

Monte Carlo – Modelo de Ising 2D

Matheus Farnese Lacerda Senna

Departamento de Ciência da Computação – Universidade Federal de Minas Gerais
Belo Horizonte, MG – Brasil

1. Termalização

A primeira parte do trabalho consiste em verificar quantos passos de Monte Carlo são necessários para termalizar um sistema. Os parâmetros levados em consideração foram a temperatura e o tamanho da rede. A seguir estão os gráficos gerados para redes de tamanho $L = 5, 10, 20, 40, 80, 160$ e temperaturas $T = 0.5, 1.0, 1.5$ e 2.0 .

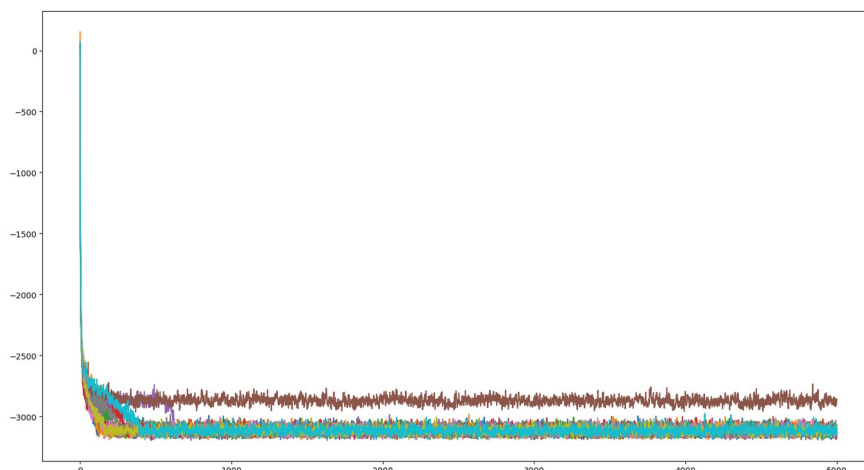
No seguinte link do Google Drive

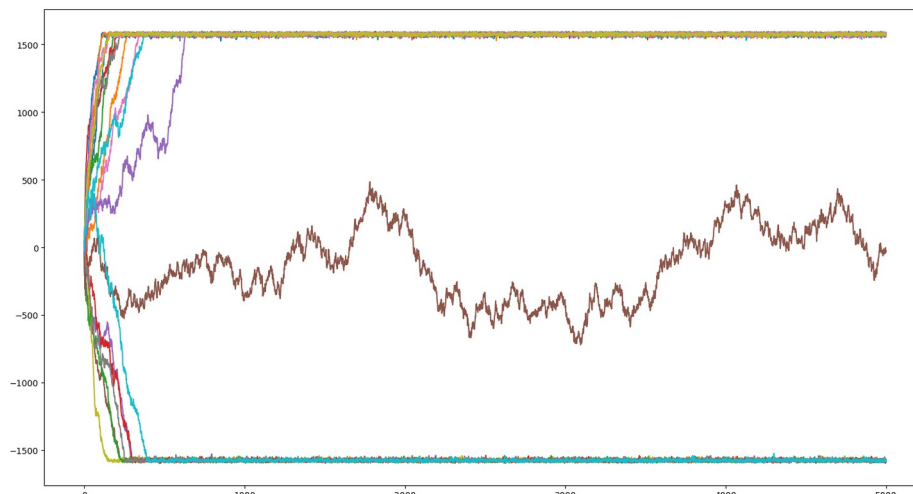
(<https://drive.google.com/drive/folders/1A9KBKAK14GPY0uqreA9m2KAtXGgVErnZ?usp=sharing>)

se encontram todos os gráficos gerados. Em cada gráfico estão plotadas 20 execuções da termalização para cada par de valores (L, T) . Eles estão no diretório “Termalizacao”, divididos entre os respectivos tamanhos L . Dentro de cada diretório “ $L=n$ ” os arquivos estão no formato $\langle T \rangle \langle \text{tipo} \rangle .\text{png}$, onde, por exemplo, “10mg.png” indica que a temperatura é 1.0 e estão plotados os valores de magnetização.

