MÉTODO DE MONTE CARLO DO MODELO DE ISING 2D

ARTHUR KRINDGES[1]; CARLOS ALBERTO V. DE MORAIS JUNIOR[2]

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – arthurkrindges@gmail.com*
[2]*Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

Na matéria condensada, uma das subáreas da física, é estudado o comportamento de materiais constituídos por um grande número de entidade (moléculas, átomos, etc). Em especial o estudo de transições de fase e de propriedades magnéticas são de grande interesse para os avanços tecnológicos (CALLISTER, 2002). Um modelo teórico muito utilizado para o entendimento das transições de fase magnéticas é o modelo de Ising, que apresenta uma transição ferromagnética/paramagnética (SALINAS, 2005).

Para resolver o modelo de Ising é utilizado da Mecânica Estatística, podendo ele ser resolvido tanto por método analítico, usando teoria de campo médio ou por simulação via método de Monte Carlo (MMC) (PATHRIA, BEALE, 2011). Com isso, o presente trabalho tem por objetivo implementar a simulação de Monte Carlo para o modelo de Ising 2D e comparar com a solução exata.

2. METODOLOGIA

O modelo de Ising 2D é descrito por um Hamiltoniano (H) que é dado pela soma de interações aos pares de sítios (S) vizinhos em uma rede 2D, podendo os sítios assumirem dois valores ($S=\pm 1$), onde J é a variável de interação, sendo ela fixa,

$$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}^{N} S_i S_j \quad . \tag{1}$$

Pela Mecânica Estatística temos a função de partição (Z) que define a soma das probabilidades dos possíveis estados acessáveis do sistema em equilíbrio térmico. Bem como a média de alguma quantidade termodinâmica ($\langle A\rangle$)

$$Z=\sum_i e^{-\beta E_i} \quad , \quad \langle A\rangle=\frac{1}{Z}\sum_i A_i e^{-\beta E_i} \quad . \tag{2}$$

Onde $\beta=1/k_B T$, o qual T é a temperatura, k_B a constante de Boltzmann e E_i é a energia da i-ésima configuração. Para tratar de forma numérica é utilizado o MMC.

A simulação de Monte Carlo consiste em sucessivas escolhas aleatórias do sistema de interesse, sendo repedida inúmeras vezes para se chegar na configuração de equilíbrio. Com isso é feita a análise de grandezas estatísticas como média e desvio padrão ao longo do processo. No caso do modelo de Ising 2D a configuração é dada por $\{S_i\}=(S_1,S_2,\ldots,S_N)_i$ e $E_i=H(\{S_i\})$.

Com isso a simulação ou dinâmica de Metropolis segue a seguinte estrutura:

I. Inicia-se com uma configuração inicial aleatória $\{S_i\}$;
II. Geração de uma nova configuração aleatória $\{S_j\}$;
III. Calcula-se $dE=E_j-E_i$;
IV. Se $dE<0$, a configuração é substituída pela nova;

V. Se $dE \geq 0$ e caso $p = e^{-\beta dE}$ for maior que uma variável aleatória *r*, distribuída uniformemente no intervalo $(0,1)$, a configuração é substituída pela nova;

VI. Caso $r > p$ é gerado uma nova configuração aleatória.

Ao longo de cada passo do MMC é feito o cálculo de grandezas termodinâmicas, sendo elas a magnetização pelo número de sítios e a energia

$$m_{MMC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} S_i \quad , \quad E_{MMC} = H(\{S\}) \quad . \tag{3}$$

Após a dinâmica de Metropolis é feita a análise e obtenção estatística de quantidades termodinâmicas, entre elas a magnetização média e a energia média

$$\langle m \rangle = \frac{1}{MC - MCD} \sum_{i=MCD}^{MC} m_{MMC} \quad , \quad \langle E \rangle = \frac{1}{MC - MCD} \sum_{i=MCD}^{MC} E_{MMC} \quad , \tag{4}$$

onde MC é o número de repetições do MMC e MCD é o número de repetições descartadas, pois é necessário alguns passos para o sistema no estado inicial entrar na região de equilíbrio térmico.

