

# Estudo do modelo de Ising em 2D via método de Monte Carlo

GABRIEL FARIAS CACCÁOS

gabriel.caccaos@usp.br

Métodos Computacionais em Física

Prof. Luis Gregório Dias

Instituto de Física da USP

17 de junho de 2018

## Resumo

*Neste trabalho, foi desenvolvido um código em Python 3.6.5 em notebook do Jupyter para a simulação do modelo de Ising em duas dimensões através do algoritmo de Metrópolis, no qual são avaliadas as transições de microestados de spin mais prováveis via método de Monte Carlo. Os resultados obtidos são compatíveis, qualitativamente, com os resultados teóricos obtidos por Onsager.*

## 1 Introdução

O modelo de Ising consiste de uma abordagem estatística para investigar as propriedades macroscópicas de sistemas físicos em 1, 2 ou 3 dimensões compostos de diversas partículas com spin ( $\sigma = \pm 1$  apenas). Em outras palavras, é um modelo que descreve o fenômeno emergente do magnetismo macroscópico a partir do agrupamento de partículas que possuem spin. Um exemplo de configuração de spins bidimensional é mostrada na figura 1.

Nessa escala, o sistema é governado, basicamente, por dois princípios fundamentais: a minimização da energia e a maximização da entropia. A competição entre esses dois fatores é mediada pela temperatura, determinando qual será mais dominante. Essa competição é descrita, matematicamente, distribuição de Gibbs,

$$P(\alpha) \sim \exp\left(-\frac{E_\alpha}{k_B T}\right), \quad (2)$$

a qual determina a probabilidade de ocorrerem mudanças de estados dado que o sistema está no estado  $\alpha$ , com energia  $E_\alpha$ .

$$\begin{array}{cccc}
 \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \\
 \downarrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \\
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\
 \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow
 \end{array} \tag{1}$$

**Figura 1:** Exemplo de uma configuração de spins em 2 dimensões.

Por exemplo, para um sistema bidimensional, a energia do sistema ( $E$ ) depende da energia de interação entre todos os pares de spins vizinhos e da energia de interação de cada spin com o campo magnético externo, além da configuração de spins em si. De forma simplificada, isso pode ser traduzido na equação

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \tag{3}$$

em que  $J$  é uma constante que define a intensidade da interação entre pares de spins vizinhos (representados por  $\langle i,j \rangle$ ) e  $h$  é uma constante associada à intensidade da interação de cada spin com o campo magnético externo. São feitas simplificações na medida em que é atribuído um mesmo valor,  $J$ , para a interação entre todos os pares de spins, embora esse valor pudesse ser diferente para cada par de spins. Analogamente, poderia ser escolhido um valor  $h_i$  específico para cada spin.

Dessa forma, a função de partição do sistema ( $Z$ ) é dada por

$$Z(T, J, h, L) = \sum_{\alpha} \exp(-\beta E_{\alpha}), \tag{4}$$

na qual o somatório é feito sobre todos os microestados possíveis,  $\alpha$ , os quais possuem energia  $E_{\alpha}$ , e  $\beta = 1/k_B T$ . Isso leva à distribuição de probabilidades definida pela equação ???. Assim, a média de uma grandeza associada ao sistema ( $f$ ), é dada pela expressão

$$\langle f \rangle = \sum_{\alpha} \exp(-\beta E_{\alpha}) f_{\alpha}, \tag{5}$$

na qual é calculado o valor de  $f_{\alpha}$  sobre cada estado possível com energia  $E_{\alpha}$ . Por ser calculada sobre todos os estados, essa média é chamada de média térmica de  $f$ .

Por exemplo, para um sistema bidimensional com  $L \times L$  spins, a magnetização por sítio associada a um estado  $\alpha$  é dada por

$$m_{\alpha} = \frac{1}{L^2} \sum_{i=0}^{L-1} \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_{i,j}. \tag{6}$$

De posse de cada valor de  $m_{\alpha}$ , é possível, então, calcular a média térmica da magnetização,  $\langle m \rangle$ , a partir da equação 5.