Como os gráficos gerados foram muitos, nesse relatório será apresentado apenas dois deles para ilustrar. Além disso, a seguir estão colocados em uma tabela o número de passos de Monte Carlo necessários para termalizar cada sistema, de acordo com os valores de L e T . As entradas da tabela foram obtidas através de uma análise qualitativa feita pela observação dos gráficos. Entradas com * indicam que nem todas as execuções termalizaram, mas a maioria termalizou com o número de passos indicado. Entradas X indicam que o sistema não termalizou. Finalmente, ‘-m’ indica que a magnetização não termalizou em alguns casos.

	$L = 5$	$L = 10$	$L = 20$	$L = 40$	$L = 80$	$L = 160$
$T = 0.5$	200	2800*	200*	900 -m	1000	3600
$T = 1.0$	200	200	3000	2000 -m	1500 -m	4000
$T = 1.5$	X	200	200	500	1900 -m	4000 -m
$T = 2.0$	X	X	X	1200	3000*	3000 -m





Os gráficos acima são para os valores de $L = 40$ e $T = 1.5$. Nesses gráficos, que estão dentro dos valores recomendados na especificação (L entre 24 e 100 e T entre 0.4 e 3.0), observa-se um bom comportamento do sistema, atingindo a termalização na maioria das execuções com poucos passos (aproximadamente 500).

Com relação à tabela, percebe-se que para redes pequenas ($L = 5$ e $L = 10$), qualquer alteração em um spin é significativa para a rede, e, dessa forma, em temperaturas mais altas, são gerados valores que aparentam ser aleatórios.

Outra observação é que a energia termaliza mais facilmente do que a magnetização. Finalmente, percebe-se que a tendência ao se aumentar o tamanho da rede é aumentar o número de passos de Monte Carlo necessários, entretanto não verifica-se correlações entre a temperatura e a quantidade de passos necessários.

2. Propriedades termodinâmicas do modelo de Ising 2D

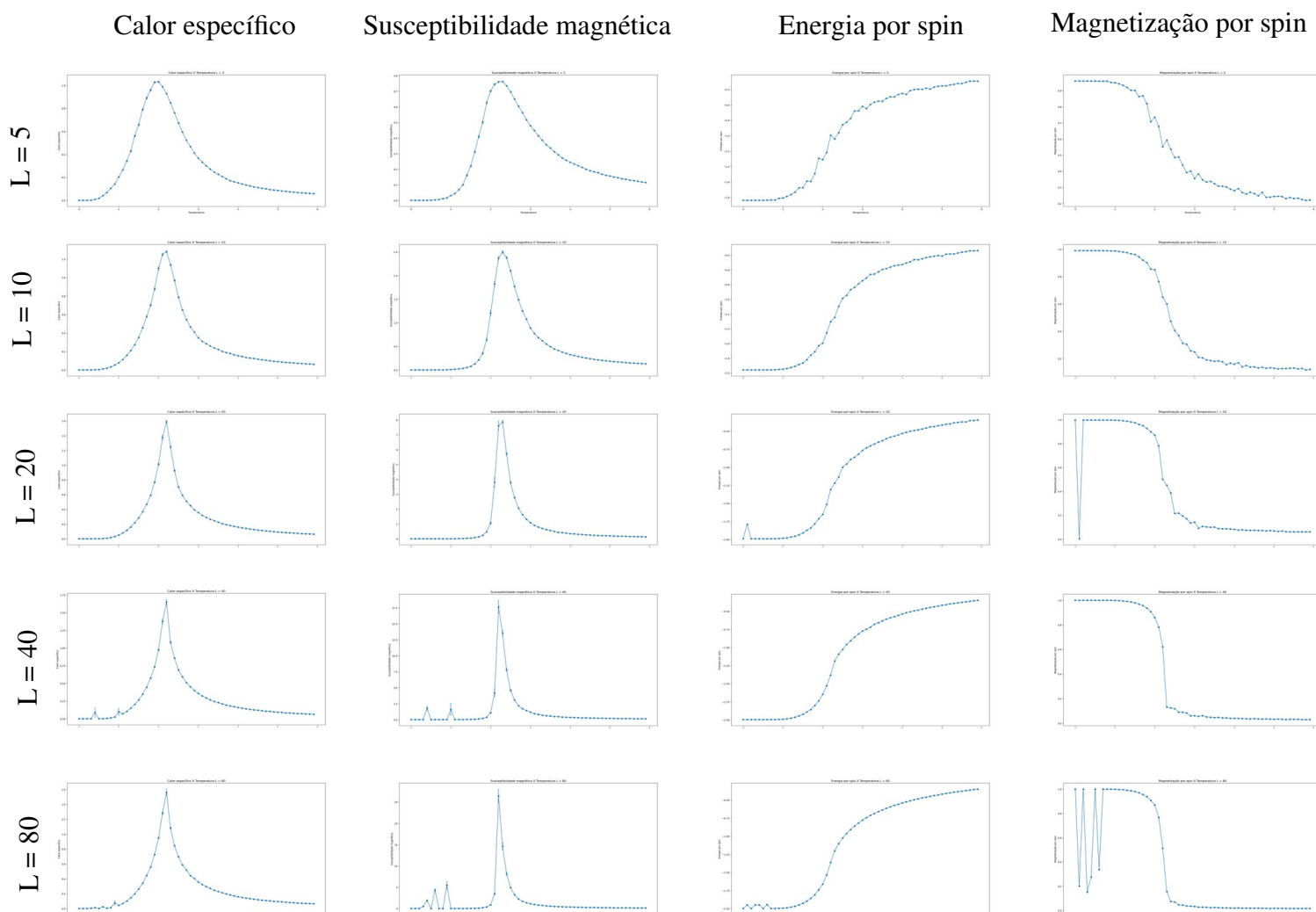
Na segunda parte do trabalho, foram analisadas as propriedades termodinâmicas em sistemas utilizando o algoritmo de Metropolis, a saber: calor específico, susceptibilidade magnética, energia por spin e magnetização por spin. Também foi avaliado o efeito do tamanho da rede em tais propriedades, bem como calculado o erro padrão da média para todas as medidas feitas.

