Ising

Davi Bastos Costa

August 2017

1 Simulação do modelo de Ising

No que segue, descrevo em linhas gerais alguns dos resultados obtidos na simulação do modelo de Ising em 2D usando o algorítimo de Metrópoli.

1.1 Introdução Teórica

Para calcular de forma exata o valor esperado de alguma propriedade Q do modelo de Ising precisamos calcular

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu \in \mathbb{C}} Q_\mu e^{-\beta H_\mu},$$

onde $\mathbb{C}$ é o conjunto de todos os estados possíveis do sistema, H_μ é a Hamiltoniana associada ao modelo de Ising para o estado μ e Q_μ é o valor da propriedade Q do estado μ. No entanto, o número de estados possíveis para o modelo de Ising com N partículas é 2^N, onde N é o número total de partículas com spin na rede. Portanto, em geral não é computacionalmente possível realizar a somatória. Como exemplo, para uma rede com $N = 100$ precisaríamos realizar uma somatória com número de termos $\sim 10^{30}$.

A técnica de Monte Carlo consiste em escolher um subconjunto X de $\mathbb{C}$ a partir de uma distribuição de probabilidade p_μ e usar

$$Q_X = \frac{\sum_{\mu \in X} Q_\mu p_\mu^{-1} e^{-\beta E_\mu}}{\sum_{\nu \in X} p_\nu^{-1} e^{-\beta E_\nu}},$$

como aproximação de $\langle Q \rangle$. Escolhendo $p_\mu \sim e^{-\beta H_\mu}$ obtemos:

$$Q_X = \frac{1}{|X|} \sum_{\mu \in X} Q_\mu$$

O algorítimo de Metrópolis nos fornece uma forma de obter os estados que pertencem a X, fazemos isso alterando o estado do sistema em passos a partir de um estado inicial. Obtemos um novo estado da seguinte forma: partindo de um estado μ do sistema, invertemos o spin da k-ésima partícula da rede que foi escolhida de forma aleatória e aceitamos o novo estado ν do sistema com probabilidade:

$$P(\mu \to \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & \text{se } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 \text{ caso contrário} \end{cases}$$

1.2 Resultados

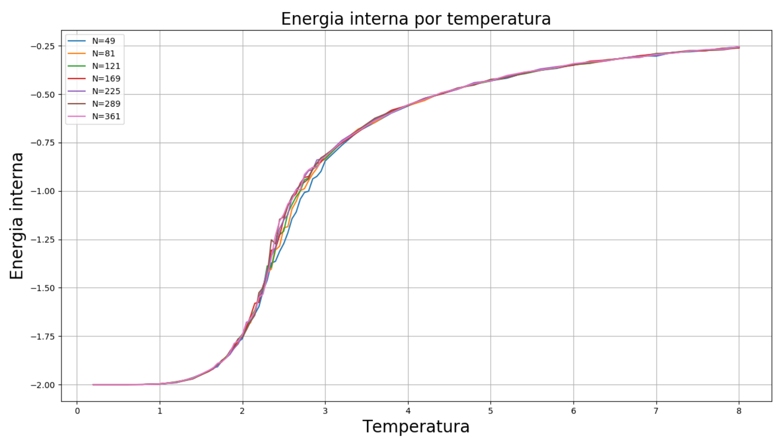

Figura 1: Energia interna por partícula do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis.

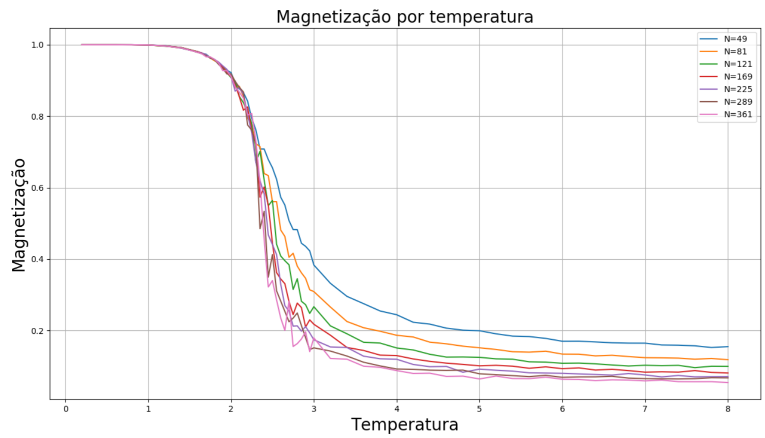

Figura 2: Magnetização por partícula do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis.

