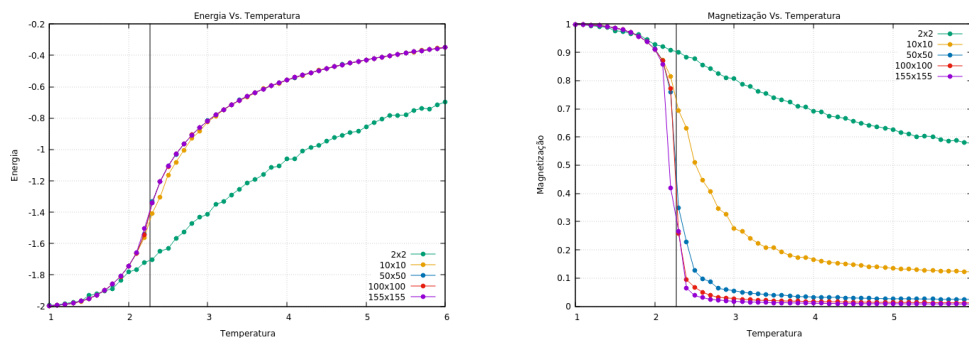
Os gráficos a seguir foram feitos no gnuplot. As simulações foram realizados em C++ onde,

- Interação entre os spins vizinhos ($J = 1$);
- Constante de *Boltzmann* ($k = 1$);
- Sem campo magnético externo ($h = 0$);
- Número de passos de Monte Carlo ($iter = 10000$);
- Intervalo de temperatura escolhido, $T \in [1, 6]$ com gap de 0.01;
- Temperatura de *Curie* ou temperatura crítica

$$\left(T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})k} \approx 2.269 \right).$$

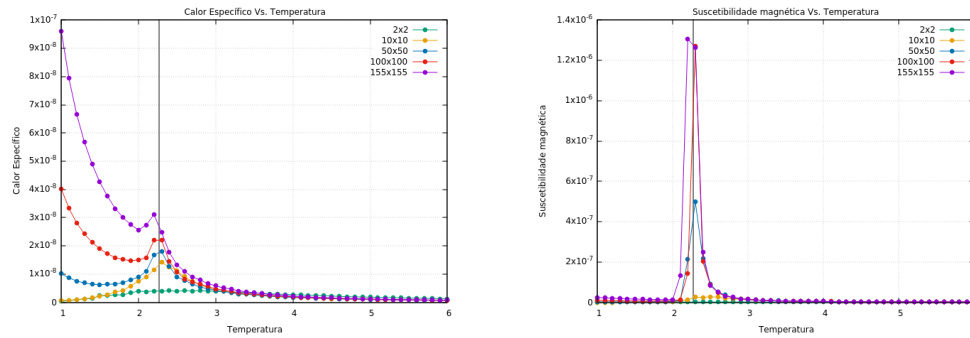
Começamos as simulações de $T = 6$ com todas as malhas, onde 90% dos sites tem o valor do spin igual +1 e 10% dos sites com o valor do spin igual -1.

Para analisarmos os resultados obtidos pelo programa serial base, realizamos diversas medidas (Energia, Magnetização, Calor específico e Suscetibilidade magnética) em sistemas com dimensões 2×2 , 10×10 , 50×50 , 100×100 , 155×155 e 180×180 .



Dado os gráficos da energia em função da temperatura, e da magnetização em função da temperatura, para cada malha, podemos ver que a energia aumenta com o aumento da temperatura, enquanto a magnetização decresce com o aumento da temperatura. Observe também que em ambos os gráficos os resultados para os cinco tamanhos de malha são aproximadamente iguais até a temperatura aproximar-se da temperatura crítica.

Conforme a temperatura se aproxima da transição de fase, os resultados deixam de ser aproximadamente iguais, pois a energia passa à ser maior para malhas maiores e voltam a tornarem-se similares após $T = 6$. Já para a magnetização, ao se aproximar da transição de fase, a magnetização decresce muito mais rapidamente em malhas maiores, com os resultados tendendo a zero com o aumento da temperatura.



Analisando os gráficos da suscetibilidade magnética e do calor específico em função da temperatura, podemos perceber que tanto a suscetibilidade magnética quanto o calor específico aumentam quando a temperatura se aproxima da temperatura crítica, com ambos os gráficos possuindo curvas que se tornam mais estreitas próximo de $T_c = 2.269$, com os gráficos sendo mais estreitos em malhas maiores.