As medidas foram realizadas da seguinte forma: dado uma temperatura, os valores de energia e magnetização do sistema foram calculados sobre 100.000 passos de Monte Carlo, divididos em 100 blocos de 1000 passos cada. Dentro de cada bloco foram calculados os valores das propriedades expressas no parágrafo anterior. Desses blocos, foram obtidas as médias de ditas propriedades, calculando também o erro padrão da média, utilizando os valores médios encontrados em cada um dos 100 blocos. O valor encontrado para cada propriedade corresponde a um ponto no respectivo gráfico. Foram encontrados 60 pontos para cada métrica, de forma a variar a temperatura entre 0 e 6 com incremento de 0.1.

2.1. Critérios utilizados para escolher os valores dos parâmetros

Primeiramente, deve-se escolher um valor para o número de passos até a termalização. O valor adotado foi de 5000 passos de Monte Carlo, pois, como observado na seção 1, 5000 passos é suficiente para normalizar a maioria dos sistemas. Para L , testou-se os seguintes valores: $L = 5, 10, 20, 40, 80$. A temperatura foi variada de 0 a 6 com intervalos de 0.1 em todos os casos. O número de passos de Monte Carlo para calcular as médias termodinâmicas foi 100.000, pois foi a maior potência de 10 que rodou razoavelmente rápido para todos os casos.

2.2. Comportamento das grandezas termodinâmicas de acordo com o tamanho do sistema



Acima estão os gráficos obtidos. Tais gráficos também estão disponíveis no Google Drive (<https://drive.google.com/drive/folders/1A9KBKAK14GPy0uqreA9m2KAtXGgVErnZ?usp=sharing>) no diretório “Ising2D” e estão separados em diretórios de acordo com o tamanho da rede.

Para o calor específico, observa-se que para altas e baixas temperaturas, ele se aproxima de zero. Para temperaturas medianas, ele assume valores variados. Além disso, observa-se um pico de calor específico em temperaturas entre 2.1 e 2.4 para todos os casos, sendo que quanto maior o tamanho da rede, mais acentuado é o crescimento em direção ao pico.

Para a susceptibilidade magnética, o comportamento é parecido: para altas e baixas temperaturas o valor se aproxima de zero e, para temperaturas medianas, ele assume valores variados. Também é observado um pico em valores de temperatura entre 2.1 e 2.4. Novamente, o crescimento da susceptibilidade magnética em direção ao pico também é mais acentuado para redes maiores. Finalmente, os valores de máximo local nos gráficos de $L=80$ e $L=40$ para temperaturas entre 0 e 1 são atribuídos ao fato de que a termalização falhou para esses pontos. Como foi observado na parte 1, é mais difícil termalizar a magnetização, causando esses erros no gráfico de susceptibilidade magnética.

