

Trabalho 4 - Transições de Fase

Modelação de Sistemas Complexos

Universidade de Aveiro

João Maria Machado, 89132

12 de junho de 2022

1 Introdução

Neste relatório serão estudadas transições de fase. De um modo geral uma transição de fase poderá ser definida como o ponto crítico (matematicamente uma singularidade) onde a simetria do comportamento de um determinado sistema é interrompida. Neste caso o modelo a estudar, que por sua vez explicará as transições de fase será o modelo de Ising para o alinhamento de *spins*. Com base neste modelo é possível estudar propriedades ferromagnéticas de determinados materiais.

No presente relatório serão discutidos e resolvidos os problemas propostos no enunciado fornecido. Para cada problema será exposto o respetivo método de resolução seguido de um breve comentário acerca do enquadramento dos resultados obtidos nos resultados esperados.

2 Modelo de Ising num Anel

Neste problema foi estudado o comportamento de uma transição de fase, em função da temperatura, quando se considera um anel de *spins*, num estado inicial qualquer.

Antes de proceder à exposição do método utilizado e soluções obtidas importa realizar um breve discussão acerca do modelo de Ising.

O modelo de *Ising*, como referido anteriormente, é utilizado para resolver um modelo magnético, neste modelo cada partícula é representado pelo valor do seu *spin* como é ilustrado pela seguinte equação:

$$\sigma_n = \begin{cases} +1, \text{ spin up} \\ -1, \text{ spin down} \end{cases} \quad (1)$$

No problema a estudar serão apenas consideradas interações de primeiros vizinhos. No entanto, para que tal seja possível não se pode considerar um *lattice* linear de N *spins* como aquele da figura 1

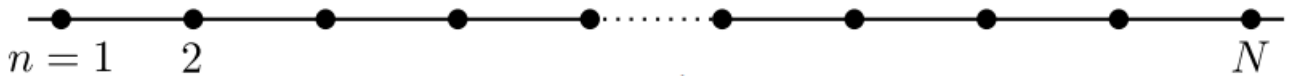


Figura 1: Lattice unidimensional (cadeia) de spins com índices $n = 1, \dots, N$.

Como é evidente pela análise da figura o 1º e o enésimo não podem garantir a condição de interação de primeiros vizinhos, visto que, cada um, só tem um vizinho respetivamente, para tal emprega-se uma aproximação simples e considera-se um *lattice* com forma de anel, desse modo garantimos que o primeiro *spin* terá interação com o segundo *spin* e o enésimo *spin*, analogamente, o último *spin* terá também duas interações com o penúltimo e o primeiro *spin*. Esta aproximação encontra-se ilustrada na figura 2.

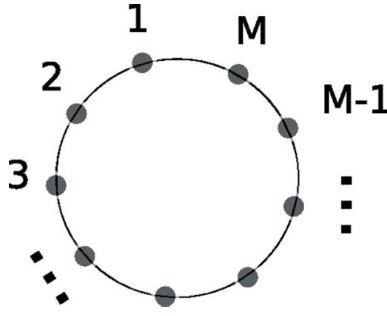


Figura 2: Laticce unidimensional (anel) de spins com índices $n = 1, \dots, M$.

Tendo analisado a geometria do problema resta conceber uma forma de computar a energia associada à interação de primeiros vizinhos. A seguinte equação representa a energia associada à interação de primeiros vizinhos no modelo.

$$E = -J\sigma_n\sigma_{n+1} = \begin{cases} -J, \sigma_n = \sigma_{n+1} \\ J, \sigma_n = -\sigma_{n+1} \end{cases}, \quad (2)$$

onde J representa uma constante de acoplamento. A energia total do anel é dada por:

$$E = -J \sum_{n=1}^N \sigma_n \sigma_{n+1} \quad (3)$$

Finalmente, para cumprir o objetivo proposto, resta computar a magnetização por *spin* e a magnetização média do sistema. Estas grandezas encontram-se representadas nas seguintes equações:

$$m^{(a)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sigma_n^{(a)} \quad (4)$$

$$\langle m \rangle = \frac{1}{t} \sum_{a=1}^t m^{(a)} \quad (5)$$

Através da observação das equações 4 e 5 é evidente, que, para finalizar o trabalho é necessário integrar o sistema concebido. Para tal efeito recorre-se ao algoritmo de Metropolis. Este algoritmo pode ser resumido pelos seguintes passos

