

Simulação computacional - Modelo de Ising 2D

Projeto 3 - Métodos Computacionais em Física

Renan de Assis, NUSP: 9865401

Junho 2020

1 Introdução

1.1 Objetivo

Em aulas passadas foi realizada a tarefa de obter numericamente a magnetização média do modelo de Ising em uma dimensão em função do campo magnético externo. Levando essa atividade adiante ampliamos o modelo de Ising para duas dimensões a fim de analisar a transição de fase do material de acordo com a variação da temperatura.

Para isso, nessa seção será dada uma introdução sobre o que é o modelo de Ising e características físicas que serão analisadas. A explicação a seguir se baseia nas referências [1] e [2].

1.2 Modelo de Ising - Descrição

Supomos que, em contato com um reservatório térmico, temos um material e nele há átomos com seus elétrons e cada um desses últimos com seus determinados spins. Para tratar dos spins consideraremos as leis da Mecânica Quântica, entretanto para facilitar nosso cálculo realizaremos algumas simplificações. Trataremos de uma rede quadrada regular de $N \times N$ spins onde cada spin só poderá ter orientação na direção do eixo z , assumindo valores $\sigma_i = \pm 1$ e a interação entre os spins se dá apenas entre seus primeiros vizinhos.

No modelo de Ising, a magnetização de um material é dada pela soma do valor de todos os spins como mostrada a equação (1.1) abaixo.

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

A partir disso trabalharemos com duas fases magnéticas distintas que esse material pode ter de acordo com a direção dos seus spins. No ferromagnetismo (Figura 1a) todos os spins estão alinhados em uma determinada direção e a magnetização do material é diferente de zero, já no paramagnetismo (Figura 1b) não existe ordenamento nos spins e isso faz com que sua magnetização seja extremamente fraca próxima de zero.

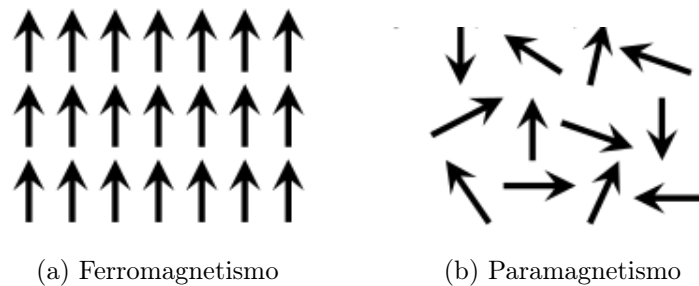


Figura 1: Fases magnéticas

Estamos interessados em estudar a transição de fase entre o ferromagnetismo e o paramagnetismo. Para isso começamos definindo como será a interação dos spins nas borda da configuração. Como não iremos realizar simulações com grandes redes nas quais poderíamos isolar melhor nosso sistema, adotaremos condições periódicas de contorno, a fim de minimizar os efeitos de borda da rede, onde os spins de uma borda vão interagir com os spins da outra borda como se essas estivessem unidas. Isso pode ser ilustrado na Figura 2

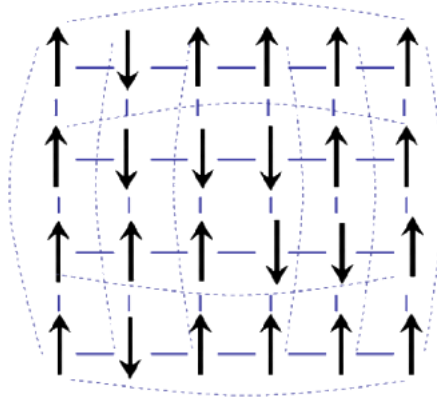


Figura 2: Modelo de Ising 2D com as linhas sólidas sendo as interações entre os spins e as linhas tracejadas a interação com as condições periódicas de contorno

A partir dessas considerações, a energia total da configuração de spins será dada pela equação (1.2) abaixo.

$$E_{tot} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.2)$$

onde J é chamada de constante de troca da interação de Coulomb (assumimos que essa seja positiva), $\sigma_i = \pm 1$ representa os spins e os possíveis valores que podem assumir, a soma $\langle i,j \rangle$ se dá entre os pares de primeiros vizinhos e h é o campo magnético externo.

