Rafael V. Cacilhas - Relatório 11 (7 de Novembro de 2018)

Exercício 1

a)

Queremos demonstrar que $\Delta E = E^{\alpha'} - E^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N} u(r_{nj}^{\alpha'}) - u(r_{nj}^{\alpha})$. Para tal, usaremos o fato de que $u_{ij}^{\alpha} = u_{ij}^{\alpha'}$ para todo i,j diferente de n e separaremos a soma de n das demais:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}^{N} \left(u(r_{i,j}^{\alpha'}) - u(r_{i,j}^{\alpha}) \right)$$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq n} \sum_{j \neq n,i} \left(u(r_{i,j}^{\alpha'}) - u(r_{i,j}^{\alpha}) \right) + \sum_{j \neq n} \left(u(r_{n,j}^{\alpha'}) - u(r_{n,j}^{\alpha}) \right) + \sum_{i \neq n} \left(u(r_{i,n}^{\alpha'}) - u(r_{i,n}^{\alpha}) \right) \right)$$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq n} \sum_{j \neq n,i} \left(u(r_{i,j}^{\alpha'}) - u(r_{i,j}^{\alpha}) \right) + \sum_{j \neq n} \left(u(r_{n,j}^{\alpha'}) - u(r_{n,j}^{\alpha}) \right) + \sum_{i \neq n} \left(u(r_{i,n}^{\alpha'}) - u(r_{i,n}^{\alpha}) \right) \right)$$

O primeiro termo, como discutido acima, é zero. Já o segundo e terceiro termo são iguais, pois apenas a ordem da soma é alterada. Assim:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left(2 \sum_{j \neq n} \left(u(r_{j,n}^{\alpha'}) - u(r_{j,n}^{\alpha}) \right) \right)$$

$$\Delta E = \sum_{j \neq n} u(r_{j,n}^{\alpha'}) - u(r_{j,n}^{\alpha}) \tag{1}$$

No programa me.f90 a energia foi calculada da maneira local, deduzida acima, e da maneira global. As duas maneiras podem ser vistas descomentando as subrotinas relevantes e os resultados são idênticos.

b)

Feito no programa me.f90.

c)

Na Figura 1 vemos a energia em função dos passos de Monte Carlo para T = 30K.

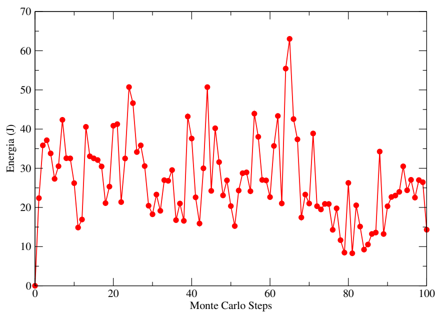

Figura 1: Distribuição de energia em função dos passos de Monte Carlo.

De modo a testar se o programa correlacao.f90 está calculando tudo corretamente utilizamos a sequência de números aleatórios *random_seq.dat* da última lista. O C(i) calculado está na figura 2. Como pode ser visto, tudo parece estar em ordem, visto que temos um C(i) que começa em 1 e cai rapidamente para zero, como esperado.

Ao calcular o tempo de auto-correlação integrado 2τ foi encontrado um problema visto que alguns valores são negativos e a interpretação disto não foi encontrada. Portanto a análise da correlação em função de d_{max} foi feita utilizando diretamente o gráfico de C(i) visto na Figura 3.

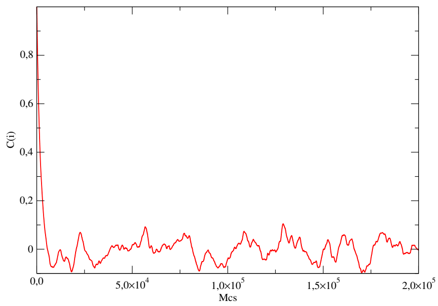

Figura 2: Distribuição de energia em função dos passos de Monte Carlo.

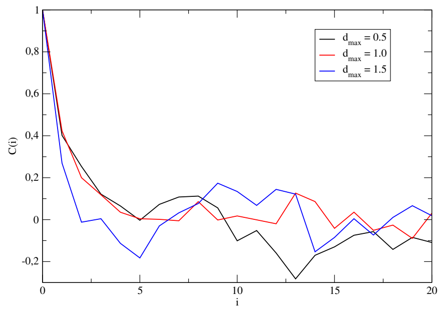

Figura 3: C(i) para três valores de d_{max}.

Como pode ser visto, para todos os valores de d_{max} temos o comportamento esperado, onde C(i) começa em 1 e oscila em torno de zero. No entanto é visível que para $d_{max} = 1.5$ o valor de C(i) vai para zero mais rapidamente do que os demais. Assim sendo, este valor de d_{max} produz as energias mais descorrelacionadas e seria a escolha adequada.

d)

A energia média por partícula e o calor específico em função da temperatura pode ser visto na Figura 4.

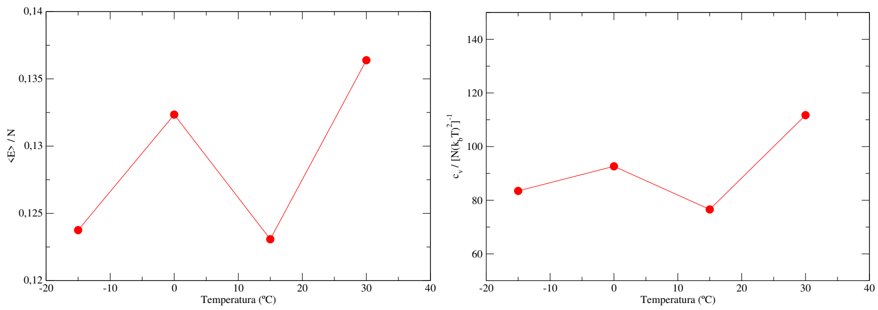

Figura 4: Energia média por partícula (esquerda) e calor específico (direita) em função da temperatura.

O histograma pode ser visto na Figura 5.

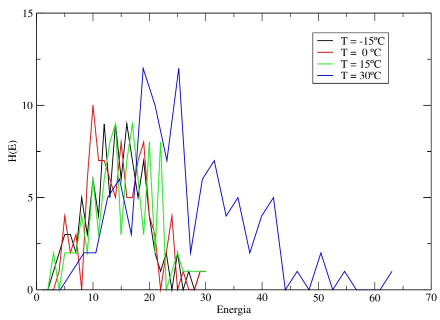

Figura 5: Histograma das energias em função da temperatura.