



Projeto 1 - Ferromagnetismo

Unidade Curricular: Simulação e Modulação Computacional em Engenharia Física

62568 - Alexandre Tashchuk

62637 - José Costa

68839 - Carolina Saraiva

Licenciatura em Engenharia Informática

Licenciatura em Engenharia Física

Índice

Índice.....	2
1. Introdução.....	3
2. Estrutura e Funcionamento do Código.....	4
3. Complexidade Computacional.....	5
4. Otimizações.....	6
5. Análise dos Resultados Obtidos.....	7
6. Conclusões.....	11

1. Introdução

Até ao momento a Física Estatística não se mostrou capaz de fornecer uma solução exata do Modelo de Ising, aplicado a uma rede cúbica 3D.

Com este primeiro projeto, pretendemos implementar o modelo acima referido, bem como simular o comportamento dos spins na rede, quando sujeitos a diferentes temperaturas e à presença de um campo magnético externo.

O Modelo de Ising foi, inicialmente, apresentado por Wilhelm Lenz, em 1920, tendo sido resolvido, de forma exata, para uma dimensão, por Ernst Ising, no ano de 1924.

Apesar dos inúmeros avanços, registados ainda no decorrer do século XX, o Modelo Ferromagnético de Ising, com interações entre os spins de dois estados, que constituem os vizinhos mais próximos, numa rede cúbica simples, frequentemente, denominado Modelo de Ising 3D, continua a ser um dos sistemas mais paradigmáticos da Física Estatística.

Para a sua análise, consideramos a existência de variáveis discretas, representativas dos momentos de dipolo magnético dos spins atômicos, podendo assumir os valores $+1$ ou -1 . O arranjo dos spins numa rede cúbica permite a sua interação com os spins vizinhos, sendo que spins com a mesma orientação estão associados a uma menor energia. Como bem sabemos, um sistema tende para o estado de energia mínima, a que corresponde a maior estabilidade. Contudo, o aumento da temperatura não permite a ocorrência desta esperada evolução, tornando possíveis outras fases estruturais. Temos que, mesmo sem campo magnético aplicado, o estado de menor energia implica igual orientação de todos os spins, com o próprio material a produzir campo magnético.

Definimos J como sendo a diferença entre as energias de um estado de spins paralelos e outro de spins anti-paralelos. Assim, quando $J > 0$, estamos perante um sistema ferromagnético, uma vez que os spins paralelos têm menor energia. Se $J < 0$, o sistema diz-se antiferromagnético, com os estados anti-paralelos associados a menor energia.

O fenómeno da magnetização espontânea ocorre a baixas temperaturas e para $J > 0$, sendo caracterizado por um alinhamento de todos os spins, ficando estes com igual momento magnético, mesmo sem campo aplicado. O aumento da temperatura destrói esta organização. Podemos, deste modo, identificar uma temperatura crítica do Modelo de Ising, a Temperatura de Curie, T_c . Para valores acima ou abaixo de T_c , a magnetização espontânea não se verifica. Conclui-se, por isso, que existe uma transição de fase, à Temperatura de Curie. A uma dimensão, esta transição de fase não ocorre, o que levou Ernst Ising a supor que o seu modelo não teria, desde logo, qualquer utilidade física.

Depois de devidamente inicializada a rede, teremos de calcular, em cada ponto desta, a variação de energia, no caso da inversão do spin. Se esta variação for negativa, temos, automaticamente, o spin invertido. Por outro lado, para as variações de energia positivas, torna-se necessário criar uma nova função, função de transição, que confere uma dada probabilidade do spin ser invertido.

Para cada par (temperatura reduzida, campo magnético externo), iremos calcular e, posteriormente, representar quatro grandezas físicas: o momento magnético, necessário no estudo da Histerese Ferromagnética-Paramagnética, a energia média por ponto de rede, a susceptibilidade magnética e a capacidade calorífica, sendo que estas duas últimas nos permitirão obter estimativas para a Temperatura de Curie.

Numa fase final, os resultados, agora, obtidos para uma rede cúbica 3D serão comparados com os já analisados de uma rede 2D.

