



**INSTITUTO
FEDERAL**
Sertão de
Pernambuco

**INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO
PERNAMBUCANO
CAMPUS PETROLINA**

Ian de Jesus Fontenele Lopes

**Determinação da temperatura de transição de
fase do modelo de Ising bidimensional via
Simulação Monte Carlo**

Petrolina-PE

2024

Ian de Jesus Fontenele Lopes

Determinação da temperatura de transição de fase do modelo de Ising bidimensional via Simulação Monte Carlo

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Coordenação do curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano - campus Petrolina, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciado em Física.

Orientador: Prof. Dr. Cícero Thiago Gomes dos Santos

Petrolina-PE

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

L864 Lopes, Ian de Jesus Fontenele.

Determinação da temperatura de transição de fase do modelo de Ising bidimensional via Simulação Monte Carlo / Ian de Jesus Fontenele Lopes. - Petrolina, 2024.
54 f.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) -Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Campus Petrolina, 2024.
Orientação: Prof. Dr. Cícero Thiago Gomes dos Santos.

1. Física. 2. Mecânica Estatística. 3. Modelo de Ising. 4. Algoritmo de Metropolis. 5. Simulação Monte Carlo. I. Título.

CDD 530



INSTITUTO FEDERAL
Sertão Pernambucano
Campus Petrolina



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA SERTÃO PERNAMBUCANO
COORDENAÇÃO DE LICENCIATURA EM FÍSICA/ CAMPUS PETROLINA

ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO (TCC)

Ata nº 03/2024 da sessão de defesa de Trabalho de Conclusão de Curso do(a) aluno(a) **IAN DE JESUS FONTENELE LOPES**, do Curso Superior de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano - IFSertãoPE, *Campus* Petrolina, realizada no dia **30 de Setembro de 2024**.

Aos **trinta dias do mês de setembro de dois mil de vinte e quatro (30/09/2024)**, na sala D06 do Campus Petrolina do IFSertãoPE, sob a presidência do(a) professor(a) **Cícero Thiago Gomes dos Santos** (IFSertãoPE), reuniu-se a Banca Examinadora composta pelo presidente e pelos membros, os professores **Bruno Gomes da Costa** (IFSertãoPE) e **Erivelton Façanha da Costa** (IFSertãoPE). Às **dezenove horas (19h00)**, o presidente abriu a sessão de defesa de Trabalho de Conclusão de Curso do(a) aluno(a) **“IAN DE JESUS FONTENELE LOPES”**, orientado pelo(a) professor(a) **Cícero Thiago Gomes dos Santos**. Após a exposição do(a) aluno(a) e arguição da Banca, esta se reuniu reservadamente e decidiu pela **APROVAÇÃO** da aluna, com nota 97 (noventa e sete). Nada mais havendo a tratar, foi encerrada a sessão, da qual eu, **Cícero Thiago Gomes dos Santos**, professor(a), lavrei a presente ata que vai assinada por mim, pelos demais membros da Banca.

Petrolina, 30 de setembro de 2024.

**Cicero Thiago
Gomes dos
Santos:06644298400**

Digitally signed by Cicero Thiago Gomes dos Santos:06644298400, OU=IFSERTAOPE - Instituto Federal do Sertao Pernambucano, O=ICPEdu, C=BR
Reason: I am approving this document with my legally binding signature
Location:
Date: 2024.09.30 20:23:20-03'00'
Foxit PDF Reader Version: 2024.2.3

Prof. Dr. CÍCERO THIAGO GOMES DOS SANTOS

Documento assinado digitalmente
gov.br BRUNO GOMES DA COSTA
Data: 30/09/2024 20:28:47-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. BRUNO GOMES DA COSTA

Documento assinado digitalmente
gov.br ERIVELTON FACANHA DA COSTA
Data: 30/09/2024 20:36:06-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. ERIVELTON FAÇANHA DA COSTA

*Este trabalho é dedicado às crianças adultas que,
quando pequenas, sonharam em se tornar cientistas.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, dona Inacia Cládia de Jesus e Francisco Fontenele Lopes Filho, por todo apoio incondicional em todas as etapas da minha vida.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Cícero Thiago, que tenho o prazer imenso de chamar de amigo, por toda paciência e ensinamentos durante a execução deste trabalho, que foram além de experiências acadêmicas, mas também de vida. Ensinamentos estes que levarei para toda minha vida.

A Maysa, minha parceira de vida, que sempre me apoia e está comigo em todas as minhas conquistas e sonhos. Sem você tudo teria sido bem mais difícil.

A meu irmão de vida Fernando, que me incentivou a ingressar no curso.

Aos meus amigos, Erisvaldo, Ana Paula, Bruna, Mateus Bahia, Reinan, Haru, Felipe, Mateus Evangelista, Matheus Silva, Geovana e Eduardo, que fizeram a jornada deste curso ser mais leve e divertida.

A todo o corpo Docente do curso de Licenciatura em Física.

*“As máquinas me surpreendem
muito frequentemente.
(Alan Turing)”*

Resumo

O Modelo de Ising, proposto por Ernst Ising em 1925, é uma simplificação do modelo de Heisenberg que envolve variáveis discretas representando momentos de spin, os quais podem existir em dois estados, ± 1 e é uma ferramenta essencial na física estatística para estudar o comportamento magnético dos materiais. Utilizando uma hamiltoniana para descrever a energia total de um sistema de spins, o modelo tem sido amplamente aplicado em várias áreas da física teórica. Desde a solução exata para o modelo bidimensional, obtida por Lars Onsager em 1944, ele se tornou crucial para descrever transições de fase e comportamento coletivo em sistemas físicos. No presente trabalho, foi utilizado o algoritmo de Metropolis, proposto em 1953, que permite a geração de configurações de spins conforme uma distribuição de probabilidade adequada. O critério de Metropolis garante que configurações de energia mais baixa sejam preferencialmente aceitas, permitindo a exploração eficiente do espaço de configurações do sistema. Este método é comprovado eficaz em várias pesquisas, sendo uma ferramenta crucial na física estatística. O objetivo principal é aprender e aplicar a técnica de simulação por Monte Carlo, desenvolvendo um código para explorar diferentes configurações e propriedades do modelo, obtendo grandezas termodinâmicas e a temperatura de transição de fase do modelo de Ising em 2D. Especificamente, pretendeu-se resolver analiticamente o modelo usando técnicas de matriz de transferência e campo médio, escrever um código de simulação usando o algoritmo de Metropolis e realizar simulações com redes de tamanho finito variando de 8×8 a 64×64 com condições de contorno periódicas para obter a temperatura de transição de fase por extrapolação. Utilizou-se o gráfico T_c vs $1/L$, ou seja, a temperatura de transição de fase em função do inverso da dimensão da rede, e foi feita uma regressão linear para extrapolar os resultados. Esta abordagem permitiu uma compreensão detalhada das propriedades magnéticas do modelo de Ising e forneceu uma base sólida para futuras pesquisas na física estatística, utilizando métodos de Monte Carlo e algoritmos eficientes como o de Metropolis.

Palavras-chave: Mecânica Estatística, Modelo de Ising, Algoritmo de Metropolis, Transição de fase, Simulação Monte Carlo.

Abstract

The Ising Model, proposed by Ernst Ising in 1925, is a simplification of the Heisenberg model that involves discrete variables representing spin moments, which can exist in two states, ± 1 , and is an essential tool in statistical physics for studying the magnetic behavior of materials. Using a Hamiltonian to describe the total energy of a system of spins, the model has been widely applied in various areas of theoretical physics. Since the exact solution for the two-dimensional model, obtained by Lars Onsager in 1944, it has become crucial for describing phase transitions and collective behavior in physical systems. In the present work, the Metropolis algorithm, proposed in 1953, was used, which allows the generation of spin configurations according to an appropriate probability distribution. The Metropolis criterion ensures that configurations with lower energy are preferentially accepted, allowing for efficient exploration of the system's configuration space. This method has proven effective in various studies, being a crucial tool in statistical physics. The main objective is to learn and apply the Monte Carlo simulation technique, developing a code to explore different configurations and properties of the model, obtaining thermodynamic quantities and the phase transition temperature of the 2D Ising model. Specifically, the aim was to analytically solve the model using transfer matrix and mean field techniques, write a simulation code using the Metropolis algorithm, and carry out simulations on finite-size lattices ranging from 8×8 to 64×64 with periodic boundary conditions to obtain the phase transition temperature by extrapolation. The T_c vs $1/L$ graph, that is, the phase transition temperature as a function of the inverse of the lattice size, was used, and a linear regression was performed to extrapolate the results. This approach allowed for a detailed understanding of the magnetic properties of the Ising model and provided a solid foundation for future research in statistical physics, using Monte Carlo methods and efficient algorithms such as Metropolis.

Keywords: Statistical Mechanics, Ising Model, Metropolis Algorithm, Phase Transition, Monte Carlo Simulation.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$	23
Figura 2 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(B + qJm)]$ com $\beta qJ = 0.5$	23
Figura 3 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$ com $\beta qJ = 1$	23
Figura 4 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$ com $\beta qJ = 1.5$	24
Figura 5 – Arranjo linear e circular fechado de spins	25
Figura 6 – Gráficos da magnetização.	28
Figura 7 – Gráficos da susceptibilidade magnética e calor específico.	29
Figura 8 – Demonstração simples do Método Monte Carlo.	31
Figura 9 – Circunferência circunscrita a um quadrado de lado 2.	32
Figura 10 – Gráfico da energia média por sítio pela temperatura	41
Figura 11 – Gráfico da magnetização média por sítio pela temperatura	42
Figura 12 – Gráfico da susceptibilidade média por sítio pela temperatura	42
Figura 13 – Gráficos do calor específico por sítio pela temperatura.	43
Figura 14 – Temperatura crítica extrapolada.	44
Figura 15 – Evolução da rede de spins 64x64 exposta ao banho térmico.	45

Sumário

1	MECÂNICA ESTATÍSTICA PARA APRESSADOS	11
1.1	Ensemble microcanônico	11
1.2	Ensemble canônico	13
2	MODELO DE ISING	14
3	SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA O MODELO DE ISING	17
3.1	Solução via teoria de campo médio: em uma dimensão	17
3.1.1	Reescrevendo o Hamiltoniano	17
3.2	Solução via matriz de transferência: em uma dimensão	24
4	SIMULAÇÃO MONTE CARLO	30
4.1	Introdução	30
4.2	O Método Monte Carlo	31
4.3	Cadeia de Markov e Equação Mestra	34
4.4	Algoritmo de Metropolis	35
4.4.1	Implementação do Algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising bidimensional	37
5	RESULTADOS	40
5.1	Energia	40
5.2	Magnetização	41
5.3	Susceptibilidade magnética	42
5.4	Calor específico	43
5.4.1	Estimativa para a temperatura de transição de fase	43
6	CONCLUSÃO	46
	REFERÊNCIAS	47
	APÊNDICE A – ALGORITMO DE METROPOLIS ESCRITO EM PYTHON	49
	APÊNDICE B – DERIVADAS DA ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ	53

1 Mecânica Estatística para apressados

A Mecânica Estatística é um ramo da Física que sustenta-se nas teorias de probabilidades com propósito de descrever o comportamento termodinâmico de sistemas macroscópicos, como por exemplo fluido e sólidos. Por meio da Mecânica Estatística, é possível compreender como as propriedades emergentes de grandes conjuntos de partículas podem ser previstas a partir do comportamento individual das partículas [1].

De acordo com o autor [Huang](#): “a mecânica estatística está preocupada com as propriedades da matéria em equilíbrio no sentido empírico usado na termodinâmica”, ou seja, as grandezas macroscópicas de estado são determinadas pela média dos valores microscópicos de suas propriedades [2]. Por exemplo, a pressão de um gás resulta das colisões das moléculas com uma superfície, enquanto a temperatura é diretamente relacionada à energia cinética média das partículas.

Este ramo da física ainda pode ser dividido em duas categorias: Mecânica Estatística de equilíbrio e Mecânica Estatística de não-equilíbrio. A Mecânica Estatística de não-equilíbrio aborda sistemas físicos que estão fora do equilíbrio termodinâmico. Entre os tópicos centrais da mecânica estatística de não equilíbrio estão as flutuações termodinâmicas, que descrevem as variações temporárias nas propriedades macroscópicas de um sistema, como temperatura e pressão. O estudo dessas flutuações é essencial para compreender os processos irreversíveis que ocorrem em sistemas fora do equilíbrio, como a condução de calor, difusão de partículas e a viscosidade [3].

Já a mecânica estatística de equilíbrio busca relacionar as médias das propriedades microscópicas com as propriedades macroscópicas no limite termodinâmico (Um sistema é dito no limite termodinâmico quando todas as suas propriedades macroscópicas, como temperatura, pressão e volume, permanecem constantes ao longo do tempo) [3]. No equilíbrio destaca-se a importância da teoria dos ensembles. Nessa teoria, um ensemble estatístico é definido como uma distribuição de probabilidade dos diferentes estados de um sistema. Dentro da teoria dos ensembles, podemos ressaltar os ensembles microcanônico e canônico descritos a seguir.