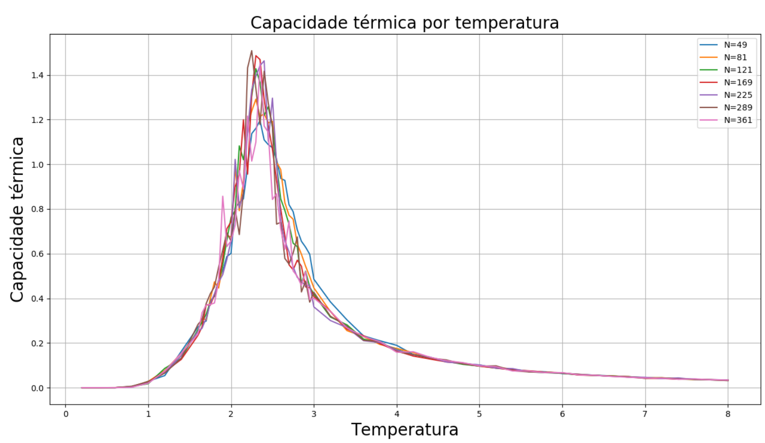

Figura 3: Capacidade térmica do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis.

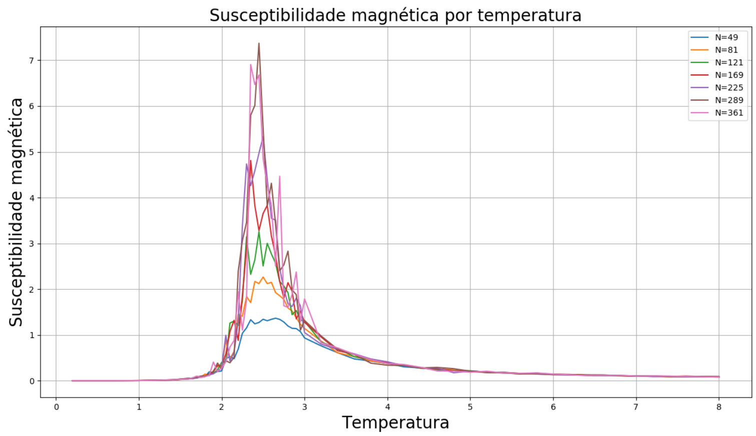

Figura 4: Susceptibilidade magnética do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis.

