

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
7600073 - Física Estatística Computacional

Projeto 5

Simulações de Monte Carlo

Rafael Fernando Gigante - **NºUSP** 12610500

15 de junho de 2023

MODELO DE ISING

TAREFA A

Nesta tarefa realizaremos uma simulação para uma temperatura fixa em uma dada configuração inicial. Nosso objetivo é observar a variação da magnetização no tempo e ver a configuração final do sistema ao atingir seu equilíbrio. Neste caso iniciaremos o sistema em uma configuração totalmente ordenada, ou seja, todos os spins iguais. Serão consideradas redes de tamanhos $L = 60$ e $L = 100$.

Na realização da simulação vamos escolhendo spins de forma aleatória e vemos a probabilidade $P(s)$ dele se manter com o mesmo valor e a probabilidade $P(-s)$ dele mudar, sendo elas dadas por:

$$P(s) = \frac{e^{\beta s \Delta M}}{e^{\beta s \Delta M} + e^{-\beta s \Delta M}}, \quad P(-s) = \frac{e^{-\beta s \Delta M}}{e^{\beta s \Delta M} + e^{-\beta s \Delta M}}$$
$$\Delta M = J[s(i-1, j) + s(i+1, j) + s(i, j-1) + s(i, j+1)] \quad (1)$$

Ao testarmos L^2 spins dizemos que realizamos 1 iteração de Monte Carlo. A cada iteração medimos a magnetização do sistema e continuamos iterando até que ele atinja o seu equilíbrio, que é quando a magnetização se torna estável e passa a flutuar em torno de um valor.

Realizando a simulação para uma temperatura tal que $\beta = 3$ (temperatura baixa) temos que a probabilidade dos spins alterarem de sinal em um sistema completamente ordenado é praticamente nula, conforme a equação (1). Portanto, após realizarmos duas iterações de Monte Carlo vemos que não há variações no valor de magnetização, assim vemos que o sistema está em equilíbrio. Na figura 1 observamos a configuração final do sistema, notando que os spins permanecem ordenados, conforme estavam em sua configuração inicial.

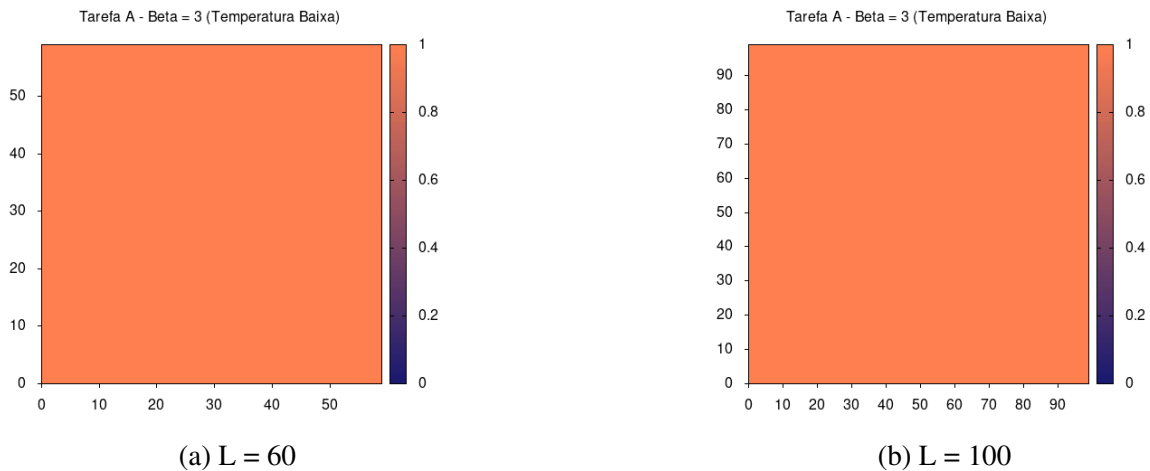


Figura 1: Configuração final da grade para $\beta = 3$

Para uma temperatura tal que $\beta = 0.1$ (temperatura alta) temos que a maior probabilidade dos spins alterarem de sinal é aproximadamente 30% então nesse caso é necessário a realização de um número bem maior de iterações de Monte Carlo (em torno de 100) para que o equilíbrio seja alcançado. A configuração final no equilíbrio é completamente desordenada, conforme pode ser visto na figura 2.

