Laboratório de Teoria da Matéria Condensada

SILVA[1], D. L. F. da, ZIMMER[1], F. M., SCHMIDT[1], M.
[1]Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Rio Grande do Sul, Brasil

O MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELO DE ISING

INTRODUÇÃO

O método de Monte Carlo (MMC) é um método estocástico muito utilizado em diversas áreas da ciência, devido à sua grande eficiência. Nesse trabalho simulamos o modelo de Ising (MI) com interações de primeiros vizinhos em duas geometrias de rede. Para isso, utilizamos o algoritmo de Metropolis, um dos mais conhecidos dentre os algoritmos que utilizam os princípios do MMC.

Os métodos estocásticos tem diversas aplicações, seja na simulação de sistemas físicos ou de modelos que buscam estudar sistemas sociais e outros problemas de grande complexidade.

METODOLOGIA

Após estudarmos o MMC, especialmente o algoritmo de Metropolis, desenvolvemos programas em Fortran 90 para obter a magnetização e a energia interna nas redes quadrada e cúbica do MI com interações ferromagnéticas, visando o comportamento dos sistemas na região próxima da temperatura crítica (T_C). Na figura 1 é descrito o algoritmo de Metropolis através de um fluxograma.

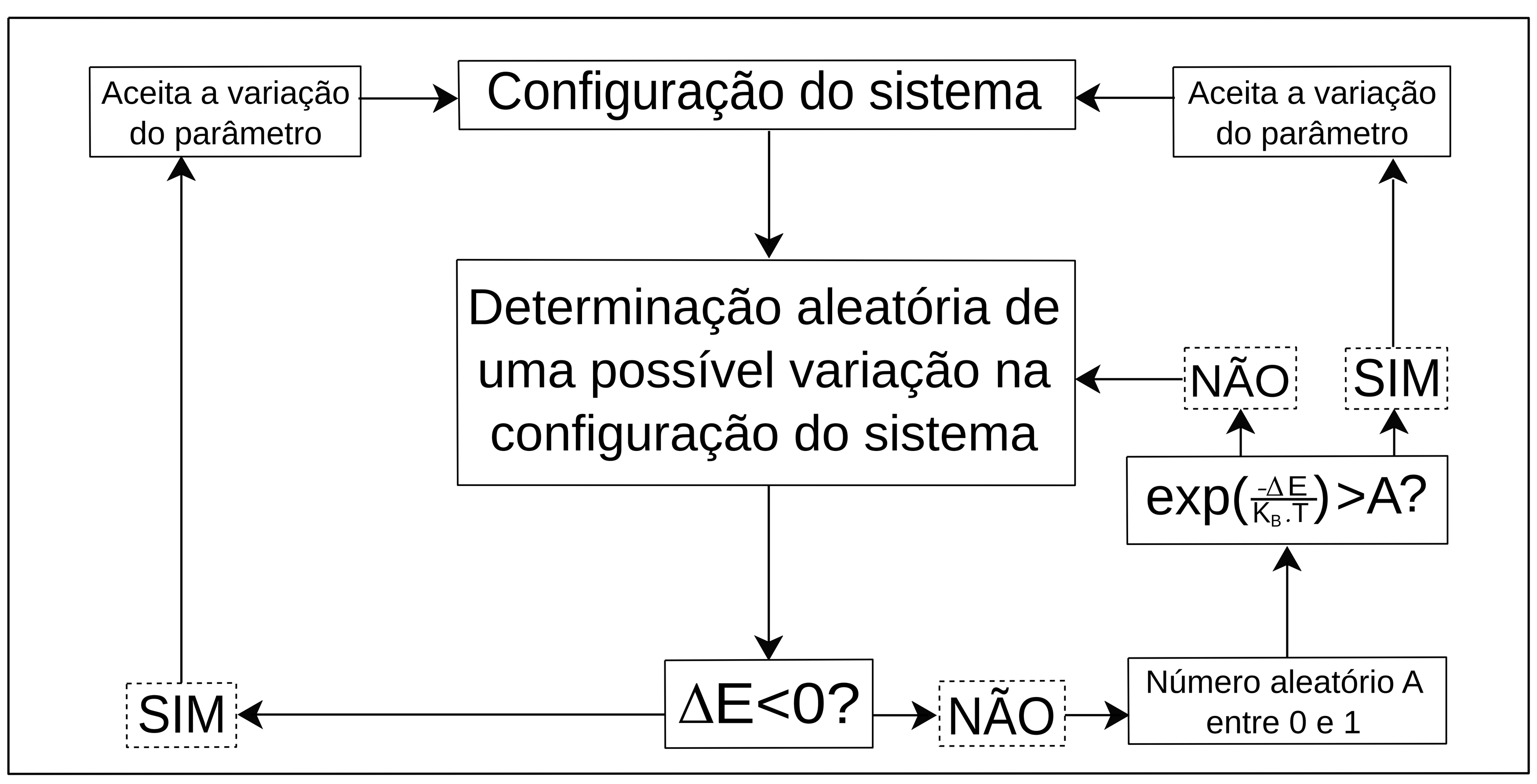

Figura 1 - Fluxograma do algoritmo de Metropolis.

O Hamiltoniano do modelo de ising é dado por:

$$\mathcal{H}=-J\sum_{(ij)}\sigma_i\sigma_j-H\sum_i\sigma_i.$$

Para comparar os resultados de nossas simulações de Monte Carlo, estudamos a solução exata da rede quadrada, obtida por Lars Onsager, e os resultados obtidos através da Teoria de Campo Médio (TCM). A TCM é um método aproximativo no qual a T_C para o MI depende apenas do número de coordenação (z), que é dado pelo número de primeiros vizinhos de cada spin na rede.