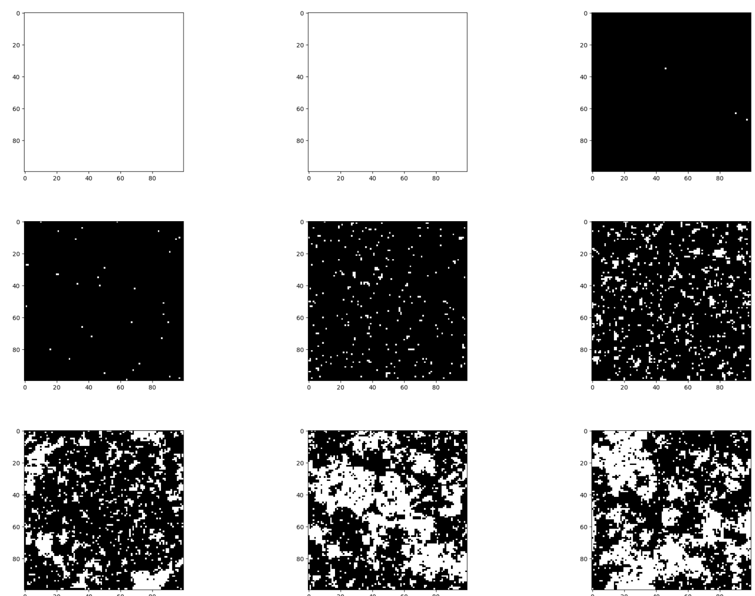

Figura 5: Nove representações da rede de 100×100 partículas do modelo de Ising atingindo o equilíbrio térmico à temperatura de $T = 2.4$. Nas imagens os pontos pretos representam partículas com spin 1/2 e pontos brancos representam partículas com spin -1/2. A progressão de imagens foi obtida com uma simulação de Monte Carlo usando o algorítimo de Metropolis, e as nove imagens representam, respectivamente, a rede após 10^n passos de Monte Carlo, com $n \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$. Nas últimas imagens o sistema atingiu o equilíbrio térmico.

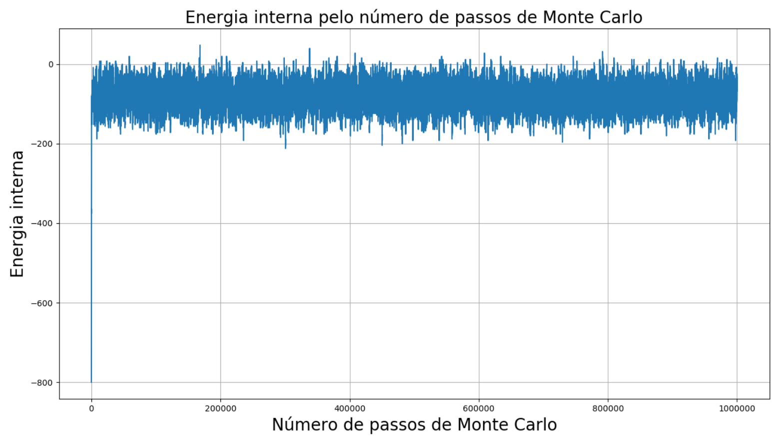

Figura 6: Energia interna do modelo de Ising em duas dimensões para rede quadrada 20×20 em função do número de passos de Monte Carlo para uma temperatura de $T = 10$. No gráfico podemos observar o processo de termalização da rede.

2 Finite size scalling

2.1 Introdução Teórica

Finite size scalling é um método para obter o valor dos expoentes críticos usando uma relação entre quantidades medidas e o tamanho do sistema. Usando as aproximações que valem na região próxima à temperatura crítica:

$$\xi \sim |t|^{-\nu}$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}$$

$$c \sim |t|^{-\alpha}$$

$$m \sim |t|^{-\beta}$$

Obtemos as expressões:

$$\chi = L^{\gamma/\nu}\widetilde{\chi}(L^{1/\nu}t)$$

$$c = L^{\alpha/\nu}\widetilde{c}(L^{1/\nu}t)$$

$$m = L^{-\beta/\nu}\widetilde{m}(L^{1/\nu}t)$$

Para sistemas com diferentes tamanhos medimos a quantidade $Q(t)$ de interesse para um conjunto de temperaturas. Então podemos estimar a scalling function usando as expressões acima. A scalling function não depende do tamanho do sistema, de forma que as estimativas obtidas para sistemas com tamanhos diferentes devem ser iguais. Porém, isso só acontece quando usamos os valores corretos para os expoentes críticos e para a temperatura crítica T_c. Portanto, devemos calcular $\widetilde{\chi}(x)$, $\widetilde{c}(x)$ e $\widetilde{m}(x)$ para sistemas com diferentes tamanhos, variar os expoentes e a temperatura crítica até as curvas colapsarem.

