

# Física Estatística Computacional - Projeto 6

Jorge Augusto Salgado Salhani

Novembro 2018

## 1 Introdução

Todos os materiais apresentam propriedades intrínsecas devido a sua estrutura. Compreender como tais propriedades funcionam tal como de onde surgem pode ter grande importância no desenvolvimento de novas tecnologias.

Quando um determinado material é exposto a um campo magnético constante, os elétrons que estão associados a um determinado átomo tendem a se alinhar ao campo e a apresentar propriedades magnéticas. Tais materiais, chamados paramagnetos, apresentam propriedades bem comportadas, uma vez que sua estrutura mantém "fixos" os elétrons a cada átomo, o que torna possível caracterizá-los como independentes, o que facilita seu estudo. [1]

Outros materiais, no entanto, não podem ser tratados como se seus componentes fossem independentes. Ferromagnetos são exemplos deste comportamento. Isto ocorre por ser observada retenção de características magnéticas mesmo na ausência de campos magnéticos aplicados sobre a amostra [2], o que nos leva a considerar que não apenas fatores externos induzem efeitos sobre a configuração dos elementos constituintes da matéria, mas que existe interações entre os mesmos que não devem ser negligenciadas.

Neste cenário surge um problema com duas (no mínimo, que aqui serão abordados) consequências: o problema diz respeito à necessidade de construção de um modelo teórico mais complexo que aquele a princípio proposto para estudo de modelos de paramagnetos, com proposição de partículas interagentes; a primeira, consequência direta, dá-se pela dificuldade de sistematizar métodos estocásticos em sua simulação, que será planeado com auxílio do método de Monte Carlo Metropolis; e a segunda deve-se à emergência, no sistema, de fenômenos críticos [3, 4].

Neste trabalho serão apresentadas as bases teóricas que formulam o modelo de Ising em sua forma mais simples (na ausência de campo magnético) assim como os fundamentos do método de Monte Carlo aplicados a este problema. Por fim um modelo computacional é apresentado como forma de estudo de características qualitativas (surgimento de domínios ou "ilhas" orientadas na mesma direção) [2] e quantitativas (variação da magnetização

e da energia de materiais em função da temperatura).

## 2 Metodologia

O modelo de Ising aqui considerado se apresenta sobre uma rede quadrada discreta  $(N, N)$ , onde a cada compartimento atribuímos um spin magnético de valor 1 ou  $-1$ , de acordo com a orientação ao longo de um eixo  $z$  arbitrário, uma vez que a orientação de cada spin indica um sentido comparativo entre os mesmos. Assim, podemos afirmar a princípio que existam  $2^{N^2}$  possíveis estados, no entanto, existem algumas configurações mais energeticamente favoráveis que outras.

Como premissa do modelo ferromagnético, supomos que cada spin é capaz de interagir fortemente a curtas distâncias com seus pares, e capaz de alterá-los de modo a minimizar a energia do sistema. Dessa forma, sua energia pode ser descrita através do *hamiltoniano* [4]

$$H_s = -\frac{J\sigma_s}{g} \sum_{i \in V} \sigma_i, \quad (1)$$

que pode ser entendido como a energia associada ao spin  $s$  referente à posição  $(x, y)$  com contribuições de cada um de seus vizinhos próximos, onde  $V = \{(x-1, y), (x+1, y), (x, y+1), (x, y-1)\}$ . O sinal negativo indica que o mínimo de energia é obtido caso todos apresentem mesmo alinhamento e a constante  $J$  está associada à *intensidade de troca*, que também deve ser normalizado pelo fator  $g$ , representando o número total de vizinhos contabilizados. Neste caso,  $g = 4$  dado a presença de 4 vizinhos próximos.

A energia total do sistema pode ser obtida pela soma simples da contribuição de cada energia  $s$ . Logo

$$H = \sum_s H_s. \quad (2)$$

Sem perda de generalidade, podemos considerar o modelo apresentado como estando em equilíbrio térmico à temperatura  $T$  com o ambiente ao seu redor. Além de ser consistente com sistemas físicos reais, tal consideração permite o tratamento do problema através do modelo estatístico canônico. Logo podemos tomar que o número de estados possíveis do sistema em uma dada temperatura  $T$  segue a forma

$$Z = \sum_j e^{-\frac{H_j}{kT}}, \quad (3)$$

onde  $k$  representa a constante de Boltzmann e  $H_j$ , a energia associada ao estado  $j$ .