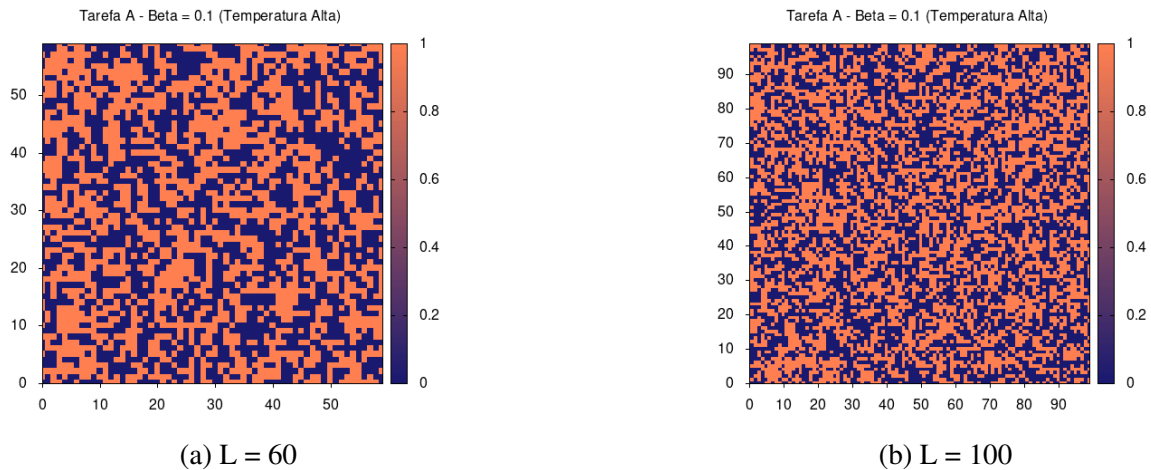


Figura 2: Configuração final da grade para $\beta = 0.1$

TAREFA B

Nesta tarefa iremos simular dois processos térmicos muito importantes em metalurgia, sendo eles o recozimento e a têmpera. No recozimento o sistema se inicia com uma determinada temperatura inicial β que durante o processo é lentamente variada por $\Delta\beta$ ($\frac{\Delta\beta}{\beta} \ll 1$), assim durante todo o processo o sistema é mantido próximo de seu equilíbrio térmico. Já no caso da têmpera também iniciamos o sistema com uma determinada temperatura inicial, porém realizamos uma mudança brusca na sua temperatura, de modo que durante o processo o sistema estará longe de seu equilíbrio térmico. Para realizar as simulações iniciaremos a rede na configuração correspondente a uma temperatura infinita ($\beta = 0$), de forma que cada sítio terá probabilidade 1/2 de ter um spin + ou -.

Para o recozimento, a cada iteração de Monte Carlo alteramos a temperatura para $\beta_n = \beta_0 + \delta$, onde β_0 é a temperatura anterior e a variação é de $\delta = 0.001$. Variamos a temperatura até que ela atinja o valor de $\beta = 3$. O resultado pode ser visto na figura 3, onde observamos que o gráfico da energia por número de spins varia de forma bem vagarosa, sempre próxima a sua condição de equilíbrio, de modo que quando ele o atinge o sistema fica em uma configuração completamente ordenada.