1.1 Ensemble microcanônico

A principal característica do ensemble microcanônico é que ele representa um sistema isolado, onde não há troca de energia ou partículas com o ambiente externo. A

energia total do sistema é fixa, o que implica que o sistema tem probabilidades iguais de estar em qualquer um dos microestados possíveis, desde que todos eles tenham a mesma energia, refletindo assim no Postulado fundamental da Mecânica Estatística: “*Todos os estados microscópicos acessíveis a um sistema fechado em equilíbrio são igualmente prováveis*” [4].

O número de estados microscópicos de um dado fluido termodinâmico com energia interna E_i , volume V e um número de partículas N é:

$$\Omega = \Omega(E_i, V, N), \quad (1.1)$$

E a probabilidade de encontrar o sistema em uma dada energia E_i é:

$$P(E_i) \propto \Omega(E_i, V, N), \quad (1.2)$$

satisfazendo à condição:

$$\sum_i P(E_i) = 1. \quad (1.3)$$

A conexão com termodinâmica é feita através da entropia, uma vez que a entropia pode ser definida como uma medida do número de microestados acessíveis ao sistema, dada uma energia total fixa. A entropia pode ser expressa da seguinte maneira:

$$S = k_B \ln(\Omega), \quad (1.4)$$

onde Ω representa o número de microestados possíveis e k_B é a constante de Boltzmann. E assim como na termodinâmica, essa função contém toda informação termodinâmica do sistema.

Derivando a entropia S com relação a energia interna U , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial U} \frac{1}{k_B} &= \frac{\partial}{\partial U} \ln(\Omega) \\ \frac{1}{k_B T} &= \frac{\partial}{\partial U} \ln(\Omega) \end{aligned} \quad (1.5)$$

O que significa que a conexão com a termodinâmica nos permite escrever a temperatura em termos da derivada do logaritmo natural do número de microestados em relação a energia interna. Onde a razão $\frac{1}{k_B T}$ chamamos de β para poupar notação.

Apesar do ensemble microcanônico ser aplicado a poucos sistemas físicos reais por se tratar de um sistema isolado, ele tem grande importância na Mecânica Estatística por ser um modelo muito simples e poderoso que serve de base para os outros ensembles [4].

1.2 Ensemble canônico

O ensemble canônico descreve sistemas isolados que estão em contato térmico com um reservatório de calor, permitindo trocas de energia, mas mantendo constantes o número de partículas N , o volume V e a temperatura T do sistema.

Nesse ensemble, o sistema como um todo, ou seja, o reservatório de calor mais o sistema físico de interesse, tem probabilidades iguais para os microestados possíveis, mas os diferentes microestados do sistema físico de interesse não têm a mesma probabilidade [4]. A probabilidade de o sistema de interesse estar em um microestado específico depende da energia E_i desse microestado e é dada pela distribuição de Boltzmann:

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (1.6)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ é o inverso da temperatura multiplicado pela constante de Boltzmann, e Z é a função de partição, que normaliza a distribuição e é dada por:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (1.7)$$

A conexão com a termodinâmica se dá por meio da energia livre de Helmholtz e fazendo o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). A partir disso a energia livre f por sítio é:

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} k_B T \ln Z, \quad (1.8)$$

e novamente essa função contém toda informação termodinâmica do sistema.

A mecânica estatística nos permite estudar uma ampla gama de fenômenos. Os mais relevantes para este trabalho são aqueles que ocorrem em sistemas com descontinuidades analíticas ou singularidades em suas funções termodinâmicas, ou seja, sistemas que apresentam transições de fase [5].

2 Modelo de Ising

Para desenvolver uma teoria microscópica das transições magnéticas, é útil considerar um modelo que incorpore interações de curto alcance em uma rede de dimensão R . Com esse propósito, em 1920, Lenz sugeriu a seu aluno de doutorado Ising um modelo de spins que se tornou não apenas um dos mais significativos, mas também um dos mais referenciados. Algum tempo depois, Ising encontrou a solução exata para o caso unidimensional [6].

Somente em 1944, Onsager conseguiu resolver analiticamente o caso bidimensional do modelo, considerando um campo externo nulo [7]. Até hoje (2024), não existe uma solução analítica para o modelo em duas dimensões com campo externo aplicado, nem para dimensões superiores. A ausência de uma solução exata está relacionada à complexidade adicional introduzida pelo campo externo, que destrói as simetrias e simplificações que permitem a resolução analítica no caso sem campo.

O modelo de Ising é um modelo magnético que envolve variáveis discretas representando momentos de spin, os quais podem existir em dois estados, ± 1 , em uma rede de N sítios. O modelo de Ising pode ser estudado no caso unidimensional, bidimensional em uma rede qualquer: quadrada, triangular, hexagonal ou no caso tridimensional: cúbica simples, cúbica de face centrada etc.

Cada sítio na rede interage com o campo magnético de seus vizinhos mais próximos e também pode interagir com um campo magnético externo aplicado. Conforme descrito por [Salinas](#), o hamiltoniano que descreve o modelo de Ising é formulado como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2.1)$$

onde S_i é uma variável que pode assumir os valores ± 1 , a notação $\langle i, j \rangle$ representa a soma que deve ser realizada entre os sítios dos primeiros vizinhos que interagem entre si, e, J representa a energia de interação de troca entre os spins. No caso de J ser positivo temos um estado ferromagnético e no caso de J ser negativo temos um estado antiferromagnético [1]. A interação de troca tem sua origem em efeitos quânticos, particularmente na superposição das funções de onda orbitais de elétrons próximos um do outro [8]. O segundo termo envolve as interações entre os spins e um campo externo B .

Para determinar o comportamento das funções termodinâmicas no modelo de Ising,

é necessário primeiro definir sua função de partição canônica. A partir dela, pode-se obter as funções desejadas. A função de partição canônica é dada por:

$$Z_N = Z(T, B, N) = \sum_{\langle S_i \rangle} e^{-\beta H}, \quad (2.2)$$

onde a soma é realizada sobre todas as 2^N configurações possíveis da rede de spins S_i . $\beta = \frac{1}{k_B T}$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Logo em seguida, devemos obter a energia livre de Helmholtz por sítio:

$$f = f(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right), \quad (2.3)$$

a partir da qual se tem toda informação termodinâmica do sistema.

Em 1925, Ising resolveu exatamente o modelo unidimensional e ficou desapontado ao descobrir que a energia livre é perfeitamente analítica, exceto em $T = H = 0$. Isso significa que não há transição de fase nesse modelo para o caso unidimensional em temperaturas finitas. A solução bidimensional do modelo de Ising, descoberta por Onsager, é um marco no desenvolvimento das modernas teorias críticas. Onsager demonstrou que, para uma rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos e campo externo nulo ($B = 0$), o calor específico diverge assintoticamente de forma logarítmica [9]:

$$c_{H=0} \cong \ln |T - T_c|, \quad (2.4)$$

cujas a temperatura crítica é definida:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (2.5)$$

Portanto, o modelo de Ising bidimensional exibe uma transição de fase contínua quando o campo externo é nulo.

A importância do modelo de Ising reside na sua simplicidade e capacidade de capturar a essência dos fenômenos críticos e transições de fase em sistemas físicos. Mesmo com essa simplicidade, o modelo de Ising é capaz de reproduzir comportamentos complexos, como a transição de fase de um estado ordenado (magnetizado) para um desordenado (não magnetizado) quando a temperatura do sistema é elevada.

Se tornando uma poderosa ferramenta para a compreensão de uma vasta gama de fenômenos em diferentes disciplinas. Seu estudo tem proporcionado insights valiosos sobre

o comportamento de sistemas complexos e continua a ser uma área ativa de pesquisa, com novas aplicações e generalizações surgindo constantemente. Como por exemplo, no artigo: “*Epidemics, the Ising-model and percolation theory: A comprehensive review focused on Covid-19*” que usa o modelo de Ising para descrever a propagação da Covid-19 [10].

Outro exemplo é no artigo: “*Learning the Ising model with generative neural networks*” que utiliza o modelo de Ising na modelagem de redes neurais (machine learning), onde os spins representam neurônios que podem estar em um estado de excitação (ligado) ou repouso (desligado). A interação entre os neurônios pode ser mapeada pelas interações entre spins, permitindo o estudo de padrões de ativação em redes neurais e aprendizado [11].

O objetivo deste trabalho é simular computacionalmente o modelo de Ising na fase ferromagnética, especificamente em uma rede quadrada finita em duas dimensões (2D), para obter as grandezas termodinâmicas do sistema e usar os resultados para investigar a temperatura de transição de fase. Várias técnicas numéricas permitem localizar a temperatura crítica com uma certa margem de erro [12]. Uma dessas técnicas é o método de Monte Carlo, que será melhor descrito no capítulo 4. A seguir serão mostradas duas técnicas de solução analítica para o modelo em 1D.

3 SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA O MODELO DE ISING

3.1 Solução via teoria de campo médio: em uma dimensão

O modelo Ising apresenta solução exata somente em uma e duas dimensões, embora tais soluções não sejam simples. No entanto, é possível uma solução aproximada em qualquer número de dimensões utilizando a abordagem da teoria de campo médio (TCM), geralmente conhecida apenas como campo médio. Essa técnica parte do pressuposto de que as flutuações térmicas do sistema são relativamente pequenas e podem ser desconsideradas em certa medida [13].

A partir dessa premissa, podemos tratar um sistema de partículas interagentes como um sistema de partículas não-interagentes, em que cada partícula interage apenas com um “campo médio” que reflete o comportamento médio das partículas ao seu redor. Em outras palavras, a TCM separa efetivamente o hamiltoniano em um hamiltoniano mais simples, descrevendo um sistema sem interações. Isso o torna um método poderoso frequentemente utilizado na física para investigar o comportamento de sistemas complexos de muitos corpos que não podem ser resolvidos exatamente [5].

Embora as previsões quantitativas feitas pela TCM sejam imprecisas, ela corretamente descreve o comportamento qualitativo do modelo de Ising em dimensões iguais ou superiores a duas. Isso se deve ao fato de que as flutuações têm maior relevância em dimensões menores, tornando a aproximação TCM menos precisa nessas condições.

3.1.1 Reescrevendo o Hamiltoniano

Para reformular o hamiltoniano de Ising usando TCM, começamos escrevendo cada spin nos termos da interação de spin $S_i S_j$ na forma:

$$S_i = \langle S_i \rangle + \delta S_i, \quad (3.1)$$

onde:

$$\delta S_i \equiv S_i - \langle S_i \rangle, \quad (3.2)$$

captura as flutuações sobre o valor médio de S_i . Então, os termos de interação de spin tornam-se:

$$\begin{aligned} S_i S_j &= (\langle S_i \rangle + \delta S_i)(\langle S_j \rangle + \delta S_j) \\ &= \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle \delta S_j + \langle S_j \rangle \delta S_i + \delta S_i \delta S_j. \end{aligned}$$

Como $\delta S_{i,j}$ é muito pequeno, podemos ignorar os termos quadráticos. Supondo que as flutuações são pequenas, então $S_i S_j$ é aproximadamente:

$$\begin{aligned} S_i S_j &\cong \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle \delta S_j + \langle S_j \rangle \delta S_i \\ &\cong \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle (\langle S_j \rangle - \langle S_i \rangle) + \langle S_j \rangle (S_i - \langle S_j \rangle) \\ &\cong \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_j \rangle S_i - \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle. \end{aligned}$$

Assim:

$$S_i S_j \cong \langle S_j \rangle S_i + \langle S_i \rangle S_j - \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle. \quad (3.3)$$

Uma vez que o sistema é translacionamente invariante, o valor médio $\langle S_i \rangle$ é independente do sítio, por isso temos:

$$\langle S_i \rangle = \langle S_j \rangle = m, \quad (3.4)$$

onde m é magnetização. Portanto:

$$S_i S_j = m S_i + m S_j - m^2 = m[(S_i + S_j) - m]. \quad (3.5)$$

Então, podemos aproximar a Hamiltoniano de Ising:

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

para:

$$H_{CM} = -Jm \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j - m) - B \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3.6)$$

onde: H_{CM} é o Hamiltoniano do campo médio. Esse Hamiltoniano é uma aproximação, então:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i = \sum_{\langle i,j \rangle} S_j. \quad (3.7)$$

Devido a simetria de i e j na soma sobre os vizinhos mais proximos, podemos escrever:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j) = \sum_{\langle i,j \rangle} 2S_i, \quad (3.8)$$

então:

$$H_{CM} = -Jm \sum_{\langle i,j \rangle} (2S_i - m) - B \sum_{i=1}^N S_i. \quad (3.9)$$

Podemos escrever a soma sobre os vizinhos mais proximos como:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in vmp(i)}, \quad (3.10)$$

onde o parâmetro $\frac{1}{2}$ é para eliminar as contagens duplas e $vmp(i)$ representa os vizinhos mais proximos de i . Como não há dependência explicita em j , então:

$$\sum_{j \in vmp(i)} = q, \quad (3.11)$$

onde q representa a soma dos vizinhos mais próximos. Logo:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} = \frac{q}{2} \sum_{i=1}^N. \quad (3.12)$$

Podemos reescrever H_{CM} como:

$$\begin{aligned}
H_{CM} &= -\frac{qJm}{2} \sum_{i=1}^N (2S_i - m) - B \sum_{i=1}^N S_i \\
&= -\frac{qJm}{2} \sum_{i=1}^N 2S_i + \frac{qJm}{2} \sum_{i=1}^N m - B \sum_{i=1}^N S_i \\
&= \frac{NqJm^2}{2} - qJm \sum_{i=1}^N S_i - B \sum_{i=1}^N S_i \\
&= \frac{NqJm^2}{2} - (B + qJm) \sum_{i=1}^N S_i,
\end{aligned}$$

assim:

$$H_{CM} = \frac{NqJm^2}{2} - B_E \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3.13)$$

onde: $B_E = B + qJm$

Conceitualmente significa que as partículas não interagem mais umas com as outras nessa aproximação, mas interagem com um campo magnético efetivo H_E , que é composto pelo campo externo H e o campo médio qJm induzido pelas partículas vizinhas.