Como, no entanto, os elementos que fazem parte da estrutura da matéria não estão em completo repouso e seu

grau de agitação está relacionado à temperatura do mesmo, podemos afirmar que o aumento de temperatura do sistema tende a desestabilizar a configuração de mais baixa energia. Assim para que haja inversão de um spin  $s$  e mudança para um estado com energia  $H_s$ , não apenas a contribuição de seus vizinhos deve ser considerada mas também a probabilidade da ocorrência do spin  $s$  para dada temperatura  $T$ . Neste momento apreciamos a relevância do uso do método de Monte Carlo via algoritmo de Metropolis para a avaliação da transição de estado. [3]

Como a probabilidade de ocorrência de um estado  $q$  em certa posição da rede  $(x, y)$  depende apenas da configuração  $s$  associada à mesma coordenada em um instante imediatamente anterior, este processo é considerado Markoviano. Definindo  $\mu(a \rightarrow b)$  como a probabilidade de transição para o estado  $b$  estando previamente no estado  $a$ , podemos representar a variação dos estados mencionados anteriormente como  $\mu(s \rightarrow q) \equiv \mu_{sq}$ .

Sendo  $P^{t+\Delta t}(H_s)$  probabilidade de ocorrência do estado cuja energia é  $H_s$  após um passo temporal  $\Delta t$ , temos que

$$P^{t+\Delta t}(H_s) = P^t(H_s) - P^t(H_s)\mu_{sq} + P^t(H_q)\mu_{qs}, \quad (4)$$

Caso tomamos o limite onde o tempo é contínuo e  $\Delta t \rightarrow 0$ , dividindo a equação por  $\Delta t$  podemos reescrever a equação acima na forma

$$\frac{\partial P(H_s, t)}{\partial t} = -P(H_s, t)\omega_{sq} + P(H_q, t)\omega_{qs}, \quad (5)$$

onde redefinimos a probabilidade de transição  $\mu_{sq}$  como taxa de transição de estados  $\omega(s \rightarrow q) \equiv \omega_{sq}$  tal que

$$\omega_{sq} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mu_{sq}}{\Delta t}. \quad (6)$$

A equação diferencial (5) é referida como equação mestra de processos estocásticos. No caso onde há equilíbrio térmico com o sistema, não há mudanças na variação da taxa de probabilidade do estado  $H_s$ , logo  $\partial P(H_s, t)/\partial t = 0$  e portanto

$$\bar{P}(H_s, t)\omega_{sq} = \bar{P}(H_q, t)\omega_{qs}, \quad (7)$$

que pode ser referida como princípio do balanço detalhado. Os termos  $\bar{P}$  são relacionados às mesmas probabilidades de ocorrência de estado, porém no caso em equilíbrio térmico. Tal princípio pode ser entendido pela sentença: *"a taxa de transição de estado  $s \rightarrow q$  dada a probabilidade de ocorrência de  $s$  é igual à taxa de transição  $q \rightarrow s$  dada a probabilidade de ocorrência de  $q$ ".*

Com o princípio do balanço detalhado podemos então admitir que a transição  $s \rightarrow q$  ocorre necessariamente quando  $H_q \leq H_s$  ou apresenta probabilidade de  $\exp\{-(H_q - H_s)/kT\}$  de ocorrência caso  $H_q \geq H_s$ , uma vez que

$$\frac{\omega_{sq}}{\omega_{qs}} = \frac{e^{-\frac{H_q}{kT}}}{e^{-\frac{H_s}{kT}}} = e^{-\frac{H_q - H_s}{kT}}. \quad (8)$$

Esta condição de troca entre transição obrigatória ou probabilística é necessária para que o sistema atinja um equilíbrio após um determinado tempo.

Atribuindo inicialmente a cada coordenada  $(x, y)$  um valor de spin  $+1$  ou  $-1$  de forma aleatória, para que seja atingido o equilíbrio térmico um número  $R$  de iterações é tomado. Para cada unidade de tempo  $r < R$  uma coordenada  $(a, b)$  é escolhida aleatoriamente e seu estado  $s$  é armazenado e trocado, caso satisfaça as condições da escolha do método de Metropolis. Este processo é repetido até que seja atingida uma temperatura  $T$  máxima.

A análise quantitativa pode ser feita através da medida de energia e da magnetização totais do sistema, calculadas respectivamente através da soma, sobre todas as coordenadas, dada pelas equações (1) e (2) e da soma simples de todos os estados

$$M = \sum_j \sigma_j. \quad (9)$$

Ambas as grandezas  $H$  e  $M$  devem ser normalizadas pelo número de compartimentos do sistema  $N^2$  multiplicado pelo número total de iterações temporais  $R$  até que o equilíbrio tenha sido atingido.