2. Estrutura e Funcionamento do Código

Podemos dividir o nosso código em sete partes principais:

- A implementação do Modelo de Ising, onde se incluem as funções: *transition_function_values*, *w*, *neighbours_table*, *initialize_grid*, *ferromagnetic_cycle* e *ferromagnetic_simulation*. Nesta primeira secção, inicializamos a rede, calculamos, em cada ponto desta, a variação de energia para a inversão do spin, sendo necessário maior cuidado, quando esta variação é positiva (criação da função *w*), fazemos um ciclo de Monte Carlo e, finalmente, efetuamos a simulação, segundo o Modelo de Ising.
- Segue-se o cálculo das grandezas físicas: momento magnético médio da rede e com o fator de ordem, energia média por ponto de rede, susceptibilidade magnética e capacidade calorífica, com recurso às funções: *calculate_average_magnetic_moment*, *calculate_average_energy_per_network_point*, *calculate_magnetic_susceptibility* e *calculate_heat_capacity*. Implementando a função *temperature_simulation*, torna-se possível analisar a variação destas grandezas, em função da temperatura.
- Em seguida, a função *hysteresis_calc_varying_h* permite-nos estudar o fenómeno da Histerese Ferromagnética-Paramagnética, fazendo variar o campo magnético externo, *h*.
- Uma estimativa para a Temperatura de Curie é conseguida com a função *calculate_curie_temperature*, que guarda, igualmente, num ficheiro, os valores da temperatura e das quatro grandezas físicas acima referidas.
- As magnetizações, para múltiplas temperaturas e com variação do campo magnético externo, são calculadas pela função *calc_magnetism_for_mult_temps*.
- Na penúltima secção, temos o *plot* de todos os gráficos necessários, recorrendo às funções: *plot_grid*, *plot_graphs*, *plot_ferro_graph*, *plot_hysteresis* e *plot_magnetism_for_mult_temps*.
- Numa fase final, apresentamos o cálculo do tempo de execução de cada uma das etapas, bem como o tempo total.

Optámos por utilizar 10.000 ciclos de Monte Carlo. Trata-se do valor mínimo aconselhado, que nos permite, no entanto, analisar a gama desejada.

Quanto à rede, tal como recomendado, utilizámos uma rede cúbica simples, de pequena dimensão: 10 x 10 x 10.

No cálculo da susceptibilidade magnética e da capacidade calorífica, é fundamental o recurso à variância, já que esta é capaz de ilustrar as variações esperadas destas grandezas físicas, à Temperatura de Curie.

Tínhamos de fornecer, no mínimo, dez valores para o campo magnético externo, h . Os valores máximo e mínimo devem ser simétricos, sendo necessário adicionar valores intermédios, incluindo $h = 0$. Como tal, definimos: $h_values = np.linspace(-h_max, h_max, (h_max * 2) + 1)$, com $h_max = -5$.

Relativamente às temperaturas reduzidas, criámos um *array* com cinco valores (número sugerido), sendo que três deles se encontram próximos da estimada Temperatura de Curie: $magnetizationsTemperatures = np.array([0.5, 2.4, 2.5, 2.6, 4.5])$.

Graficamente, com os resultados obtidos para as quatro grandezas físicas, percebemos, rapidamente, que a Temperatura de Curie estará próxima dos 4,5 K. Trata-se, por isso, de um valor muito idêntico ao conseguido, com recurso à função *calculate_curie_temperature*.

3. Complexidade Computacional

Analisando a complexidade temporal e espacial das funções implementadas:

transition_function_values(t, h):

- Complexidade temporal: $O(1)$, pois o tamanho das listas ΔE e output são fixos.
- Complexidade espacial: $O(1)$, pois o tamanho das listas ΔE e output são fixos.

w(sigma, sigSoma, valuesW):

- Complexidade temporal: $O(1)$, pois a função realiza apenas operações aritméticas simples.
- Complexidade espacial: $O(1)$, pois não cria novas estruturas de dados.

neighbours_table(size):

- Complexidade temporal: $O(n)$, onde n é o tamanho da rede.
- Complexidade espacial: $O(n)$, pois cria duas listas de tamanho n .

initialize_grid(size, spin):

- Complexidade temporal: $O(n^3)$, onde n é o tamanho da rede.
- Complexidade espacial: $O(n^3)$, pois cria uma matriz 3D de tamanho n^3 .

ferromagnetic_cycle(grid, neighbours, size, valuesW, h):

- Complexidade temporal: $O(n^3)$, onde n é o tamanho da rede. Isso ocorre, porque há três loops aninhados que percorrem a rede.
- Complexidade espacial: $O(1)$, pois não cria novas estruturas de dados significativas.

