



Exercício 05: Modelo de Ising

Francisco Cerdeira*

Implementação do algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising ferromagnético. Determinação da temperatura crítica, T_c , através da análise da energia e magnetização médias por spin.

Simulações de Monte Carlo: modelo de Ising

- O modelo de Ising é um modelo matemático que consiste no uso de 2 variáveis discretas de modo a descrever o spin de um átomo, que toma assim valores de -1 e 1 consoante a sua orientação sendo estes dispostos numa rede quadrada (*lattice*) de modo a possibilitar a sua interação com os seus vizinhos e estudar a variação de energia e magnetização à medida que se faz variar o spin de um célula de cada vez. A energia total e a magnetização do sistema são dadas pelas equações 1 e 2, respetivamente

$$E_T = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (2)$$

onde

- $\sigma_i; \sigma_j$, representam os spins da partícula i e j , respetivamente, e podem tomar os valores -1 e 1
- $J = 1$, é um parâmetro da força de interação

O modelo de Ising foi implementado pelo algoritmo de Metropolis descrito em baixo:

- Começou-se por gerar uma rede de tamanho $N = L \times L$ na qual a configuração inicial consiste em ter-se todos os spins orientados, isto é, com o mesmo valor σ ;
- De modo a tornar o algoritmo mais eficiente, são calculados os valores de E_T e M sendo posteriormente calculadas apenas as suas variações;
- É aplicado o método de Monte Carlo, começando por gerar uma posição aleatória na rede à qual iremos aplicar o algoritmo de Metropolis. Isto é conseguido multiplicando o resultado da função *drand48()* pelo tamanho da rede retornando um número inteiro i , que corresponde à localização da célula no *array* criado (a nossa rede quadrada não é mais que um *array*)(*int i = drand48() * N*).

- É calculada a variação de energia pela formula dada pela equação 3

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{T_f} - E_{T_i} = \\ &= 2J(\sigma_i \sigma_{cima} + \sigma_i \sigma_{baixo} + \\ &\quad + \sigma_i \sigma_{esquerda} + \sigma_i \sigma_{direita}) \end{aligned} \quad (3)$$

considerando-se as condições de fronteira periódicas;

- A variação de energia calculada, ΔE é agora tomada em consideração no momento da decisão de proceder à alteração do spin ou não
 - * se $\Delta E \leq 0$ aceito a alteração
 - * se $\Delta E \geq 0$ aceito a alteração com probabilidade, p , dada pela equação 4

$$p = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \quad (4)$$

onde

- k_B , corresponde à constante de Boltzmann
- T , é a temperatura (Jk_B^{-1})
- Caso a alteração seja aceite é necessário atualizar os valores de E_T e de M

$$E_T^{n+1} = E_T^n + \Delta E^n \quad (5)$$

$$M^{n+1} = M^n + 2\sigma_i \quad (6)$$

onde n é a iteração atual;

- A esta sequencia dá-se o nome de *Monte Carlo Step* sendo que N *Monte Carlo Steps* correspondem a 1 *Monte Carlo Sweep*. Para fins estatísticos foi necessário separar o código em 2 ciclos *for*, de modo a reduzir a correlação entre amostras para cada temperatura: um primeiro que aplicava o algoritmo de Metropolis e que se prolonga ao longo dos N passos (*Monte Carlo Step*) e, um segundo que englobava o primeiro e era responsável por somar os valores de E_T e M sempre que o contador era divisível por 3, não podendo deixar-se de verificar as vezes que isto ocorria, o que permitiu gerar uma média de E_T e M para cada temperatura tendo apenas em conta os valores a cada 3 *Monte Carlo Sweep*. No fim será necessário dividir estes valores por N de modo a termos os valores de energia e magnetização por célula.

* francisco.cerdeira@gmail.com

- De modo a obter as figuras 1, 2 e 3 foi utilizado o código fornecido no exercício 02, *latticeview.h*, gerando-se 3 configurações diferentes em que se fez variar a temperatura T para um tamanho N de rede. Para a escolha de temperatura teve-se em consideração que $T_c^{Teorico} = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \approx 2.269$, optando-se por $T = \{1.5, 2.269, 3\}$. À medida que a temperatura aumenta também aumenta a probabilidade com que se aceita a inversão do spin.