Agora, supomos que temos uma configuração está em um estado com energia E_0 e um spin localizado na linha n e coluna m ($\sigma_{n,m}$) é flipado (cima para baixo ou vice-versa). Agora teremos uma nova configuração com energia E_1 que tem energia diferente da configuração em E_0 , chamaremos essa diferença de energia de E_{flip} . Como estudaremos a transição de fase, vários spins serão flipados e portanto seria vantajoso conseguir uma expressão para E_{flip} ao invés de calcular a energia total da configuração antes e depois do flip. Assim, desenvolveremos o seguinte raciocínio abaixo.

Abrindo ambas as somatórias da equação (1.2), consideramos que a configuração com energia E_0 é dada pela equação (1.3) abaixo,

$$E_0 = -J(\dots + \sigma_{n,m}\sigma_{n+1,m} + \sigma_{n,m}\sigma_{n-1,m} + \sigma_{n,m}\sigma_{n,m+1} + \sigma_{n,m}\sigma_{n,m-1} + \dots) - h(\dots + \sigma_{n,m} + \dots) \quad (1.3)$$

Portanto, como o flip de um spin da linha n e coluna m ($\sigma_{n,m}$) influencia na contribuição com seus primeiros vizinhos, teremos a energia total da configuração dada pela expressão (1.4) abaixo

$$E_1 = -J(\dots - \sigma_{n,m}\sigma_{n+1,m} - \sigma_{n,m}\sigma_{n-1,m} - \sigma_{n,m}\sigma_{n,m+1} - \sigma_{n,m}\sigma_{n,m-1} + \dots) - h(\dots - \sigma_{n,m} + \dots) \quad (1.4)$$

Assim, fazendo a diferença entre E_1 e E_0 teremos a expressão para E_{flip} dada abaixo.

$$E_{flip} = 2J\sigma_{n,m}(\sigma_{n+1,m} + \sigma_{n-1,m} + \sigma_{n,m+1} + \sigma_{n,m-1}) + 2h\sigma_{n,m} \quad (1.5)$$

Para uma determinada configuração α calcularemos a densidade de magnetização dada pela expressão (1.6) e também a energia média por sítio (1.7).

$$m_\alpha = \frac{M}{N} \quad (1.6)$$

com M sendo dado pela equação (1.1) e N o número de spins da configuração.

$$E_\alpha = \frac{E_{tot}}{N} \quad (1.7)$$

com E_{tot} sendo dado pela equação (1.2) e N o número de elementos da configuração.

Já que calcularemos mais de uma configuração, podemos calcular médias diferentes para todas essas configurações. A magnetização média (1.8) é dada pela soma sobre todas as configurações(α) ponderada pela probabilidade de Boltzmann do sistema estar naquela determinada configuração(P_α).

$$\langle m \rangle = \sum_{\alpha}^{Nc} m_\alpha P_\alpha = \sum_{\alpha} m_\alpha e^{-\beta E_\alpha} \quad (1.8)$$

onde temos $\beta = 1/k_B T$ e N_c o número total de configurações consideradas.

Além disso também analisaremos a média das energias dentre todas as configurações observadas pela equação (1.9) abaixo

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha}^{N_c} E_{\alpha} \quad (1.9)$$

Como pretendemos estudar a transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética, iremos variar a temperatura do sistema para que isso ocorra. O começo da transição de fase ocorre em uma temperatura crítica T_c . Para o modelo de Ising em duas dimensões a temperatura crítica tem seu valor calculado analiticamente dado por

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.27 \quad (1.10)$$

Aqui analisaremos expoentes críticos relacionados à grandezas físicas quando a temperatura se aproxima da temperatura crítica. Para valores de temperatura próximos de T_c , a densidade de magnetização varia conforme o expoente crítico β da expressão abaixo

$$m \sim (T_c - T)^{\beta} \quad (1.11)$$

onde β é o expoente crítico relacionado à magnetização.