ferromagnetic_simulation(size, cycles, temperature, h, spin):

- Complexidade temporal: $O(n^3 \times m)$, onde n é o tamanho da rede e m é o número de ciclos. Isso ocorre porque a função *ferromagnetic_cycle* é chamada m vezes.
- Complexidade espacial: $O(n^3)$, pois cria uma matriz 3D de tamanho n^3 .

temperature_simulation(temps, size, n_ciclos, h, spin):

- Complexidade temporal: $O(p \times n^3 \times m)$, onde p é o número de temperaturas, n é o tamanho da rede e m é o número de ciclos. Isso ocorre, porque a função *ferromagnetic_simulation* é chamada p vezes.
- Complexidade espacial: $O(n^3)$, pois cria uma matriz 3D de tamanho n^3 .

hysteresis_calc_varying_h(temperature, size, n_ciclos, h_values, spin):

- Complexidade temporal: $O(q \times n^3 \times m)$, onde q é o número de valores de h , n é o tamanho da rede e m é o número de ciclos. Isso ocorre, porque a função *ferromagnetic_simulation* é chamada q vezes.
- Complexidade espacial: $O(n^3)$, pois cria uma matriz 3D de tamanho n^3 .

calc_magnetism_for_mult_temps(temperatures, mc_cycles, h_values, size, spin):

- Complexidade Temporal: $O(p \times q \times n^3 \times m)$, onde p é o número de temperaturas, q é o número de valores de h , n é o tamanho da rede e m é o número de ciclos de Monte Carlo. Isso ocorre, porque a função *hysteresis_calc_varying_h* é chamada p vezes e tem complexidade $O(q \times n^3 \times m)$.
- Complexidade Espacial: $O(p)$, onde p é o número de temperaturas. Isso ocorre, porque a função cria um array *magnetizations* que armazena p valores.

As outras funções têm complexidade temporal e espacial $O(1)$, pois realizam apenas operações aritméticas simples e não criam novas estruturas de dados.

Como tal, as complexidades temporal e espacial do programa como um todo serão, $O(p \times q \times n^3 \times m)$ e $O(n^3)$, respectivamente.

4. Otimizações

Antes da execução das funções, foi adicionada uma funcionalidade que exibe os parâmetros a serem utilizados nas primeiras simulações.

Incluimos a capacidade de salvar os gráficos em formato de imagem vetorial, permitindo um maior nível de zoom, sem perda de qualidade. Além disso, as temperaturas são guardadas no ficheiro “results3D.tsv”. Todos estes ficheiros são armazenados numa pasta denominada “Plots e Resultados”.

Implementámos também um temporizador que, utilizando Threads, regista o tempo decorrido, durante a simulação.

Alterámos alguns nomes de funções e variáveis, para melhorar a legibilidade do código.

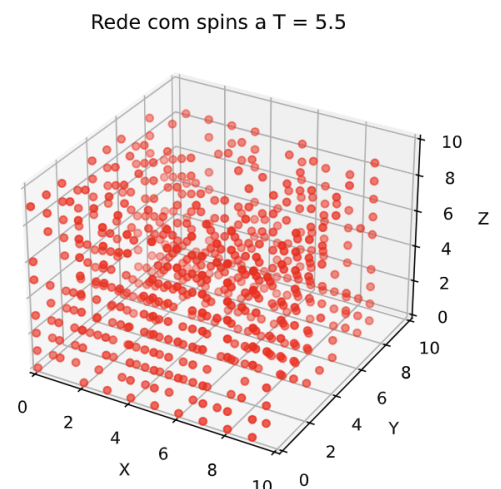
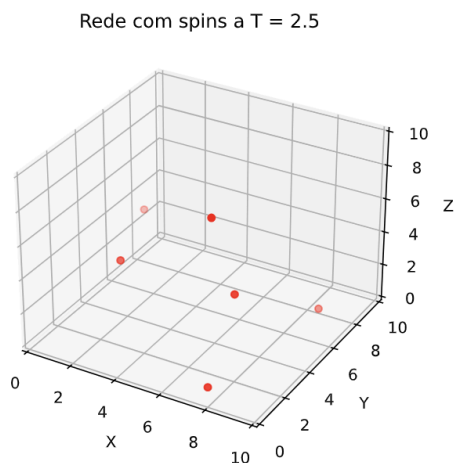
Por fim, é exibida uma mensagem com o tempo que cada gráfico demorou a ser criado, sendo, igualmente, apresentado o tempo total de execução da simulação.