Para o cálculo da susceptibilidade magnética e do calor específico usamos as relações

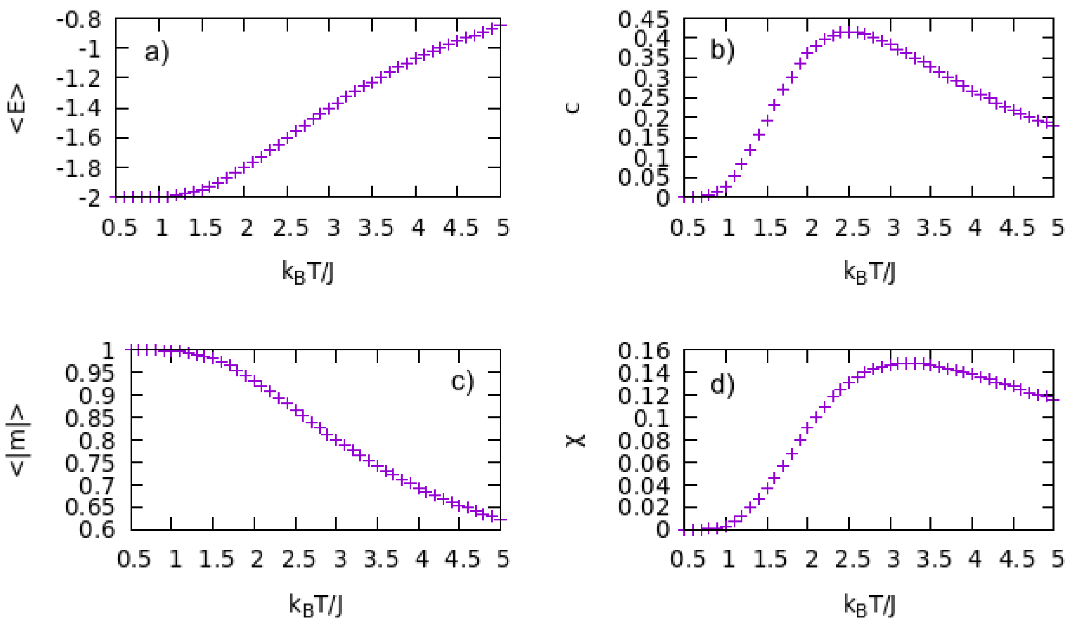
$$\chi = \beta N \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right) \quad , \quad c = \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad . \tag{5}$$

Assim, por meio de linguagem de programação *FORTRAN*, implementamos o método de Monte Carlo para o modelo de Ising 2D e calculamos as quantidades desejadas.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com a aplicação do método de Monte Carlo via código *FORTRAN* foi possível chegar a alguns resultados.

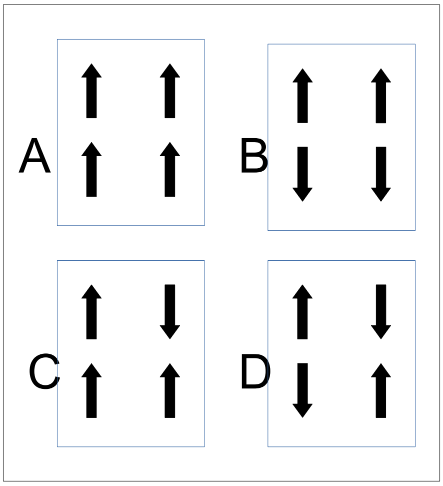
Figura 1: a) Energia média por sítio em função de k_BT/J; b) Calor específico por sítio em função de k_BT/J; c) Modulo da magnetização média por sítio em função de k_BT/J; d) Susceptibilidade magnética por sítio em função de k_BT/J. Usando MMC.



Para gerar a Figura 1 foi simulado o modelo de Ising 2D com L= 2, número de sítios por dimensão, usando MC = 10^5 e MCD = 5×10^3. No gráfico a) temos a energia média por sítio em função de k_BT/J, é esperado o aumento da energia média em função do aumento da temperatura. O gráfico b) apresenta o calor específico por sítio em função de k_BT/J, podemos analisar ainda um pico entre 2 e 3 para k_BT/J, indicando uma transição de fase. Já no gráfico c) temos o modulo da magnetização média por sítio em função de k_BT/J, podemos notar que ela decresce com o aumento da temperatura. No gráfico d) a susceptibilidade magnética é apresentada em função de k_BT/J, onde ela cresce até uma certa temperatura crítica e então decresce com o aumento da mesma, característico de uma transição de fase.

Fazendo agora a solução exata do modelo de Ising 2D com L=2, temos que as possíveis configurações dadas pela Figura 2, onde $\uparrow=+1, \downarrow=-1$.

Figura 2: Possíveis configurações de sítios.



Sabendo as possíveis configurações, podemos montar a função de partição com o auxílio da Tabela 1.

Tabela 1: Descrição do número de degenerescências, energia e magnetização total em função da configuração adotada.