2.2 Resultados

No presente trabalho usamos as scaling functions como método para conferir os resultados da nossa simulação. Usamos $\alpha = 0$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$, $\delta = 15$, $\eta = 1/4$, $\nu = 1$ e $\omega = 2$, e verificamos que as escaling functions de fato colapsaram para sistemas com diferentes tamanhos:

Susceptibilidade e Scaling Function da Susceptibilidade

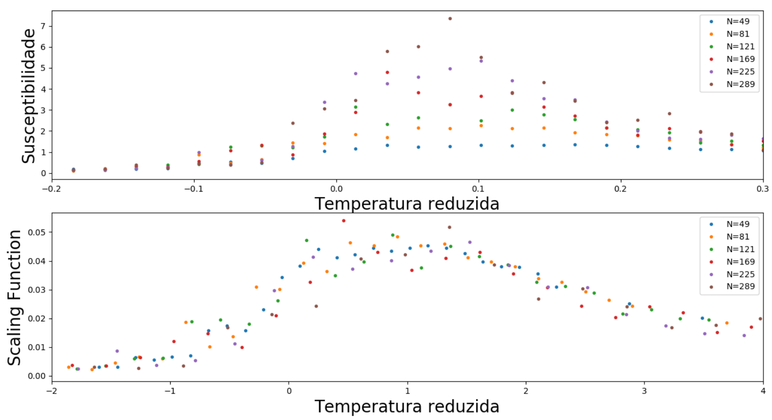

Figura 7: Susceptibilidade magnética do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function da susceptibilidade magnética foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{\chi}(Lt) = L^{-7/4}\chi(t)$

Susceptibilidade e Scaling Function da Susceptibilidade

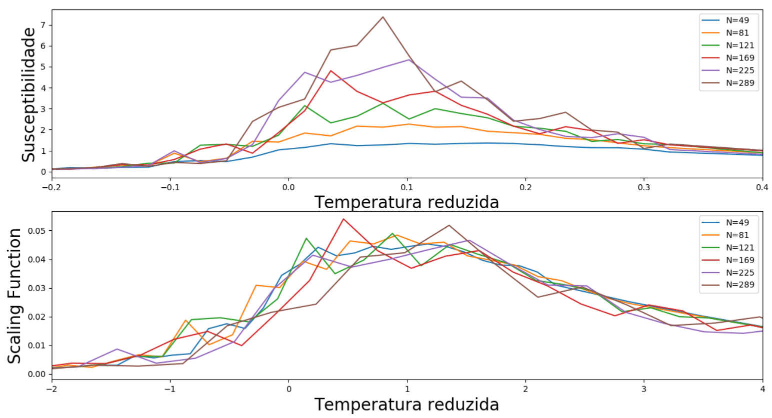

Figura 8: Susceptibilidade magnética do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function da susceptibilidade magnética foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{\chi}(Lt) = L^{-7/4}\chi(t)$

Magnetização e Scaling Function da Magnetização

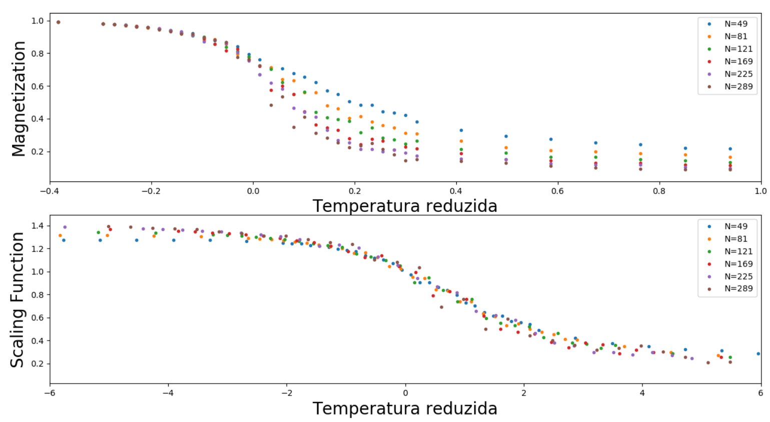

Figura 9: Magnetização do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function da magnetização foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{m}(Lt) = L^{1/8}m(t)$. Veja que a scaling function, só colapsa as diferentes curvas na regiões próxima à temperatura crítica, aproximadamente no intervalo [-2,4].