5. Análise dos Resultados Obtidos

5.1. Parâmetros Usados nas Simulações 2D e 3D

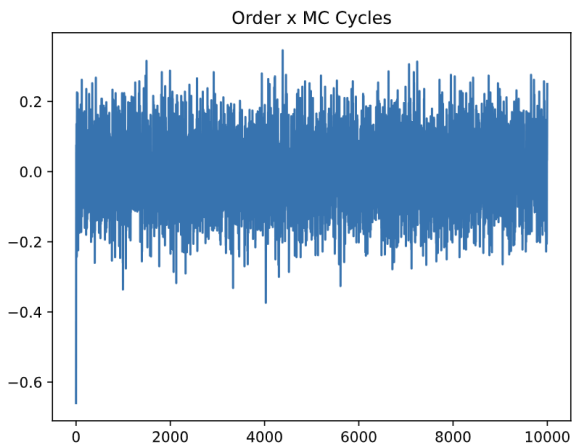
- Spin = -1
- Temperatura = 2.5 K
- Campo Magnético Inicial = 0.0
- Tamanho = 10
- Número de Ciclos de Monte Carlo = 10.000
- temperaturas = *np.arange(0.5, 5.5, 0.1)*
- Campo Magnético Externo Máximo = 5
- Valores do Campo Magnético = $[-5.0, -4.0, -3.0, -2.0, -1.0, 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0]$
- Temperaturas da Histerese = $[0.5, 2.4, 2.5, 2.6, 4.5]$

5.2. Rede 3D, para Diferentes Temperaturas

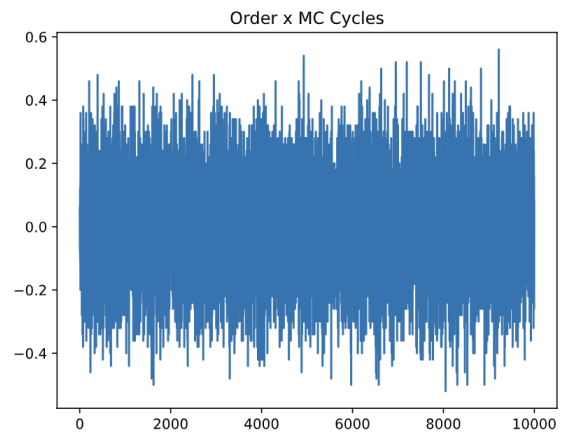


Como esperado, com o aumento da temperatura, há uma inversão de um número muito maior de spins.

5.3. Diferenças na Ordem entre a Rede 2D e 3D



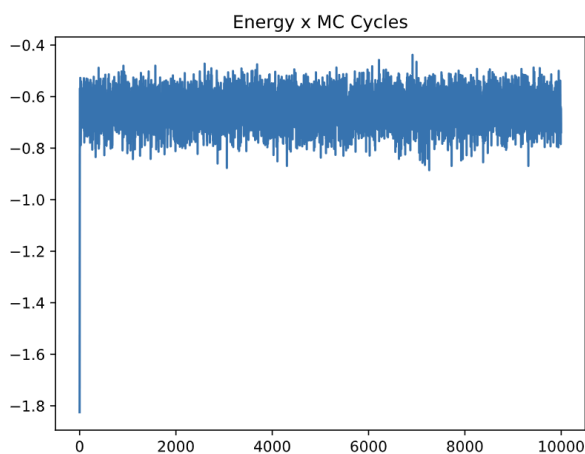
Rede 3D



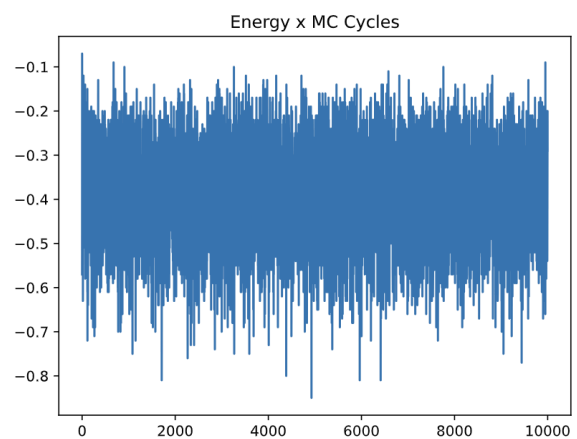
Rede 2D

Como podemos observar, na rede 3D, existe uma maior simetria, relativa ao grau de ordenação dos spins, para temperaturas iguais. Contudo, a estabilidade não é atingida, de imediato.

