

Métodos Computacionais em Física - 4300331 - 1s/ 2020

Prof. Dr. Luis Gregório Dias da Silva – FMT - IFUSP

Projeto 3 – Mecânica Estatística

Prazo de entrega: **23h55** de **07/06/2020 (Domingo)** através do site da disciplina.

NÃO SERÃO ACEITOS projetos enviados após esta data ou por e-mail!!

Orientação geral:

O projeto é *individual* e tem como objetivo o estudo computacional do seguinte tema:

1- Estudo do modelo de Ising em 2D via Método de Monte Carlo.

Arquivos:

O estudante deverá fazer o upload online dos arquivos de MatLab (“NomeDoAluno_Projeto3.m”) prontos para serem executados (caso seja feita a opção por outra linguagem, fazer o upload do código-fonte e instruções de compilação) e um Relatório escrito (“NomeDoAluno_Projeto3_Relatorio.pdf”) contendo:

- Introdução

Introduza o problema a ser estudado. Escreva como se você estivesse explicando a um colega ou a um outro professor. Lembre-se: o relatório do Projeto é um documento pensado para uma plateia mais ampla!

- Descrição da simulação numérica e dos resultados obtidos.

Descreva em detalhe o método numérico que você utilizou e sua escolha de parâmetros. Exemplo: O passo está adequado? Que testes você fez?

Use quantos gráficos você quiser para ilustrar suas conclusões. Não se limite aos tipos de gráficos usados nas tarefas. Quanto mais, melhor! Nos gráficos, serão avaliados aspectos como legenda, labels nos eixos, clareza na apresentação dos dados (símbolos, linhas, etc).

- “Manual do usuário” do seu script: Se um colega for rodar seu código, como ele deve proceder? Quais as variáveis importantes? Quais os parâmetros podem ser modificados?

- Conclusão

Que tipo de informação sobre o sistema **físico** a simulação numérica trouxe? Lembre-se: muita gente pode fazer programas mas poucos sabem interpretar o resultado!

Dicas:

No MatLab, você pode gerar a figura em pdf para incluir no Relatório usando o comando “print -dpdf” como por exemplo:

print -r300 -dpdf test.pdf

- As legendas e labels tem que ser FACILMENTE legíveis. Use a opção ‘FontSize’ para aumentar o tamanho da fonte.

Descrição do tema proposto:

1- Estudo do modelo de Ising em 2D via Método de Monte Carlo

Em sala, aplicamos o Método de Monte Carlo para o modelo de Ising em 1D sem campo magnético utilizando o algoritmo de Metrópolis. Neste projeto, vamos estudar o modelo de Ising em 2D *com* campo magnético. A energia é dada por:

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

onde os spins são representados por $\sigma_i = \pm 1$ localizados nos sítios i em um grid 2D [cada sítio tem “coordenadas” (n_i, m_i)] sendo que “ $\{i,j\}$ ” indica que a soma se dá entre primeiros vizinhos [sítios com coordenadas $n_i = n_j \pm 1$ e $m_i = m_j$]

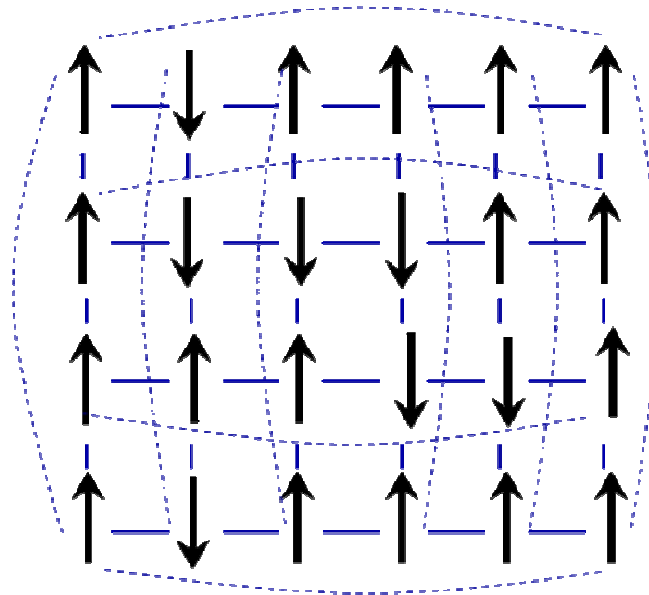


Figura: modelo de Ising 2D. Linhas sólidas indicam o acoplamento ($-J$) entre primeiros vizinhos. Linhas tracejadas indicam o acoplamento com condições periódicas de contorno.

Pontos a considerar no seu trabalho:

- Descreva o algoritmo de Metrópolis e como ele se aplica ao modelo de Ising em 2D com condições periódicas de contorno (vide figura).
- Comece com o caso $h=0$ e $J=1$ e calcule a magnetização média por sítio em função da temperatura para um grid $N \times N$. Comece com $N=10$ e 1000 varreduras.
- Calcule também a energia por sítio em função da temperatura.
- Verifique a dependência com N e discuta como extrapolar para $N \rightarrow \infty$ ($1/N \rightarrow 0$).
- Pesquise sobre as características da transição de fase do modelo de Ising em 2D (temperatura crítica, etc.) e compare com os seus resultados.
- Em particular, estude os conceitos de *criticalidade* e *expoentes críticos* da solução exata de Onsager (um dos grandes feitos da Física teórica do século XX) para o modelo de Ising em 2D e compare com os seus resultados.
- Em particular, estime o expoente crítico da magnetização a partir dos dados da sua simulação. Descreva em razoável detalhe o procedimento utilizado!
- Por fim, discuta/mostre como seus resultados mudam quando um campo magnético $h \neq 0$ é adicionado ao modelo.
- Etc. etc.

Pontos a serem avaliados:

Projeto:

- Este é, sobretudo, um **projeto de pesquisa** e é assim que será avaliado. Não há necessariamente respostas “certas” aqui (mas cuidado com erros conceituais!!). Mais importantes são as *perguntas* que você vai propor a si mesmo(a) no projeto e como buscará as respostas.
- Se alguma coisa não está fazendo sentido, discuta o porquê! Faça testes.

Participação nas “lives” é importante!!

- Na versão online do curso, haverá espaço durante as “lives” para dúvidas e discussões sobre o andamento dos projetos. Embora não seja obrigatória, a participação nas discussões é muito importante para a troca de ideias e sugestões sobre o andamento do seu projeto.

Relatório:

- Capricho na elaboração do relatório e qualidade dos gráficos.
- Descrição da simulação e discussão da física envolvida no problema.

Scripts:

- Originalidade e clareza na escrita do script.
- Facilidade de usar o script (“user-friendly”) e se a documentação (“Manual do usuário”) está adequada.
- Discussões com colegas são permitidas mas **CÓPIAS DE TRECHOS DE SCRIPTS SERÃO CONSIDERADAS PLÁGIO** e implicam em **nota zero** no projeto.

Pontualidade na entrega:

- **Responsabilidade com prazos e organização estão sendo avaliados.**
- Não deixe para entregar no final do prazo, especialmente nos minutos finais!
- Podem (e provavelmente vão!) ocorrer problemas como falha na conexão, falha no computador, falha no envio, etc. etc. Não vale a pena arriscar!!
- **Projetos e scripts enviados por e-mail não serão considerados!**