No caso da têmpera, mantemos o sistema numa temperatura fixa $\beta = 3$ e realizaremos o mesmo número de iterações de Monte Carlo que no caso anterior (3000 iterações). Como a variação da

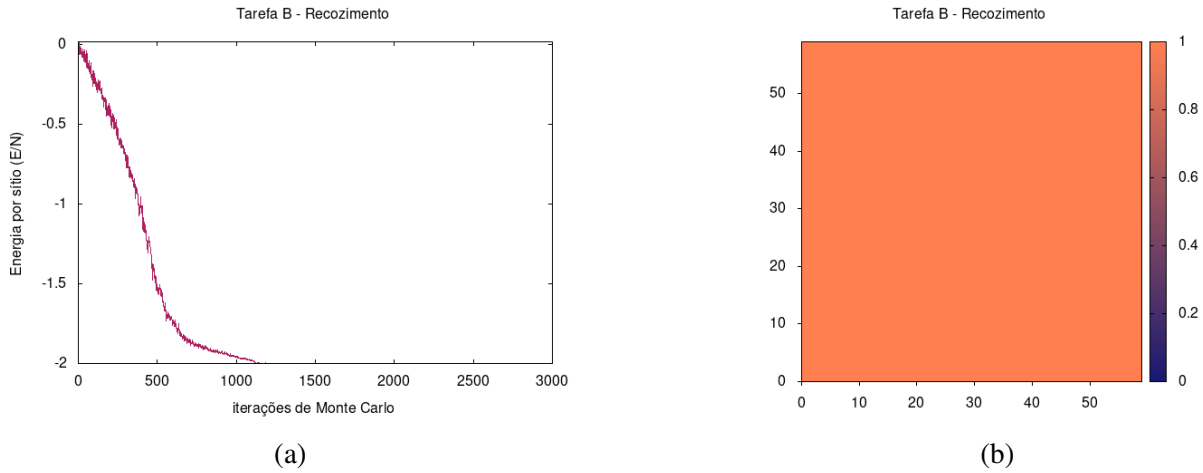


Figura 3: Resultados obtidos para o recozimento

temperatura é muito brusca, o sistema pode ou não atingir um estado ordenado. Na figura 4 temos o resultado obtido para duas simulações com diferentes configurações iniciais. Em ambas vemos a energia por spin cair de forma drástica. No caso (a) vemos o sistema atingir o seu equilíbrio logo no início e manter sua configuração ao longo das iterações, porém a configuração final não é ordenada. Já no caso (c) podemos observar que o sistema ao longo das iterações consegue atingir o seu equilíbrio em um estado completamente ordenado.

TAREFA C

Nesta tarefa realizaremos um processo chamado de loop térmico, que consiste em esfriar o sistema em uma temperatura infinita até um temperatura próxima do zero absoluto e, então, aquecê-lo novamente até a temperatura infinita. Podemos utilizar o loop térmico para estimarmos a temperatura crítica do sistema, que é um ponto específico onde ocorre a transição de fase do sistema, ou seja, quando o sistema passa de um estado ordenado para um estado desordenado. Abaixo dessa temperatura crítica, os spins são altamente correlacionados, de modo que eles tendem a se alinhar em uma determinada direção. Para uma temperatura acima da crítica os spins são pouco correlacionados (se orientam de forma aleatória), fazendo com que o sistema se torne desordenado. Ao medirmos a energia por spin durante o processo de loop térmico devemos observar um loop de histerese ao redor da temperatura crítica, isso pois a energia não segue um caminho único de aumento ou diminuição conforme a variação de temperatura. Isso acontece devido as múltiplas configurações de spins que podemos ter que correspondem à um mínimo de energia, significando que o estado final do sistema depende das temperaturas pelas quais ele passou e das configurações que ocupou em cada temperatura.

Na primeira parte da tarefa realizaremos o processo descrito para redes de diferentes tamanhos