### 3 Resultados

Dispondo de uma matriz  $(200, 200)$  onde a cada coordenada é atribuído aleatoriamente um valor de spin  $+1$  ou  $-1$ , a evolução temporal para o sistema-modelo ferromagneto pode ser apreciado nas figuras (1) a (3). Em cada uma delas foi mantida uma temperatura  $T$  distinta para o banho térmico ao qual o sistema está sujeito.

Na figura (1) a temperatura mantida foi de  $T = 0.2$ . Para a figura (2),  $T = 0.8$  e, para a figura (3),  $T = 1.8$ . Como podemos notar, a temperatura está diretamente relacionada com a disposição ordenada das "ilhas" com dipolos magnéticos alinhados, uma vez que sua indução à desordem do sistema compete com a organização decorrente da interação entre os spins. Caso a temperatura fosse aumentada desenfreadamente, não haveriam aglomerações com spins paralelos, mas um retorno à situação inicial, onde não há domínios emparelhados.

A escolha da temperatura entre 0 e 2 como forma de comparação entre o grau de ordenação das "ilhas" não é arbitrária. Ao observarmos as figuras (4) e (5) referentes à magnetização em função da temperatura notamos

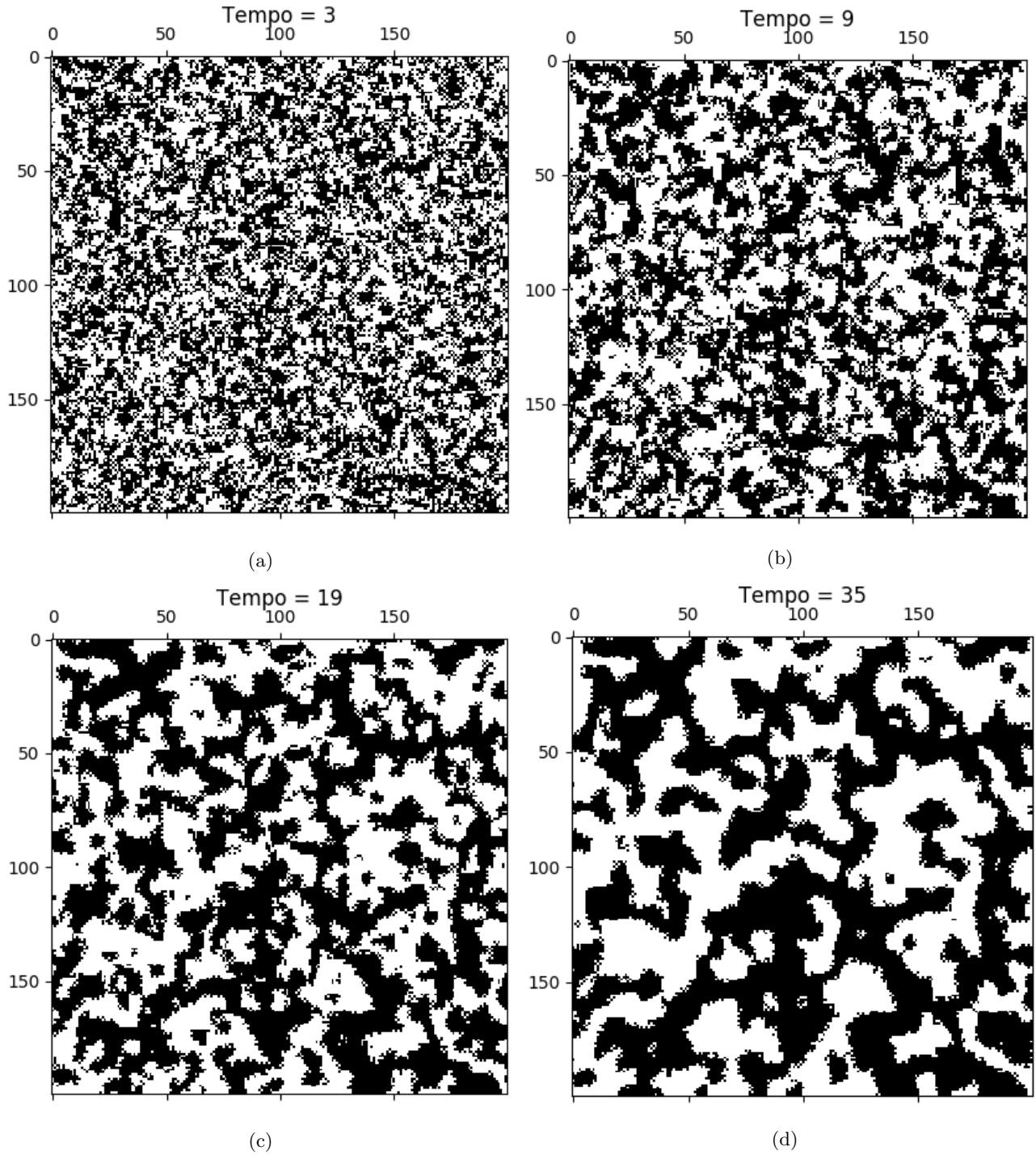


Figure 1: Evolução temporal da termalização do sistema  $(N, N)$ , com  $N = 200$ , para os tempos (a)  $t = 3$ , (b)  $t = 9$ , (c)  $t = 19$  e (d)  $t = 35$ . A temperatura  $T$  foi mantida constante e dada por  $T = 0.2$ .

a predominância de dois domínios evidentes: Para  $T < 2$  o sistema mantém sua magnetização e para  $T > 2.5$ , ela é completamente perdida. Esse fenômeno é descrito através de sua criticalidade. A temperatura crítica  $T_c$  a partir da qual existe transições descontínuas de segunda ordem (pois a descontinuidade está presente na segunda derivada dos potenciais termodinâmicos, como calor específico, ao invés de apresentar-se diretamente

na primeira derivada, como entropia [3]) aproxima-se do valor  $T_c \approx 2.25$ .

