

# Transições de Fase no Modelo de Ising 2D

Modelação e Física Estatística



Alexandre Rodrigues (92993)

João Inácio (93039)

28 de junho de 2021

Temos como objetivos principais deste trabalho a implementação de um método Monte-Carlo com fim de estudar a transição de fase num modelo magnético, o modelo de Ising, assim como o seu comportamento crítico. Decidimos implementar o método de Wang-Landau, visto que este estima a densidade de estados conjunta e daí conseguimos tirar todas as variáveis termodinâmicas para quais quer temperaturas ao invés do método de Metropolis.

Começamos por estudar analítica e numericamente o modelo de Ising numa rede  $2 \times 2$ , de forma a validar a nossa implementação. Estudamos sistemas maiores,  $32 \times 32$ , e estimamos os expoentes críticos.

# 1 Modelo de Ising

O modelo de Ising, nomeado após Ernest Ising que o resolveu no caso de uma dimensão [1], considera uma cadeia de partículas de spin-1/2 que só podem interagir com os seus vizinhos mais próximos. Lars Onsager resolveu analiticamente o modelo a duas dimensões [2]. Este descobriu que, ao contrário de uma dimensão, há uma transição de fase de um estado ordenado a baixa temperatura para um estado desordenado a alta temperatura. Esta transição ocorre a uma temperatura crítica  $T_C$  que a duas dimensões é dada por  $T_C \sim 2.269$  [2].

Como neste modelo ocorre uma transição de fase de um estado ordenado para um estado desordenado, este modelo representa as ideias básicas de um material ferromagnético, onde a baixas temperaturas exibe uma magnetização espontânea e a altas temperaturas não exibe magnetização.

O modelo de Ising representa um sistema de partículas de spin-1/2, que podem estar a apontar para cima (+1) ou para baixo (-1), onde só há interação entre partículas vizinhas, o seu Hamiltoniano é escrito

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (1)$$

onde  $J$  é a constante de interação entre spins vizinhos,  $S_i$  o valor do spin da partícula no local  $i$  e  $H$  é um campo magnético externo aplicado. A notação  $\langle i, j \rangle$  do somatório significa que a soma é efetuada sobre os vizinhos da partícula  $i$ . Se  $J > 0$ , o sistema a temperaturas baixas comporta-se como de uma maneira ferromagnética e se  $J < 0$  comporta-se como um sistema anti-ferromagnético.

Neste trabalho, não vamos estudar o modelo de Ising com um campo magnético aplicado, por isso  $H = 0$ , e vamos considerar que a constante de interação é igual à unidade,  $J = 1$ . Assim o hamiltoniano fica

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \equiv -\frac{1}{2} \sum_{ij} S_i S_j. \quad (2)$$

## 1.1 Densidade de Estados Conjunta

A densidade de estados  $g(E)dE$  é definida como o número de microestados disponíveis ao sistema num intervalo de energia de  $E$  a  $E+dE$ . Para um sistema discreto, a densidade de estados  $g(E)$  dá-nos o número exato de microestados com energia  $E$ .

Com a densidade de estados conseguimos tirar a função partição canónica,  $Z(T)$  e a energia livre de Helmholtz,  $F(T)$ , em função da temperatura.

Como estamos a avaliar um sistema magnético, é-nos útil saber quantos micro-estados o sistema tem disponível por energias e magnetizações. Assim, usamos a densidade de estados conjunta, um histograma a duas dimensões que contém informação sobre o número de microestados com uma dada energia  $E$  e magnetização  $M$ ,  $g(E, M)$ . Com a densidade de estados conjunta, conseguimos obter a função partição canónica e a energia livre ambas em função da temperatura e magnetização do sistema.

Para um sistema Ising a duas dimensões numa rede quadrada de lado  $L = 2$ , a densidade de estados conjunta fica

**Tabela 1:** Densidade de estados conjunta para um sistema Ising 2D numa rede quadrada de lado  $L = 2$ . As colunas representam as magnetizações  $M$  e as linhas as energias  $E$  disponíveis.