1. Gerar o conjunto de microestados iniciais. Gerar aleatoriamente *spins* com valores $+1$ ou -1 .
2. Escolher um spin qualquer e inverter o seu valor, por exemplo, $\sigma_n^{(new)} = -\sigma_n^{(old)}$
3. Para um dado valor de temperatura T e campo magnético H calcular a variação de energia no sistema imposto no passo anterior.
$$\Delta E_n = E_n(\sigma_n^{(new)}) - E_n(\sigma_n^{(old)}) \quad (6)$$
4. Se ΔE_n for menor ou igual a 0, aceita-se o novo microestado ($\sigma_n = \sigma_n^{(new)}$) e procede-se ao passo 8 do algoritmo.
5. Se ΔE_n for maior que 0, calcula-se a grandeza $w = e^{-\Delta E_n/T}$
6. Gera-se um número aleatório r no intervalo unitário $[0, 1]$
7. Se $r < w$, aceita-se o novo microestado ($\sigma_n = \sigma_n^{(new)}$), caso contrário, mantém-se o sistema no microestado anterior ($\sigma_n = \sigma_n^{(old)}$). A quantidade w corresponde à probabilidade de aceitação de um novo microestado com energia superior ao anterior.
8. Determinar o valor da quantidade física, neste caso será a magnetização por *spin*.
9. Repetem-se os passos 2 e 8 um número significativo de vezes de modo a obter um número significativo de microestados
10. Periodicamente (na solução elaborada, uma vez em cada 100 passos) computa-se a média da magnetização ao longo dos microestados processados. Desprezando os 100 primeiros visto que nestes estados o sistema está longe de atingir equilíbrio.

Tendo exposto, teoricamente, o programa elaborado importa mostrar a sua implementação na prática. A figura 3 contém o trecho de código responsável por garantir que a estrutura de dados sobre a qual codificou o sistema corresponde, na prática, a um anel.

```
%Garantir o anel|
if p_centro > 1 && p_centro < N
    p_previous = p_centro - 1;
    p_next = p_centro + 1;
elseif p_centro == 1
    p_previous = N;
    p_next = p_centro + 1;
else
    p_previous = p_centro - 1;
    p_next = 1;
end
```

Figura 3: Trecho de código responsável por garantir a implementação do anel.

Em seguida implementou-se o algoritmo de Metropolis conforme descrito no algoritmo. O trecho de código da imagem 4 contém a implementação do algoritmo de Metropolis.

```
%%Virar S
E = -J*Spin*(SpinLeft + SpinRight) - H*Spin;
E_new = -J*(-Spin)*(SpinLeft + SpinRight) - H*(-Spin);
dE = E_new - E;

if dE <= 0
    S(p_centro) = -S(p_centro);
else
    beta = 1/Temp(k);
    w = exp(-beta*dE);
    r = rand(1);
    if r <= w
        S(p_centro) = -S(p_centro);
    end
end

M(i) = (1/N)*sum(S);
end

% Magnetização média
l=1;
for i = 100:100:m-100 %Escolher indices pretendidos
    M100(k,l) = (1/i)*sum(M(1:i+99));
    l = l + 1;
end
```

Figura 4: Implementação do Algoritmo de Metropolis

Antes de proceder à apresentação dos resultados resta definir aquilo que se entende por valores esperados. A expressão teórica da magnetização média é dada pela seguinte equação:

$$\langle m \rangle(H, T) = \frac{\sinh(H/T)}{\sqrt{\sinh^2(H/T) + e^{-4J/T}}} \quad (7)$$

Tendo descrita toda a metodologia utilizada resta agora apresentar os resultados obtidos. A figura 5 contém o gráfico com os valores da magnetização média ($\langle m \rangle$) em função da temperatura (T).