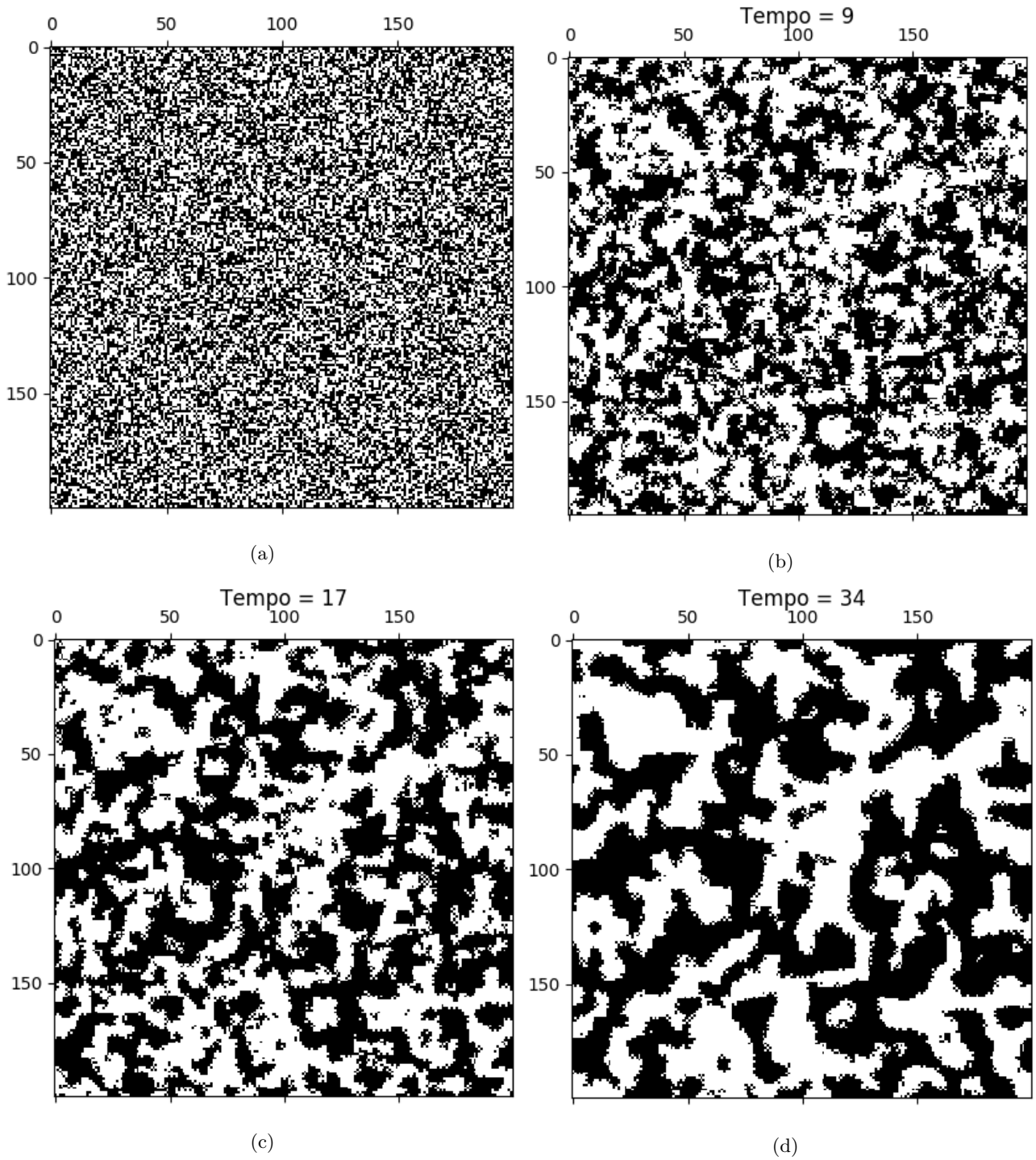


Figure 2: Evolução temporal da termalização do sistema  $(N, N)$ , com  $N = 200$ , para os tempos (a)  $t = 0$ , (b)  $t = 9$ , (c)  $t = 17$  e (d)  $t = 34$ . A temperatura  $T$  foi mantida constante e dada por  $T = 0.8$ .