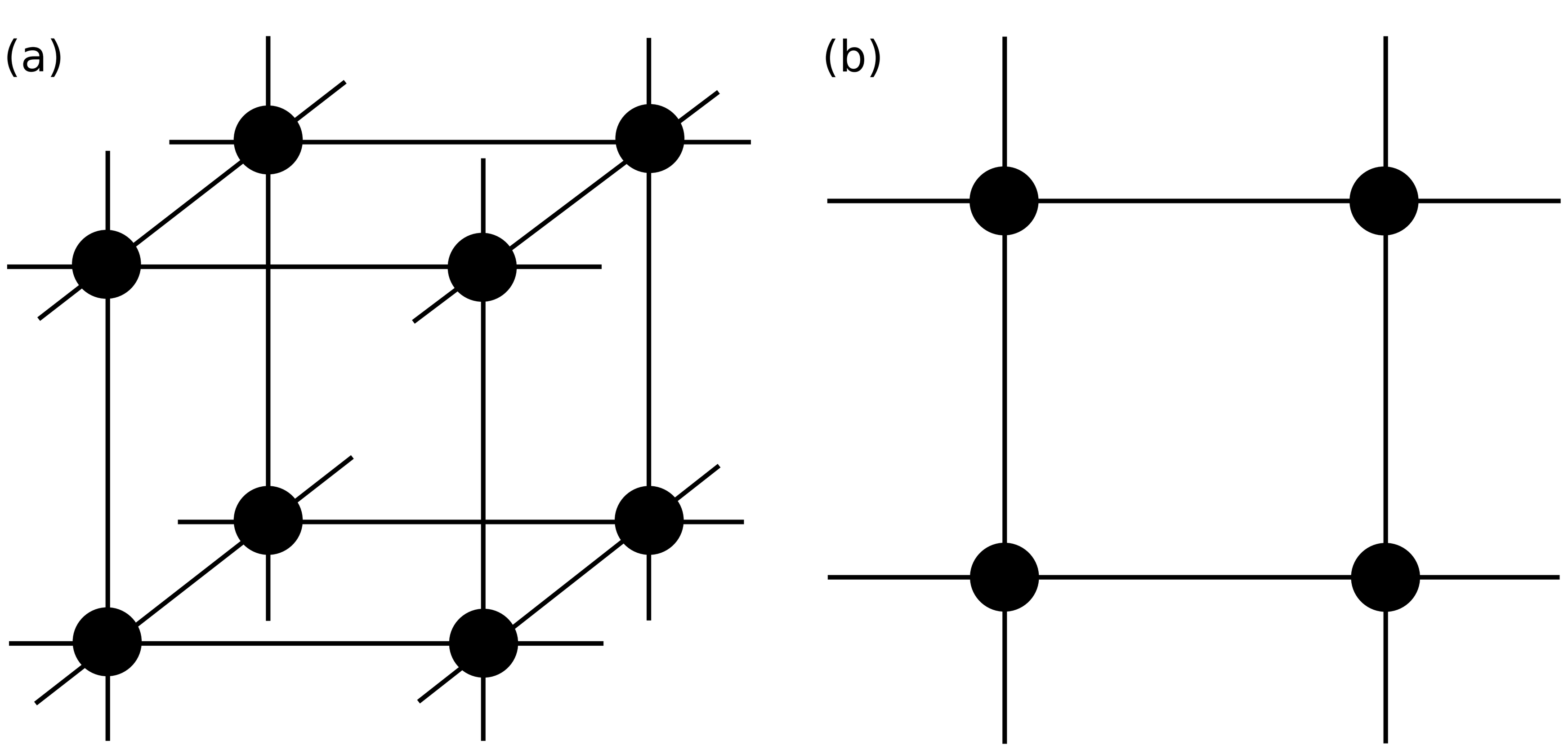

Figura 2 - Geometrias de rede cúbica (a) e quadrada (b).

RESULTADOS

Apresentamos os resultados obtidos para a rede quadrada através das simulações de Monte Carlo, da TCM e da solução exata. Para a rede cúbica são apresentados os resultados das simulações e da TCM.