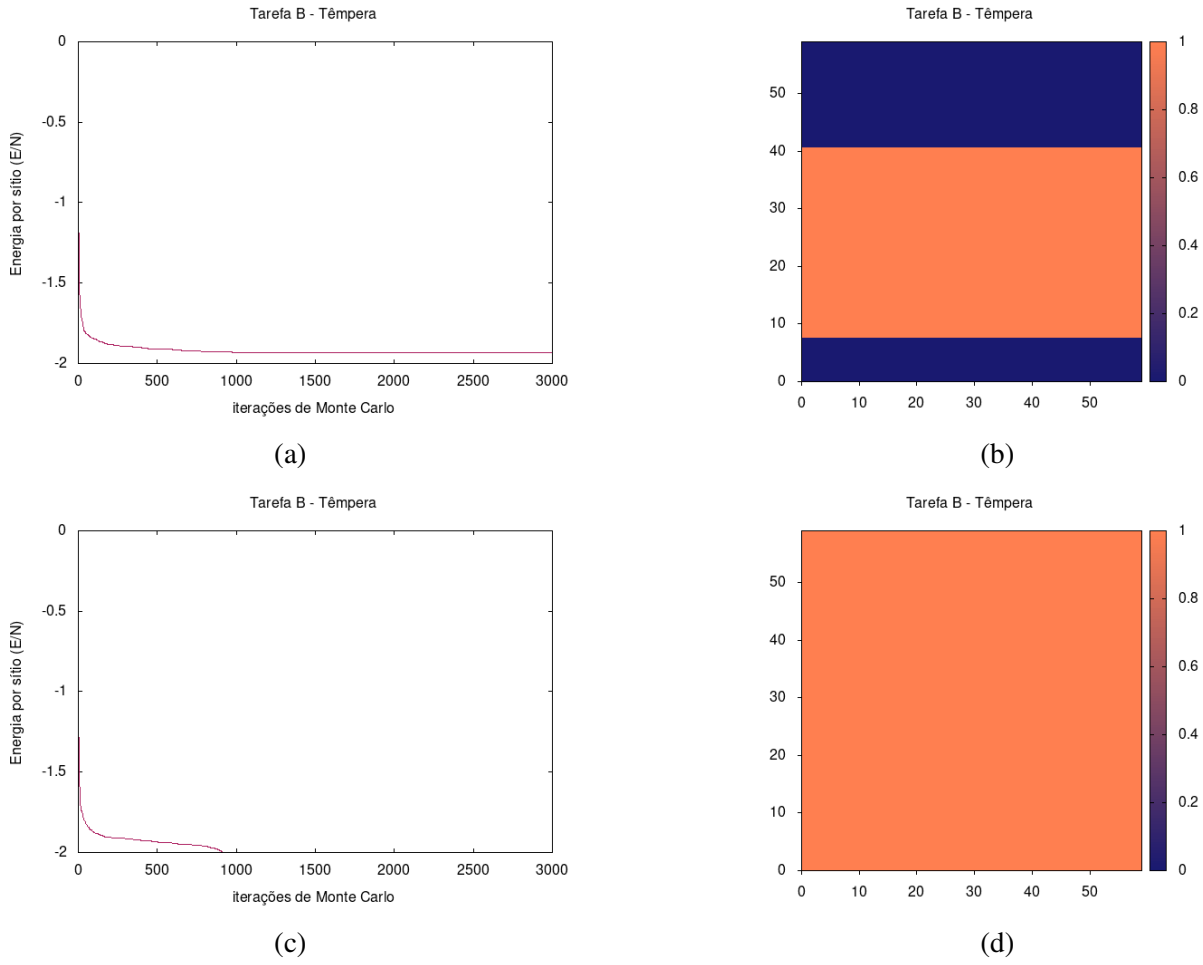


Figura 4: Resultados obtidos para a têmpera

e para diferentes variações de temperatura. Faremos β variar de 0 até 1.75 e mediremos a energia por spin a cada iteração de Monte Carlo. Nas figuras 5 e 6 podemos observar os resultados obtidos para $\Delta\beta = 0.001$ e $\Delta\beta = 0.0001$ respectivamente. Notemos que conforme aumentamos o L o loop se torna cada vez mais fechado, porém o range que a histerese ocorre não é alterada. Porém ao diminuirmos o $\Delta\beta$ o range em que ocorre a histerese diminui consideravelmente. Pode-se estimar que a temperatura crítica ocorre no range de β entre 0.3 a 0.6.