Conforme pode ser visto para o modelo exato, é esperado que a temperatura neste ponto seja dada por  $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.27$  [4], o que permite afirmar a validade da simulação aqui apresentada.

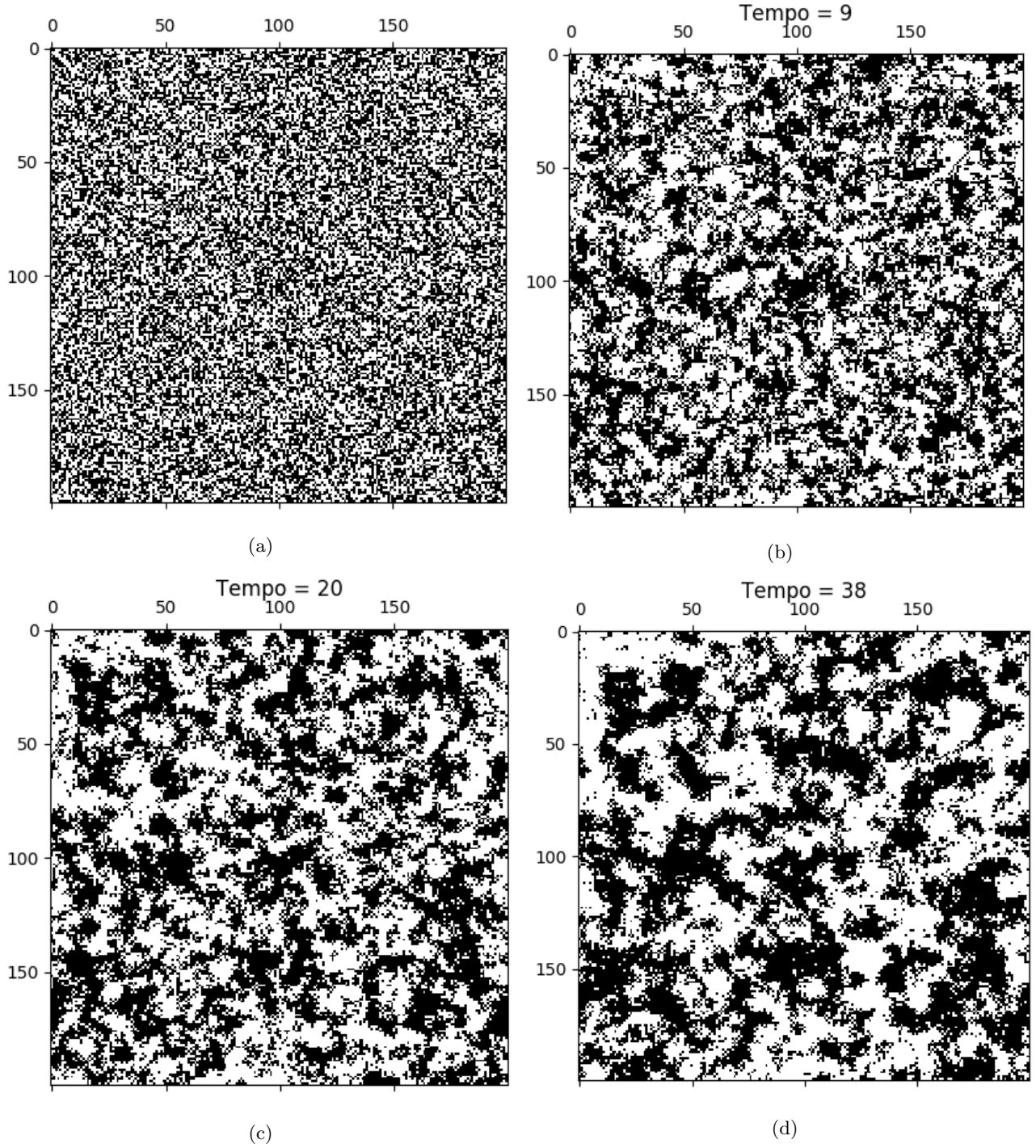
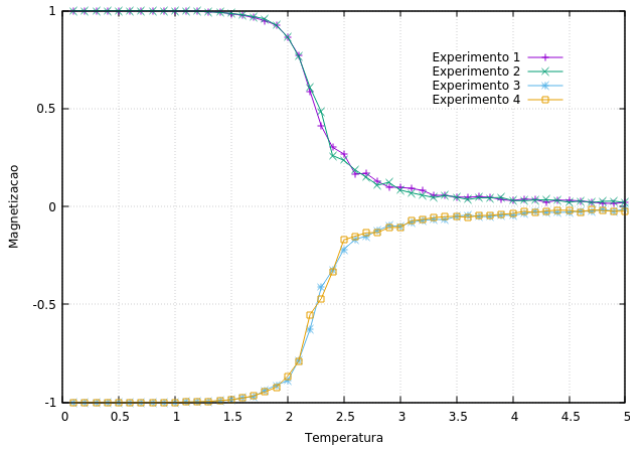
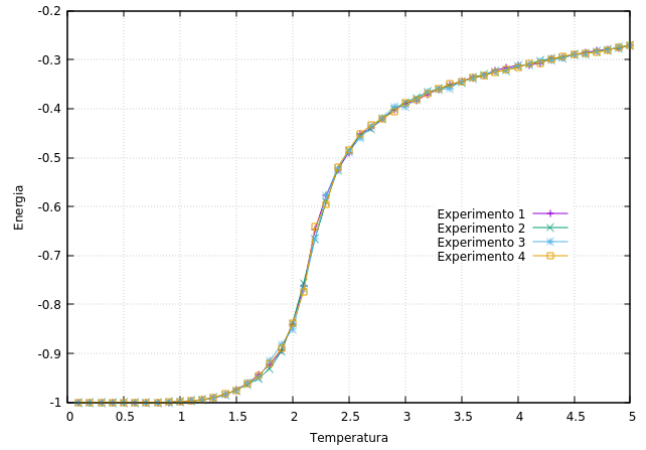