$E / M$	-4	-2	0	+2	+4
-8	1	0	0	0	1
-4	0	0	0	0	0
0	0	4	4	4	0
+4	0	0	0	0	0
+8	0	0	2	0	0

## 1.2 Relações Termodinâmicas

Tendo a densidade de estados conjunta, conseguimos obter quais quer variáveis termodinâmicas num sistema em equilíbrio [3]. A probabilidade de um estado com energia  $E_i$ , é dada por

$$P_i = \frac{\sum_q g(E_i, M_q) \exp(-\beta E_i)}{Z}, \quad (3)$$

onde  $\beta$  é definido como  $\beta \equiv 1/k_B T$  e  $Z$  é a função partição canónica,

$$Z = \sum_q Z(T, M_q) = \sum_q \sum_i g(E_i, M_q) \exp(-\beta E_i). \quad (4)$$

Com isto conseguimos obter médias de ensemble,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \sum_q g(E_i, M_q) E_i \exp(-\beta E_i), \quad (5)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_q \sum_i M_q g(E_i, M_q) \exp(-\beta E_i) \equiv \frac{1}{Z} \sum_q M_q Z(T, M_q). \quad (6)$$

$\langle E \rangle$  está relacionado com a capacidade calorífica e  $\langle M \rangle$  está relacionado com a suscetibilidade magnética por

$$\langle C \rangle = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}, \quad \langle \chi \rangle = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}, \quad (7)$$

e usando a segunda lei da termodinâmica conseguimos tirar a entropia.

$$\langle S \rangle = \int \frac{\langle C \rangle}{T} dT. \quad (8)$$

Contudo há uma outra maneira de obter propriedades termodinâmicas, de uma densidade de estados conjunta. Usando a energia livre de Helmholtz, definida por

$$F(T, M) = -k_B \ln(Z(T, M)) \equiv U - TS \quad (9)$$

e o princípio de minimização de energia, conseguimos obter  $F_{min}(T) = \min(F(M, T))$ , que é definido como a menor energia livre dependente da temperatura que pode ser alcançada pelo sistema. Com isto conseguimos obter  $M_{F_{min}}$ ,  $E_{F_{min}}$  e as seguintes variáveis

$$C = -T \frac{\partial^2 F_{min}}{\partial T^2}, \quad (10)$$

$$S = -\frac{\partial F_{min}}{\partial T}. \quad (11)$$

### 1.3 Exemplo: Modelo de Ising numa rede $2 \times 2$

Na tabela 1 encontra-se a densidade de estados conjunta para um sistema Ising 2D numa rede quadrada de lado  $L = 2$ . Com isto e com as fórmulas da secção anterior vamos estudar analiticamente o caso mais simples a duas dimensões. Considerando um sistema de unidades onde  $J = 1$  e  $k_B = 1$  ( $\beta \equiv 1/T$ ), temos

$M$	$E$	$g$	$Z(T, M)$	$F(T, M)$
4	-8	1	$\exp(8/T)$	-8
2	0	4	4	$-T \ln(4)$
0	0	4	$4 + 2 \exp(-8/T)$	$-T \ln(4 + 2 \exp(-8/T))$
	8	2		
-2	0	4	4	$-T \ln(4)$
-4	-8	1	$\exp(8/T)$	-8

Para obter as quantidades termodinâmicas desejáveis, temos de calcular a função partição,

$$Z = \sum_q Z(T, M_q) = 2 \exp(8/T) + 2 \exp(-8/T) + 12 = 4 \cosh(8/T) + 12. \quad (12)$$

A energia média é

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(4 \cosh(8\beta) + 12) = -8 \frac{\sinh(8/T)}{\cosh(8/T) + 3}. \quad (13)$$

A magnetização média pode ser calculada pela fórmula apresentada na secção anterior

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} (4 \exp(8/T) + 8 - 8 - 4 \exp(8/T)) = 0, \quad (14)$$

o que era de esperar já que o sistema encontra-se em equilíbrio termodinâmico. Por outro lado, a magnetização média absoluta,

$$\langle |M| \rangle = \frac{1}{Z} (4 \exp(8/T) + 8 + 8 + 4 \exp(8/T)) = \frac{4 + 2 \exp(8/T)}{\cosh(8/T) + 3}. \quad (15)$$