Calculando a função de partição:

$$Z_{CM} = \sum_{S_{i\pm 1}} e^{-\beta H}, \quad (3.14)$$

onde esta soma representa todas as configurações viáveis do sistema. No contexto do modelo de Ising, essa soma pode ser expressa explicitamente como:

$$\begin{aligned}
Z_{CM} &= \sum_{S_{i\pm 1}} e^{-\beta H_{CM}} \\
&= \prod_{i=1}^N \left(\sum_{S_{i\pm 1}} \right) e^{H_{CM}} \\
&= \prod_{i=1}^N \left(\sum_{S_{i\pm 1}} \right) e^{-\beta \left(\frac{NqJm^2}{2} + B_E \sum_{S_j=1}^N S_j \right)} \\
&= e^{-\frac{\beta NqJm^2}{2}} \prod_{i=1}^N \left(\sum_{S_{i\pm 1}} \right) e^{\beta B_E S_i} \\
&= e^{-\frac{\beta NqJm^2}{2}} \prod_{i=1}^N \left(e^{\beta B_E} + e^{-\beta B_E} \right),
\end{aligned}$$

assim:

$$Z_{CM} = e^{-\frac{\beta N q J m^2}{2}} [2 \cosh(\beta B_E)]^2. \quad (3.15)$$

Sabemos que a magnetização m é dada por:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle, \quad (3.16)$$

onde $\langle S_i \rangle$ é dado por:

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{S_i \pm 1} (S_i e^{-\beta H})}{Z}. \quad (3.17)$$

Podemos reescrever m como:

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sum_{S_i \pm 1} (S_i e^{-\beta H_{CM}})}{Z_{CM}} \right] \\ &= \frac{1}{N} \frac{1}{Z_{CM}} \sum_{S_i \pm 1} \sum_{i=1}^N S_i e^{-\beta H}, \end{aligned}$$

note que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_{CM}}{\partial B_E} &= \frac{\partial}{\partial B_E} \sum_{S_i \pm 1} (e^{-\beta H_{CM}}) \\ &= \sum_{S_i \pm 1} \left(\frac{\partial}{\partial B_E} e^{-\beta B_E} \right) \\ &= -\beta \sum_{S_i \pm 1} \left(\frac{\partial H_{CM}}{\partial B_E} e^{-\beta H_{CM}} \right) \\ &= -\beta \sum_{S_i \pm 1} \left[\frac{\partial}{\partial B_E} \left(\frac{N q J m^2}{2} - B_E \sum_{i=1}^N S_i \right) \right] \\ \frac{\partial Z_{CM}}{\partial B_E} &= \beta \sum_{S_i \pm 1} \left[\sum_{i=1}^N S_i e^{-\beta H_{CM}} \right], \end{aligned}$$

então:

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{1}{N\beta} \frac{1}{Z_{CM}} \frac{\partial Z_{CM}}{\partial B_E} \\
 m &= \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial B_E} (\ln(Z_{CM})).
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Substituindo Z_{CM} , temos:

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial H_E} \left[\ln \left[e^{-\beta \frac{NqJm^2}{2}} (2 \cosh(\beta B_E))^N \right] \right] \\
 &= \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial B_E} \left[-\beta \frac{NqJm^2}{2} + N \ln Z_{CM} + N \ln [\cosh(\beta B_E)] \right] \\
 &= \tanh(\beta B_E),
 \end{aligned}$$

portanto:

$$m = \tanh[\beta(B + qJm)], \tag{3.19}$$

onde a equação (3.19) é uma equação transcendental, ou seja, é uma equação irreduzível. No entanto, podemos resolver m graficamente traçando m e $\tanh[\beta(B + qJm)]$ (para valores fixos de β , B , q , e J).

Vamos considerar o caso especial de $B = 0$. Traçamos m e $\tanh(\beta qJm)$ no mesmo gráfico para alguns valores de βqJ . Podemos ver graficamente que as soluções são qualitativamente diferente quando $\beta qJ \leq 1$ e $\beta qJ > 1$. Esses dois casos podem ser entendidos da seguinte forma:

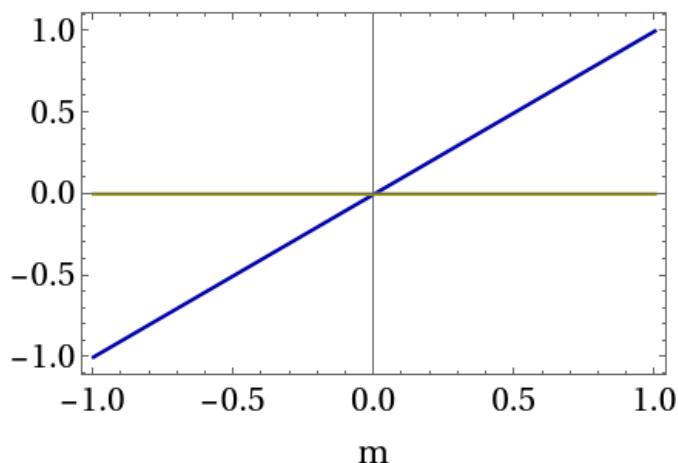
Para $\beta qJ \leq 1$ (i.e, $k_B T \geq qJ$): Existe apenas uma solução: $m = 0$. Isso corresponde ao sistema em estado paramagnético. Mostrado na figura 1.

Para $\beta qJ > 1$ (i.e., $k_B T < qJ$): Existem três soluções: $m = 0$ e $m = \pm m_0$, onde $m_0 \leq 1$. As soluções $m = \pm m_0$ correspondem ao sistema estar em estado ferromagnético (o sistema está magnetizado). A solução $m = 0$ torna-se instável, então fisicamente apenas observamos $m = m_0$ ou $m = -m_0$ nessa temperaturas. Mostrado nas figuras 2, 3 e 4, variando βqJ de 0.5 até 1.5.

A temperatura crítica T_c abaixo da qual o sistema se torna espontaneamente magnetizado sem quaisquer campos magnéticos externos é, portanto, dado por:

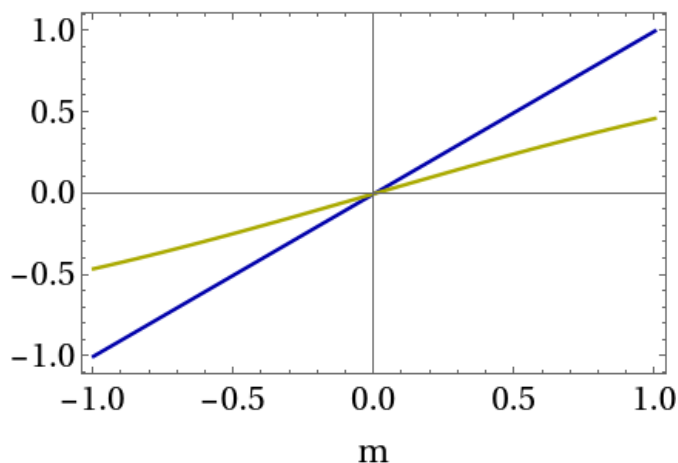
$$k_B T_c = qJ. \tag{3.20}$$

Figura 1 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$



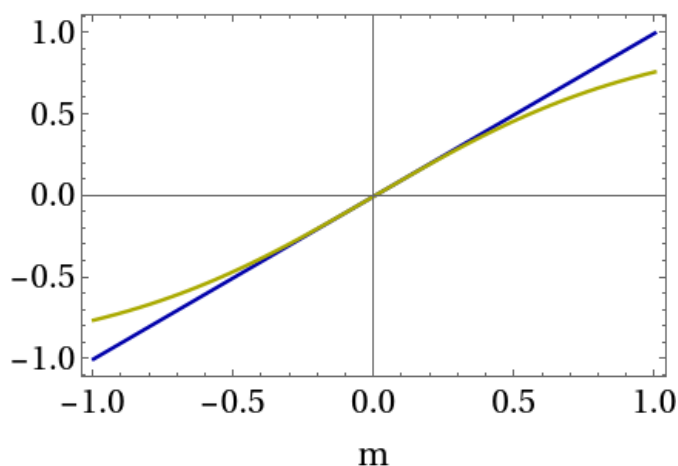
Fonte: Autor

Figura 2 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(B + qJm)]$ com $\beta qJ = 0.5$



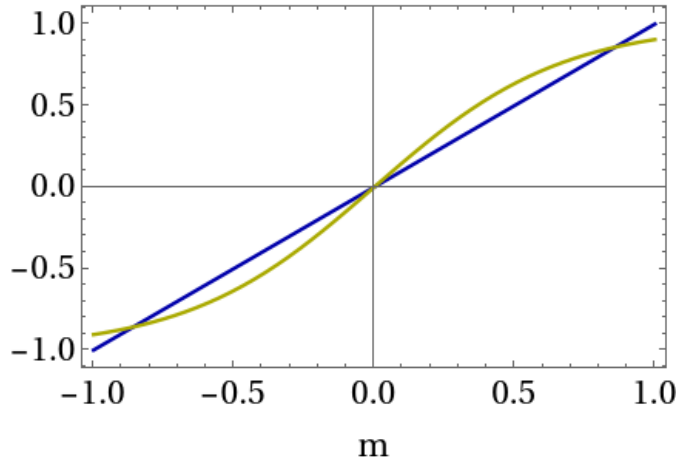
Fonte: Autor

Figura 3 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$ com $\beta qJ = 1$



Fonte: Autor

Deve-se notar que para o caso 1D, a TCM prevê assim uma transição de fase magnética em $k_B T_c = 2J$; no entanto, resolvendo exatamente este sistema, descobrimos

Figura 4 – Gráfico da magnetização m e $\tanh[\beta(h + qJm)]$ com $\beta qJ = 1.5$


Fonte: Autor

que de fato não há transição fase em 1D. As flutuações térmicas revelaram-se fortes o suficiente para destruir o sistema ordenação magnética em 1D, então a TCM fornece um resultado qualitativamente incorreto neste caso específico [15].

Conforme mencionado anteriormente, a TCM é mais precisa em dimensões superiores. Por exemplo, para o caso 2D numa rede quadrada, a TCM prevê $k_B T_c = 4J$, enquanto resolvendo o sistema exatamente, descobrimos que $k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \cong 2,269J$. Observe também que, como a TCM assume que as flutuações são pequenas, geralmente superestima a tendência do sistema de ordenar e, portanto, superestima o valor de T_c .

3.2 Solução via matriz de transferência: em uma dimensão

Na mecânica estatística, a técnica da matriz de transferência é usada para resolver modelos de spins clássicos unidimensionais, reescrevendo a função de partição como uma matriz. As propriedades termodinâmicas do sistema são determinadas pelos autovalores dessa matriz, com a energia livre dependendo do maior autovalor. Ela também é útil em modelos bidimensionais, embora nesses casos a matriz seja infinita e exija uma análise matemática mais avançada. [5].

A aplicando da técnica da matriz de transferência ao modelo de Ising nos permite simplificar o somatório em todos os termos em uma soma de dois autovalores.

Em um campo magnético externo B , a energia de configuração especificada por S_1, S_2, \dots, S_N é:

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - B \sum_{i=1}^N S_i. \quad (3.21)$$

Adotando a condição de contorno periódica:

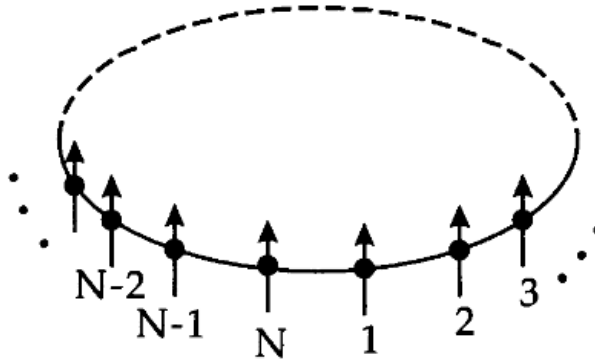
$$S_{N+1} = S_1, \quad (3.22)$$

isto torna a topologia da cadeia de um círculo, mostrado na figura 5. Escrevendo a função de partição, temos:

$$Z(B, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{\beta \left[\sum_{i=1}^N (JS_i S_{i+1} + BS_i) \right]}, \quad (3.23)$$

onde: $S_i = \pm 1$.

Figura 5 – Arranjo linear e circular fechado de spins



Fonte: Thermodynamics and Statistical Mechanics, Walter Greiner, Ludwig Neise, Horst Stöcker, pág. 438.