Figure 3: Evolução temporal da termalização do sistema  $(N, N)$ , com  $N = 200$ , para os tempos (a)  $t = 0$ , (b)  $t = 9$ , (c)  $t = 20$  e (d)  $t = 38$ . A temperatura  $T$  foi mantida constante e dada por  $T = 1.8$ .

Outro ponto interessante que é evidenciado quando comparamos as figuras (4) a (6) refere-se à invariância da energia, devido à simetria de spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  que minimizam a energia ser independente de sua orientação, desde que tenham a mesma orientação quando próximos, e à região permitida da magnetização, limitada pelas curvas que descrevem condições iniciais completamente alinhadas ( $-1$  ou  $+1$ , mostrado na figura (4a)).

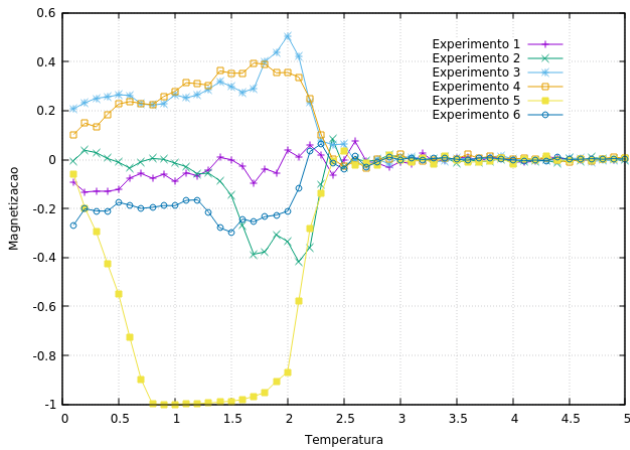


(a)