Podemos ainda calcular a capacidade térmica e a suscetibilidade magnética.

$$\langle C \rangle = -\frac{1}{T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle = \frac{1}{T^2} \frac{64}{\cosh(8/T) + 3} \left( \cosh(8/T) - \frac{\sinh^2(8/T)}{\cosh(8/T) + 3} \right) \quad (16)$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{T}. \quad (17)$$

A variância da magnetização é dada por

$$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \frac{32}{Z} (\exp(8/T) + 1) - 0^2 = \frac{8(\exp(8/T) + 1)}{\cosh(8/T) + 3} \quad (18)$$

assim, a suscetibilidade magnética é

$$\langle \chi \rangle = \frac{8(\exp(8/T) + 1)}{T(\cosh(8/T) + 3)}. \quad (19)$$

Estes resultados analíticos podem ser comparados com a solução numérica.

## 2 Método de Wang-Landau

Em 2001, Fugao Wang e David P. Landau [4, 5] propuseram um novo método de Monte-Carlo, chamado método de Wang-Landau (WL). O objetivo deste método é tentar estimar a função de partição canônica

$$Z = \sum_E g(E) \exp(-\beta E), \quad (20)$$

através da estimação da densidade de estados  $g(E)$  via uma random walk, com probabilidade proporcional ao inverso da densidade de estados  $\frac{1}{g(E)}$ , que produz um histograma plano no espaço de energia. A estimativa de  $g(E)$  é melhorada a cada iteração do método. Este método pode ser usado para estimar a densidade de estados conjunta, realizando uma random walk no espaço de fases  $(E, M)$  ao invés do espaço de energias.

Primeiro começamos num ponto aleatório do espaço de fases,  $(E_i, M_i)$ , e com uma estimativa da densidade de estados, normalmente  $g(E, M) = 1$ . Começamos a random walk, efetuando um spin-flip que leva o sistema do estado  $(E_i, M_i)$  ao estado  $(E_j, M_j)$  e aceitamos esta modificação com uma probabilidade

$$P((E_i, M_i) \rightarrow (E_j, M_j)) = \min \left( 1, \frac{g(E_i, M_i)}{g(E_j, M_j)} \right). \quad (21)$$

Quer a nova configuração seja aceite ou rejeitada, estamos no ponto  $(E, M)$  do espaço de fases e atualizamos o histograma e a densidade de estados segundo,

$$H(E, M) = H(E, M) + 1, \quad g(E, M) = f \times g(E, M).$$

Aqui, o parâmetro  $f$  é chamado de fator de modificação. Uma escolha razoável para este parâmetro no início da simulação é  $f_0 = e$ . Se este é demasiado grande vai induzir erros estatísticos na nossa estimativa, caso seja demasiado pequeno a simulação vai ficar muito demorada. Este processo é repetido até obtermos um histograma "plano". Como é impossível obter um histograma 100% plano, definimos um critério para a planicidade do histograma como  $\min(H(E, M)) > \langle H(E, M) \rangle \times p$ .  $p$  é escolhido de acordo com o sistema que estamos a simular. Para sistemas pequenos,  $p$  pode ser tão grande como 0.95, contudo para sistemas maiores a condição de planicidade pode nunca ser satisfeita se  $p$  for perto da unidade.

Quando o histograma fica plano, fazemos  $H(E, M) = 0$  e reduzimos o fator de modificação  $\sqrt{f_i} \rightarrow f_{i+1}$ , de forma a obter uma melhor estimativa da densidade de estados conjunta a cada iteração da simulação. Repetimos isto até que o valor de  $f$  seja menor que um dado  $f_{final}$ , que normalmente define-se como  $f_{final} \sim 1 + 1E - 8$ .