Magnetização e Scaling Function da Magnetização

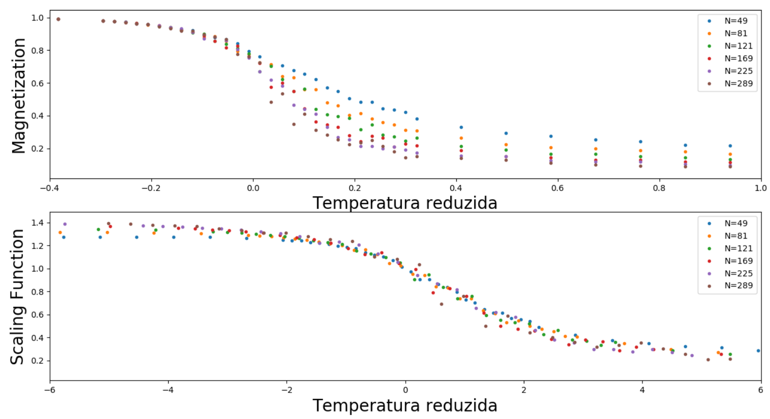

Figura 10: Magnetização do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function da magnetização foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{m}(Lt) = L^{1/8}m(t)$. Veja que a scaling function, só colapsa as diferentes curvas na regiões próxima à temperatura crítica, aproximadamente no intervalo [-2,4].

Scaling Function do Calor Específico

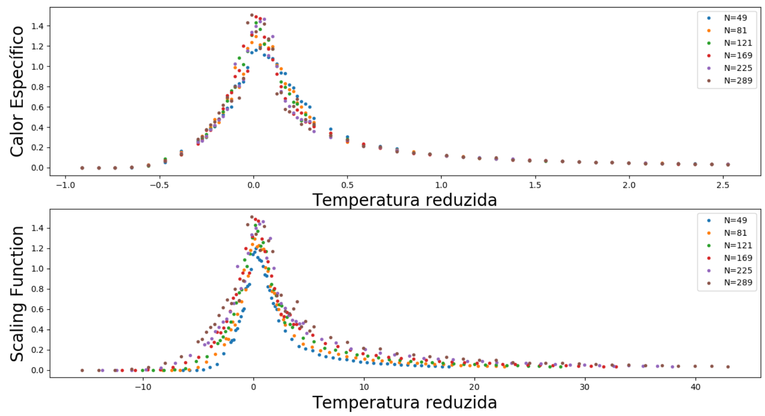

Figura 11: Calor específico do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function do calor específico foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{m}(Lt) = m(t)$.

Scaling Function do Calor Específico

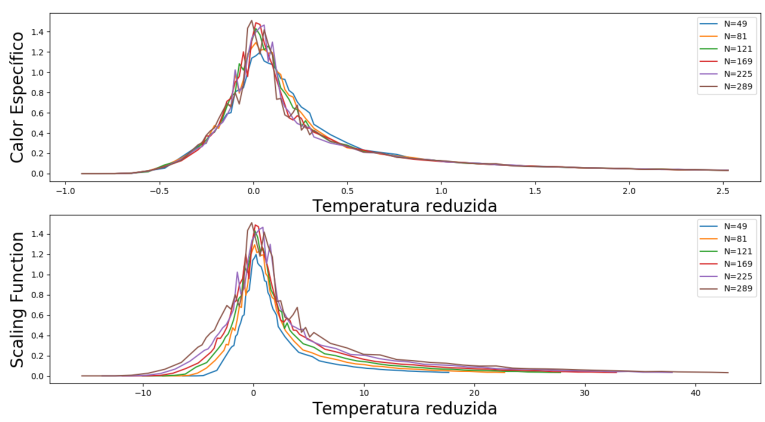

Figura 12: Calor específico do modelo de Ising em duas dimensões para redes quadradas de diferentes dimensões em função da temperatura reduzida e scaling function associada. Os pontos foram obtidos usando o método de Monte Carlo com o algorítimo de Metropolis. A scaling function do calor específico foi calculada a partir desses valores usando $\widetilde{m}(Lt) = m(t)$.