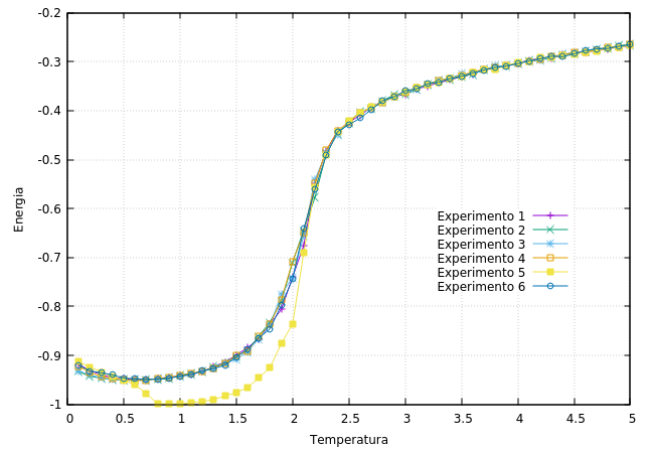


(b)

Figure 4: Variação da magnetização (a) e da energia (b) conforme a temperatura é incrementada sobre matriz  $(N, N)$  com  $N = 50$ . Nos experimentos rotulados 1 e 2 todo o sistema foi inicializado com spin  $+1$  enquanto para 3 e 4, com spin  $-1$ .



(a)



(b)

Figure 5: Variação da magnetização (a) e da energia (b) conforme a temperatura é aumentada. Em todos os experimentos as condições iniciais para a configuração dos spins sobre a matriz  $(N, N)$  com  $N = 50$  foram aleatórias. Cada experimento foi inicializado e mantido ao longo de toda variação de temperatura.

## 4 Conclusão

Podemos concluir, através dos resultados aqui apresentados, que o modelo de Ising apresenta grande aproximação em descrições qualitativas e quantitativas de materiais ferromagnéticos. Apesar de maior complexidade teórica quando comparado ao modelo de paramagnetos ideais, ao utilizar do método de Monte Carlo Metropolis para descrever a dinâmica partindo de situações de equilíbrio térmico, é possível descrever fenômenos de criticalidade e estudá-los de forma precisa.



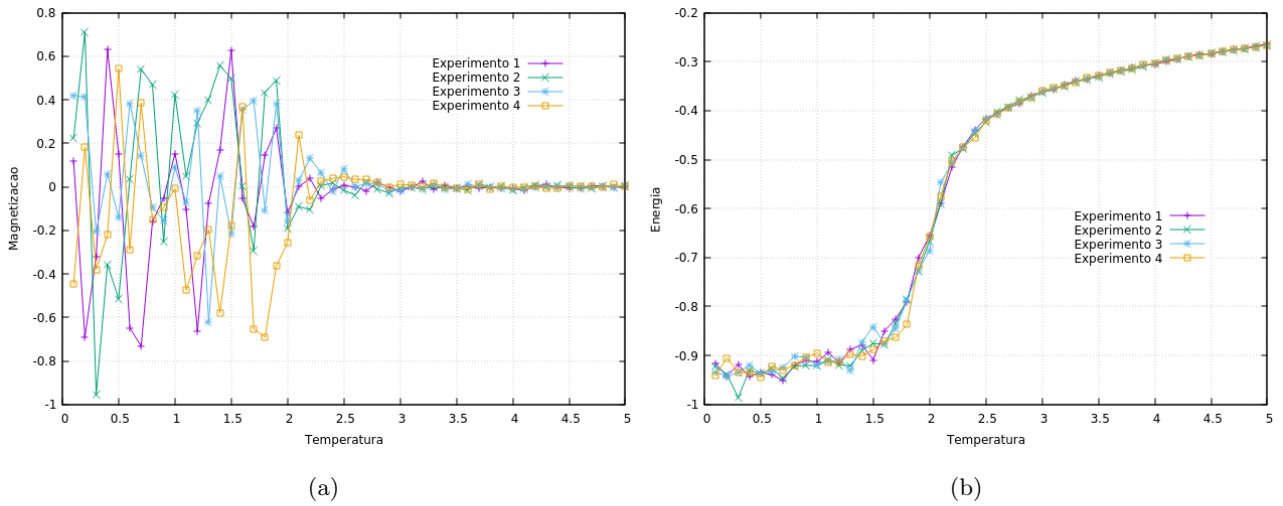


Figure 6: Variação da magnetização (a) e da energia (b) conforme a temperatura é aumentada. Em todos os experimentos as condições iniciais para a configuração dos spins sobre a matriz  $(N, N)$  com  $N = 50$  foram aleatórias. A cada temperatura considerada uma nova condição inicial aleatória foi estabelecida.