Da Termodinâmica temos que o calor específico é dado pela expressão (1.12) abaixo

$$C = \frac{d \langle E \rangle}{dT} \quad (1.12)$$

Portanto o calor específico diverge próximo da temperatura crítica T_c com a seguinte relação abaixo

$$C \sim \frac{1}{|T - T_c|^{\alpha}} \quad (1.13)$$

onde α é o expoente crítico relacionado ao calor específico.

A última grandeza física estudada aqui será a suscetibilidade magnética, a qual será explorada na seção 2.5, que diverge da mesma forma que o calor específico

para temperaturas próximas de T_c .

$$\chi \sim \frac{1}{|T - T_c|^\gamma} \quad (1.14)$$

onde γ é o expoente crítico relacionado à suscetibilidade magnética.

2 Descrição da simulação e dos resultados

A partir da discussão na seção 1, iremos resolver computacionalmente o problema do modelo de Ising em duas dimensões através do chamado Algoritmo de Metrópolis com o método de Monte Carlo.

Sabendo que o método de Monte Carlo é um método computacional que se utiliza de uma grande amostragem de números gerados aleatoriamente e selecionando apenas aqueles valores razoáveis para serem utilizados, podemos entender o Algoritmo de Metrópolis.

Iniciando com uma configuração de spins gerada aleatoriamente com valores $+1$ ou -1 , seguimos os passos a seguir do algoritmo, descrevendo como o sistema se altera dada uma determinada temperatura T .

2.1 Algoritmo de metrópolis

Considerando a configuração inicial, sortearmos aleatoriamente um spin para evitar o "viés" que seria gerado caso estivéssemos pegando um spin seguido do outro na configuração. Desse spin sorteado calcularemos a diferença de energia caso apenas esse fosse flipado (E_{flip}) (1.5), se esse valor for estritamente negativo, então fliparemos o spin. Caso contrário calcularemos a probabilidade da configuração estar no estado E_{flip} , dada pela função de distribuição de Boltzmann.

$$P_{flip} = e^{-E_{flip}/k_B T} \quad (2.1)$$

onde tomamos $k_B = 1$ para a simplificação das contas.

Se essa probabilidade calculada for maior do que um número r uniformemente distribuído entre 0 e 1 gerado aleatoriamente, fliparemos o spin mesmo assim beneficiando os spins que aumentaram apenas um pouco sua energia. Caso $P_{flip} <$

r , mantemos a configuração como está e sortearemos outro spins repetindo todo o processo.

Quando o algoritmo avaliar todos os spins, isso caracteriza uma varredura da configuração. Ao final de cada varredura calculamos e armazenamos a densidade de magnetização (1.6) e a energia média por sítio (1.7) da configuração atual.

2.2 Variação da temperatura

Como o algoritmo de Metrópolis trabalha em uma determinada temperatura T , iremos variar a temperatura das nossas simulações, obtendo algumas propriedades. Para cada temperatura calcularemos a magnetização média (1.8) e a energia média entre todas as configurações (1.9). A partir do valor da energia média podemos utilizar as flutuações presentes para calcular a variância

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (2.2)$$

onde temos $\langle E^2 \rangle$ dado por

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha}^{N_c} E_{\alpha}^2 \quad (2.3)$$

Assim, de acordo com o teorema de flutuação-dissipação da mecânica estatística podemos calcular o calor específico por spin como

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{N k_B T^2} \quad (2.4)$$

com N sendo o número de spins da configuração e considerando $k_B = 1$

Utilizando as flutuações dos valores da magnetização média também podemos calcular a suscetibilidade magnética por spin com

$$\chi = \frac{(\Delta m)^2}{N T} \quad (2.5)$$

com Δm sendo a variância da magnetização média, N o número de spins da configuração e considerando $k_B = 1$.