Escrevendo a função de partição explicitamente, temos:

$$Z(B, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{\beta \left[\sum_{i=1}^N (JS_i S_{i+1} + \frac{1}{2} B(S_i + S_{i+1})) \right]}. \quad (3.24)$$

Definindo P um operador da matriz 2×2 , cujo elementos de matriz são dados por:

$$\langle S_i | P | S_{i+1} \rangle = e^{\beta \left[\sum_{i=1}^N (JS_i S_{i+1} + \frac{1}{2} B(S_i + S_{i+1})) \right]}, \quad (3.25)$$

os elementos de matriz são:

$$\begin{aligned} \langle + | P | + \rangle &= e^{\beta(J+B)} \\ \langle - | P | - \rangle &= e^{\beta(J-B)} \\ \langle + | P | - \rangle &= \langle - | P | + \rangle = e^{-\beta B}. \end{aligned}$$

Assim:

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta B} \\ e^{-\beta B} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Reescrevendo a função de partição:

$$Z(B, T) = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \langle S_1|P|S_2\rangle \langle S_2|P|S_3\rangle \dots \langle S_N|P|S_{N+1}\rangle.$$

Sabemos que $|S_2\rangle\langle S_2| = I$, então:

$$Z(B, T) = \sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1|P^N|S_1\rangle$$

$$Z(B, T) = \text{Tr}(P^N). \quad (3.27)$$

Usando as seguintes propriedades [17]:

- $\text{Tr}(M) =$ soma dos autovalores λ
- $M^N = \lambda^N$,

então:

$$Z(B, T) = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (3.28)$$

onde λ_1 e λ_2 são os autovalores da matriz.

A matriz dos autovalores é encontrada transformando P na forma diagonal através da equação secular:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+B)} - \lambda & e^{-\beta B} \\ e^{\beta B} & e^{\beta(J-B)} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (3.29)$$

Para encontrar os autovalores, calculamos o $\det(T - \lambda I)$:

$$\begin{aligned} 0 &= (e^{[\beta(J+B)]} - \lambda)(e^{[\beta(J-B)]} - \lambda) - (e^{[-\beta J]})(e^{[-\beta J]}) \\ 0 &= e^{[2\beta J]} - \lambda e^{[\beta(J+B)]} - \lambda e^{[\beta(J-B)]} + \lambda^2 - e^{[-2\lambda J]} \\ 0 &= \lambda^2 - \lambda(e^{[\beta J]}e^{[\beta B]} + e^{[\beta J]}e^{[-\beta B]}) + e^{[2\beta J]} - e^{[-2\beta J]} \\ 0 &= \lambda^2 - \lambda(e^{[\beta J]}(e^{[\beta B]} + e^{[-\beta B]})), +_2 \sinh(2\beta J) \end{aligned}$$

assim:

$$\lambda^2 - 2\lambda(e^{\beta J} \cosh(\beta B) + 2 \sinh(2\beta J)) = 0. \quad (3.30)$$

Resolvendo a equação do 2º grau:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{2e^{[\beta J]} \cosh(\beta B) \pm ((2 \cosh(\beta B))^2 - 8 \sinh(2\beta J))^{1/2}}{2} \\ &= e^{(\beta B)} \cosh(\beta B) \pm [e^{[2\beta J]} \cosh(\beta B)^2 - \sinh(2\beta J)]^{1/2} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta B) \pm [e^{2\beta J} (\sinh^2((\beta B) + 1) - (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}))]^{1/2} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta B) \pm [e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B) + e^{2\beta J} - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}]^{1/2} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta B) \pm [e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B) + e^{-2\beta J}]^{1/2}, \end{aligned}$$

então:

$$Z_N(B, T) = \text{Tr} \left(\begin{array}{cc} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{array} \right)^N \quad (3.31)$$

Substituindo na energia livre de Helmholtz, dada por $f = -\frac{kT}{N} \ln Z_N$ no limite termodinâmico, temos:

$$\begin{aligned} f &= -\frac{kT}{N} \ln [\lambda_1^N + \lambda_2^N] \\ &= -\frac{kT}{N} \ln \left[\lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right], \end{aligned}$$

onde o autovalor λ_1 é muito maior que o autovalor λ_2 , fazendo com que a razão $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) \rightarrow 0$.

Então:

$$f = -kT \ln(\lambda_1). \quad (3.32)$$

Substituindo λ_1 em (3.32), temos:

$$\begin{aligned} f &= -kT \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta B) + [e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B) + e^{-2\beta J}]^{1/2} \right] \\ &= -kT \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta B) + e^{\beta J} [\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}]^{1/2} \right] \\ f &= -J - \ln \left[\cosh(\beta B) + [\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}]^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Fazendo algumas derivadas chegamos nas funções consideradas neste trabalho. Temos:

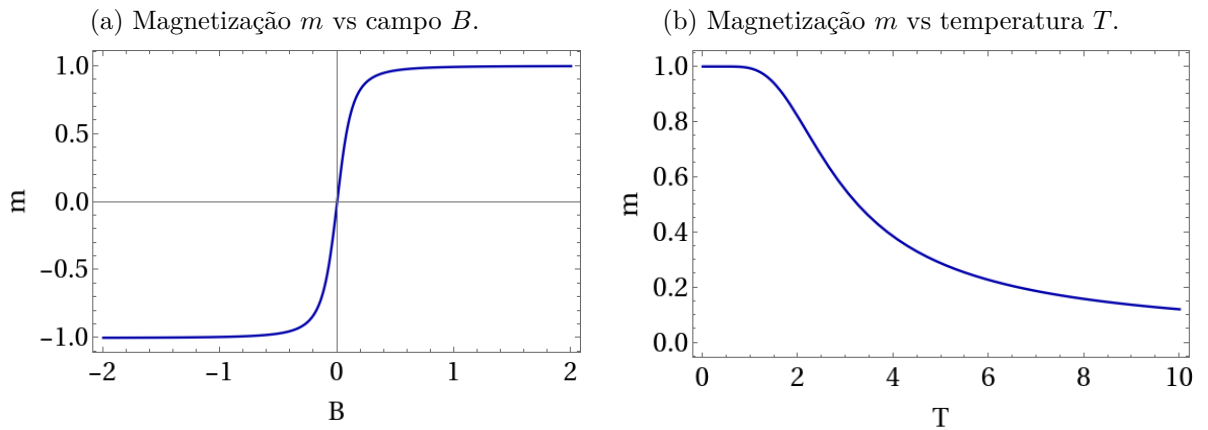
$$m(B, T) = -\frac{\partial f}{\partial B} \quad (3.34)$$

$$c(B, T) = -T \frac{d^2 f}{dT^2} \quad (3.35)$$

$$\chi(B, T) = \frac{\partial m}{\partial B}, \quad (3.36)$$

onde m é magnetização, c é o calor específico e χ é a susceptibilidade magnética. As expressões fechadas dessas derivadas estão no apêndice (B). Podemos plotar essas funções para ver o seu comportamento.

Figura 6 – Gráficos da magnetização.

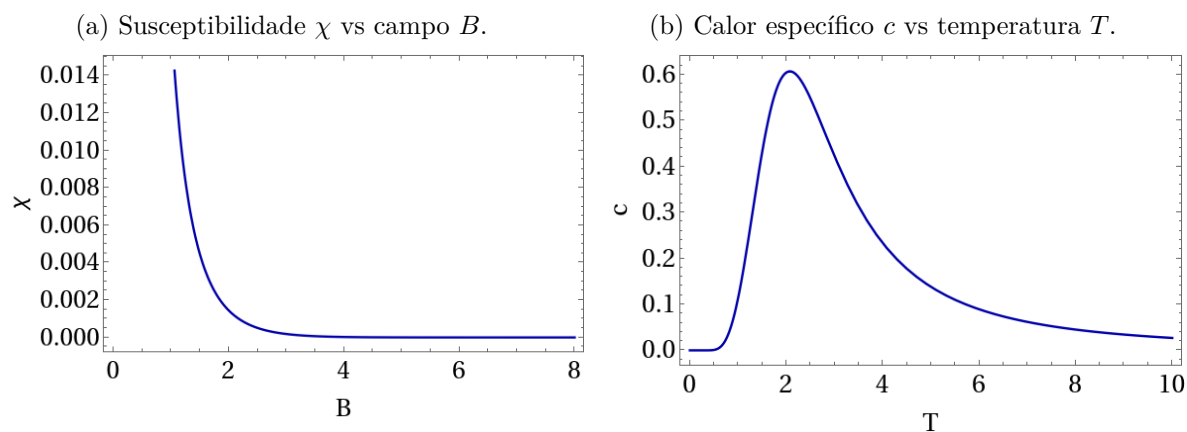


Fonte: Autor.

Como esperado os gráficos das grandezas sugerem que de fato não há transição de fase para o modelo de Ising em 1D. Isso fica claro ao olhar para a magnetização em função do campo, ilustrada na Figura (6), note que a medida que o campo vai tendendo a zero a magnetização também vai a zero. Também pode-se perceber a ausência da transição olhando para a magnetização em função da temperatura. Nota-se que a medida que a temperatura aumenta a magnetização vai tendendo a zero (lei de Curie) sem nenhuma descontinuidade ou singularidade [5]. Na Figura (7), a ausência de transição também é

verificada no calor específico que faz uma curva tipo Schottky [18]. No entanto, sabemos que em 2D há uma transição de fase. Para verificar isso, fazemos uso do Método de Monte Carlo que será descrito a seguir no próximo capítulo.

Figura 7 – Gráficos da susceptibilidade magnética e calor específico.



Fonte: Autor.

4 Simulação Monte Carlo

4.1 Introdução

Para resolver o modelo de Ising computacionalmente, é comum, utilizar o Método Monte Carlo (MMC). O MMC, em particular na simulação do modelo de Ising, tem como principal objetivo calcular o valor médio de um certo observável $\langle Q \rangle$, ou seja, uma variável dinâmica que pode ser medida. Exemplos desses observáveis incluem a energia interna de um gás ou a magnetização em um modelo magnético [19].

A mecânica estatística de equilíbrio permite determinar as propriedades macroscópicas do sistema em análise com base no conhecimento de seus estados microscópicos [1]. Por exemplo, ao utilizarmos o ensemble canônico, o valor médio de uma quantidade Q é determinado da seguinte forma:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i Q_i e^{-\beta E_i}, \quad (4.1)$$

na qual esta soma percorrerá todas as configurações do sistema i , Q_i denota o valor da quantidade física Q na configuração i , e Z representa a função de partição no ensemble canônica dada por:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (4.2)$$

com $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Olhando para a equação (4.1) podemos ver que a quantidade:

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (4.3)$$

representa a probabilidade que se ocorra a dada configuração i no equilíbrio térmico. Calcular a soma das equações acima pode se tornar uma tarefa bem árdua, mesmo para modelos simples, o que faz com que a solução exata seja obtida apenas para pouquíssimos modelos teóricos. Por exemplo, no caso do modelo Ising, mesmo sendo finito, há muitas configurações, pois existem N sítios, e a soma deve ser feita sobre 2^N configurações, tornando a realização dessa soma de forma numérica impraticável [20]. Para contornar

esse problema, podemos usar métodos computacionais, como o método de Monte Carlo, que será discutido brevemente a seguir.

4.2 O Método Monte Carlo

A simulação de Monte Carlo (MC) é um método numérico desenvolvido em 1949 pelos trabalhos de John Von Neumann e Stanislav Ulam, com o objetivo de encontrar soluções para determinados problemas matemáticos [21]. Inicialmente, o Método de Monte Carlo não foi criado para resolver problemas na Física, mas sim para calcular integrais [19].

Vejamos como calcular uma integral por meio do MMC.

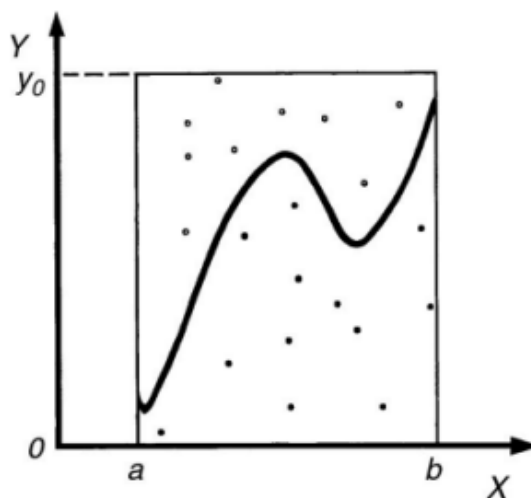
Seja a integral dada por:

$$y = \int_a^b f(x)dx,$$

podemos calcular o valor aproximado de y escrevendo uma caixa que contenha todo o intervalo de $f(x)$ e sortear números aleatórios dentro dessa caixa.

Este procedimento está ilustrado na Figura. (8).

Figura 8 – Demonstração simples do Método Monte Carlo.



Fonte: A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics.
LANDAU, D. BINDER, K. pág. 52.

