

# Métodos computacionais em física

## Projeto2-Relatório

Pedro Mariano Marques Mendes, 9865398

Maio 2020

## 1 Introdução

Este projeto tem como objetivo simular computacionalmente uma rede de spins bidimensional. Para isso foi utilizado o Modelo de Ising 2D, descrito na seção 1.1, para implementar o modelo foi utilizado o algoritmo de Monte Carlo - Metropolis descrito na seção 2.1.

A partir desse simulação é possível analisar o comportamento do sistema a diferentes valores de temperatura e campo magnético, com isso extrair dados importantes de sistemas magnéticos, como a temperatura crítica  $T_c$  onde ocorre a transição de fase abrupta, de uma fase ferromagnética, onde havia uma magnetização espontânea, para uma fase paramagnética onde não há magnetização devido a "desordem" causada pelo aumento da temperatura [1].

Temos como resultado teórico a solução de Onsager realizada em 1944 que se trata de uma solução analítica para o modelo de Ising em duas dimensões.

### 1.1 Modelo de Ising 2D

O modelo de Ising 2D simula um sítio de spins como um grid bidimensional onde cada ponto desse grid contém um spin. Cada spin só interage com o seu vizinho direto. Esse arranjo possui ainda condições periódicas de contorno, ou seja, o primeiro spin é vizinho do último, cada extremidade se liga com a outra. O spin é representado por  $\sigma$  que pode ser  $\pm 1$  (spin up, para cima, ou spin down, para baixo).

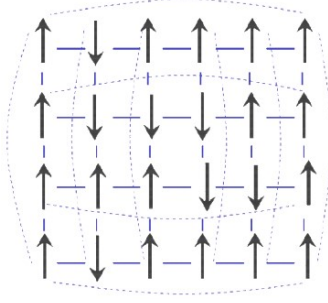


Figure 1: Sítio de spins segundo o modelo de Ising bidimensional.

As linhas azuis sólidas representam as interações entre vizinhos e as linhas pontilhadas as condições periódicas de contorno. O modelo admite também a variação do sistema de acordo com a temperatura e o campo magnético. Nesse modelo a energia total do sistema a uma dada configuração é dada pela soma:

$$E = -J \sum_{\{i,j\}} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

Onde  $J$  é a unidade de energia e  $h$  o campo magnético aplicado no sistema.  $i$  representa um spin e  $j$  os vizinhos diretos a esse  $i$ , o que equivale a dizer que  $|i - j| = 1$ . Essa soma é sobre todas as "ligações" entre spins, e desse modo uma mesma ligação não deve ser contada duas vezes ( $\sigma_1 \sigma_2 = \sigma_2 \sigma_1$ ).

No Modelo de Ising a magnetização média por sítio de uma dada configuração de  $N$  spins é dada por:

$$m(T, h) = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (2)$$

Foi estudada também a Calor específico do sistema, essa é dada por [1]:

$$C(T, h) = \frac{(\Delta E)^2}{k_b T^2} \quad (3)$$

Onde  $(\Delta E)^2$  é a variância da energia.

Segundo a solução de Onsager a condição para se determinar essa temperatura crítica na qual ocorre a transição de fase é [2]:

$$2 \tanh^2(2\beta J) = 1 \quad (4)$$

O que leva a:

$$k_b T_c \approx 2.269185 J \quad (5)$$

Na região onde  $T \approx T_c$  podemos aproximar a magnetização e a Calor específico por [1]:

$$m(T, h) = (T - T_c)^\beta \quad (6)$$

$$C(T, h) = \frac{1}{|T - T_c|^\alpha} \quad (7)$$

Os expoentes que aparecem nas equações 6 e 7 são chamados de expoentes críticos, e podem ser calculados pela solução de Onsager. Tem como valor esperado  $\alpha = 0$  e  $\beta = \frac{1}{8}$  [2].

## 2 Descrição da simulação numérica e resultados obtidos

A maneira de implementar o Modelo de Ising computacionalmente foi o método de Monte Carlo - Metropolis [1] [2].