5.4. Diferenças na Energia entre a Rede 2D e 3D



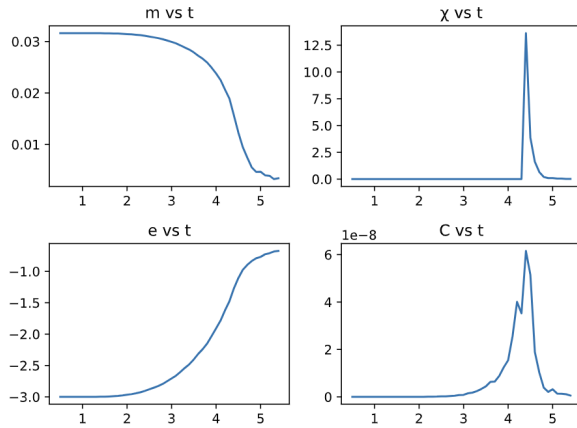
Rede 3D



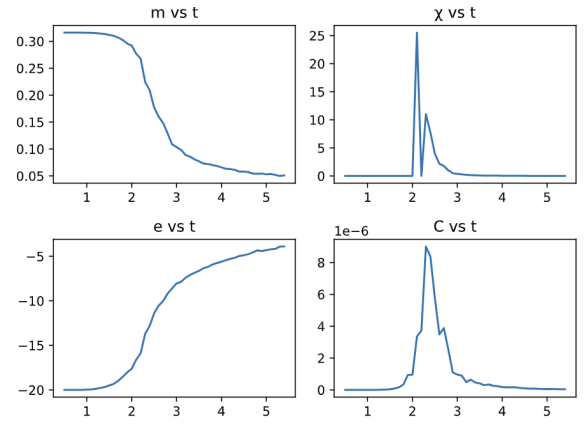
Rede 2D

Para o caso da energia em cada ponto, na rede 3D, é possível atingir uma maior estabilidade (menor variação de energia), dada a existência de um número mais elevado de vizinhos.

5.5. Grandezas Físicas a Analisar



Rede 3D



Rede 2D

O comportamento das quatro grandezas físicas em função da temperatura, t , coincide com o esperado.

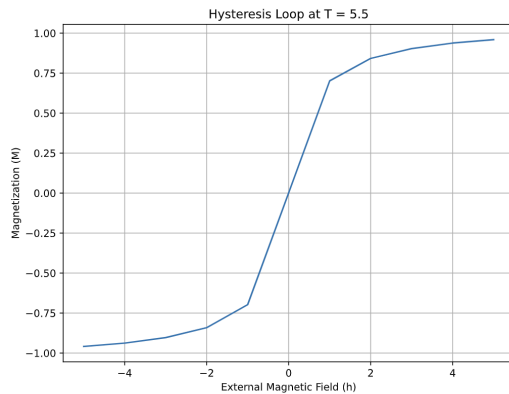
Antes de ocorrer a transição de fase, à temperatura de Curie, T_C , o material é ferromagnético. Como tal, os respectivos momentos magnéticos dispõem-se uniformemente, em determinadas regiões aleatórias, o que justifica o facto do momento magnético médio, m , permanecer aproximadamente constante. Com o aumento da temperatura, a orientação dos spins é, gradualmente, desfeita. Assim, para temperaturas suficientemente elevadas, dá-se a transição de fase, passando o material a comportar-se como paramagnético, e, consequentemente, a magnetização e o campo magnético do sistema tendem para zero.

A susceptibilidade magnética, χ , define-se como sendo a razão entre a magnetização e a intensidade do campo magnético aplicado. Para temperaturas inferiores a T_C , χ assume um valor positivo elevado, que não é, geralmente, proporcional ao campo magnético aplicado. A partir de T_C , esta grandeza física segue a conhecida Lei de Curie. Deste modo, χ começa a diminuir, já que o aumento da temperatura intensifica o movimento aleatório entre as moléculas, o que neutraliza a magnetização.