Para determinarmos a temperatura crítica com maior precisão devemos realizar simulações fixando as temperaturas β estimadas anteriormente. Consideramos o sistema em uma condição inicial mista, onde metade dos spins estão ordenados e a outra metade desordenada. Então, medimos a energia por spin durante as iterações de Monte Carlo para cada temperatura fixada (fazemos variações de 0.01). Devemos observar que os valores que saem da mesma energia inicial evoluírem de forma distinta. Podemos estimar que a temperatura crítica será aquela que terá a maior variação em seu comportamento. Na figura 7 temos o gráfico obtido da energia por spin para várias temperaturas. Vemos que abaixo no gráfico temos as temperaturas que tiveram a maior variação em sua energia,

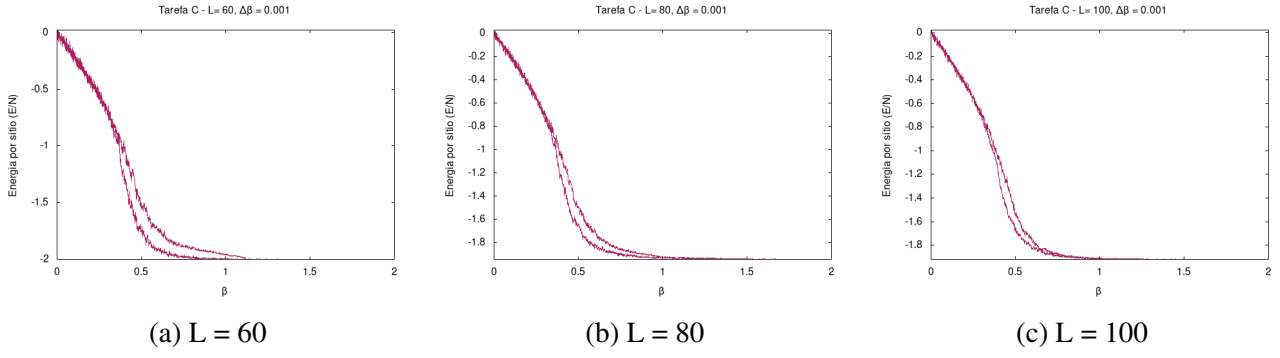


Figura 5: Loop térmico para variações de $\Delta\beta = 0.001$

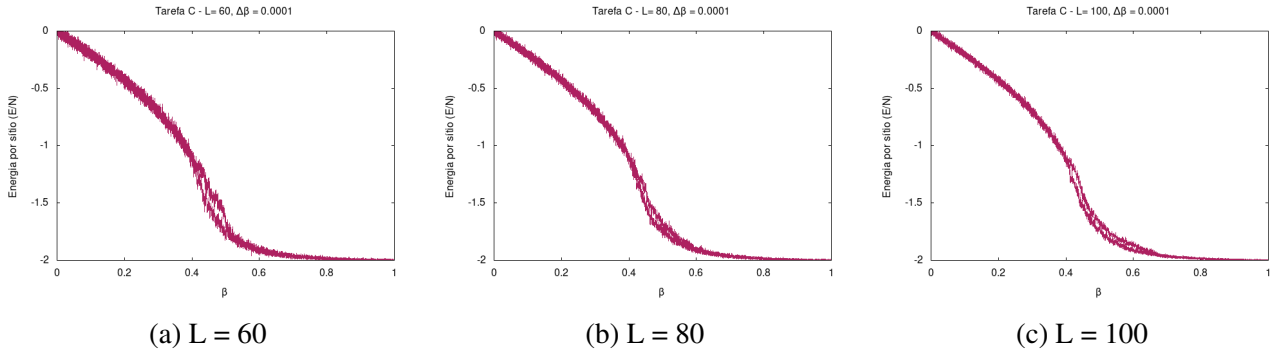


Figura 6: Loop térmico para variações de $\Delta\beta = 0.0001$

sendo elas correspondes aos últimos valores de β do intervalo, portanto estimamos que a temperatura crítica seja tal que $\beta_c \sim 0.6$.