### 2.1 Monte Carlo - Algoritmo de Metropolis

Com esse método é possível calcular a orientação dos spins numa dada configuração de campo magnético e temperatura. Dada uma configuração de spins com energia  $E_0$  e uma segunda configuração, na qual flipamos o spin  $\sigma_i$ , com energia  $E_1$  chamamos de  $E_{flip}$  a diferença entre elas:

$$E_{flip} = E_1 - E_0 \quad (8)$$

Devido ao modelo, a mudança na energia por essa mudança na orientação de  $\sigma_i$ , é determinada apenas por  $\sigma_i$  e seus vizinhos, de acordo com a equação 1. Fazendo para uma dimensão ignorando os termos que não envolvem  $\sigma_i$  (pois eles não se alteram quando se flipa  $\sigma_i$ ):

$$E_0 = -J(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1}) - h(\sigma_i) \quad (9)$$

após fliparmos  $\sigma_i$ :

$$E_1 = -J(-\sigma_{i-1}\sigma_i - \sigma_i\sigma_{i+1}) - h(-\sigma_i) \quad (10)$$

e portanto:

$$E_{flip} = J(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1}) + 2h(\sigma_i + \sigma_i) \quad (11)$$

simplificando:

$$E_{flip} = 2(J(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1}) + h\sigma_i) \quad (12)$$

Devido a simetria entre as direções horizontal e vertical podemos generalizar esse resultado para duas dimensões:

$$E_{flip} = 2J(\sigma_i\sigma_{\uparrow} + \sigma_i\sigma_{\downarrow} + \sigma_i\sigma_{\leftarrow} + \sigma_i\sigma_{\rightarrow}) + 2h\sigma_i \quad (13)$$

Onde  $\sigma_{\uparrow}$  representam os vizinhos nas respectivas direções das setas. É importante lembrar das condições periódicas de contorno, tais que todos os spins possuem quatro vizinhos, mesmos os que estão na borda do grid.

As configurações com menor energia são privilegiadas e portanto a probabilidade do sistema ir da primeira para a segunda configuração é dada por:

$$P_{flip} = \exp(-\beta E_{flip}) \quad (14)$$

Onde  $\beta$  é igual ao inverso da constante de Boltzmann vezes a temperatura  $(k_b T)^{-1}$ . Por se tratar de uma solução numérica que apresenta problemas para números muito pequenos foi utilizado  $k_b = 1$ . Para determinarmos a configuração da cadeia a uma certa condição de temperatura e campo magnético fazemos  $N_{var}$  varreduras na cadeia até que a magnetização daquela configuração já esteja mais ou menos estabilizada. Mais ou menos pois, por se tratar de um processo envolvendo probabilidades a magnetização pode variar levemente dentro de uma mesma configuração de  $T$  e  $h$ . Uma varredura é definida como o processo de calcular a orientação de cada spin do grid uma vez.

A cada varredura é calculada a magnetização média por sítio dessa configuração,  $m_{\alpha}$ , usando a equação 2 e a energia média por sítio,  $E_{\alpha}$ , usando a equação 1 dividida pelo número de spins. Terminadas as  $N_{var}$  varreduras a média dessas configurações são dadas por:

$$\langle m \rangle (T, h) = \left\langle \frac{1}{N_{var}} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \right\rangle \quad (15)$$

e

$$\langle E \rangle (T, h) = \left\langle \frac{1}{N_{var}} \sum_{\alpha} E_{\alpha} \right\rangle \quad (16)$$

Terminadas as varreduras é calculada também a Calor específico dada pela equação 3.

Sabendo disso o procedimento do algoritmo é:

1. Inicializa-se com uma determinada configuração
2. Calcula-se  $E_{flip}$  para o primeiro spin
3.
  - Se  $E_{flip} < 0$  flipamos o spin
  - Se  $E_{flip} \geq 0$  calcula-se  $P_{flip}$  e sorteamos um número aleatório  $r$  entre 0 e 1
  - Se  $r < P_{flip}$  flipamos o spin
  - Se  $r \geq P_{flip}$  nada muda
4. Faz o mesmo para um novo spin da cadeia
5. Ao final de todos os spins (finalizada uma varredura) calcula-se e armazena  $m_{\alpha}$  e  $E_{\alpha}$  e o processo é reiniciado

6. Após terminadas as  $N_{var}$  varreduras calcula-se  $\langle m \rangle$ ,  $\langle E \rangle$  e  $\langle C \rangle$ .

O problema estudado consiste em determinar a configuração dos spins num banho térmico, dessa forma o grid de spin é reiniciado a cada temperatura. De modo que ele comece do "zero" a cada temperatura.

Para resolver esse problema foi utilizado o programa Octave [3].

## 2.2 Resultados

A magnetização média por sítio em função da temperatura com as configurações: Grid de tamanho  $10 \times 10$ , fazendo 1000 varreduras e campo magnético nulo. Os valores de temperatura são espaçados de 0.1 nas bordas e de 0.05 na região crítica. A magnetização é sempre plotada em módulo, pois o sentido da magnetização não é importante no sistema sem um campo aplicado.