A energia por spin tende a -2.0 para baixas temperaturas e cresce logarithmicamente para altas temperaturas. Em todos os casos, há um crescimento mais significativo da energia em temperaturas entre 2.1 e 2.4. Para redes maiores, o limite quando a temperatura tende a zero é mais próximo de -2.0. No gráfico de $L=5$, o limite para temperaturas baixas é de aproximadamente -1.8,

enquanto que para $L=40$ e $L=80$, esse limite é de -2.0 . Entretanto, para altas temperaturas, não há diferenças significativas entre os tamanhos de rede. Ademais, não há picos e vales para os valores de energia por spin.

A magnetização por spin tende a 1 em baixas temperaturas e a 0 em altas temperaturas. As oscilações bruscas para nos gráficos de $L=20$ e $L=80$ para temperaturas entre 0 e 1 são devidas a erros de termalização, assim como no caso da susceptibilidade magnética. Observa-se um decaimento acentuado de 1 para 0 em temperaturas de 2.1 a 2.4. Ademais, para $L=5$, as oscilações entre pontos consecutivos são maiores. Assim como no caso da energia, a magnetização não tem picos e vales.

2.3. Erros estatísticos

Primeiramente, para os valores de energia por spin e magnetização por spin, o erro de todos os pontos em todos os casos é desprezível e não aparece nos gráficos, pois as barras são muito pequenas.

Para o calor específico a susceptibilidade magnética, os maiores erros se encontram nos pontos de máximo local e global, bem como na região de crescimento acentuado em direção ao máximo global. No caso dos máximos locais, o erro é devido a termalização, pois, nesses pontos, ela falhou. Já no caso dos respectivos máximos globais, o grande erro das medidas está associado à mudança de fase sofrida pelo sistema. Durante a mudança de fase, as ditas propriedades divergem.

Finalmente, observa-se que os erros estatísticos são maiores para redes grandes. Isso ocorre porque deve-se tomar o limite termodinâmico (redes de tamanho infinito) para descrever bem as fases e propriedades de um sistema. Dessa forma, redes maiores possuem mudanças de fase mais bem definidas e, portanto, o erro associado a elas é maior, pois calor específico a susceptibilidade magnética divergem em mudanças de fase.

2.4. Fases do sistema

O sistema possui duas fases: uma com temperaturas entre 0 e 2.3 e outra com temperaturas entre 2.3 e 6. 2.3 é a temperatura onde ocorrem os picos de valores do calor específico da susceptibilidade magnética, bem como um crescimento da energia por spin e um decrescimento da magnetização por spin.

Na primeira fase (de 0 a 2.3), a energia por spin do sistema se aproxima de -2.0 , possuindo um crescimento acentuado durante a transição de fase. Após tal transição, a energia cresce com um formato logarítmico. Já a magnetização por spin, começa em 1, na primeira fase. Durante a transição, ela decai rapidamente para zero, permanecendo em zero na segunda fase do sistema.