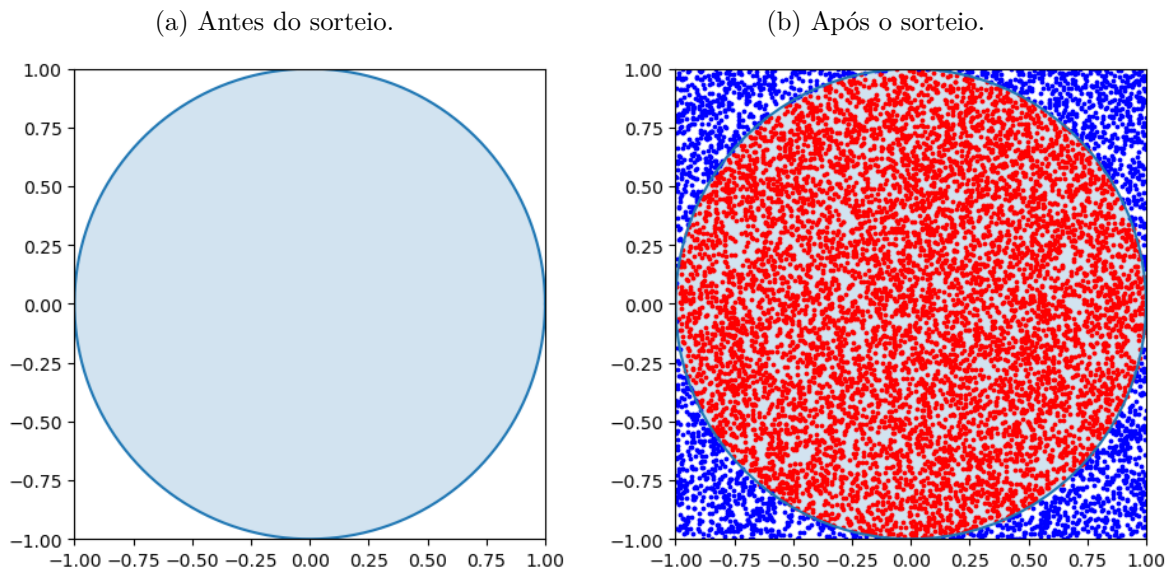
A aproximação da integral de $f(x)$ será dada pela multiplicação da razão de N_{in} por N_t vezes a área da caixa.

$$y_{\text{aproximado}} = \frac{N_{in}}{N_t} [y_0(b - a)],$$

onde N_{in} é o número de pontos aleatórios que estão abaixo da curva $f(x)$ e N_t é o número total de números aleatórios sorteados.

Podemos aplicar isso para calcular o valor aproximado de π . Para calcular a área da circunferência unitária, utilizaremos o método de integração de Monte Carlo. A ideia é colocar a circunferência dentro de uma figura, cuja área seja fácil de calcular, e sortear pontos aleatórios dentro da figura. Como mostrado na Figura (9).

Figura 9 – Circunferência circunscrita a um quadrado de lado 2.



Fonte: Autor.

Usando o MMC, a área A da circunferência será igual ao número de pontos que caíram dentro da circunferência (N_{in}) dividido pelo número total de pontos sorteados (N_t) vezes a área da caixa:

$$A = 4 \frac{N_{in}}{N_t}. \quad (4.4)$$

Da geometria plana, a área da circunferência é:

$$A = \pi R^2. \quad (4.5)$$

Podemos igualar as equações, então:

$$\pi = 4 \frac{N_{in}}{N_t}. \quad (4.6)$$

E pela equação da circunferência sabemos que todos os números que caíram dentro da circunferência é dado por:

$$x^2 + y^2 \leq 1. \quad (4.7)$$

Assim, temos todas as informações para escrever o algoritmo para estimar o valor de π . Abaixo temos um pseudocódigo que ilustra como fazer este cálculo.

Algoritmo 1: Pseudocódigo para estimar o valor de π .

```

 $N_t = n;$ 
 $i_{int} = 0;$ 
for  $i == 1$  até  $N_t$  do
     $x =$  valor aleatório entre -1 e 1;
     $y =$  valor aleatório entre -1 e 1;
    if  $x^2 + y^2 \leq 1$  then
         $i_{int} = i_{int} + 1;$ 
    end
end
O valor de  $\pi$  é aproximadamente:  $4 * (\frac{i_{int}}{N_t});$ 

```

No entanto, em 1953, Metropolis e outros colaboradores aprimoraram o método, transformando-o em uma ferramenta útil para a mecânica estatística [22]. Hoje em dia, com o avanço dos computadores e o desenvolvimento de algoritmos poderosos, o método de Monte Carlo tornou-se uma ferramenta essencial em diversos campos da ciência [23].

De maneira geral, o método de Monte Carlo envolve gerar configurações de um sistema físico com base em uma determinada distribuição de probabilidade, para então estimar o valor esperado $\langle Q \rangle_{MC}$ de uma quantidade Q . Se a amostra for suficientemente grande, pode-se assegurar que a estimativa converge para o resultado exato. Essa é a ideia fundamental da amostragem por importância (importance sampling) [19]. A estimativa da média de uma quantidade Q é calculada por:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{-\beta E_i} = \langle Q \rangle_{MC}, \quad (4.8)$$

onde $\langle Q \rangle_{MC}$ é a estimativa obtida utilizando o método de Monte Carlo, baseado no conceito de amostragem por importância. Se tivermos M configurações, obtidas de acordo com a

distribuição de Boltzmann, a estimativa $\langle Q \rangle_{MC}$ do valor médio de Q pode ser expressa como:

$$\langle Q \rangle_{MC} = \frac{\sum_i^M Q_i}{M} = \langle Q \rangle. \quad (4.9)$$

Dessa forma, substituímos a média canônica (média do ensemble) $\langle Q \rangle$ por uma média $\langle Q \rangle_{MC}$, calculada a partir da sequência de microestados pelos quais o sistema passa durante a geração das configurações de Monte Carlo.

Contudo, a vantagem do método está em obter estimativas de grandezas físicas sorteando uma amostra de configurações do sistema, distribuídas pelos microestados segundo a distribuição de Boltzmann [24]. Substituímos a soma sobre todos os estados possíveis do ensemble pela soma sobre os microestados das amostras sorteadas, embora isso introduza erros sistemáticos na estimativa. Para garantir que a equação (4.9) se aplique aos estados gerados pela distribuição de Boltzmann, é necessário que o processo de escolha das configurações seja dado por uma cadeia de Markov e atenda às condições da equação Mestre [20].

4.3 Cadeia de Markov e Equação Mestre

A cadeia de Markov pode ser descrita como a transição de um estado μ para um estado ν , onde o novo estado ν depende apenas do estado anterior μ , sem efeitos de memória. Portanto, ao partir de diferentes estados iniciais, o estado final gerado pode variar. Uma simulação de Monte Carlo cria exatamente essa sequência de estados utilizando o processo de Markov [20].

De acordo com o autor [Tomé](#), o ponto de partida para se gerar um Cadeia de Markov em um simulação Monte Carlo é a chamada equação Mestre, que pode ser expressa da seguinte forma [25]:

$$\frac{dP_\mu}{dt} = \sum_\mu P_\mu w_{\mu,\nu} - \sum_\nu P_\nu w_{\nu,\mu}, \quad (4.10)$$

onde P_μ é a probabilidade de o sistema estar no estado μ no instante t , e $w_{\mu,\nu}$ é a taxa de transição do estado μ para o estado ν . Observamos que a variação temporal de P_ν consiste em dois termos: um aumento, devido às transições dos estados μ para o estado ν , e uma diminuição, devido às transições do estado ν para o estado μ .

Além da equação Mestra mencionada, é crucial assegurar a ergodicidade do sistema, o que significa que qualquer estado acessível do sistema pode ser alcançado a partir de qualquer outro estado. No equilíbrio, onde as probabilidades não devem mudar com o tempo, a equação (4.10) leva a:

$$\sum_{\mu} P_{\mu eq} w_{\mu, \nu} = \sum_{\nu} P_{\nu eq} w_{\nu, \mu}. \quad (4.11)$$

Resolver a equação descrita acima não é uma tarefa simples. Contudo, uma solução particular e bastante direta é o princípio de balanço detalhado, onde ocorre:

$$P_{\mu eq} w_{\mu, \nu} = P_{\nu eq} w_{\nu, \mu}. \quad (4.12)$$

Como mencionado anteriormente, no estado de equilíbrio desejamos que a distribuição de probabilidade $P_{\mu eq}$ seja a de Boltzmann. Assim, utilizando a condição de balanço detalhado mencionada anteriormente, podemos selecionar $w_{\mu, \nu}$ de forma que:

$$\frac{P_{\mu eq}}{P_{\nu eq}} = \frac{w_{\nu, \mu}}{w_{\mu, \nu}} \Rightarrow \frac{w_{\nu, \mu}}{w_{\mu, \nu}} = e^{-\beta \Delta E_{\mu, \nu}}, \quad (4.13)$$

onde:

$$\Delta E_{\mu, \nu} = E_{\nu} - E_{\mu}. \quad (4.14)$$

Note que, mesmo nesse caso específico, não há uma forma prescrita para $w_{\mu, \nu}$, exceto que ela deve satisfazer a equação (4.13) junto com o princípio da ergodicidade. No entanto, desde que uma proposta para $w_{\mu, \nu}$ seja estabelecida, é possível desenvolver um algoritmo para implementar uma cadeia de Markov e calcular o valor médio da grandeza desejada Q da equação (4.1). Existem diversas abordagens para escolher essa taxa de transição. Uma das mais utilizadas, proposta por [Metropolis et al.](#), será discutida a seguir [22].

4.4 Algoritmo de Metropolis

Dentre os algoritmos do método Monte Carlo um dos mais usados para se gerar uma cadeia de Markov em sistemas de spins é o Algoritmo de Metropolis [26], que foi desenvolvido por Metropolis e colaboradores [22]. No Algoritmo de Metropolis, constroem-se as configurações seguindo a distribuição de Boltzmann, gerando uma sequência de sorteios

aleatórios de transições entre os estados, assegurando que a configuração final seja a de equilíbrio [20].

As transições de fase entre os estados μ e ν seguem o princípio do balanço detalhado descrito na equação (4.12) e são escolhidas de tal maneira a permitir que as configurações mais prováveis tenham mais possibilidade de entrar na média das grandezas de interesse, ou seja, limitando a busca a um conjunto específico de configurações estacionárias que são energeticamente vantajosas [19].

Como as transições de fase devem satisfazer inicialmente o princípio do balanço detalhado, a escolha dessas taxas de transição usadas na simulação de Monte Carlo prescrita pelo Algoritmo de Metropolis é tal que:

$$w_{\mu,\nu} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E_{\mu,\nu}} & , \text{ se } \Delta E_{\mu,\nu} > 0 \\ 1 & , \text{ se } \Delta E_{\mu,\nu} < 0 \end{cases} \quad (4.15)$$

Para simular um sistema de N spins utilizando o algoritmo de Metropolis, é necessário primeiramente escolher uma configuração inicial, que geralmente consiste em todos os spins alinhados ou em uma configuração aleatória. Em seguida, seleciona-se uma nova configuração alterando o sinal de um determinado spin (esse spin pode ser escolhido aleatoriamente na rede ou a rede pode ser percorrida de forma sequencial) e calcula-se a variação de energia $\Delta E_{\mu,\nu}$ entre a nova configuração j e a configuração inicial i [27].

Se $\Delta E_{\mu,\nu} < 0$, aceitamos a configuração ν como a nova configuração. No entanto, se $\Delta E_{\mu,\nu} > 0$, calcula-se o valor de $p_{\mu,\nu} = e^{-\beta\Delta E_{\mu,\nu}}$ e compara-se com um número pseudo-aleatório r , onde $0 < r < 1$. Se $p_{\mu,\nu} > r$, a configuração ν é aceita, caso contrário, mantemos a configuração μ . Após esse processo, uma nova configuração é escolhida, e o procedimento continua [20].

Quando esse método é aplicado a todos os spins da rede, a configuração é registrada e os valores das grandezas termodinâmicas são calculados. Esse ciclo corresponde a um passo de Monte Carlo. Diversos passos de Monte Carlo são realizados para obter as médias termodinâmicas desejadas.

Vale notar que a alteração de um único spin na rede faz com que a nova configuração seja muito semelhante à anterior, de modo que, após um passo de Monte Carlo percorrendo toda a rede, a configuração final não estará fortemente correlacionada com a configuração inicial. A seguir, será feita a implementação desse algoritmo ao modelo de Ising.

4.4.1 Implementação do Algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising bidimensional

Considere primeiramente, uma rede real de N spins como variáveis (para facilitar será considerado variáveis inteiras), um array de variáveis inteiras que podem assumir valores ± 1 . Aplicando condições de contorno periódicas à matriz, ou seja, especificamos que os spins em uma borda da rede são vizinhos do correspondente spin na outra borda. Isso garante que todos os spins tenham o mesmo número de vizinhos e geometria local, e que não há spins de aresta especiais que possuem propriedades diferentes das demais, todos os spins são equivalentes e o sistema é completamente invariante translacionalmente. Assim, melhorando consideravelmente os resultados da simulação [21].

Em seguida, precisamos determinar a temperatura que queremos realizar nossa simulação. Também precisamos definir um valor inicial para cada um dos spins, ou seja, o estado inicial do sistema. Na maioria dos casos, a escolha do estado inicial não é especialmente crucial, embora uma seleção cuidadosa possa, em algumas situações, reduzir o tempo necessário para alcançar o equilíbrio [19].

Os dois estados iniciais mais comuns são o de temperatura zero ($T = 0$) e o de temperatura infinita ($T = \infty$). Em $T = 0$, o modelo de Ising está em seu estado fundamental, com todos os spins alinhados para cima ou para baixo, contribuindo com a energia mínima possível para o Hamiltoniano. Quando $T = \infty$, a energia térmica disponível é muito maior que a energia da interação spin-spin, fazendo com que os spins sejam orientados aleatoriamente [19].