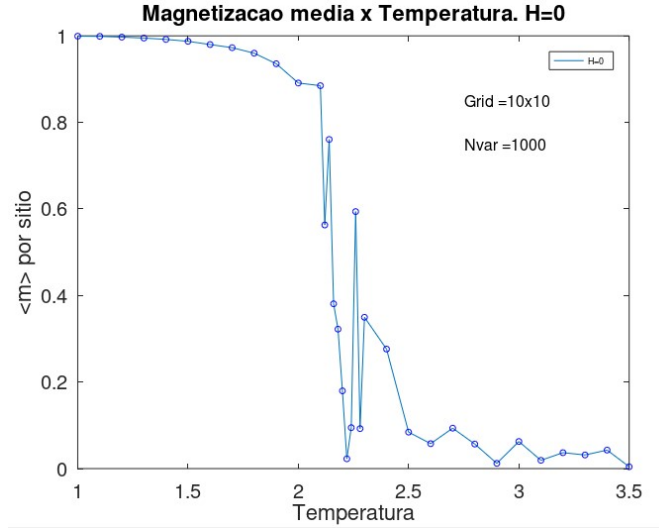


Figure 2: Magnetização média por sítio em função da temperatura. Grid =  $10 \times 10$ ,  $N_{var} = 1000$

A energia por sítio em função da temperatura para a mesma configuração:

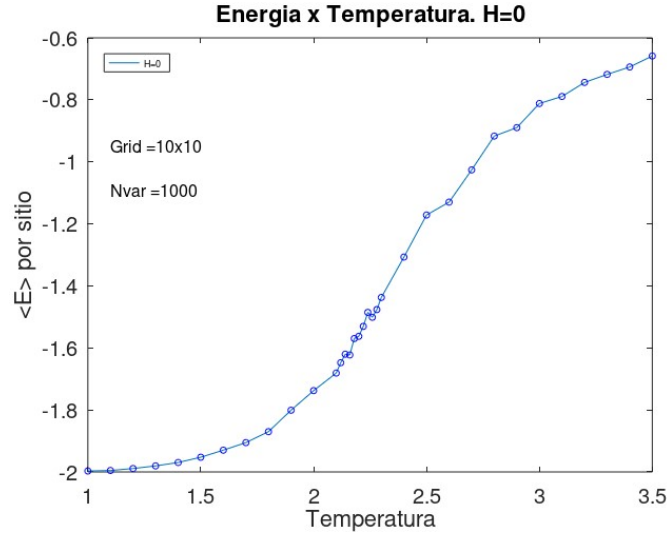


Figure 3: Energia por sítio em função da temperatura. Grid =  $10 \times 10$ ,  $N_{var} = 1000$ .

Outro ponto importante é a dependência dos resultados em função do número de varreduras e do tamanho do grid de spins. Para ver isso é útil um gráfico da magnetização média por sítio em função da temperatura para vários valores de varredura e para vários tamanhos de grid. Com campo magnético nulo. Começando pelo número de varreduras:

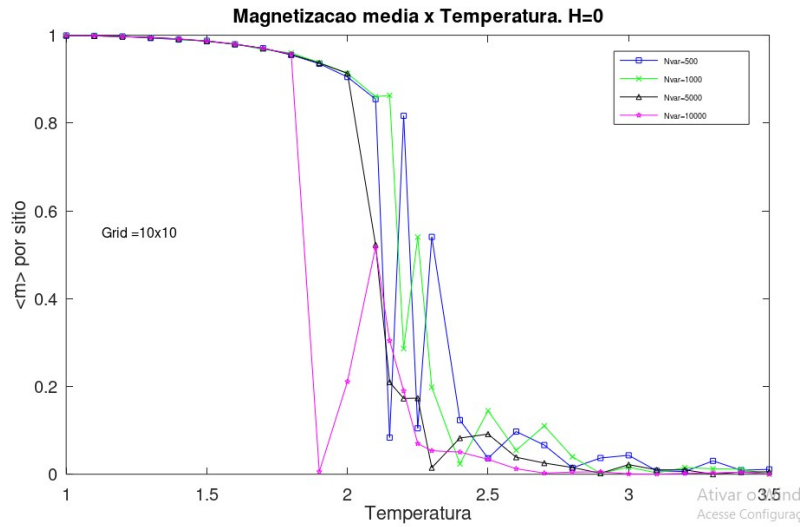


Figure 4: Magnetização média por sítio em função da temperatura para diferentes números de varredura. Grid =  $10 \times 10$ .