Também podemos ver que ambos os gráficos começam a decair após a temperatura crítica. Isso significa que as variâncias da energia e da magnetização aumentam consideravelmente com a transição de fase do sistema, implicando no aumento da suscetibilidade magnética e do calor específico ao redor da temperatura crítica. É possível perceber que esse efeito é maior em malhas maiores, onde há uma grande diferença entre os valores das malhas de diferentes tamanhos.

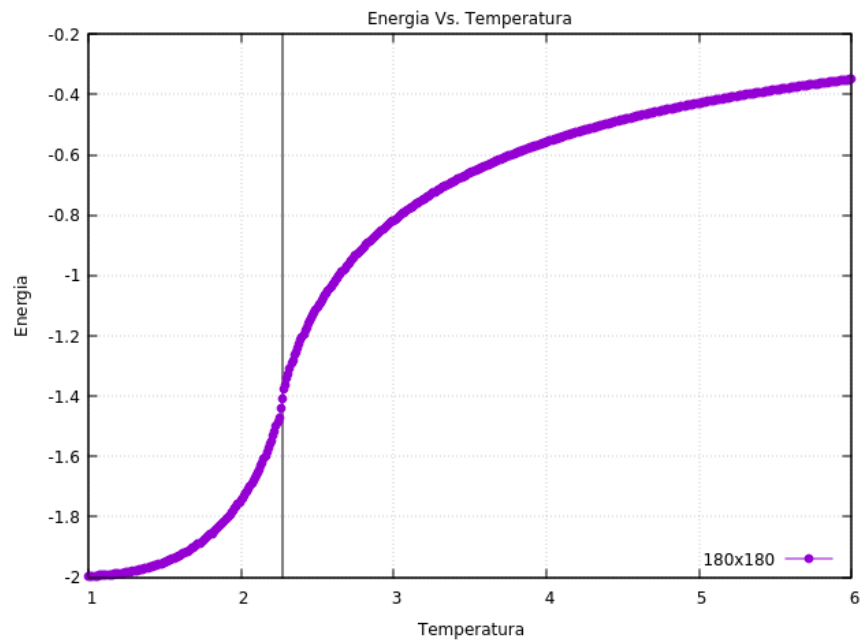
Observe que para temperaturas menores que $T = 2$ e maiores que $T = 3$ a suscetibilidade magnética possui valores aproximadamente iguais para todos os tamanhos de malhas.

7 Script

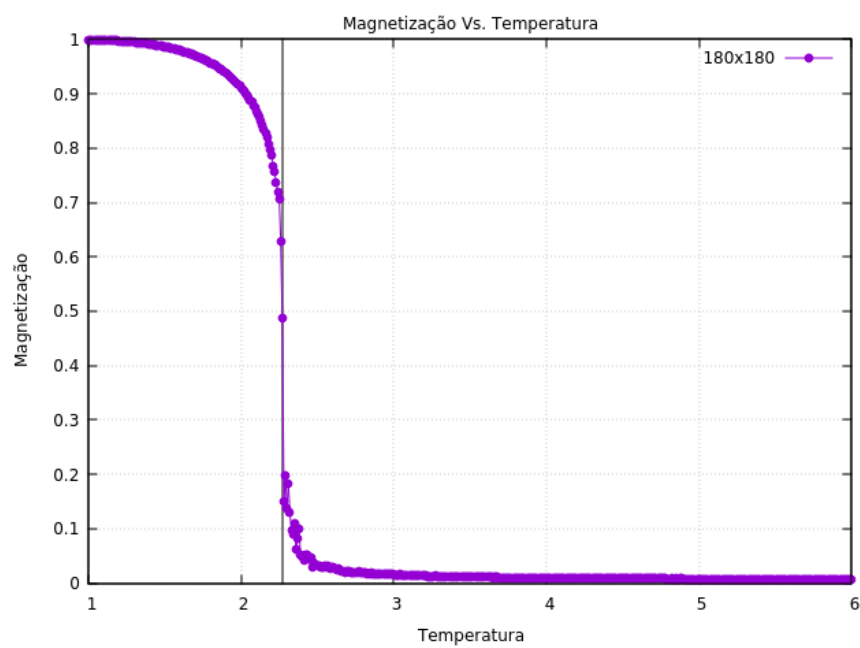
Exemplo:

Para rodar uma simulação com uma malha de 180×180 :