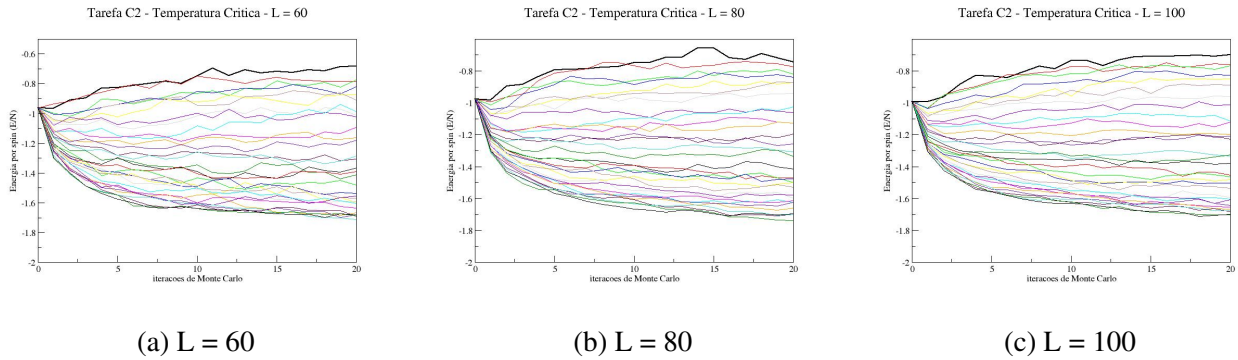


Figura 7: Energia por spin para diferentes valores de β

TAREFA D

Nesta tarefa realizaremos uma simulação onde tomaremos o sistema em uma temperatura baixa $\beta = 1/2$, então contabilizaremos o intervalo de iterações de Monte Carlo o sistema fica com um dado sinal de magnetização. O sistema é iniciado de forma desordenada e esperamos 2000 iterações de

Monte Carlo antes de começar a contabilizar os intervalos. Ao final fazemos a média destes intervalos e veremos a dependência desse valor com o tamanho L da grade.

Pelos resultado obtidos (Figura 8), vemos que a média dos intervalos que separam as iterações em que a magnetização muda de sinal cresce de forma exponencial. Portanto, vemos que se $L \rightarrow \infty$ vemos que o sistema nunca irá atingir uma configuração simétrica à sua inicial, ilustrando assim a quebra espontânea de simetria.

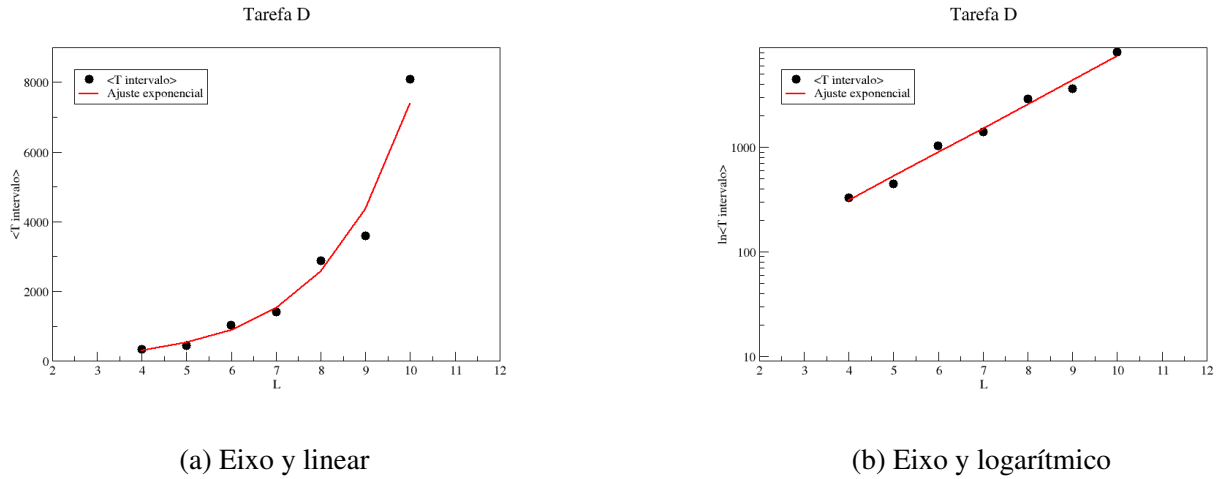


Figura 8: Crescimento $\langle T_{intervalo} \rangle$ em função de L