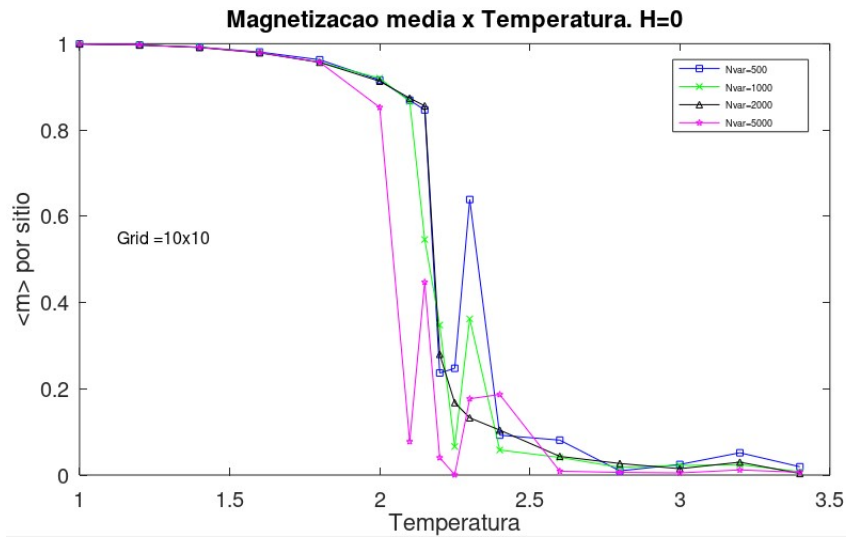


Figure 5: Magnetização média por sítio em função da temperatura para diferentes números de varredura. Grid =  $10 \times 10$ ,  $N_{var} = 2000$ .

Contra intuitivamente o comportamento não parece melhorar para um número de varreduras maior, foram feitos outros gráficos semelhantes e todos apre-

sentaram resultados parecidos aos aqui apresentados. Um número maior de varreduras não parece eliminar pontos fora da curva esperado. Um valor que seja bom e ao mesmo tempo viável computacionalmente é de 2000 varreduras. A dependência com o tamanho do grid:

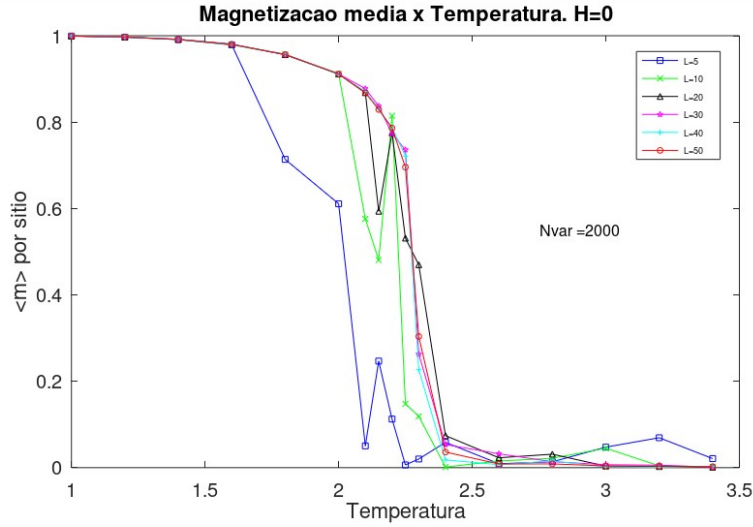


Figure 6: Magnetização média por sítio em função da temperatura para diferentes tamanhos de grid.  $N_{var} = 2000$ .

Feito com 2000 varreduras.  $L$  representa o tamanho da lateral do grid, ou seja,  $L=10$  representa um grid  $10 \times 10$ . As curvas para  $L = 30, 40$  e  $50$  são bem semelhantes, indicando que a partir de 30 se obtém um bom resultado, como visto na referência [4]. Portanto foi observado que o tamanho do grid influencia mais nas flutuações estatísticas do que o  $N_{var}$  (como visto nos gráficos 4 e 5), desse modo é mais importante alocar o poder computacional para um bom tamanho da cadeia do que para um  $N_{var}$  muito alto. Um valor adequado para o tamanho do grid é de  $40 \times 40$ . Daqui em diante estarão fixados esses valores de  $N_{var}$  e tamanho do grid.

Os gráficos para essas configurações são apresentados a seguir. A magnetização média por sítio em função da temperatura:



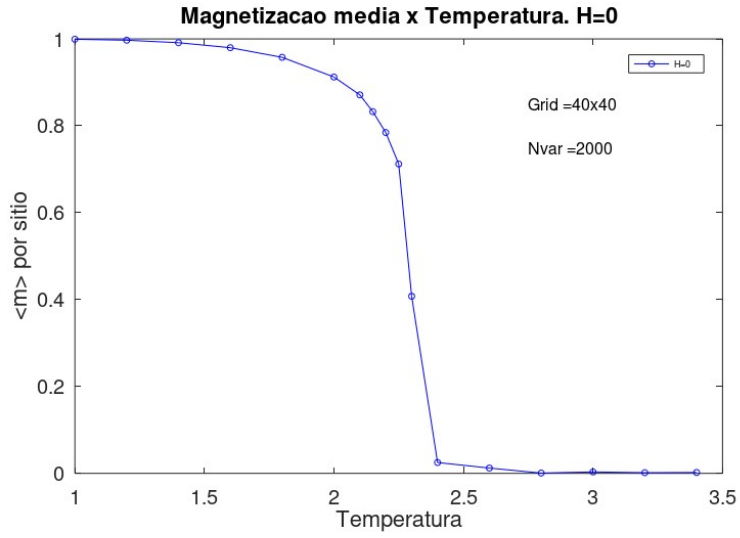


Figure 7: Magnetização média por sítio em função da temperatura.  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

A energia por sítio em função da temperatura:

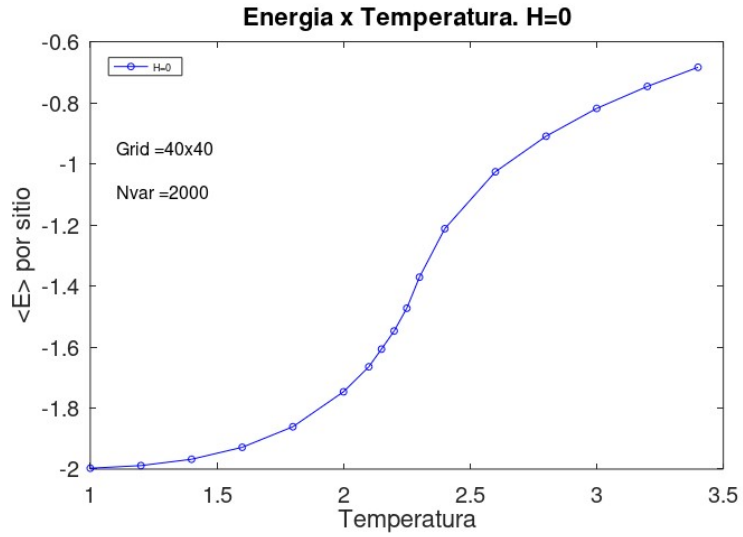


Figure 8: Energia por sítio em função da temperatura.  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

A Calor específico em função da temperatura:

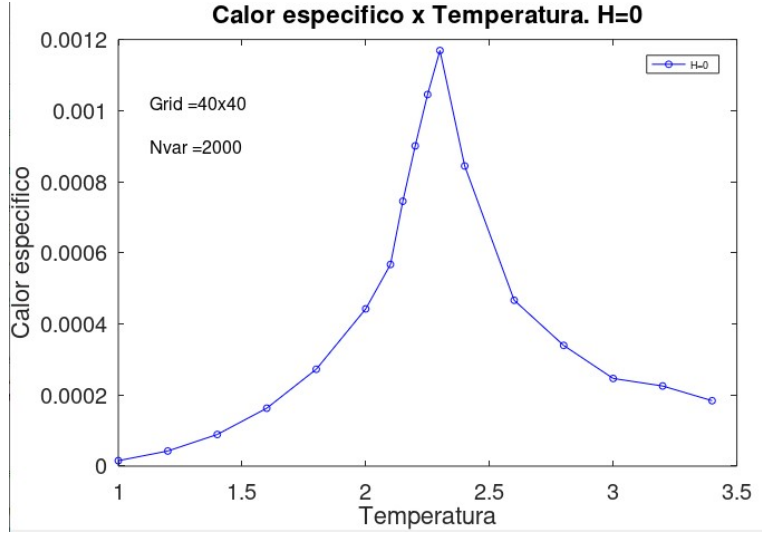


Figure 9: Calor específico em função da temperatura.  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

Um ponto de interesse no estudo da magnetização é justamente a transição de fase apresentada nas figuras 2, 4, 5, 6 e 7 que acontece na temperatura crítica  $T_c$ .

Na região de  $T \approx T_c$  a magnetização média se comporta de acordo com a equação 6

Aplicando  $\log$  nos dois lados da equação:

$$\log(m) = \beta \cdot \log(T - T_c) \quad (17)$$

Foi feito um gráfico  $\log - \log$  da magnetização em função da temperatura na região de  $T \approx T_c$  com um ajuste linear para obter o expoente crítico  $\beta$ . O valor obtido foi de  $\beta = 0.135 \pm 0.045$  em comparação com o valor esperado de 0.125. O resultado foi condizente com o esperado.