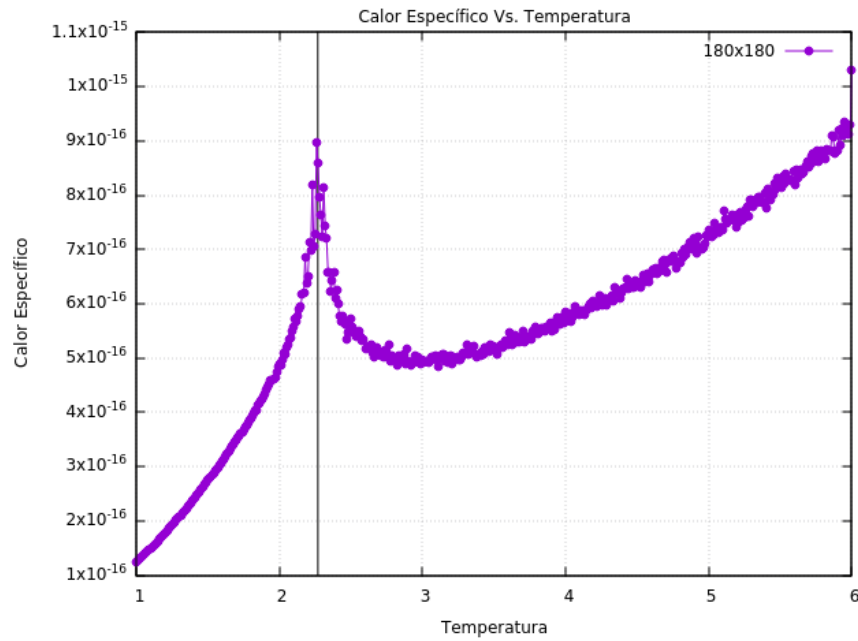
- Abrir o arquivo **header.h** e mudar as variáveis globais para `int x[180][180]` e `N=180`;
- Compilar a partir do makefile. No terminal dar o comando: `make`
- Executar o executável modelo. No terminal dar o comando: `./modelo`
- Se não houver erros aparecerá no terminal uma mensagem informando quantos segundos o programa demorou para rodar. No caso da malha 180×180 , o tempo gasto foi de 11958.9 segundos, aproximadamente 3 horas e 20 minutos.
- No terminal dar o comando: `make clean`
- Abrir o gnuplot. No terminal dar o comando: `gnuplot`
- Criar o gráfico de energia vs temperatura. No terminal dar o comando: `load "arquivo.txt"`



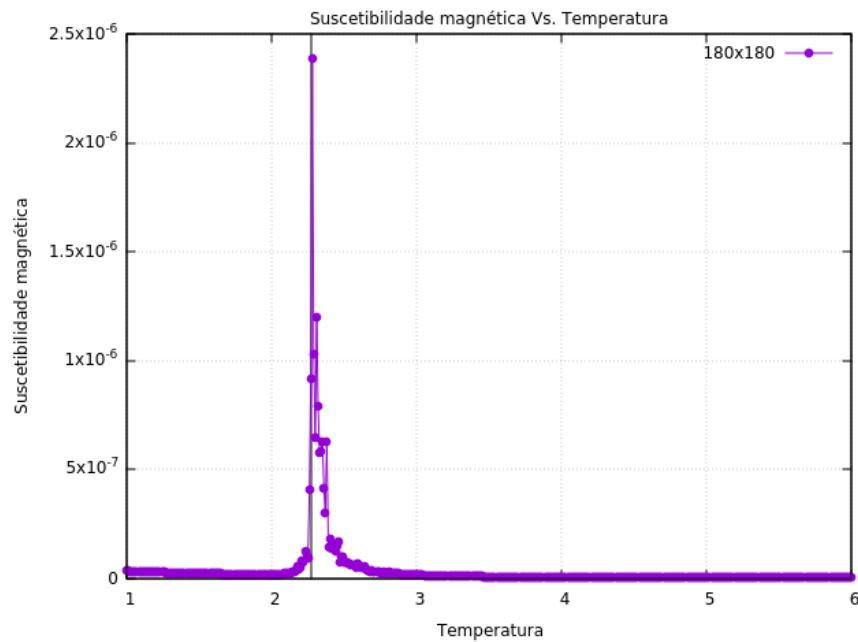
- Criar o gráfico de magnetização vs temperatura. No terminal dar o comando: load "arquivo2.txt"



- Criar o gráfico de calor específico vs temperatura. No terminal dar o comando: load "arquivo3.txt"



- Criar o gráfico de suscetibilidade magnética vs temperatura. No terminal dar o comando: `load "arquivo4.txt"`



Observação: Para simular quaisquer modificações nas condições iniciais, como por exemplo o intervalo de temperatura, o gap de temperatura, a dimensão da malha, o número de passos de Monte Carlo, o valor da interação entre spins, o valor da constante de *Boltzmann* ou o valor do campo magnético, basta fazer tais modificações na parte de variáveis globais no arquivo **header.h**.