Uma solução exata para a magnetização de um sistema bidimensional com condições periódicas de contorno em função da temperatura foi obtida por Onsager:

$$[?]m = \left[1 - (\sinh 2J\beta)^{-4}\right]^{\frac{1}{8}}. \quad (7)$$

O resultado teórico prevê a existência de uma temperatura crítica na magnetização do sistema, a qual caracteriza um ponto de mudança de fase: se  $2 \tanh^2(2\beta J) = 1$ , então  $m = 0$ ; portanto, a temperatura crítica é dada por

$$T_C = \frac{2J}{k_B \log(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269. \quad (8)$$

## 2 Simulações

### 2.1 Métodos computacionais

Na prática, para calcular o valor da média térmica (dada pela equação 5) da magnetização (dada pela equação 6), seria necessário calcular a magnetização sobre todos os estados possíveis. Isso representa um notável trabalho computacional, dado que, para um grid com  $N = L \times L$  spins, há  $2^N$  estados possíveis.

O algoritmo de Metropolis contorna esse problema na medida em que utiliza passos de Monte Carlo para guiar a evolução do sistema. Ao invés de calcular a magnetização sobre todos os estados possíveis, a magnetização é calculada sobre estados selecionados com distribuição de probabilidade semelhante à de Gibbs (equação 2). O sistema é iniciado em uma dada configuração de spins. Essa configuração pode ser aleatória ou homogênea. Um spin é, então, escolhido aleatoriamente e calcula-se a energia necessária para que esse spin seja invertido,  $\delta E$ . No código, um grid de spins 2D é representado por um array (matriz)  $\sigma$  de formato  $L \times L$  com condições periódicas de contorno e que contém valores  $+1$  ou  $-1$ . Se o sistema se encontrava no estado  $\alpha$  e mudaria para o estado  $\alpha'$ , isso significa que, de acordo com a equação , a energia necessária para inverter o spin na posição  $(i, j)$  é dada por

$$\delta E = E_{\alpha'} - E_{\alpha} = 2\sigma_{i,j} [J (\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) + h]. \quad (9)$$

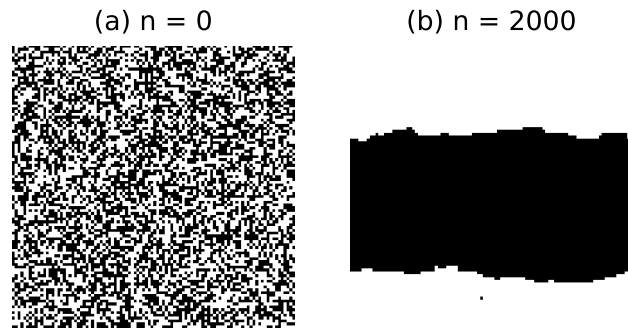
Caso essa mudança reduza a energia do sistema, isto é,  $\delta E \leq 0$ , o spin é invertido e o sistema é levado, consequentemente, a outro microestado. Caso contrário, o spin é invertido ou não de acordo com uma distribuição probabilística dada pela equação ???. Isso é feito obtendo-se um número de forma aleatória com distribuição de probabilidade uniforme no intervalo  $[0, 1]$ . Se esse número for maior do que  $P_{\text{flip}}$  (a probabilidade do sistema mudar do estado  $\alpha$  para o estado  $\alpha'$ ), o spin não é invertido. Caso contrário, o sistema também é levado ao estado  $\alpha'$ . Em seguida, é escolhido outro spin (que não havia sido escolhido previamente) aleatoriamente e o mesmo procedimento para inverter ou não o spin; e esse processo é repetido após  $N_{\text{steps}}$  passos.

Para cada passo de Monte Carlo, é possível calcular a magnetização do microestado correspondente através da equação ???. Dessa forma, ao fim de  $N_{\text{steps}}$  passos, a magnetização é calculada como a média sobre os valores de magnetização simulados:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N_{\text{steps}}} \sum_{\alpha \in \text{var}} m_{\alpha}. \quad (10)$$

A energia média ( $e$ ) é calculada de forma análoga.