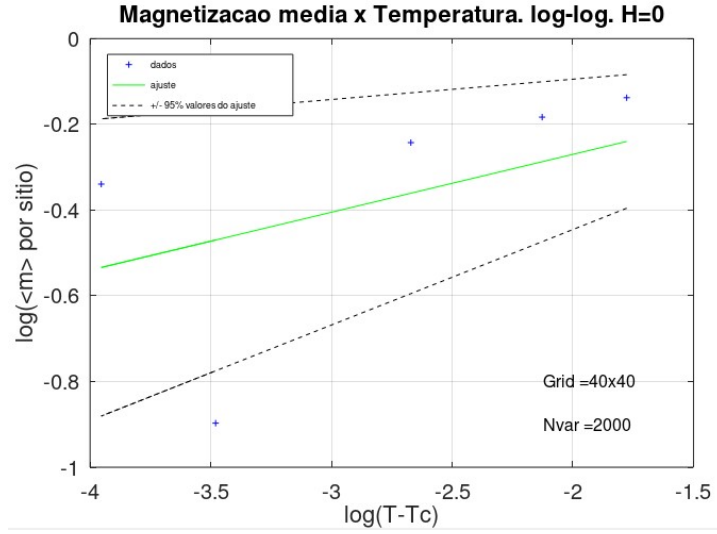


Figure 10: Magnetização média por sítio em função da temperatura na região da temperatura crítica.  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

Ainda na região de  $T \approx T_c$  a Calor específico se comporta de acordo com a equação 7. Foi feito também um gráfico  $\log - \log$  para se obter o parâmetro  $\alpha$  analogamente ao feito para a magnetização  $m$  e o parâmetro  $\beta$ .

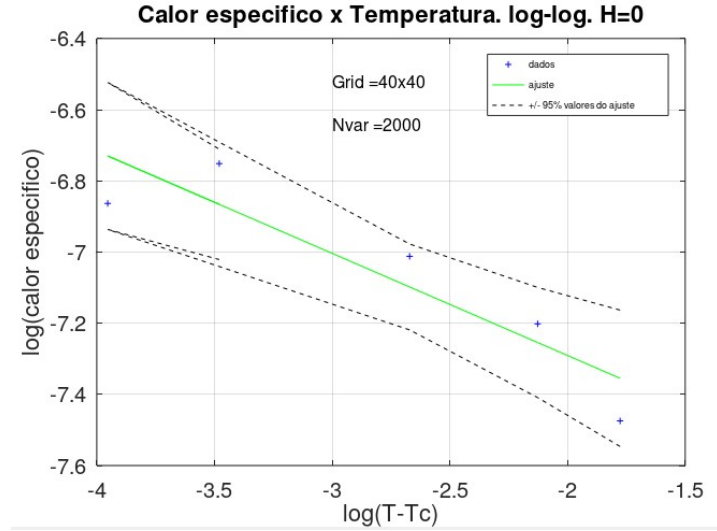


Figure 11: Calor específico em função da temperatura na região da temperatura crítica.  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

O valor obtido foi de  $\alpha = 0.287 \pm 0.75$  em comparação com o valor esperado de 0. O resultado ficou longe do esperado, não é compatível nem mesmo dentro de  $3\sigma$ .

Até agora todos os resultados apresentados são sem um campo magnético atuando no sistema.

Os gráficos 8, 9 agora com  $H=1$ :

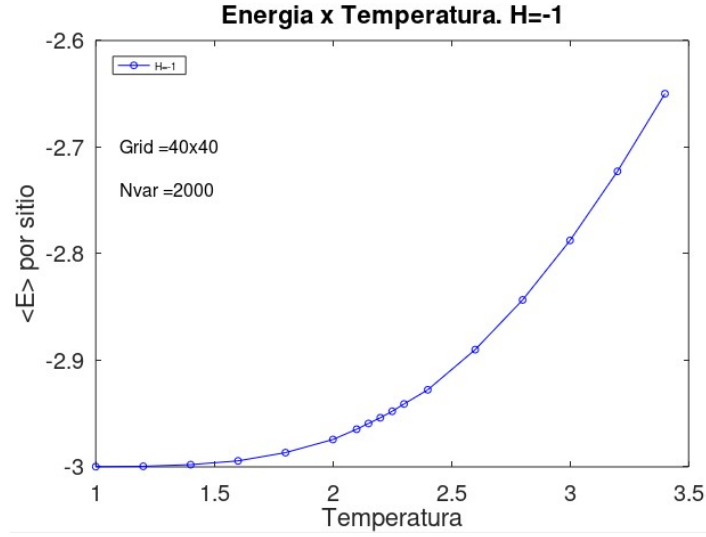


Figure 12: Energia média por sítio em função da temperatura com  $H=1$ .  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