Essas duas opções de estado inicial são populares porque cada uma corresponde a uma temperatura conhecida e bem definida e são fáceis de gerar. Contudo, existe um outro estado inicial que às vezes pode ser muito útil e que será utilizada neste trabalho. Muitas vezes não realizamos apenas uma simulação em uma única temperatura, mas sim um conjunto de simulações, uma após a outra, em uma gama de valores diferentes de T , para sondar o comportamento do modelo com temperatura variável [19].

É vantajoso escolher o estado final de uma simulação em uma temperatura próxima como o estado inicial para outra simulação. Por exemplo, ao investigar temperaturas entre $T = 1,0$ e $T = 2,0$ em passos de $0,1$, pode-se começar com uma simulação em $T = 1,0$ usando o estado de temperatura zero (todos os spins alinhados). Após atingir o equilíbrio em $T = 1,0$, o estado final dessa simulação é usado como o estado inicial para $T = 1,1$, e assim por diante. Isso acelera a chegada ao equilíbrio, pois o estado de equilíbrio em $T = 1,0$ é mais parecido com $T = 1,1$ do que com o estado de temperatura zero [19].

Feitas tais considerações, pode-se iniciar a simulação. O primeiro passo é iniciar uma rede, ou seja, um estado μ e em seguida escolher aleatoriamente um novo estado ν , que difere do estado atual por apenas um spin k , e cada um desses estados deve ter a mesma probabilidade de ser gerado como qualquer outro. O próximo passo é calcular a variação de energia $E_\nu - E_\mu$. Como no novo estado mudamos o sinal apenas de um único spin k , a maneira mais eficiente de calcular essa variação é percebendo que os outros termos permanecem os mesmos e então se cancelam. Portanto, a mudança de energia entre os dois estados é:

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^\nu S_j^\nu + J \sum_{\langle ji \rangle} S_i^\mu S_j^\mu$$

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{i.v.k} S_i^\mu (S_k^\nu - S_k^\mu), \quad (4.16)$$

onde $i.v.k$ representam todos os vizinhos mais próximos do spin k invertido. E usando o fato de que todos os outros spins não mudam, então $S_i^\nu = S_i^\mu$. Se $S_k^\mu = +1$, então após o spin k ter sido invertido, teremos $S_k^\nu = -1$, de modo que $S_k^\nu - S_k^\mu = -2$. Analogamente, se $S_k^\mu = -1$, então $S_k^\nu - S_k^\mu = +2$. Assim, podemos escrever:

$$S_k^\nu - S_k^\mu = -2S_k^\mu, \quad (4.17)$$

logo:

$$E_\nu - E_\mu = 2J S_k^\mu \sum_{i.v.k} S_i^\mu. \quad (4.18)$$

Essa expressão envolve apenas a soma dos vizinhos mais próximos. Outro ponto interessante é que envolve apenas os valores dos spin's do estado μ , então podemos avaliá-lo antes de realmente inverter o spin k [19].

O algoritmo envolve calcular $E_\nu - E_\mu$ a partir da Equação (4.18) e, em seguida, seguir a regra dada na Equação (4.15). Se $E_\nu - E_\mu < 0$, aceitamos definitivamente o movimento e invertemos o spin $S_k \rightarrow -S_k$. Se $E_\nu - E_\mu > 0$, ainda podemos querer inverter o spin. O algoritmo de Metropolis nos diz para inverter com uma probabilidade $w(\mu \rightarrow \nu) = e^{(-\beta \Delta E_{\mu,\nu})/T}$. Podemos fazer isso da seguinte forma: avaliamos a razão de aceitação $w(\mu \rightarrow \nu)$ usando o valor de da Equação (4.18) e, em seguida, escolhemos um número aleatório r entre zero e um. (Estritamente, o número pode ser igual a zero, mas deve ser menor que um: $0 < r < 1$). Se esse número for menor que nossa razão de aceitação, $r < w(\mu \rightarrow \nu)$, então invertemos o spin. Se não for, deixamos o spin como está [27].

E esse é o nosso algoritmo completo. Agora, basta repetir os mesmos cálculos várias vezes: escolher um spin, calcular a mudança de energia que teríamos se o invertêssemos e,

em seguida, decidir se devemos invertê-lo de acordo com a Equação (4.15). Este algoritmo está exemplificado no pseudocódigo abaixo.

Em Algoritmo (2) é mostrado um pseudocódigo para o Algoritmo de Metropolis aplicado ao modelo de Ising. Primeiramente são definidos os parâmetros, em seguida chama-se a Função Metropolis para equilibrar o sistema, logo após é feito o loop principal sobre as temperaturas chamando novamente a Função Metropolis, mas dessa vez em cada chamada do loop a Função Metropolis é executada para obter as grandezas do sistema.

Na Função Metropolis são feitos dois loop's. Um sobre os passos Monte Carlo e o outro sobre os sítios da rede. Dentro do loop dos sítios é feita uma estrutura condicional que segue os mesmos passos descritos acima, que são: escolher um spin, calcular a mudança de energia que teríamos se o invertêssemos e, em seguida, decidir se devemos invertê-lo de acordo com a Equação (4.15), e repetir isso quantas vez for o tamanho do passo Monte Carlo. O código da implementação do Algoritmo de Metropolis escrito em Python está disponível no apêndice (A).

Algoritmo 2: Algoritmo de Metropolis aplicado ao modelo de Ising

```

Inicializa a rede;
 $T_i$  ;                               /*  $T_i$  representa temperatura inicial */
 $T_f$  ;                               /*  $T_f$  representa temperatura final */
Chamar a função Metropolis();
for  $x < T_f$  do
    Chamar a função Metropolis();
    Incrementar a temperatura  $T \leftarrow T_i + \text{passotemp}$  ; /* passotemp = passo
    de temperatura */
end
Metropolis();
for  $i < pmc$  do
    for  $j < L * L$  do
        Escolher um sítio da rede aleatoriamente;
        Calcular a variação da energia:  $\Delta E$ ;
        if  $\Delta E > 0$  then
            Escolher um número aleatório  $r$  entre 0 e 1;
            Calcular a probabilidade  $p = e^{-(\Delta E)/T}$ ;
            if  $r < p$  then
                | Inverte o spin na rede;
            end
        else
            | Inverte o spin na rede;
        end
    end
end
  
```

5 Resultados

Com base na teoria apresentada no início deste trabalho e aplicando os métodos mencionados, foi possível estudar as propriedades de um modelo ferromagnético, ou seja, $J > 0$, e calcular a magnetização, energia, susceptibilidade magnética e calor específico para redes de tamanhos variando de 8×8 a 64×64 , utilizando 10^6 passos de Monte Carlo tanto para a equilibração quanto para a execução para a obtenção das grandezas do sistema. O computador utilizado para executar o código possui as seguintes especificações: GPU AMD Ryzen™ 7 5700U com 16 núcleos e 16GB de memória RAM. O código implementa os métodos discutidos no capítulo 4. Como o objetivo do trabalho é determinar a temperatura crítica no limite termodinâmico usando, para isso, configurações de tamanho finito, foram gerados gráficos de magnetização, energia, susceptibilidade magnética e calor específico.

5.1 Energia

A partir da expressão (4.15) explicada na sessão (4.4), é possível calcular de forma simples a variação de energia toda vez que um spin é invertido. A energia total E_{tot} é calculada fazendo:

$$E_{tot} = E_i + \Delta E, \quad (5.1)$$

onde E_i representa a energia total inicial após a equilibração e ΔE é a variação da energia a cada vez que o spin é invertido.

A energia média total $\langle E_{tot} \rangle$ é calculada através de uma média aritmética simples.

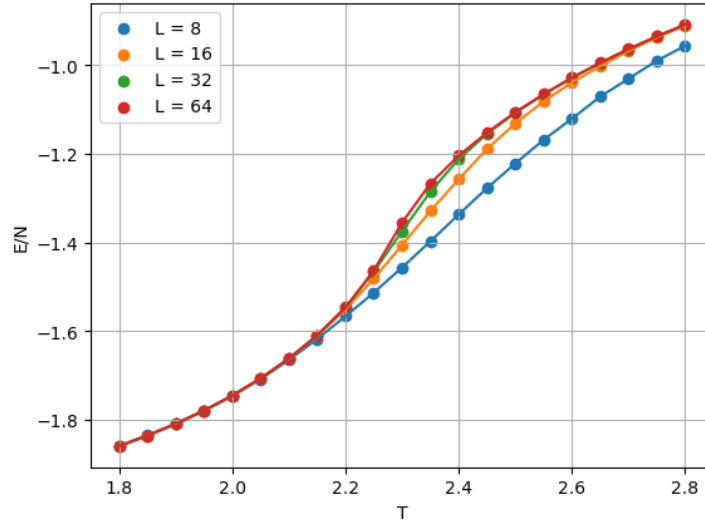
$$\langle E_{tot} \rangle = \sum_{i=1}^n \frac{E_i}{i}, \quad (5.2)$$

onde i é o número de vezes que a energia foi calculada.

Para determinar a temperatura crítica no limite termodinâmico (onde o tamanho da rede tende ao infinito), foram elaborados gráficos utilizando as estimativas da energia média, magnetização, susceptibilidade, magnetização, calor específico e, ao extrapolar para $(L \rightarrow \infty)$, o pico no calor específico e susceptibilidade, a mudança de concavidade na energia média e o ponto onde a magnetização se torna nula acontecem na mesma temperatura, surgindo uma estimativa para a temperatura de transição de fase. No gráfico a seguir, são apresentados os resultados da energia para cada tamanho de rede

($L * L$). A Figura (10) mostra a energia média total por sítio para o intervalo de temperatura (com $k_B = 1$ e $J = 1$) entre 1,8 e 2,8.

Figura 10 – Gráfico da energia média por sítio pela temperatura



Fonte: Autor

5.2 Magnetização

A magnetização média $\langle m \rangle$ é dada por:

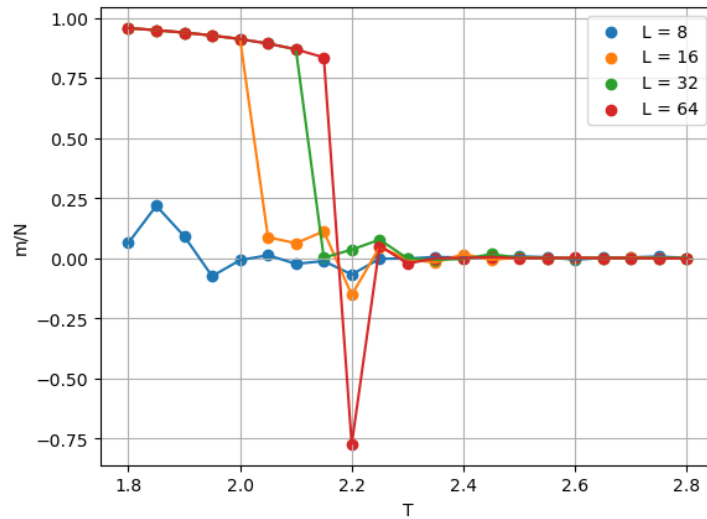
$$\langle m \rangle = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{i}, \quad (5.3)$$

onde i é o número de vezes que a magnetização foi calculada.

Na figura (11), observamos a magnetização média por sítio em função da temperatura para cada tamanho de rede ($L * L$), no intervalo de temperatura (em unidades arbitrária) entre 1,8 e 2,8. A magnetização é o parâmetro de ordem, o que significa que, no limite termodinâmico, ela é diferente de zero abaixo da transição e se torna nula acima dela. O gráfico revela uma queda abrupta, indicando o fim da fase com ordenamento ferromagnético e o início da fase paramagnética. O ponto de inflexão no gráfico oferece uma estimativa da temperatura crítica.

Nota-se também que há uma grande flutuação na magnetização em torno das regiões da temperatura crítica. Para mais informações ler a referência [28].

Figura 11 – Gráfico da magnetização média por sítio pela temperatura



Fonte: Autor

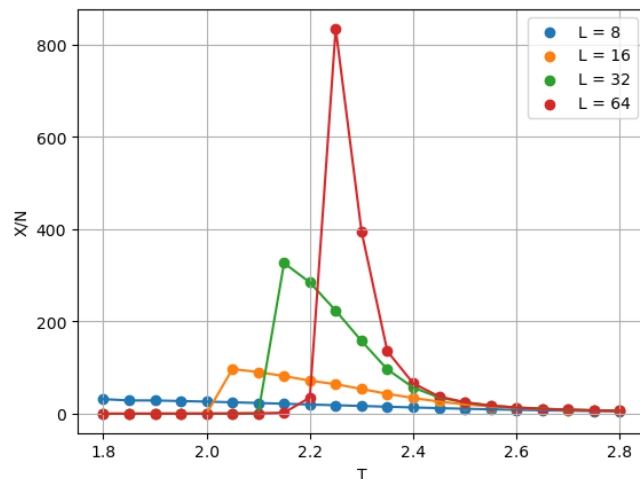
5.3 Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade magnética é calculada a partir da flutuação da magnetização (parâmetro de ordem):

$$\chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{T}. \quad (5.4)$$

Com base na expressão mencionada e nos dados de magnetização obtidos por simulação, podemos construir um gráfico da susceptibilidade magnética por sítio em função da temperatura, conforme mostrado na Figura (12). Observa-se que a susceptibilidade magnética aumenta rapidamente com o crescimento da rede, e o valor máximo se desloca para a direita. Segundo a teoria fenomenológica de Landau et al., em uma transição de fase, a susceptibilidade magnética diverge para uma rede de tamanho infinito.