No final da simulação temos que normalizar a densidade de estados. Para tal, podemos usar o facto de

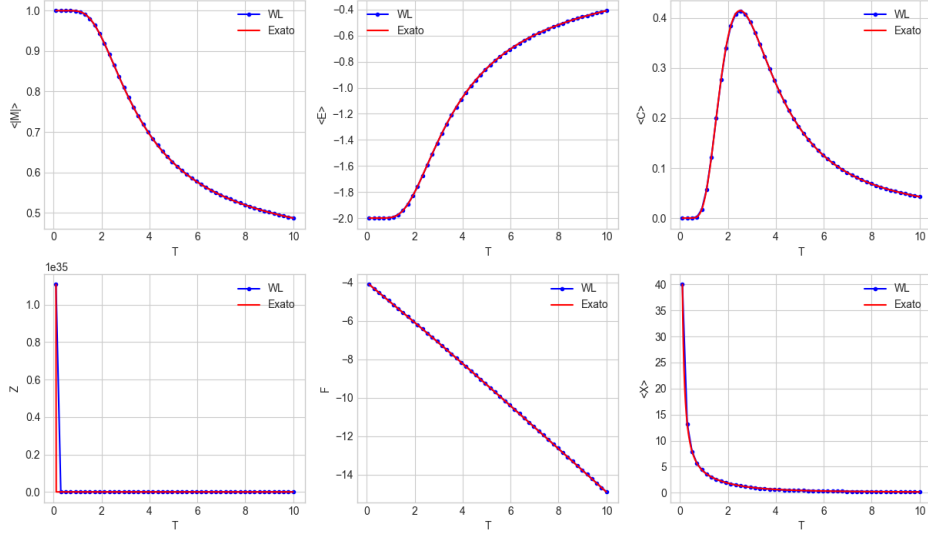
$$\sum_{E, M} g(E, M) = 2^N, \quad (22)$$

onde  $N$  é o número de partículas no sistema.

### 3 Resultados

#### 3.1 Modelo de Ising numa rede $2 \times 2$

De forma a verificar que a nossa implementação do método Wang-Landau está correta, decidimos calcular a densidade de estados conjunta de um sistema Ising  $2 \times 2$  e comparar com a solução calculada analiticamente na secção 1. Obtivemos os seguintes resultados,



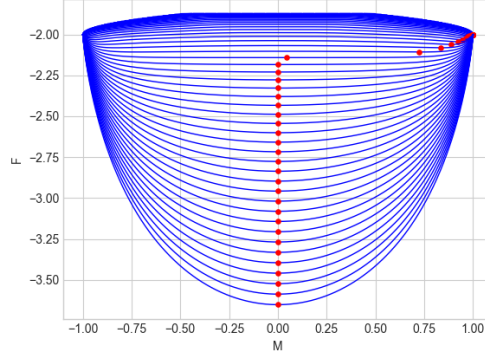
**Figura 1:** Comparação de quantidades termodinâmicas calculadas a partir da densidade de estados estimada pelo método de Wang-Landau versus a solução analítica para um sistema Ising  $2 \times 2$ .

Todas as quantidades termodinâmicas calculadas pelo método estão de acordo com os resultados analíticos, por isso damos a nossa implementação como validada.

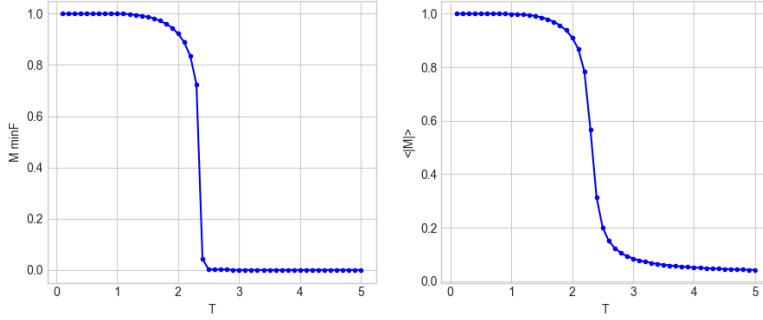
#### 3.2 Modelo de Ising numa rede $32 \times 32$

De forma a obter quantidades termodinâmicas pela minimização da energia livre temos de ter um sistema suficientemente grande para que o erro numérico no cálculo das derivadas do mínimo de energia em função da temperatura seja suficientemente pequeno tal que possa ser desprezado. Um sistema 2D  $32 \times 32$  já tem 513 valores de magnetizações possíveis, logo o erro das derivadas não vai ser significativo.