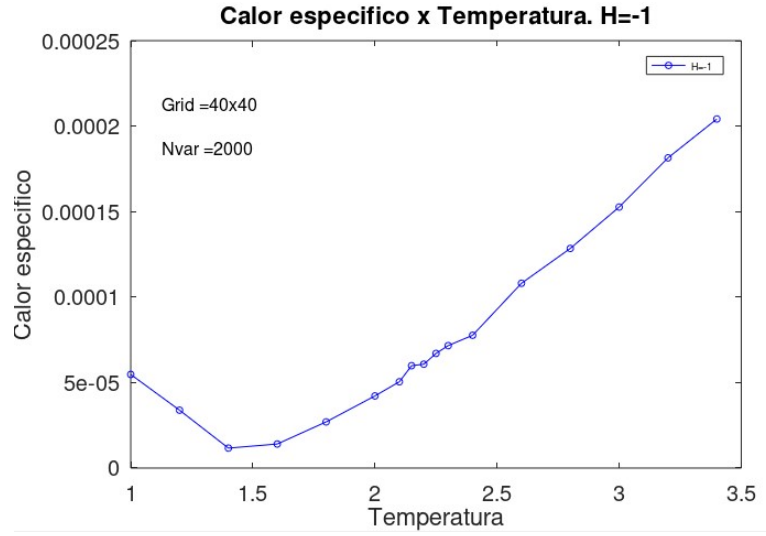


Figure 13: Calor específico em função da temperatura com  $H=1$ .  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

E a magnetização para  $H = 1, 0$  e  $-1$ :

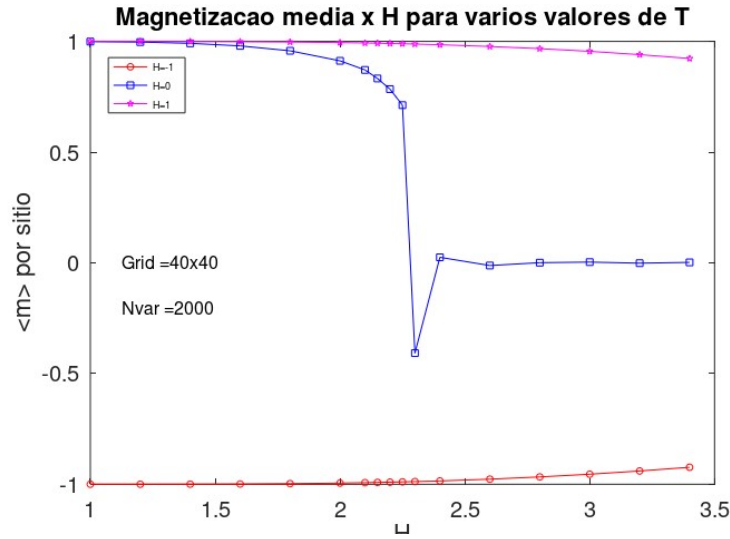


Figure 14: Magnetização média por sítio em função da temperatura para diversos valores de  $H$ .  $L = 40$ ,  $N_{var} = 2000$ .

Podemos ver que o campo  $H$  interfere profundamente na magnetização da

cadeia de spins, levando a magnetização a ser no sentido do campo. Porém é observável que a magnetização vai se aproximando de zero conforme a temperatura aumenta, isso ocorre muito mais rapidamente, até abruptamente, sem um campo aplicado, com um campo aplicado essa queda é gradual.

## 3 Manual do usuário

O programa desenvolvido calcula a magnetização, a energia e a Calor específico além de plotar gráficos dadas quaisquer configurações.

### 3.1 Descrição do programa

Na primeira parte do código, das linhas 17 a 30 está a parte que pode ser alterada pelo usuário, nessa parte determina-se o(s) tamanho(s) do grid de spins na variável `n_spins`, o intervalo de temperaturas a ser calculado, os valores de campo magnético, o(s) número(s) de varreduras a serem feitas na variável `n_var`, a unidade de energia  $J$  e o intervalo de temperaturas ao redor da  $T_c$  que se quer analisar. O programa permite quaisquer variações nessas características desde que levado em conta o tempo de execução.

Na parte tempo do programa é feita uma previsão do tempo que levará para realizar todos os cálculos dadas as configurações iniciais escolhidas pelo usuário. Caso seja um tempo aquém do esperado pelo usuário pode-se para a execução apertando `ctrl + c` e escolher condições iniciais mais "modestas". O tempo de execução do programa é a proporcional a uma constante igual a 0.00018151s, que equivale a calcular a parte 3 do algoritmo uma vez, descrita na seção 2.1. Iremos fazer esse calculo para cada spin, vezes o numero de varreduras, vezes o número de temperaturas, vezes o número de campos magnéticos.