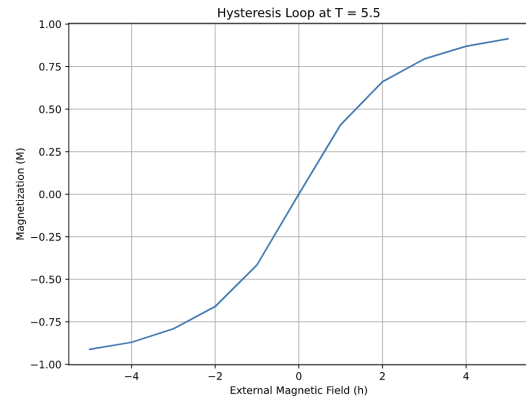
A energia média por ponto de rede, e , aumenta, tendendo para a saturação, tal como era expectável, dada a maior desordenação dos spins.

Quanto ao calor específico, C , a transição ferromagnético-paramagnético conduz a uma variação brusca desta propriedade, que atinge o seu valor máximo, à Temperatura de Curie, T_C , e, de seguida, decresce, abruptamente. Regista-se, assim, uma descontinuidade, para $t = T_C$.

5.6. Histerese Paramagnética



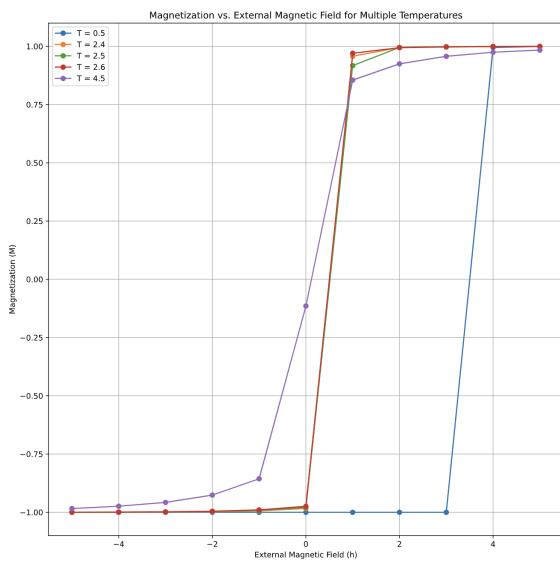
Rede 3D



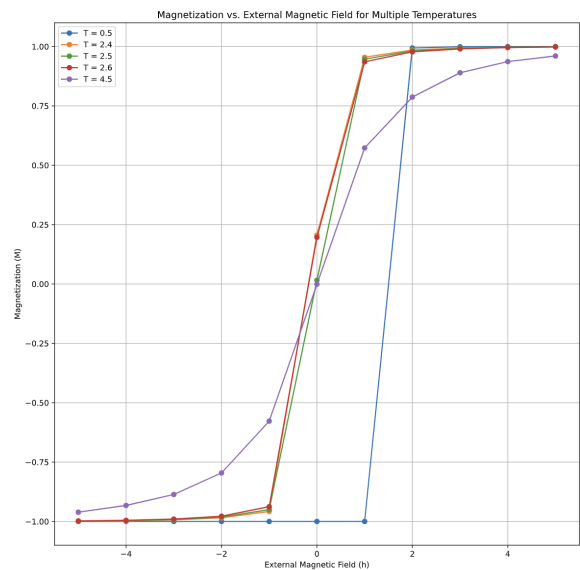
Rede 2D

A rede 2D apresenta transições com um menor declive (menos acentuadas), em comparação com a rede 3D, o que se deve às maiores dimensões e interações mais diversificadas entre spins, nesta última rede.

5.7. Histerese Paramagnética para Várias Temperaturas



Rede 3D



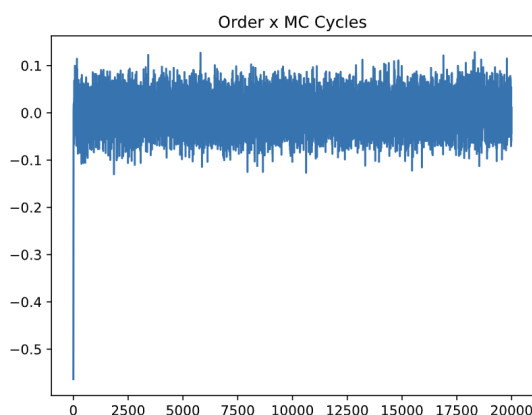
Rede 2D

O estudo da histerese paramagnética, em redes 2D e 3D, evidencia a influência significativa das dimensões da rede, nas características magnéticas associadas ao Modelo de Ising. Redes 3D apresentam uma curva de histerese mais complexa, devido ao maior número de interações entre spins, sobretudo, em torno da Temperatura de Curie, resultando em transições mais abruptas e variações mais notórias na magnetização, ao longo do ciclo aplicado de campo magnético externo.