Em primeiro lugar temos de obter  $F_{min}$ , definido como  $F_{min}(T) = \min(F(M, T))$ . Para tal, calculamos a energia livre de Helmholtz em função da magnetização, pela equação 9. Obtém-se o gráfico da figura 2. Os pontos marcados a vermelho são as magnetizações que minimizam a energia para uma dada temperatura, de acordo com o princípio da minimização da energia livre. Com esses pontos conseguimos construir o gráfico da figura 3 de  $M_{F_{min}}$  em função da temperatura.



**Figura 2:** Energia livre em função da temperatura e magnetização. Cada linha representa um valor de temperatura diferente. Os pontos a vermelho indicam o par  $(F, M)$  mínimo para uma dada temperatura.



**Figura 3:** Magnetização em função da temperatura obtida de duas maneiras. No gráfico da esquerda a magnetização foi obtida pela minimização da energia livre. No gráfico da direita a magnetização é a média de ensemble.

Esperaríamos que estes gráficos fossem iguais, já que ambos representam a magnetização do sistema em função da temperatura. Isto é verdade para uma rede de tamanho infinito. Para redes finitas, a forma da curva do gráfico da esquerda é mais parecida à curva da magnetização da rede infinita. Já o gráfico da direita tem uma curva mais achatada, contudo a temperatura onde ocorre a transição de fase aproxima-se mais da temperatura da rede infinita ( $T_C(L \rightarrow \infty) \sim 2.269$ ).

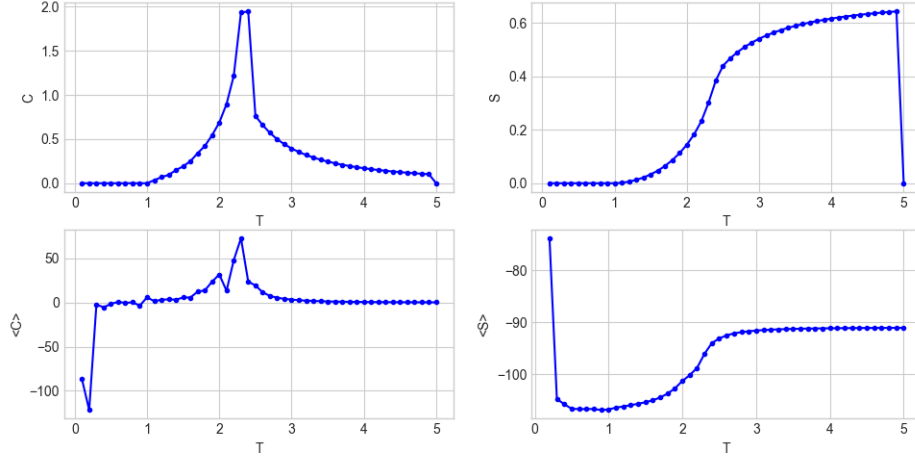
**Tabela 2:** Estimativas de  $T_C$  para redes de tamanhos 4, 8, 16 e 32.

$L$	$T_C \langle  M  \rangle$	$T_C M_{F_{min}}$
4	2.525	3.395
8	2.423	2.832
16	2.371	2.525
32	2.320	2.371

Tendo a energia livre mínima para uma dada temperatura conseguimos usar as equações 10 e 11 para calcular os valores exatos do calor específico e da entropia. Analisando o gráfico 4 conseguimos observar que, outra vez, a forma das curvas



obtidas pela minimização da energia livre aproximam a forma da curva na rede infinita, enquanto os valores obtidos pela média do ensemble têm uma temperatura de transição de fase mais próxima da temperatura da rede infinita.



**Figura 4:** Os dois gráficos de cima são a capacidade térmica e entropia calculadas pelas derivadas de  $F_{min}$ , os dois gráficos de baixo são as médias da capacidade calorifica e da entropia.