A figura 2 esquematiza as configurações inicial e final de um grid com  $100 \times 100$  spins com condições periódicas de contorno sem campo magnético externo ( $h = 0$ ) à temperatura  $T = 1$ . Para este exemplo, foram realizados 2000 passos de Monte Carlo na simulação através do algoritmo de Metropolis. O sistema é iniciado com uma configuração de spins aleatória e atinge um estado final com regiões compactas de mesma magnetização.



**Figura 2:** Configurações inicial (esquerda) e final após 2000 passos de Monte Carlo (direita) de um grid com  $100 \times 100$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$ ,  $h = 0$  e  $T/k_B = 1$ .

Nas simulações deste trabalho, foi fixado o valor da constante de Boltzmann em  $k_B = 1$ .<sup>1</sup>

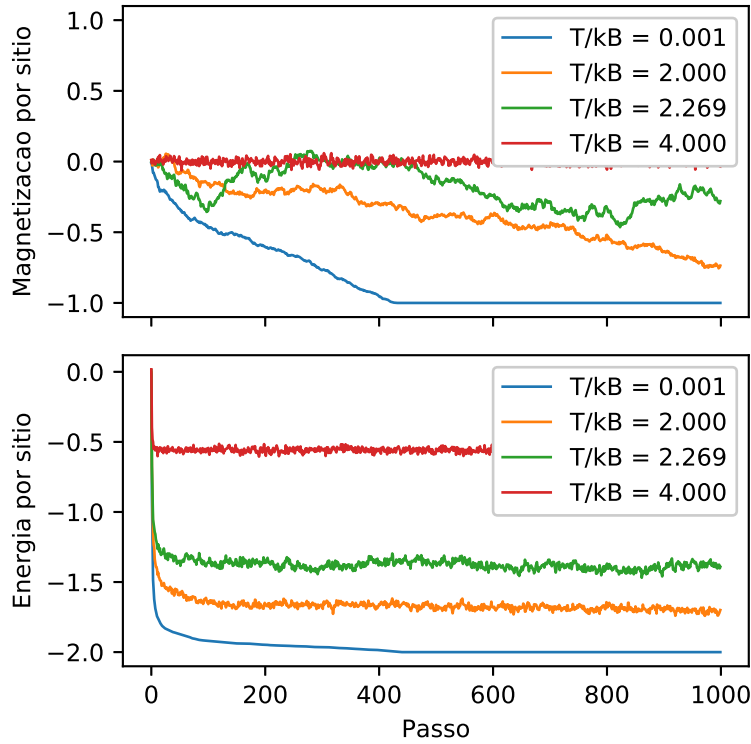
## 2.2 Resultados

A figura 3 mostra a evolução da magnetização por sítio e da energia por sítio para um grid com  $100 \times 100$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$  e  $h = 0$  a cada passo de Monte Carlo para alguns valores de temperatura próximos à temperatura 8. É possível notar que o sistema pode levar alguns passos de Monte Carlo para atingir valores estacionários de magnetização por sítio e de energia por sítio em função da temperatura, isto é, há um comportamento de transição (transiente). Para temperaturas mais baixas, o sistema atinge valores estacionários mais

---

<sup>1</sup>Uma outra forma de entender isso é pensar que a temperatura é dada em unidades de  $[T] / [k_B]$ .

rapidamente.