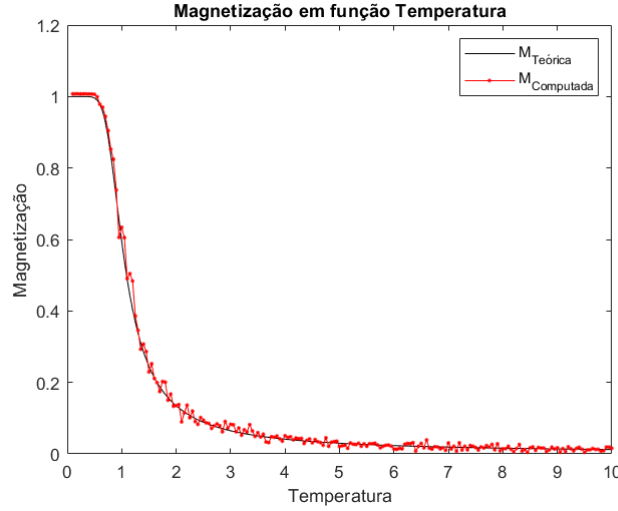


Figura 5: Magnetização média em função da Temperatura

Como se pode verificar, apesar de alguma variância, há uma convergência dos valores computados para os valores teóricos. Também é possível observar que no ponto em que $T = 1$ se verifica a temperatura crítica do sistema, isto é a temperatura onde ocorre uma mudança significativa no comportamento propriedades ferromagnéticas do sistema.

3 Modelo de Ising com Interações de Todos-Para-Todos

Neste problema foi proposto resolver o modelo de Ising, mas desta vez, em vez de apenas considerar interações de primeiros vizinhos, considera-se que um *spin* pode interagir com qualquer outro *spin* do *lattice*.

Apesar de o sistema ser o mesmo, torna-se necessário redefinir as funções previamente explicitadas de modo a englobar as interações de todos-para-todos. Desse modo, as próximas equações correspondem às grandezas da energia do modelo e energia associada ao *spin* respetivamente.

$$E = -\frac{J}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{n'=n+1}^N \sigma_n \sigma_{n'} - H \sum_{n=1}^N \sigma_n, \quad (8)$$

$$E_n(n) = -\frac{J}{N} \sigma_n \sum_{n' \neq n} \sigma_{n'} - H \sigma_n. \quad (9)$$

Importa mencionar que as grandezas da magnetização por *spin* e magnetização média do modelo permanecem iguais àquelas descritas pelas equações 4 e 5. Nesta etapa foi também proposto que se fizesse uma análise da suscetibilidade magnética (χ) em função da temperatura. A seguinte equação contém a definição da suscetibilidade magnética média em função da magnetização por *spin* e magnetização média do modelo.

$$\chi = \frac{N}{T} \left[\frac{1}{t} \sum_{a=1}^t (m^{(a)})^2 - \langle m \rangle^2 \right] \quad (10)$$

Antes de proceder à exposição do método utilizado e dos resultados obtidos importa definir os valores teóricos esperados de $\langle m \rangle$ e χ . Estes encontram-se definidos nas seguintes equações respetivamente:

$$\langle m \rangle = \tanh(J\langle m \rangle/T + H/T) \quad (11)$$

$$\chi = \frac{1}{T \cosh^2\left(\frac{J\langle m \rangle}{T} + H/T\right) - J/T} \quad (12)$$

Para integrar o sistema recorreu-se, novamente, ao algoritmo de Metropolis, no entanto, importa mencionar que qualquer energia será calculada segundo as equações 8 e 8 dependendo da passo a cumprir do algoritmo. A figura 6 contém parte do trecho do código produzido responsável por implementar o algoritmo de Metropolis.

```

for j = 1:num_mstate
    estado = randi(N); % Choose random spin

    E = getEnergyLR(sigma, estado, H(h), J, N);

    sigma(estado) = -sigma(estado); % Flip spin

    E_new = getEnergyLR(sigma, estado, H(h), J, N);

    %Algoritmo de Metropolis
    dE = E_new - E;

    if dE > 0
        w = exp(-dE / Temp(i));
        r = rand();
        if r >= w
            sigma(estado) = -sigma(estado);
        end
    end
end

```

Figura 6: Implementação do algoritmo de Metropolis com interações todos-para-todos. A função *getEnergy* implementa as funções definidas nas equações 8 e 9

Desse modo foi possível produzir os resultados para os parâmetros propostos. As figuras 7 e 8 contêm os gráficos da suscetibilidade magnética em função da temperatura para valores diferentes de H .