O erro a temperaturas baixas no gráfico da capacidade calorifica média na figura 4, advém do facto do cálculo da densidade de estados conjunta para o sistema  $32 \times 32$  não ser o mais preciso. Isto deve-se aos tempos de cálculo serem demasiado elevados e faltou tempo para obter resultados melhores. Como a entropia é calculada pelo integral da capacidade térmica (equação 8), os seus valores têm um erro mais acrescido.

### 3.3 Comportamento Crítico

Num sistema em que ocorre uma transição de fase de segunda ordem, o seu comportamento no limite termodinâmico pode ser descrito por uma energia livre dependente do tamanho [6], que toma a forma

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(tL^{1/\nu}), \quad (23)$$

onde  $t$  é a temperatura reduzida  $t = \frac{|T_C - T|}{T_C}$ . Pela derivação apropriada da energia livre, conseguimos obter várias variáveis termodinâmicas que têm os seus expoentes de escalonamento,

$$M = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}^o(tL^{1/\nu}), \quad (24)$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \chi^o(tL^{1/\nu}), \quad (25)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}^o(tL^{1/\nu}), \quad (26)$$

onde  $\mathcal{M}^o(tL^{1/\nu})$ ,  $\chi^o(tL^{1/\nu})$  e  $\mathcal{C}^o(tL^{1/\nu})$  são funções de escalonamento. Os expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  estão relacionados segundo  $2 - \alpha = \gamma + \beta$ . No ponto exato de

transição ( $T = T_C$ ) das propriedades termodinâmicas, as funções de escalonamento reduzem-se a uma constante de proporcionalidade, por isso obtemos

$$M \propto L^{-\beta/\nu} \quad (27)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (28)$$

$$C \propto L^{\alpha/\nu}. \quad (29)$$

Numa rede finita de tamanho  $L$ , a transição de fase ocorre a uma temperatura  $T_C(L)$ . Esta está relacionada com a temperatura crítica do sistema infinito pelo expoente crítico  $\nu$ . A relação é dada

$$T_C(L) = T_C + aL^{-1/\nu}. \quad (30)$$

De acordo com Onsager [2], a temperatura crítica do sistema infinito é  $T_C \approx 2.269$ , com  $\nu = 1$ .

O modo mais óbvio para obter os expoentes críticos é fazer uma regressão linear do logaritmo da quantidade pretendida em função do logaritmo do tamanho do sistema. Isto dá-nos uma relação linear em que o declive da reta é o expoente. Neste caso, a ordenada na origem é a constante de proporcionalidade, ou seja, as constantes de escalonamento avaliadas em  $T = T_C$ . Na determinação dos expoentes críticos assumimos  $\nu = 1$  para a temperatura crítica ser a temperatura encontrada por Onsager. Assim avaliamos as quantidades termodinâmicas em  $T = 2.269$ .

**Tabela 3:** Estimativas dos expoentes críticos do modelo de Ising.

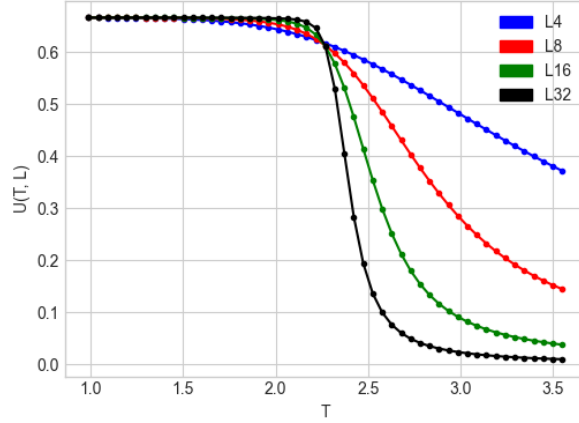
	Valor Obtido	Valor Teórico
$\alpha$	1.986	0
$\beta$	0.122	0.125
$\gamma$	1.757	1.75

Os valores de  $\beta$  e  $\gamma$  obtidos são bastante próximos do valor exato, contudo o valor de  $\alpha$  está muito longe do valor teórico. Isto deve-se ao facto de haver uma divergência logarítmica na capacidade térmica em  $T_C$ . Para obter uma boa estimativa do expoente  $\alpha$  teríamos que considerar sistemas muito grandes,  $L \gg 64$ .