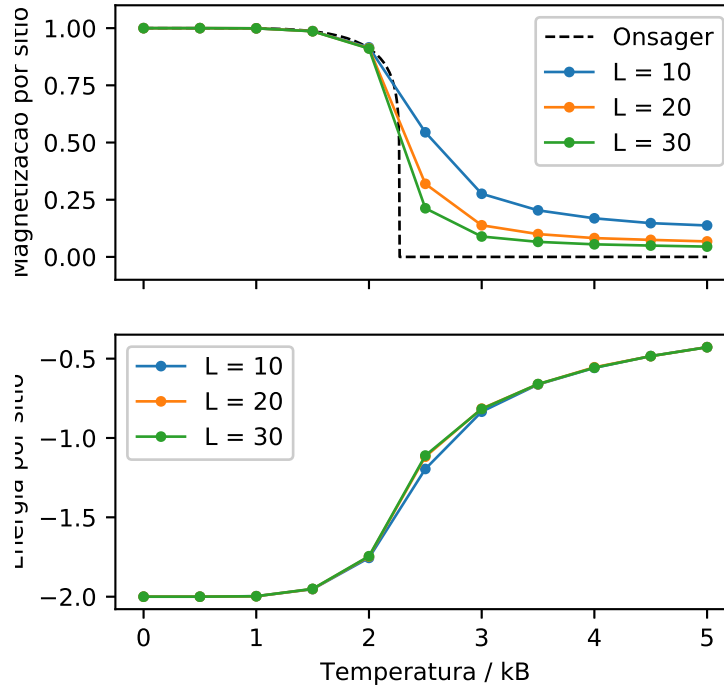
**Figura 3:** Evolução da magnetização por sítio (acima) e da energia por sítio (abaixo) de um grid com  $100 \times 100$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$  e  $h = 0$  a cada passo de Monte Carlo para alguns valores de temperatura próximos à temperatura crítica (equação 8).

A figura 4 mostra as curvas de magnetização por sítio médias e de energia por sítio médias de simulações com

### 3 Manual do usuário

Os códigos criados para obter os gráficos deste projeto estão no arquivo de notebook para o Jupyter, "GabrielFariasCaccaos\_Projeto4.ipynb". Para executá-lo, é necessária a versão 3.6.5 (ou superior) de Python e os módulos matplotlib, numpy, numba e ipywidgets (o qual é parte do IPython). [?] Além disso, é necessário que o arquivo "ising2d.py" esteja no mesmo diretório, uma vez que contém as funções criadas para as simulações e suas ilustrações.

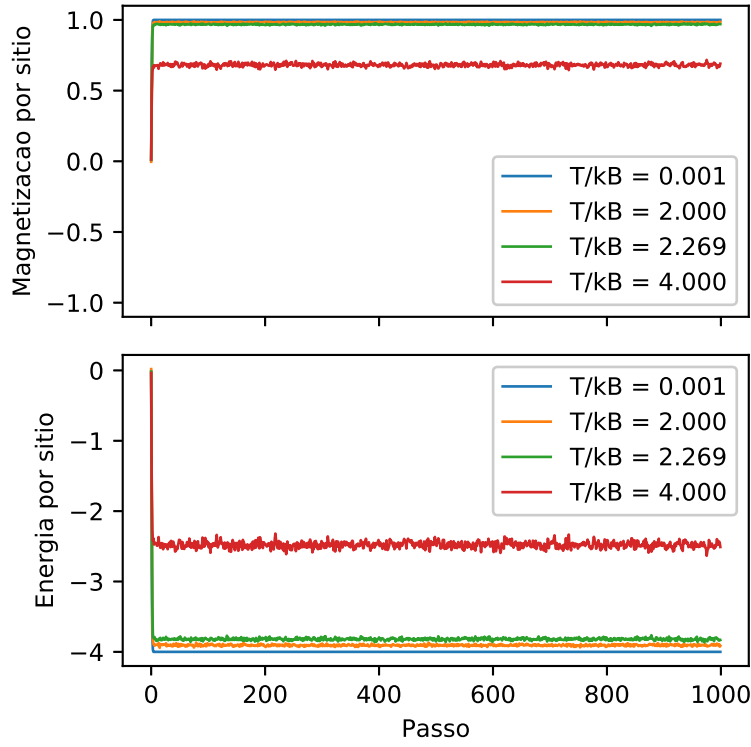
A função "ising\_step" efetua um passo na evolução de uma configuração de spins através do algoritmo de Metropolis para os valores de  $T$ ,  $J$  e  $h$  fornecidos. O passo de Monte Carlo do algoritmo de Metropolis, por sua vez, é definido na função "ising update". Para obter a solução estacionária dos valores esperados da magnetização por sítio e da energia por sítio, é necessário escrever um script, em uma nova célula do notebook, consistindo de um loop de  $N$  passos com a