## 5 Bibliografia

- [1] - Salinas, S. R. A. Introdução à Física Estatística. *EdUsp*, Ed. 2, pp. 124-126, 2008.
- [2] - Griffiths, D. J. Eletrodinâmica. *Pearson*, Ed. 3, pp. 177, 192-194.
- [3] - Santos, M. L. Simulação de Monte Carlo no Modelo de Ising na Rede Quadrada. Tese (Mestrado em Física: Mecânica Estatística) - UFMG. Minas Gerais, 2014.
- [4] - Giordano, N. J. Computational Physics. *Prentice Hall*, pp. 204-207, 218, 1997.

## 6 Código

Em sequência é apresentado o código da simulação do modelo de Ising cujos resultados foram vislumbrados ao longo deste trabalho. Existem dois blocos principais do código: o primeiro é relativo à coleta de dados para a construção gráfica da magnetização e da energia pela temperatura; e o segundo, relativo à animação da evolução temporal do sistema ao equilíbrio, dada uma temperatura de banho térmico fixa.

---

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation

N = 50

arq = open('energIsingRan3.dat', 'w')
arq2 = open('magIsingRan3.dat', 'w')
```

```

Tequil = 100
temp = 0.1
T = 5

#Secao de coleta de dados para graficos
while temp < T:
    M1 = 2 * np.random.randint(2, size=(N, N)) - 1
    #M1 = -1*np.ones((N,N))
    t = 0
    while t < Tequil:
        M2 = M1.copy()
        l=0
        while l<N:
            k=0
            while k<N:

                w = int(np.random.random()*N)
                z = int(np.random.random()*N)
                choose0 = M1[w,z]
                neighs0 = [M1[w, (z-1)%N], M1[w, (z+1)%N], M1[(w-1)%N, z], M1[(w+1)%N, z]]
                en0 = 2 * choose0 * sum(neighs0)

                if en0 < 0:
                    choose0 *= -1

                elif np.random.random() < np.exp(-en0/temp):
                    choose0 *= -1

                M2[w,z] = choose0

                k+=1
            l+=1
        M1 = M2
        t+=1

    energTot = 0
    magTot = 0
    t = 0
    while t < Tequil:
        M2 = M1.copy()
        i=0
        while i<N:

```

```

j=0
while j<N:

    x = int(np.random.random()*N)
    y = int(np.random.random()*N)
    choose = M1[x,y]
    neighs = [M1[x, (y-1)%N], M1[x, (y+1)%N], M1[(x-1)%N, y], M1[(x+1)%N, y]]
    en = 2 * choose * sum(neighs)

    if en < 0:
        choose *= -1

    elif np.random.random() < np.exp(-en/temp):
        choose *= -1

    M2[x,y] = choose
    energTot -= choose * sum(neighs) / 4

    j+=1
    i+=1
    M1 = M2
    magTot += np.sum(M1)
    t+=1

    arq.writelines([str(temp), '\t', str(energTot / (Tequil*(N**2))), '\n'])
    arq2.writelines([str(temp), '\t', str(magTot / (Tequil*(N**2))), '\n'])
    print(temp)

    temp+=0.1

""" #Secao de animacao
M1 = 2 * np.random.randint(2, size=(N, N)) - 1
t=0
def update(data):
    global M1,t
    M2 = M1.copy()
    i=0
    temp = 1.8
    while i<N:
        j=0

```

```

while j<N:

    x = int(np.random.random()*N)
    y = int(np.random.random()*N)
    choose = M1[x,y]
    neighs = [M1[x, (y-1)%N], M1[x, (y+1)%N], M1[(x-1)%N, y], M1[(x+1)%N, y]]
    en = 2 * choose * sum(neighs)

    if en < 0:
        choose *= -1

    elif np.random.random() < np.exp(-en/temp):
        choose *= -1

    M2[x,y] = choose

    j+=1
i+=1

plt.title('Tempo = %s' %(t))
t+=1
mat.set_data(M2)
M1 = M2
return [mat]

fig, ax = plt.subplots()
mat = ax.matshow(M1, cmap=plt.cm.Greys)
ani = animation.FuncAnimation(fig, update, frames=100, repeat=False, interval=500)
plt.show()
"""

```

---