2.3 Definir número de varreduras

Primeiramente fizemos simulações sem campo magnético externo $h = 0$, com 35 valores de temperatura entre 0.1 K e 4 K em uma rede de 10x10 spins ($N = 10$) apenas variando o número de varreduras do algoritmo de metrópolis para verificar o que aconteceria. O resultado é dado na Figura 3 abaixo.

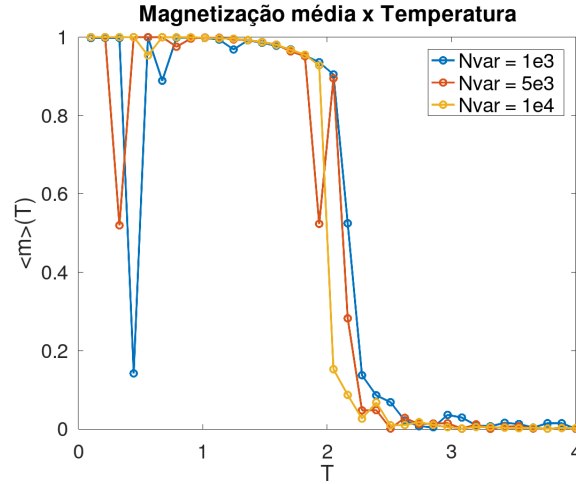


Figura 3: Magnetização média por spin pela temperatura -
Variação do número de varreduras

Assim, verificamos que quanto maior o número de varreduras, menores são as flutuações estatísticas do Método de Monte Carlo. Foi visto também que independente do número de varreduras, algumas vezes alguns dos primeiros valores da magnetização ficavam muito abaixo do esperado.

A energia média não sofre grandes alterações pela variação do número de varreduras, como visto na Figura 4 abaixo.

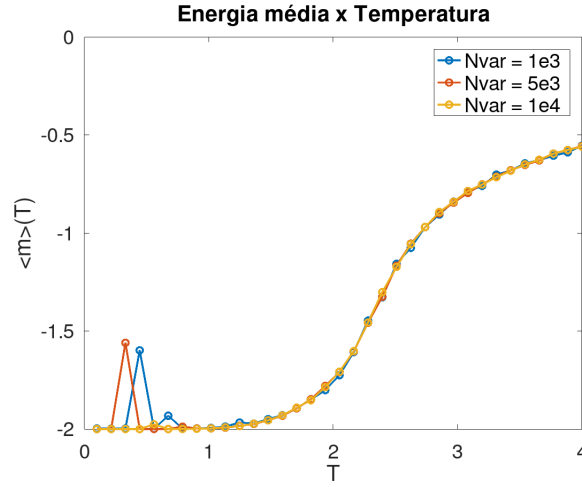


Figura 4: Energia média por spin pela temperatura -
Variação do número de varreduras

2.4 Variação do número de spins da configuração

A partir da determinação do número de varreduras, verificamos a dependência do número de spins e o que isso alteraria na magnetização média da simulação. Foram realizadas 3 simulações sem campo magnético externo $h = 0$, com 35 valores de temperatura entre 0.1 K e 4 e 10^4 varreduras, variando o número de spins por dimensão(N) em 3 valores diferentes.

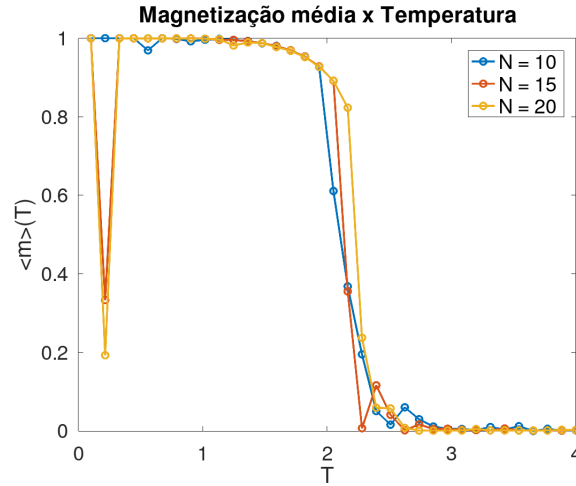


Figura 5: Magnetização média por spin pela temperatura -
Variação do número de spins na configuração

Analisando a Figura 5 podemos afirmar que com o aumento do número de spins da configuração existe uma definição melhor da curva de magnetização e também uma diminuição das flutuações. Além disso, com o aumento do número de spins perto da temperatura crítica a curva vai se tornando cada vez mais assintótica portanto consideramos que para $N \rightarrow \infty$ a curva teria uma assíntota perfeita na temperatura crítica.