Configuração	Degenerescências	Energia(E_i)	Magnetização total
A	2	-8J	+4;-4
B	4	0	0
C	8	0	+2;-2
D	2	+8J	0

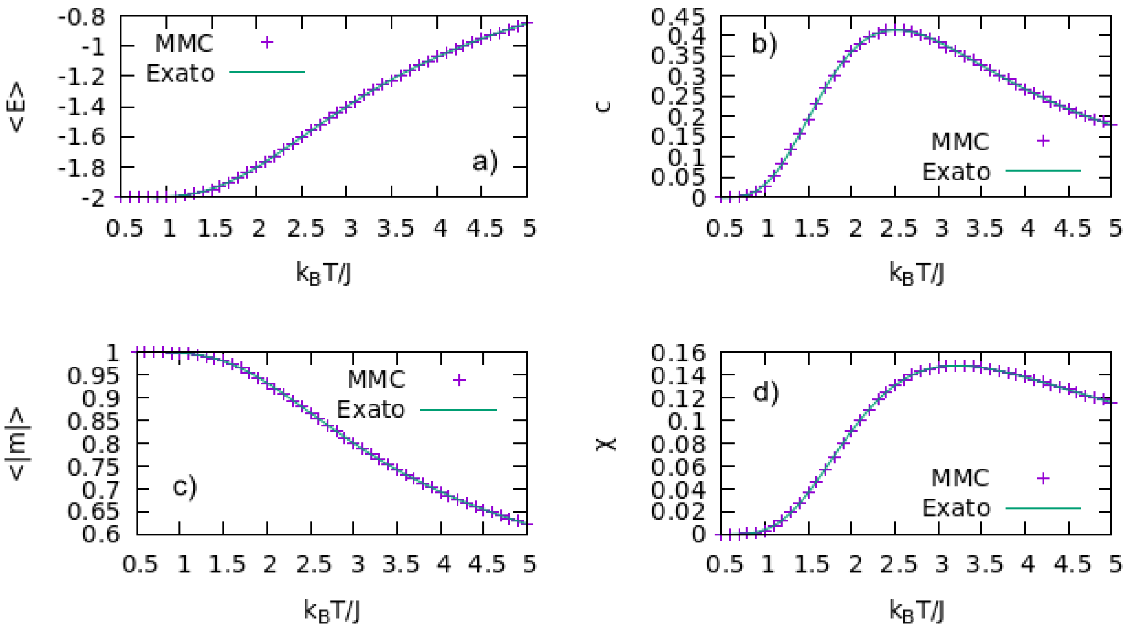
Calculando então a função de partição e os valores médios da energia, e magnetização, temos

$$Z=12+4\cosh(8\beta J),\ \langle E\rangle=\frac{-32\,senh(8\beta J)}{Z},\ \langle E^2\rangle=\frac{256\cosh(8\beta J)}{Z} \qquad (6)$$

$$\langle|M|\rangle=\frac{16+8e^{8\beta J}}{Z},\ \langle M^2\rangle=\frac{32+32e^{8\beta J}}{Z} \quad . \qquad (7)$$

Fazendo uso das equações (5) podemos gerar o comportamento da solução exata do modelo, usando os dados acima, e compara com os resultados da simulação MC. Com isso, obtemos a Figura 3.

Figura 3: a) Energia média por sítio em função de k_BT/J; b) Calor específico por sítio em função de k_BT/J; c) Modulo da magnetização média por sítio em função de k_BT/J; d) Susceptibilidade magnética por sítio em função de k_BT/J. Usando MMC e solução analítica exata.



Podemos notar que todas as grandezas termodinâmicas calculadas por simulação condizem com a solução exata esperada, calculadas usando as equações (6) e (7).

4. CONCLUSÕES

Podemos concluir que o MMC é uma ferramenta muito útil para tratar o modelo de Ising 2D, pois para N grande, é pouco prático encontrar a solução exata analiticamente, já que o total de possíveis configurações é de 2^N. Quando N tende a valores muito altos o MMC acaba por não resolver o problema em função do tempo computacional gasto ser muito grande. Com isso, os métodos aproximativos, como teoria de campo médio, acabam por exercer um papel mais adequado para descrição do modelo de Ising e de outros modelos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

PATHRIA, R. K.; BEALE, P. D. **Statistical Mechanics**. Boston: Academic Press, 2011.

SALINAS, Sílvio R. A. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: Edusp, 2005.

SANTOS, M. L. S**imulação de Monte Carlo no modelo de Ising na rede quadrada**. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) - Curso de Pós Graduação em Física, Universidade Federal de Minas Gerais.

KOTZE, J. **Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet**, 3 mar. 2008. Pré-impressão em https://arxiv.org/pdf/0803.0217.pdf.