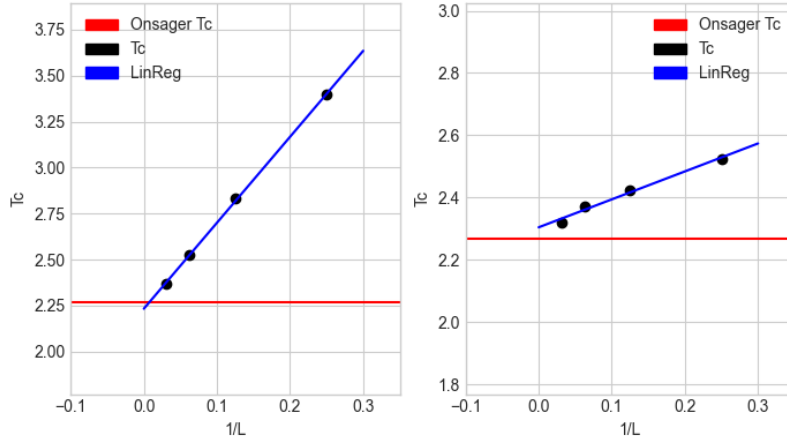
Para estimar a temperatura crítica do sistema infinito, temos duas maneiras. Podemos realizar uma regressão linear usando a equação 30 ou usar o parâmetro de Binder [6], definido por

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3\langle M^2 \rangle_L^2}. \quad (31)$$

Com isto conseguimos traçar uma curva para cada tamanho de sistema considerado. O ponto onde todas estas curvas se encontram é uma estimativa do  $T_C$  da rede infinita.



**Figura 5:** Parâmetro de Binder para vários tamanhos de rede, 32, 16, 8 e 4. A abscissa ponto onde todas as curvas se cruzam é uma estimativa da temperatura crítica da rede infinita.



**Figura 6:** Fit de uma regressão linear na equação 30. O gráfico da esquerda tem as temperaturas críticas estimadas pela  $M_{F_{min}}$  enquanto no gráfico da direita foram usadas as estimativas de  $T_C$  pela  $\langle |M| \rangle$

O valor da temperatura críticas estimado pelo parâmetro de Binder é aproximadamente 2.233, enquanto o valor estimado pela regressão linear do  $T_C$   $M_{F_{min}}$  e  $T_C$   $\langle |M| \rangle$  é 2.233 e 2.305, respetivamente. Para uma estimativa com menor erro, é preferível usar o parâmetro de Binder para estimar o  $T_C$  do sistema infinito quando se tem apenas resultados de sistemas pequenos, i.e.,  $L < 32$ . Quando se possui resultados de sistemas grandes, quer a estimação através do parâmetro de Binder quer pela regressão linear são precisas.

## 4 Conclusão

Conseguimos implementar o método de Wang-Landau com sucesso. Obtivemos resultados que nos permitissem estudar o modelo de Ising a duas dimensões, com tamanhos de rede 4, 8, 16 e 32. Como não tivemos recursos computacionais suficientes para obter resultados para redes de tamanho maior, alguns dos nossos resultados ficaram imprecisos. Isto é o caso da capacidade térmica calculada pela variância da energia e do expoente crítico  $\alpha$ , que está correlacionado com a mesma.

De resto, o trabalho correu com sucesso uma vez que conseguimos determinar os expoentes críticos e a temperatura crítica para a rede infinita com alguma exatidão.

## Referências

- [1] E. Ising, “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, no. 1, pp. 253–258, 1925.
- [2] L. Onsager, “A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition,” *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 3 and 4, pp. 117–149, 1944.
- [3] R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistical Mechanics*. 3rd ed.
- [4] F. Wang and D. P. Landau, “Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States,” *Physical Review Letters*, vol. 86, pp. 2050–2053, mar 2001.
- [5] D. P. Landau, S.-H. Tsai, and M. Exler, “A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling,” *American Journal of Physics*, vol. 72, no. 10, pp. 1294–1302, 2004.
- [6] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 2005.