**Figura 4:** Curvas de magnetização por sítio (acima) e energia por sítio (abaixo) em função da temperatura de grids com  $10 \times 10$ ,  $20 \times 20$  e  $30 \times 30$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$  e  $h = 0$ .

função “ising step” aplicada iterativamente sobre as configurações de spins. Assim, é possível investigar a evolução desses valores esperados, a cada passo de Monte Carlo, através das funções “magnetization\_per\_site” e “energy\_per\_site” respectivamente. Claramente, o número de passos necessários para atingir o estado estacionário depende da largura do grid e da temperatura para uma dada configuração inicial. Por exemplo, para uma situação de baixa temperatura, mantendo-se a largura do grid, espera-se que uma configuração uniforme atinja um estado estacionário mais rapidamente do que uma configuração inicial aleatória. Portanto, para cada configuração inicial simulada com determinados valores de  $L$ ,  $J$  e  $h$ , há um número típico de passos que fazem parte de um regime transitório e que devem ser descartados na análise das grandezas médias do sistema.

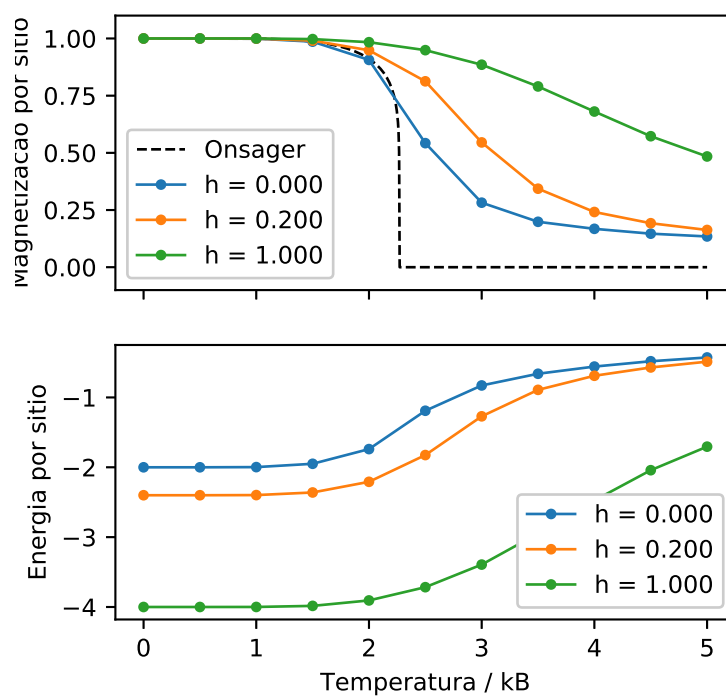
Assim, um usuário pode manipular as variáveis  $L$ ,  $J$ ,  $h$ ,  $Nsteps$  e  $T$ , além da própria configuração inicial (primeiro índice do vetor “steps”), a fim de variar os resultados das células do notebook.



**Figura 5:** Evolução da magnetização por sítio (acima) e da energia por sítio (abaixo) de um grid com  $100 \times 100$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$  e  $h = 1$ , a cada passo de Monte Carlo, para alguns valores de temperatura próximos à temperatura crítica (eq).

## 4 Conclusões

Os resultados obtidos através dos códigos desenvolvidos estão compatíveis, qualitativamente, com os resultados analíticos obtidos por Onsager. Nota-se, claramente, que há uma temperatura de transição para a magnetização por sítio no caso  $J = 1; h = 0$  e esse valor está próximo de  $T_C$ .



**Figura 6:** Curvas de magnetização por sítio (acima) e energia por sítio (abaixo) em função da temperatura de um grid com  $10 \times 10$  spins com condições periódicas de contorno e  $J = 1$  e  $h = 0, 0.2$  e  $1$ .