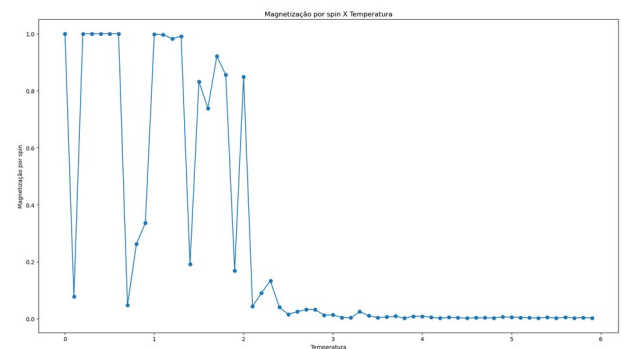
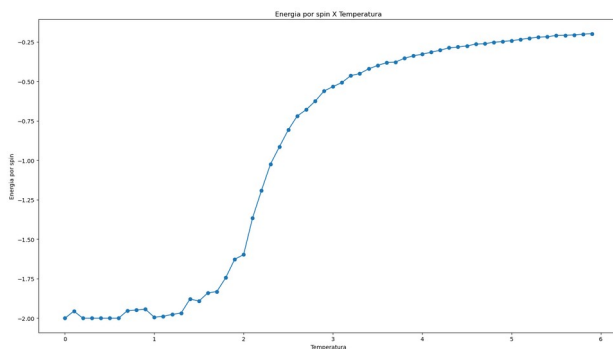
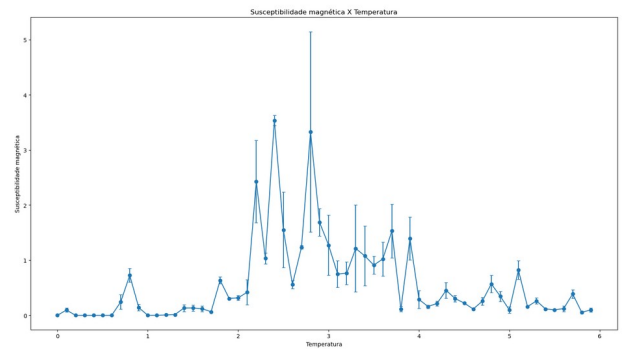
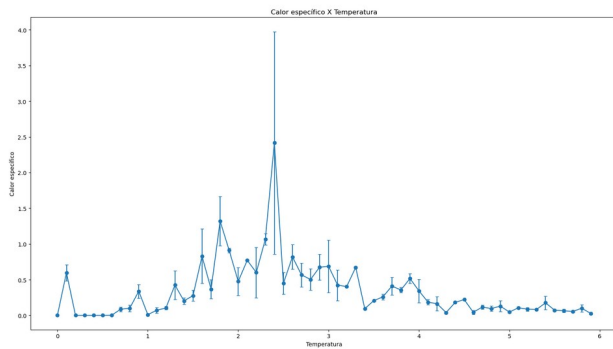
O calor específico e a susceptibilidade magnética crescem rapidamente na mudança de fase e, caso seja tomado o limite termodinâmico, haveria uma divergência dos valores dessas medidas durante a transição de fase. Com relação às fases: na primeira, ambas medidas tendem a zero quando a temperatura se aproxima de zero, e crescem a medida que se aproxima da transição de fase. Já na segunda fase, decrescem e assumem valores que vão diminuindo e se aproximando de zero para temperaturas muito altas.

2.5. Temperatura de transição de fase do sistema no limite termodinâmico

A temperatura estimada de transição de fase no limite termodinâmico é de 2.3, como já discutido em seções anteriores.

Caso o limite termodinâmico fosse tomado, o rápido crescimento do calor específico e da sus magnética se transformariam em uma divergência na função. Ademais, a magnetização por spin decairia verticalmente de 1 para 0 na temperatura de transição de fase, enquanto que a energia crescería rapidamente em tal temperatura.

Para exemplificar esse limite termodinâmico, foi gerado um gráfico com tamanho da rede $L=500$. Devido à complexidade computacional, tal gráfico foi calculado com 10 passos de Monte Carlo e 2 blocos, sendo uma medida imprecisa e pouco significativa. Entretanto, o comportamento ilustrado por ele está de acordo com o esperado. Os quatro gráficos se encontram a seguir e também estão disponíveis no Google Drive.



Percebe-se o grande erro associado às medidas, mas de fato a magnetização decaiu quase que verticalmente na temperatura de transição (2.2 no gráfico gerado) e a energia teve o maior crescimento a essa temperatura, apesar de não vertical. Já o calor específico e a susceptibilidade magnética possuem altos erros de medida durante a transição de fase, caracterizando a divergência de tais propriedades.

Novamente ressalta-se que os gráficos acima não possuem valor estatístico, pois não foram geradas amostras aleatórias o suficiente para descrever o comportamento do sistema. Eles estão apenas ilustrando aproximadamente o comportamento no limite termodinâmico, sendo que esse comportamento é parecido com o que era de se esperar.

3. Apêndice

Os códigos em python usados para a termalização (primeira parte do trabalho) e para a simulação do modelo de Ising 2D (segunda parte do trabalho) também estão disponíveis no Google Drive, no diretório “Codigos”. Para executá-los, basta usar um terminal e usar uma das duas linhas a seguir:

```
python3 thermalize.py
```

```
python3 ising.py
```

Caso seja do interesse, é possível editar os parâmetros nas últimas linhas dos referidos arquivos para executá-los como quiser. Observa-se que para valores de L altos, ising.py demora para executar. Para $L=80$, por exemplo, demorou aproximadamente 1 hora para concluir a execução. Já para $L=20$, o tempo gasto é de 3 minutos.