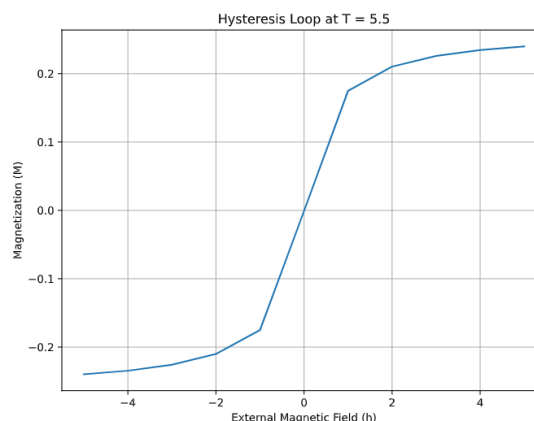
6. Conclusões

6.1. Resultados para um Maior Número de Ciclos de Monte Carlo

Após verificarmos que os valores obtidos estavam de acordo com o esperado, para 10.000 ciclos e uma rede de tamanho $10 \times 10 \times 10$, decidimos realizar uma simulação para 20.000 ciclos, com uma rede de $20 \times 20 \times 20$.



Como é visível neste gráfico da ordem, é possível obter uma maior simetria, usando estes parâmetros.



Para além disto, os valores conseguidos para a magnetização são, agora, muito menores, o que é justificado pela nova dimensão da rede.

Comparando uma simulação com 10.000 ciclos e uma rede de tamanho $10 \times 10 \times 10$, com uma simulação de 20.000 aplicada a uma rede de tamanho $20 \times 20 \times 20$, os gráficos obtidos apresentam aspetos semelhantes, o que pode ser explicado pela natureza estatística dos fenómenos simulados.

A simulação de 20.000 ciclos de Monte Carlo, numa rede maior, permite uma amostragem mais detalhada e uma melhor aproximação dos valores teóricos esperados.

6.1.1. Comparação dos Tempos de Execução

10.000 Ciclos de Monte Carlo e Rede $10 \times 10 \times 10$ (valores aproximados):

- Tempo de execução para a simulação inicial: 1 minutos;
- Tempo de execução para calcular as propriedades: 4 minutos;
- Tempo de execução para calcular a histerese: 1 minutos;
- Tempo de execução para calcular a magnetização, para múltiplas temperaturas, variando o campo magnético externo: 3 minutos;
- **Tempo total de execução: 9 minutos.**

20.000 Ciclos de Monte Carlo e Rede 20 x 20 x 20 (valores aproximados):

- Tempo de execução para a simulação inicial: 13 minutos;
- Tempo de execução para calcular as propriedades: 62 minutos;
- Tempo de execução para calcular a histerese: 11 minutos;
- Tempo de execução para calcular a magnetização, para múltiplas temperaturas, variando o campo magnético externo: 52 minutos;
- **Tempo total de execução: 138 minutos.**

Nota: Estes valores foram obtidos, usando um Intel Core i7-13700H (Velocidade base - 2.5Ghz), com 16 Gb de RAM.

6.2. Principais Dificuldades

Enfrentámos dificuldades na interpretação de alguns resultados da simulação. Analisar e compreender os dados gerados revelou-se mais complexo do que o previsto, exigindo um esforço adicional, para conectar os resultados práticos com os conceitos teóricos subjacentes.

Inicialmente, tivemos alguma dificuldade em adaptar a simulação para uma rede 3D, a partir da implementação, usando uma rede 2D.

6.3. Considerações Finais

Com este projeto, tivemos a oportunidade de aplicar muitos dos conhecimentos adquiridos, no decorrer das aulas teóricas. Conseguimos simular e analisar diversos fenómenos, que caracterizam o ferromagnetismo, podendo constatar as principais diferenças, nos resultados obtidos para redes 2D e 3D.

Concluimos que atingimos os objetivos pretendidos do trabalho, implementando, com sucesso, o Modelo de Ising, numa grelha cúbica 3D, e simulando, para diferentes temperaturas reduzidas e campos magnéticos externos.

Em suma, tratou-se de um trabalho enriquecedor, que nos permitiu desenvolver competências, ao nível do trabalho de grupo e capacidade de autonomia.