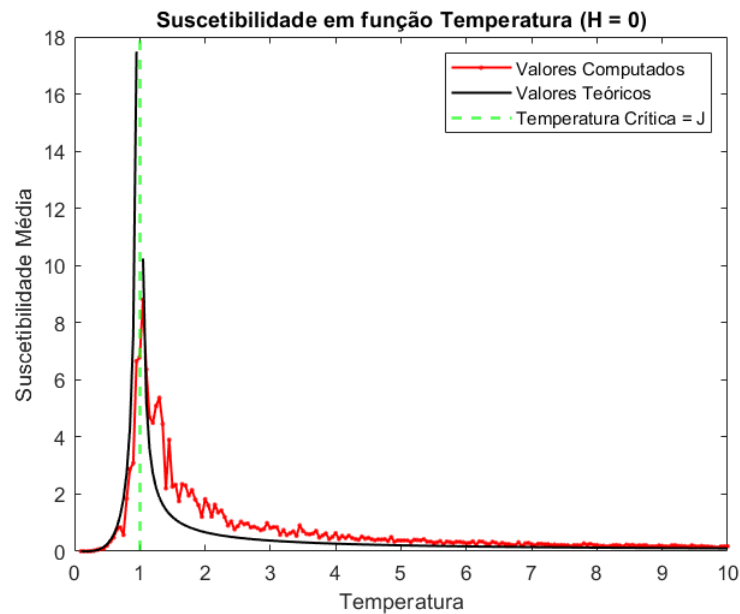


Figura 7: Suscetibilidade magnética média em função da temperatura com $H = 0$

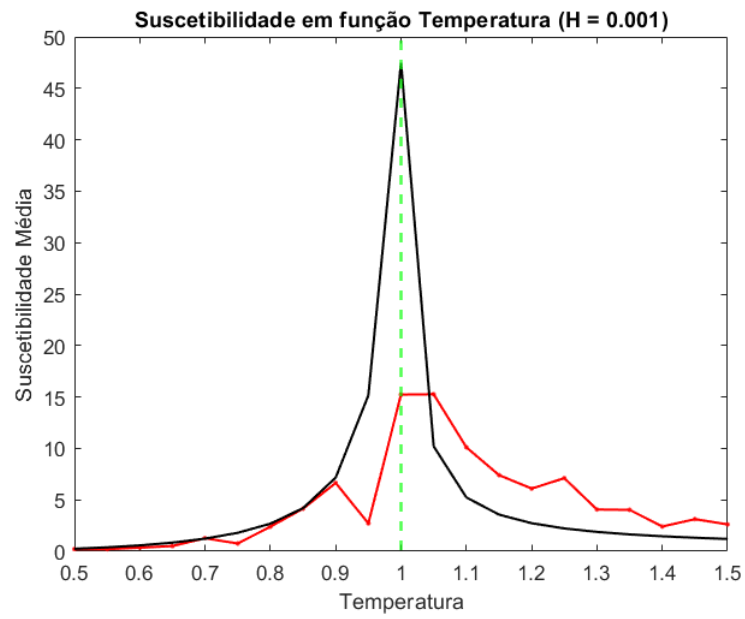


Figura 8: Suscetibilidade magnética média em função da temperatura com $H = 0.001$

As figuras 9 e 10 contêm os gráficos da magnetização em função da temperatura para valores diferentes de H .