Figura 12 – Gráfico da susceptibilidade média por sítio pela temperatura



Fonte: Autor

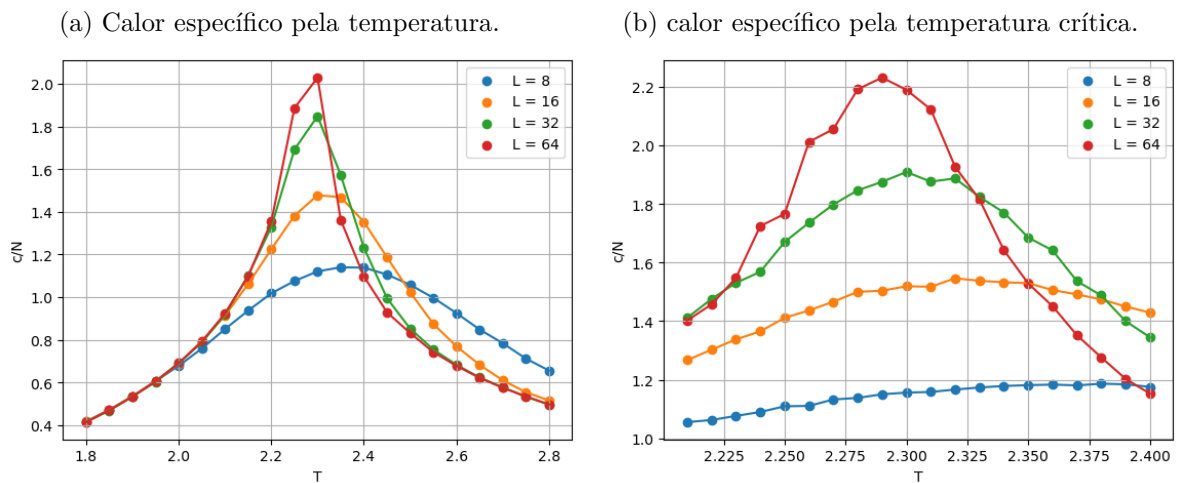
5.4 Calor específico

O calor específico apresenta um comportamento muito mais significativo em torno da temperatura de transição, pois o modelo de Ising tem uma transição de fase de segunda ordem, devido a isto há essa singularidade próximo a região da temperatura crítica, conforme mostrado na Figura (13b). Observa-se que o calor específico, c , atinge um máximo que aumenta e se desloca para a esquerda à medida que o tamanho da rede cresce. O calor específico c foi calculado a partir da flutuação térmica da energia, conforme a expressão:

$$c = \frac{\langle (E/N)^2 \rangle - \langle E/N \rangle^2}{T^2}. \quad (5.5)$$

Os picos nos gráficos da Figura (13) indicam a temperatura crítica, ou seja, o ponto em que a temperatura “vence” o campo interno gerado pela interação dos spins, causando sua desordem temporária e, conseqüentemente, a perda momentânea de suas propriedades magnéticas [30].

Figura 13 – Gráficos do calor específico por sítio pela temperatura.



Fonte: Autor.

5.4.1 Estimativa para a temperatura de transição de fase

A tabela (1) abaixo apresenta as estimativas da temperatura crítica para cada tamanho de rede, obtidas a partir dos cálculos do calor específico.

Em seguida, a partir dos dados da tabela foi gerado um gráfico com essas temperaturas críticas pelo inverso da rede L que demonstra que, à medida que o tamanho da rede aumenta, a estimativa da temperatura crítica se aproxima cada vez mais da temperatura crítica prevista pela solução analítica. A temperatura crítica obtida da solução analítica é

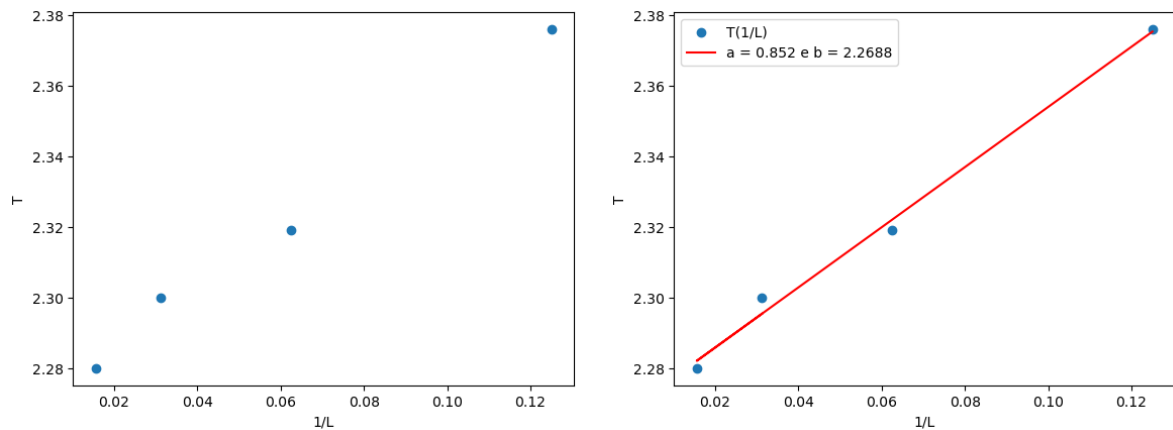
$T_c \approx 2.269$, e a temperatura obtida na simulação foi de $T_c = 2.2688$. Um erro associado de 0.009%. Ver figura (14b).

Tamanho da rede: L	Temperatura crítica: T_c
1/L	Calor específico: c
1/8	2.376
1/16	2.319
1/32	2.3
1/64	2.28

Tabela 1 – Tabela da temperatura crítica em relação ao inverso tamanho da rede.

Figura 14 – Temperatura crítica extrapolada.

- (a) Temperatura crítica extrapolada para rede infinita.
 (b) Temperatura crítica extrapolada para rede infinita com ajuste linear.

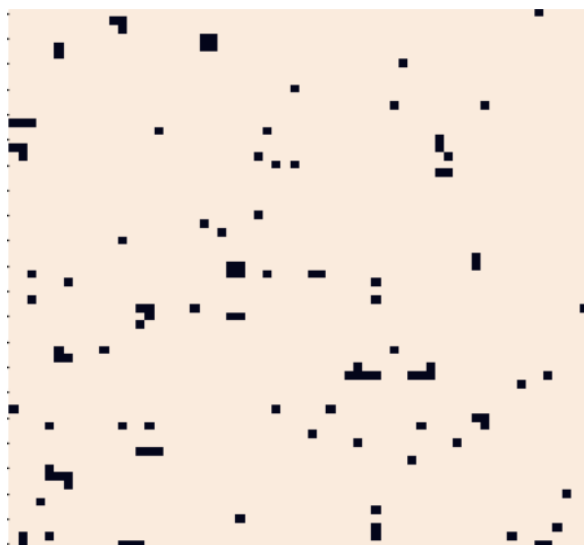
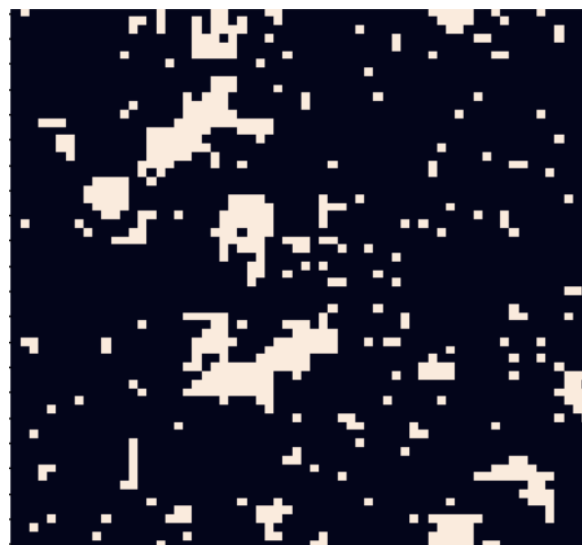
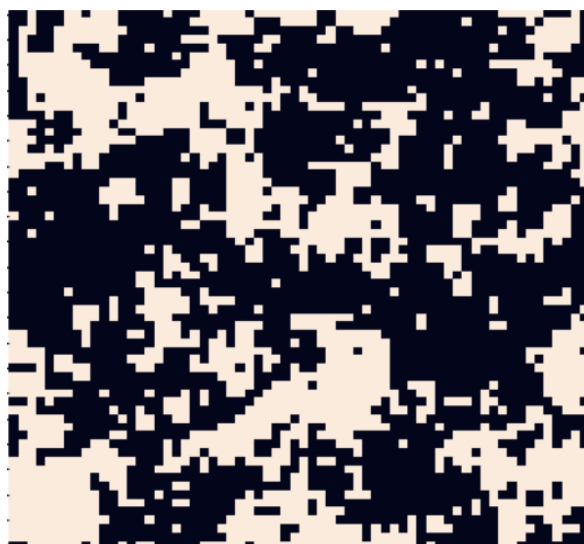
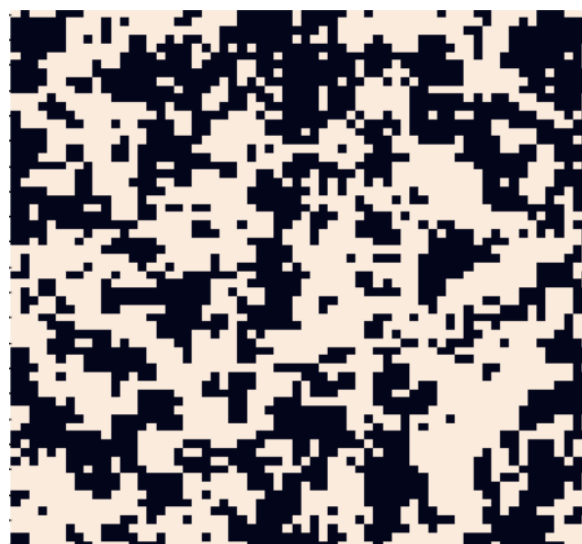


Fonte: Autor.

Uma outra observação interessante que podemos fazer é printar o comportamento da rede a medida que esta vai sendo exposta ao banho térmico. A Figura (15) mostra este comportamento para alguns valores de temperatura (em unidades arbitrárias), onde a cor bege representa o valor do estado +1 e o valor do estado -1 é representado pela cor preta.

Na Figura (15a) é mostrado a rede inicial já no equilíbrio. Como a rede iniciou com todos os spins +1, ou seja, para cima, podemos ver um grande “cluster” de spins +1. A medida que vamos aumentando a temperatura e chegamos próximo de T_c vemos a formação de um grande “cluster”, mas agora com uma inversão no sentidos dos spins para -1, quando a temperatura vence a força de interação e ocorre a transição de fase, ilustrado na Figura (15b). E conforme a temperatura vai aumentando o sistema vai diminuindo este “cluster” e o sistema avança para uma transição ordem-desordem, como pode-se verificar nas Figuras (15c e 15d) e nesse estado é onde o sistema tem magnetização zero.

Figura 15 – Evolução da rede de spins 64x64 exposta ao banho térmico.

(a) Rede de spin com $T = 1.8$.(b) Rede de spin com $T = 2.25 \approx T_c$.(c) Rede de spin com $T = 2.55$.(d) Rede de spin com $T = 2.8$.

Fonte: Autor.

6 Conclusão

Neste trabalho, foram exploradas as soluções analíticas para o modelo de Ising em uma dimensão, utilizando a Teoria de Campo Médio e a Matriz de Transferência. Essas abordagens forneceram uma base sólida para entender os comportamentos fundamentais de sistemas magnéticos. Além disso, o estudo aprofundou-se no Método de Monte Carlo, aplicando-o de forma sistemática ao Modelo de Ising em duas dimensões, especificamente em uma rede quadrada.

Com o uso do Método de Monte Carlo, especialmente por meio do algoritmo de Metropolis, foi possível calcular a energia interna, a magnetização, a susceptibilidade magnética e o calor específico em função da temperatura para amostras de diferentes tamanhos de rede. Esses cálculos permitiram a obtenção de dados que possibilitaram a investigação sobre o comportamento do sistema em diferentes condições térmicas.

A partir dos resultados obtidos, foi possível estimar a temperatura crítica associada à transição ordem-desordem no modelo de Ising em duas dimensões. Essa transição é um fenômeno fundamental em sistemas magnéticos, caracterizando o ponto em que o sistema perde sua magnetização espontânea devido ao aumento da temperatura.

Os resultados confirmaram que, à medida que o tamanho da rede aumenta, as estimativas da temperatura crítica se aproximam cada vez mais da previsão teórica. A temperatura que foi obtida neste trabalho teve uma margem de 0.009% com relação a temperatura obtida da solução exata de Onsager[7], o que valida a metodologia utilizada. Este estudo demonstrou a importância das simulações numéricas em física estatística, especialmente em sistemas onde as soluções analíticas são inviáveis, contribuindo para uma compreensão mais profunda dos fenômenos de transição de fase em sistemas magnéticos.