Além dessas simulações também foram feitas 5 simulações com as mesmas características das anteriores entretanto com 2000 varreduras, variando o número de spins por dimensão de 5 em 5 entre 10 e 30. O resultado é mostrado na Figura 6.

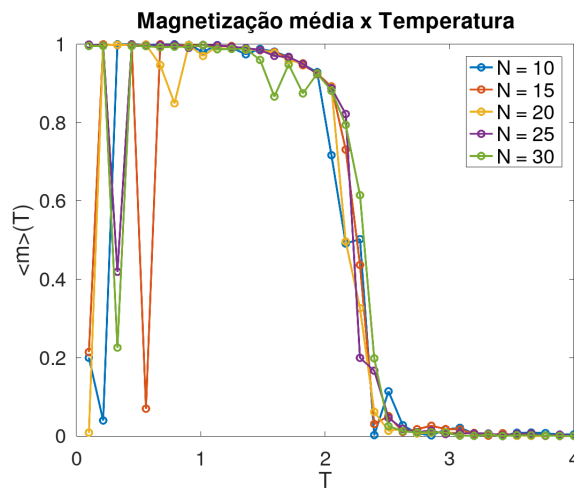


Figura 6: Magnetização média por spin pela temperatura - Variação do número de spins na configuração

A análise da Figura acima reforça nossas conclusões anteriores.

2.5 Análise próximo à temperatura crítica

Nos gráficos que estamos analisando temos um sistema que se inicia na fase ferromagnética e ao chegar em uma temperatura crítica faz uma transição para a fase paramagnética.

Para analisar o comportamento do sistema próximo da temperatura crítica consideraremos a simulação feita com 10^4 varreduras e uma rede de 20x20 spins.

O intervalo de temperaturas se deu por entre 0.2 K e 4 K com dT variando conforme a relação abaixo.

$$dT = \begin{cases} 0.2, & \text{se } T \leq 1.8 \text{ e } T \geq 2.5 \\ 0.02, & \text{se } 1.8 \leq T \leq 2.5 \end{cases} \quad (2.6)$$

Como quisemos pegar mais valores próximos à T_c também sofremos com a maior flutuação esperada nessa região. Isso ilustrado pela Figura 7 abaixo.

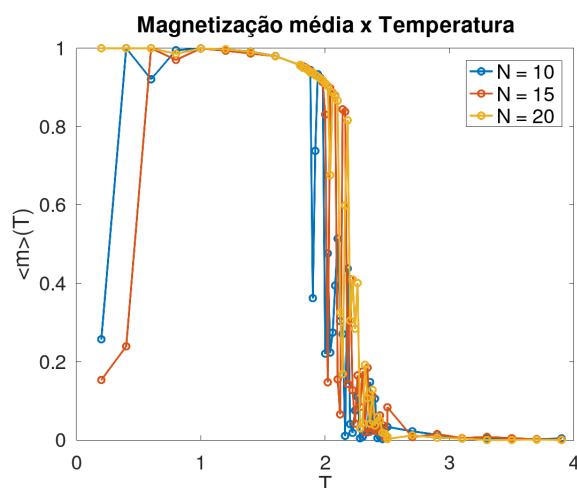


Figura 7: Magnetização média por spin pela temperatura

Não foi possível fazer o gráfico log-log da magnetização a fim de encontrar o valor do expoente crítico β , entretanto modificando a expressão (1.11) como

$$\ln m = \beta \ln T_c - T \quad (2.7)$$

E colocando os dados obtidos entre as temperaturas 2 K e 2.5 K pela simulação na função "polyfit" do Octave que retorna os coeficientes de um polinômio, obtivemos o valor $\beta = 0.143$.