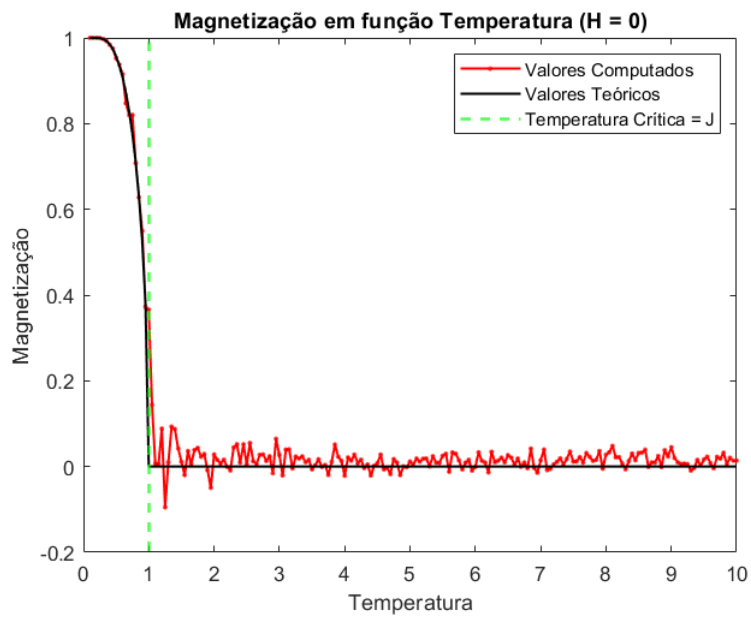


Figura 9: Magnetização média em função da temperatura com $H = 0$

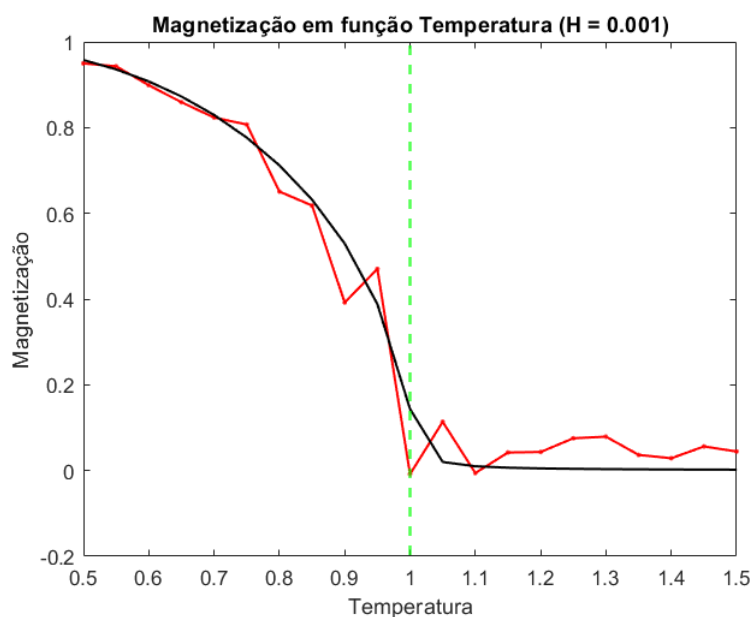


Figura 10: Magnetização média em função da temperatura com $H = 0.001$

Como se pode verificar em todas as figuras, de um modo geral, existe convergência dos valores computados para os valores teóricos esperados, no entanto, importa mencionar que perto dos valores de temperatura crítica (quando se observam os gráficos de suscetibilidade magnética) a função tende a efetuar um desvio significativos dos valores, isto deve-se ao facto de que, matematicamente, este ponto corresponde a uma singularidade, isto é o seu valor não é de natureza numérica daí o desvio dos valores na sua vizinhança. Importa também mencionar que, mais uma vez, o ponto de temperatura crítica corresponde a $T = 1$ (nas unidades não convencionais definidas no enunciado).

4 Conclusão

Neste relatório foram estudados dois sistemas de transição de fase recorrendo ao modelo de Ising. Numa primeira etapa foram apenas consideradas interações de primeiros vizinhos no modelo. Numa segunda etapa foi considerado que uma partícula interagia com as restantes partículas presentes no *lattice*. Em ambos os casos, para integrar o modelo recorreu-se ao algoritmo de Metropolis. Como se verificou, em todos os casos (apesar de uma expectável falha em torno das singularidades) convergência dos valores computados para os valores teóricos esperados, o autor considera que as simulações bem como o relatório foram elaborados com sucesso.

Uma possível maneira de melhorar a qualidade dos resultados obtidos, isto é, obter uma maior convergência com o mesmo número de números aleatórios gerados, será, por exemplo, estudar mais atentamente o gerador de números pseudo-aleatórios do *matlab* e tentar aproximar o comportamento deste a um verdadeiro gerado de números aleatórios.