Este estudo não só reafirma a importância das soluções analíticas em modelos teóricos, como também destaca a relevância e a eficácia das simulações numéricas no estudo de sistemas complexos, demonstrando a capacidade de técnicas como o Método de Monte Carlo em prever e analisar comportamentos críticos em sistemas físicos, sendo aplicável não apenas na física, mas também em outras disciplinas científicas.

Referências

- [1] SALINAS, S. R. *Introdução à física estatística*. [S.l.]: Edusp, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 11, 14 e 30.
- [2] HUANG, K. *Statistical mechanics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. Citado na página 11.
- [3] PATHRIA, R. K. *Statistical mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 2016. Citado na página 11.
- [4] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.
- [5] YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. [S.l.]: Clarendon Press, 1992. Citado 4 vezes nas páginas 13, 17, 24 e 28.
- [6] ISING, E. Z. Physical review letters. *phys.6*, n. 31, p. 253, 1925. Citado na página 14.
- [7] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, APS, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 46.
- [8] ASHCROFT, N.; MERMIN, N. Solid state physics (saunders college, philadelphia). *Google Scholar*, v. 404, p. 782, 1976. Citado na página 14.
- [9] CASQUILHO, J. P.; TEIXEIRA, P. I. C. *Introdução a física estatística*. São Paulo: Editora Livraria da física, 2012. Citado na página 15.
- [10] MELLO, I. F. et al. Epidemics, the ising-model and percolation theory: a comprehensive review focused on covid-19. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 573, p. 125963, 2021. Citado na página 16.
- [11] D'ANGELO, F.; BÖTTCHER, L. Learning the ising model with generative neural networks. *Physical Review Research*, APS, v. 2, n. 2, p. 023266, 2020. Citado na página 16.
- [12] SCHERER, C. *Métodos computacionais da Física*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005. Citado na página 16.
- [13] BAXTER, R. J. *Exactly solved models in statistical mechanics*. [S.l.]: Courier Corporation, 2007. Citado na página 17.
- [14] LAGE, E. Física estatística, lisboa. *Fundação Calouste Gulbenkian*, 1995. Nenhuma citação no texto.
- [15] UTERMOHLEN, F. Mean field theory solution of the ising model. *Sept*, v. 12, p. 3, 2018. Citado na página 24.
- [16] GREINER, W.; NEISE, L.; STÖCKER, H. *Thermodynamics and statistical mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Nenhuma citação no texto.

- [17] ANDRADE, M. S. Fórmulas do traço e o cálculo de matrizes inversas. 2013. Citado na página 26.
- [18] OLIVEIRA, M. J. de. *Termodinâmica*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005. Citado na página 29.
- [19] NEWMAN, M. E.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo methods in statistical physics*. [S.l.]: Clarendon Press, 1999. Citado 6 vezes nas páginas 30, 31, 33, 36, 37 e 38.
- [20] LANDAU, D.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 30, 34 e 36.
- [21] KRAUTH, W. *Statistical mechanics: algorithms and computations*. [S.l.]: OUP Oxford, 2006. v. 13. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 37.
- [22] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 35.
- [23] THOMOPOULOS, N. T. *Essentials of Monte Carlo simulation: Statistical methods for building simulation models*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 33.
- [24] LÍBERO, V. L. De ising a metropolis. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, p. 346–352, 2000. Citado na página 34.
- [25] TOMÉ, T. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35*. [S.l.]: Edusp, 2001. Citado na página 34.
- [26] RINO, J. P.; COSTA, B. d. Abc da simulação computacional. *Livraria da Física-UFSCar*, 2013. Citado na página 35.
- [27] BINDER, K.; HEERMANN, D. W.; BINDER, K. *Monte Carlo simulation in statistical physics*. [S.l.]: Springer, 1992. v. 8. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 38.
- [28] BINDER, K. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 43, p. 119–140, 1981. Citado na página 41.
- [29] LANDAU, L. D. et al. On the theory of phase transitions. *Zh. eksp. teor. Fiz*, v. 7, n. 19-32, p. 926, 1937. Citado na página 42.
- [30] YONEZAWA, J. H. N. Simulação monte carlo do modelo ising em uma rede quadrada: transição de fase e propriedades magnéticas. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2023. Citado na página 43.
- [31] MENEZES, N. N. C. Introdução à programação com python. *São Paulo: Novatec*, p. 34, 2010. Nenhuma citação no texto.
- [32] BHARGAVA, A. Y. *Grokking algorithms*. [S.l.]: Simon and Schuster, 2024. Nenhuma citação no texto.

APÊNDICE A – Algoritmo de Metropolis escrito em Python

Ian Lopes (2024). Programa TCC

Link para o Github: <https://github.com/iansk8/codigo_mc_ising>

```

1  '''
2  PROGRAMA: MODELO DE ISING EM 2D, COM CAMPO EXTERNO NULO. SIMULALCAO
3  MONTE CARLO
4
5  USANDO ALGORITMO DE METROPOLIS
6
7  AUTORES: IAN DE JESUS FONTENELE LOPES/PROF. Dr. CICERO THIAGO GOMES
8  DOS SANTOS, IFSERTAO-PE
9  '''
10 #=====IMPORTANDO BIBLIOTECAS=====
11 import numpy as np
12 from numba import njit
13 from math import exp
14 import matplotlib.pyplot as plt
15 import time
16 import seaborn as sns
17 from sklearn.linear_model import LinearRegression
18
19 #=====DEFININDO PARAMETROS=====
20 l = 8 #Dimensao da rede
21 num_dir = 4 #Numero de vizinhos
22 t = 2.2 #Temperatura inicial
23 mcs = 10**6 #passo monte carlo
24 range_temp = 20 #Faixa de temperatura
25 passo_temp = 0.01 #Passo de temperatura
26
27 #=====DEFININDO FUNCOES=====
28 def initialize_rede(L): #Cria rede de spins
29     matriz = []
30
31     for _ in range(L):
32         matriz.append([1 for i in range(L)])
33     #Para rede aleatoria trocar 1 por: np.random.choice((1, -1))
34
35     return matriz

```

```

35
36 @njit()
37 def metropolis(mcs, matriz, T, L, energia_total, magnetizacao):
38     #Executa o Algoritmo de Metropolis
39     energia_atual = energia_total
40     sum_energia = 0
41     sum_energia_quadrada = 0
42     magnetizacao_atual = magnetizacao
43     sum_magnetizacao = 0
44     sum_magnetizacao_quadrada = 0
45     for i in range(mcs): #Loop sobre o Passo Monte Carlo
46         for j in range(L * L): #Loop sobre os sites
47             y = np.random.choice(L) #Site aleatorio
48             x = np.random.choice(L) #Site aleatorio
49             delta_E = calcular_variacao_energia(matriz, L, y, x)
50             delta_M = calcular_variacao_magnetizacao(matriz, y, x)
51             if delta_E > 0:
52                 q = np.random.random() #Numero aleatorio entre 0 e 1
53                 prob = np.exp(-delta_E/ T) #Calcula a probabilidade de Boltzmann
54                 if q < prob:
55                     matriz[y][x] = (matriz[y][x]) * -1 #Inverte o spin
56                     energia_atual += delta_E
57                     magnetizacao_atual += delta_M
58                 else:
59                     matriz[y][x] = (matriz[y][x]) * -1 #Inverte o spin
60                     energia_atual += delta_E
61                     magnetizacao_atual += delta_M
62                 sum_energia += energia_atual
63                 sum_energia_quadrada += energia_atual * energia_atual
64                 sum_magnetizacao += magnetizacao_atual
65                 sum_magnetizacao_quadrada += magnetizacao_atual * magnetizacao_atual
66             e_m = sum_energia/(mcs * (L**2))
67             e_m_q = sum_energia_quadrada/(mcs * (L**2))
68             m_m = sum_magnetizacao/(mcs * (L**2))
69             m_m_q = sum_magnetizacao_quadrada/(mcs * (L**2))
70             t_ = round(T + passo_temp, 5)
71             return matriz, e_m, energia_atual, e_m_q, m_m, sum_energia,
72                 magnetizacao_atual, m_m_q, t_
73
74 @njit()
75 def calcular_variacao_energia(matriz, L, y, x): #Calcula a variacao da
76     energia interna
77     sum_vizinhos, _ = vizinho(matriz, L, y, x)
78     variacao_energia = 2 * matriz[y][x] * sum_vizinhos
79     return variacao_energia

```

```
80
81 @njit()
82 def calcular_variacao_magnetizacao(matriz, y, x): #Calcula a variacao
    da magnetizacao
83 variacao_magnetizacao = -2 * matriz[y][x]
84 return variacao_magnetizacao
85
86
87 @njit()
88 def vizinho(matriz, L, y, x): #Condicoes de contorno periodica
89 vizinhos = []
90
91 vizinhos.append(matriz[y][(x+1) % L]) #primeiro vizinho da direita
92 vizinhos.append(matriz[y-1][x]) # primeiro vizinho de cima
93 vizinhos.append(matriz[y][x-1]) # primeiro vizinho da esquerda
94 vizinhos.append(matriz[(y+1) % L][x]) #primeiro vizinho de baixo
95 sum_vizinhos = 0
96 for _ in range(4): #Soma sobre os vizinhos
97 sum_vizinhos += vizinhos[_]
98 return sum_vizinhos, vizinhos
99
100
101 def energia_tot(matriz, L, num_dir):
102 energia_total = 0
103 for y in range(L):
104 for x in range(L):
105 for _ in range(num_dir):
106 i, vizinhos = vizinho(matriz, L, y, x)
107 energia_total += (matriz[y][x] * vizinhos[_])
108 energia_total = -energia_total / 2
109 #Dividido por 2 dois porque cada sitio e contado duas vezes
110 return energia_total
111
112
113 def magnetizacao_total(matriz, L):
114 magnetizacao = 0
115 for i in range(L):
116 for j in range(L):
117 magnetizacao += matriz[i][j]
118 return magnetizacao
119
120
121 #=====PROGRAMA PRINCIPAL=====
122 matriz = np.array(inicialize_rede(1))
123 energia_total = energia_tot(matriz, 1, num_dir)
124 magnetizacao = magnetizacao_total(matriz, 1)
125 matriz, _, energia_total, _, _, _, magnetizacao, _, _ = metropolis(mcs,
```

```
    matriz, t, l, energia_total, magnetizcao)
126 #Executa o Algoritmo de Metropolis para a equilibracao do sistema
127 matriz = np.array(matriz)
128 energia_media_ps_8 = []
129 m_m_ps_8 = []
130 calor_esp_64 = []
131 suscep_mag_64 = []
132 t_p = []
133 for k in range(range_temp): #Loop sobre as temperaturas
134 matriz, e_m, energia_total, e_m_q, m_m, sum_e, magnetizcao, m_m_q, t =
    metropolis(mcs, matriz, t, l, energia_total, magnetizcao)
135 #Executa o algoritmo para calcular as propriedades
136 t = round(t + passo_temp, 4)
137 t_p.append(t)
138 e = sum_e/(mcs * (l**2))
139 energia_media_ps_8.append(e/(l * l))
140 calor = ((e_m_q - (e_m * e_m))/( l * l * t * t))
141 calor_esp_64.append(calor) #Calor especifico por sitio
142 m_m_ps_8.append((m_m)/(l * l))
143 suscep_mag_64.append((m_m_q - (m_m * m_m))/(l * l * t))
```

APÊNDICE B – Derivadas da energia livre de Helmholtz

Aqui temos as derivadas da energia livre de Helmholtz que é dada pela equação (3.33).

Para a magnetização:

$$m(B, T) = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\sinh\left(\frac{B}{kT}\right)}{\sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}}}. \quad (\text{B.1})$$

Para o calor específico:

$$\begin{aligned} c(B, T) &= -T \frac{d^2 f}{dT^2} \\ c(B, T) &= \left(e^{-\frac{4J}{kT}} \left(\cosh\left(\frac{B}{kT}\right) \left(e^{\frac{4J}{kT}} \left((B^2 + 4J^2) \cosh\left(\frac{2B}{kT}\right) - 4J^2 \right) + B^2 + 4J^2 \right) \right) \right. \\ &\quad + 2B^2 e^{\frac{4J}{kT}} \cosh^2\left(\frac{B}{kT}\right) \sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}} + 4J \sinh\left(\frac{B}{kT}\right) * \\ &\quad * \left(e^{\frac{4J}{kT}} 2 \sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}} \left(J \sinh\left(\frac{B}{kT}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + B \cosh\left(\frac{B}{kT}\right) \right) + B \cosh\left(\frac{2B}{kT}\right) + B \right) * \\ &\quad * \left(T^2 \sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}} \left(k e^{\frac{4J}{kT}} \sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + k \right) * \right. \\ &\quad \left. * \left(\sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}} + \cosh\left(\frac{B}{kT}\right) \right) \right)^{-2}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Para a susceptibilidade:

$$\chi(B, T) = \frac{\partial m}{\partial B} = \frac{\cosh\left(\frac{B}{kT}\right)}{kT \sqrt{\sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + e^{-\frac{4J}{kT}}} \left(e^{\frac{4J}{kT}} \sinh^2\left(\frac{B}{kT}\right) + 1 \right)}. \quad (\text{B.3})$$