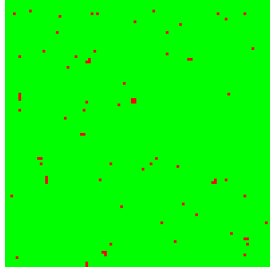


Figura 1. Resultado do algoritmo acima descrito para $T = 1.5$ com MC Sweep = 10000 e $L = 100$. A verde temos que $\sigma_i = 1$ e a vermelho, $\sigma_i = -1$

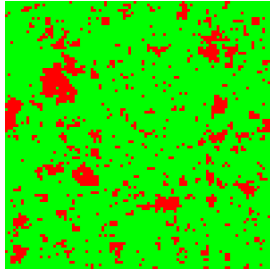


Figura 2. Resultado do algoritmo acima descrito para $T = T_c$ com MC Sweep = 10000 e $L = 100$. A verde temos que $\sigma_i = 1$ e a vermelho, $\sigma_i = -1$

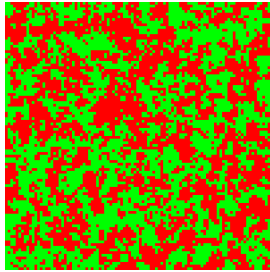


Figura 3. Resultado do algoritmo acima descrito para $T = 3$ com MC Sweep = 10000 e $L = 100$. A verde temos que $\sigma_i = 1$ e a vermelho, $\sigma_i = -1$

Estatística

- Nesta secção procurar-se-á estimar a temperatura

crítica, T_c^{exp} a partir do cálculo do valor médio da energia, $\langle E_T \rangle$, e magnetização, $\langle M \rangle$, por átomo (célula) em função da temperatura, T , para 3 tamanhos de sistema diferentes. A temperatura crítica será assim dada pela intersecção das 3 curvas obtidas.

O método através do qual serão calculados os valores para a energia e magnetização média por átomo já foi descrito anteriormente, sendo aqui usados diferentes valores para L , T e $MCSweeps$.

- $L = \{50, 100, 150\}$
- $MCSweeps = 5000$
- T toma valores de 0.5 a 3 com incrementos de 0.01

- Na figura 4 são apresentados 2 gráficos, um para a energia média e o outro para a magnetização média, ambos por célula. Como foi explicado, pretende-se estimar um valor para a temperatura crítica, algo que não é possível verificar no primeiro mas que no caso da magnetização média é possível concluir que $T_c^{exp} \approx 2.35$ pois é a partir deste valor que podemos observar uma convergência dos valores da magnetização média para 0. O desvio ao valor teórico é facilmente explicado pelo pequeno tamanho das redes quadradas usadas.

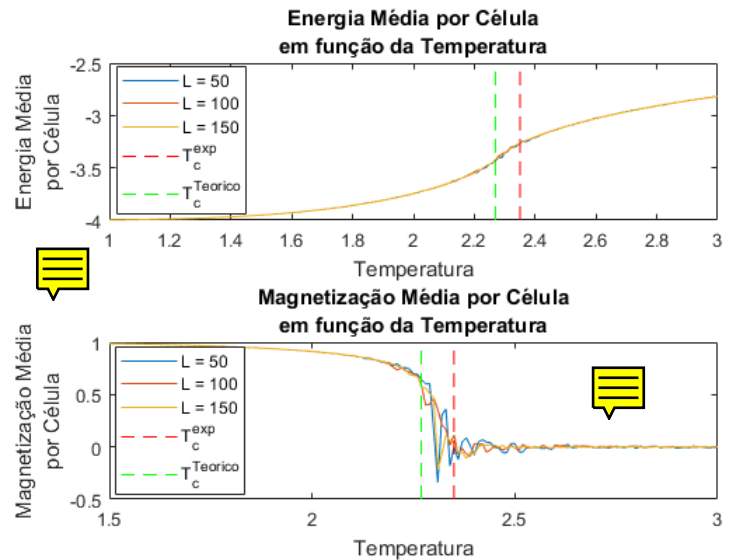


Figura 4. Gráficos da Energia e Magnetização Médias por célula em função da Temperatura (T). A tracejado são apresentados os valores de $T_c^{Teorico}$ (verde) e de T_c^{exp} (vermelho), este ultimo uma estimativa efetuada com base na convergência dos valores da magnetização média para 0