Depois do cálculo de β , foi calculado o calor específico em função da temperatura para os três tamanhos de rede feitos.

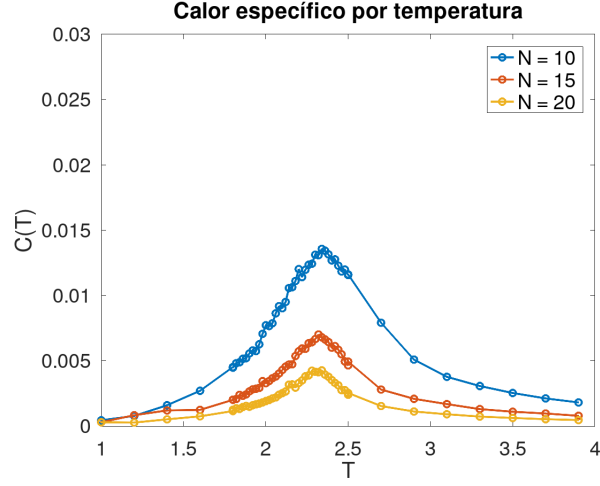


Figura 8: Calor específico por spin em função da temperatura

A Figura 8 nos mostra que quanto maior a rede de spins, menor irá ser o valor máximo do calor específico. Tomando os valores para a rede de 20x20 calculamos o valor de α através do logaritmo natural da equação (1.13)

$$\ln C = -\alpha \ln T - T_c \quad (2.8)$$

Utilizando a mesma função "polyfit" que foi usada para calcular β , obtivemos o valor de $\alpha = 0.055$.

Por fim, foi calculada a suscetibilidade magnética χ através da equação (2.5) e obtida a Figura 9 para os diferentes valores de rede.

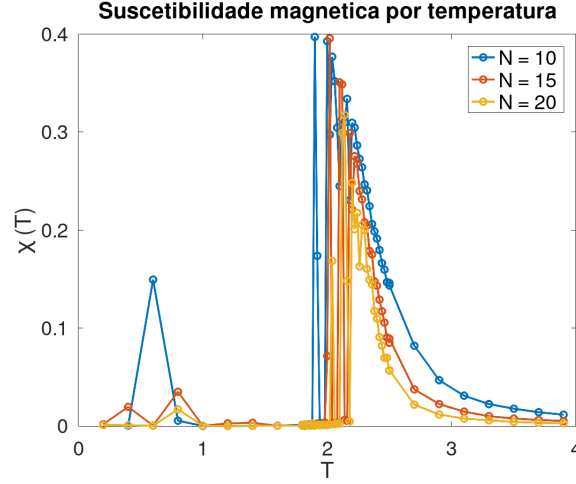


Figura 9: Suscetibilidade magnética em função da temperatura

Infelizmente, a Figura acima possui flutuações muito acentuadas já que é calculada a partir da magnetização média. Entretanto tentamos calcular o expoente crítico γ da mesma forma calculada com os outros expoentes críticos. Tirando o logaritmo natural de ambos os lados da equação (2.5), temos

$$\ln \chi = -\gamma \ln T - T_c \quad (2.9)$$

Assim, utilizando a função "polyfit" obtivemos o valor de $\gamma = 2.51$.

3 Manual do usuário para o *script*

Para a resolução numérica do modelo de Ising em duas dimensões foi feito um *script* com o *software* Octave[3]. Devido à complexidade considerável do problema a ser resolvido o *script* foi modularizado em funções para facilitar a alteração de partes específicas do código e para a melhor compreensão de um leitor. As funções utilizadas foram:

Gera_config(N) - Função que gera uma configuração aleatória de $N \times N$ spins com valores ± 1 utilizando a função sinal, a qual retorna o sinal do número real especificado, em uma distribuição normal de N números gerados aleatoriamente com média 0 e variância 1.