Em seguida o programa faz ajustes iniciais para executar. Em especial vale destacar que temos ênfase no estudo da magnetização para o campo igual a zero e portanto o programa busca se esse valor foi escolhido dentro dos valores de campo e ele determina qual o índice desse valor no vetor  $H$ . Caso não exista o valor zero no vetor ele escolherá o primeiro valor do vetor. Ele também determina as temperaturas mais próximas das escolhidas para se fazer o zoom, portanto os intervalos de temperatura podem ser heterogeneamente distribuídos, utilizando uma definição maior na região perto de  $T_c$ .

Em seguida estão definidas as funções. A primeira calcula a energia total do sistema. A segunda calcula a energia  $E_{flip}$ . A Terceira calcula as configurações de spins, a magnetização, a energia e a Calor específico para uma dada configuração, os valores de energia e de Calor específico são calculadas apenas para campo magnético nulo de acordo com o paragrafo acima.

A parte principal do programa varia todas as condições escolhidas e armazena os resultados no vetores  $m$ ,  $E$  e  $C$ .

Terminados os cálculos o programa salva os resultados num arquivo txt com nome definido pela data e hora em que foi criado. Esse arquivo pode ser lido em outro programa para se fazer análises posteriores.

Em seguida o programa plota os gráficos, podendo chegar a oito gráficos.

1.  $m$  vs  $T$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ .
2.  $E$  vs  $T$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ .
3.  $m$  vs  $T$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e vários valores de  $N_{var}$ . Executado se foi escolhido mais de um valor de  $N_{var}$ .
4.  $m$  vs  $T$  para  $H$  nulo. vários valores de grid e 1 valor de  $N_{var}$ . Executado se foi escolhido mais de um valor de grid.
5.  $\log(m)$  vs  $\log(T - T_c)$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ . Zoom ao redor da  $T_c$  com ajuste linear. Plota os valores encontrados no ajuste.
6.  $C$  vs  $T$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ .
7.  $\log(C)$  vs  $\log(T - T_c)$  para  $H$  nulo. 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ . Zoom ao redor da  $T_c$  com ajuste linear. Plota os valores encontrados no ajuste.
8.  $m$  vs  $T$  para diversos valores de  $H$ . 1 valor de grid e 1 valor de  $N_{var}$ . Executado se foi escolhido mais de um valor para  $H$ .

Por fim o programa mostra o tempo total de execução do programa.

Junto do programa original está o arquivo LinearRegression.m usado para fazer o ajuste linear nos gráficos 5 e 7, basta colocá-lo na mesma pasta do arquivo original na hora de executar o programa.

### 3.2 Modo de uso

A princípio o programa foi pensado de modo que a primeira execução fosse com parâmetros modestos e os gráficos 1 e 2 dessem um panorama do problema. Em seguida rodar novamente o programa para diversos valores de  $N_{var}$  de modo a determinar qual seria um número adequado para essa variável por meio do gráfico 3. Na terceira execução do programa já está definido o  $N_{var}$  e agora pretende-se determinar o tamanho do grid analogamente, mas agora pelo gráfico 4. Tendo agora definido tanto  $N_{var}$  quanto o tamanho do grid o programa pode ser executado de forma a se aproveitar todos os gráficos 1 a 7, e o 8 se quiser observar o comportamento em relação ao campo  $H$  aplicado. Esse procedimento foi utilizado para chegar nas conclusões desse relatório.

## 4 Conclusão

Os resultados tem uma dependência maior com o tamanho da cadeia do que com o número de varreduras, foi considerado que um grid  $40 \times 40$  com 2000 varreduras são valores razoáveis para se realizar a simulação. Qualitativamente os gráficos

apresentam o resultado esperado para a magnetização, para a Calor específico e para a energia. Quantitativamente  $\beta$  ficou por volta de dois desvios padrões do esperado, já  $\alpha$  ficou bem distante do esperado.

O efeito do campo  $H$  altera todas as características da cadeia de spins, em especial direciona a magnetização no seu sentido e elimina a transição de fase espontânea.

## References

- [1] Nicholas J. Giordano. *Computational Physics*. Prentice-Hall, 1997. ISBN 0-13-367723-0.
- [2] Mark Tuckerman. Exact solutions of the ising model in 1 and 2 dimensions, 1999. URL <http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/stat.mech/lectures/lecture.26/node2.html>. [Online; accessed 02-June-2020].
- [3] John W. Eaton, David Bateman, Søren Hauberg, and Rik Wehbr ing. *GNU Octave version 5.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*, 2020. URL <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v5.2.0/>.
- [4] Matheus Phellipe Brasil de. Sousa. Expoentes críticos numéricos na rede quadrada para o modelode ising, 2017.