Calc_Eflip(config,n,m,J,h) - Função que calcula a diferença de energia(E_{flip}) entre uma configuração onde o spin da linha n e coluna m foi flipado e a configuração original($config$). Esse cálculo é dado a partir da equação (1.5).

somavizinhos(config) - Função que calcula uma matriz onde cada elemento (n,m) é a soma dos primeiros vizinhos do elemento da matriz $config(n,m)$

Calc_Em(config,J,h) - Função que calcula a energia média por sítio de uma configuração de spins($config$) através da energia total dada pela equação (1.2) dividida pelo número de sítios da configuração.

metropolis(config,J,h,T,Nvar) - Função que realiza $Nvar$ varreduras do Algoritmo de Metrópolis, seção 2.1, para uma dada temperatura T , valor de campo magnético externo h e constante de troca J . A função retorna, referente a todas as varreduras feitas, a magnetização média por sítio($\langle m \rangle$), a energia média por sítio($\langle E \rangle$) o calor específico por sítio(C) e a suscetibilidade magnética(χ).

Após a definição das funções acima, existe a seção de **definições iniciais** que define as constantes e valores utilizados na simulação. Apenas nessa seção algumas das variáveis podem ser livremente modificadas e são elas: o campo magnético externo (h), o vetor com número de spins por dimensão ($Nspins$), o vetor com o número de varreduras ($Nvar$) e o vetor com os valores de temperatura a serem utilizados (T).

A próxima seção do *script* inicializa os vetores magnetização média, energia média, calor específico e suscetibilidade magnética que irão variar com a temperatura especificada.

A seguir temos o cálculo principal do algoritmo de metrópolis variando o número de spins da rede, o número de varreduras e a temperatura. Para cada temperatura se inicia uma nova configuração de spins aleatória e são calculadas todas as grandezas que o algoritmo retorna. Esses dados são salvos em um arquivo com o número de spins e número de varreduras correspondente para serem analisados e tratados em outro *script*.

Por fim, a última seção têm as Figuras que serão geradas caso opte a simulação com apenas um valor de N_{spins} e de N_{var} .

4 Conclusão

Com os conhecimentos obtidos acerca do modelo de Ising em duas dimensões esse foi considerado um problema extremamente complexo e custoso computacionalmente, além do prazo curto para a resolução do mesmo. Foi observado com as análises feitas que o algoritmo de metrópolis é efetivo para a resolução do problema, entretanto é necessário um alto número de varreduras por configuração a fim de se obter resultados minimamente precisos, sendo necessário alto poder computacional ou tempo suficiente para tal. Apesar disso variando o número de spins por dimensão na rede do modelo de Ising foi verificado que conforme esse número aumenta temos uma assíntota mais bem definida na região da temperatura crítica que ocorre a transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética do material.

O modo como foi feita a análise do modelo próximo da temperatura crítica não ficou extremamente clara e compreendida pelo aluno em questão, entretanto foram obtidos valores dos expoentes críticos próximos dos da solução de Onsager, isso visto na tabela abaixo

Expoentes críticos	Solução de Onsager	Valores obtidos
α	0	0.055
β	0.125	0.143
γ	1.75	2.51

Além disso na questão de conhecimentos computacionais, esse problema auxiliou a melhorar a formulação de um *script* pois existiam diversas partes a serem feitas e isso exigiu modularizar o código e também como o mesmo demorava para rodar, salvar os resultados em arquivos diferentes para tratar posteriormente foi uma boa prática aprendida.

Referências

- [1] N.J. Giordano and H. Nakanishi. *Computational Physics*. Pearson/Prentice Hall, 2006. ISBN 9780131469907. URL <https://books.google.com.br/books?id=52J6QgAACAAJ>.

- [2] Sílvia RA Salinas. *Introdução a física estatística vol. 09*. Edusp, 1997.
- [3] John W. Eaton, David Bateman, Søren Hauberg, and Rik Wehbring. *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/>.