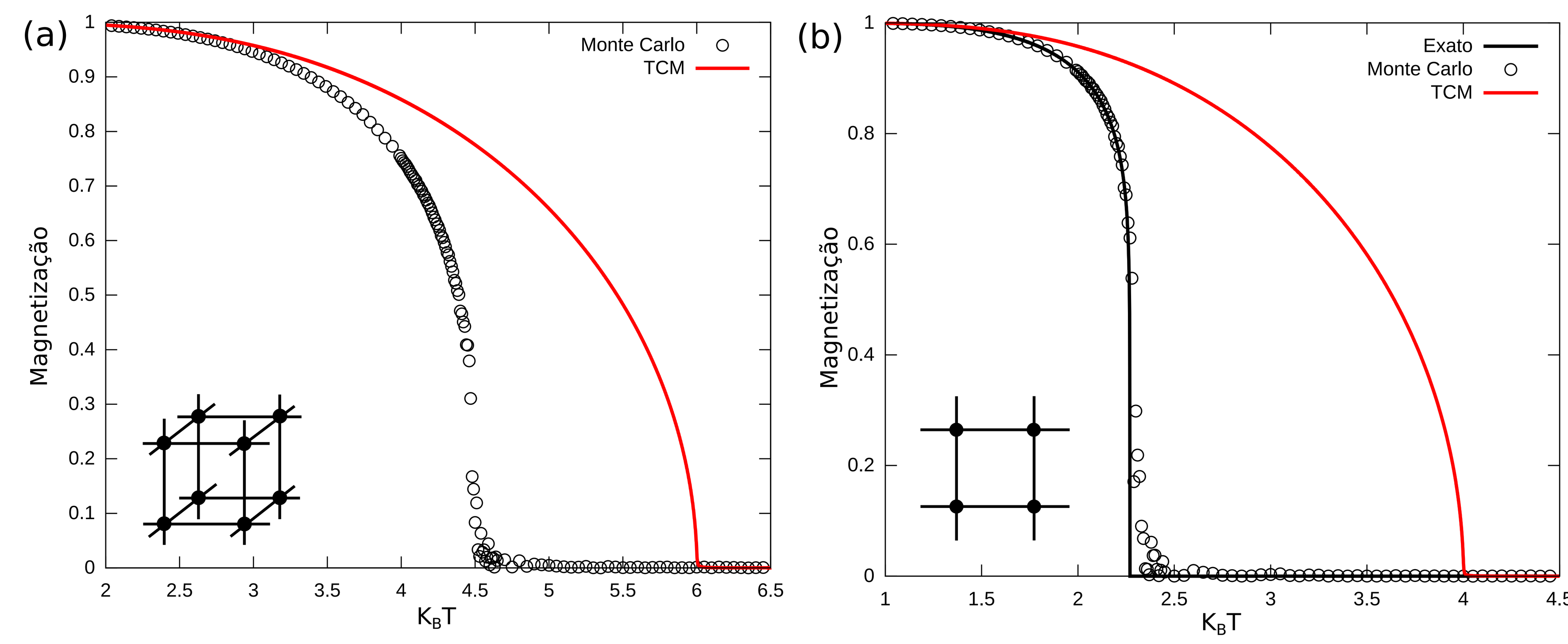

Figura 3 - a) A T_C exata é igual a 4.51 e as simulações levam à uma T_C de aproximadamente 4.53; b) A Tc exata é igual a 2,27 e as simulações mostram a transição em aproximadamente 2.35.

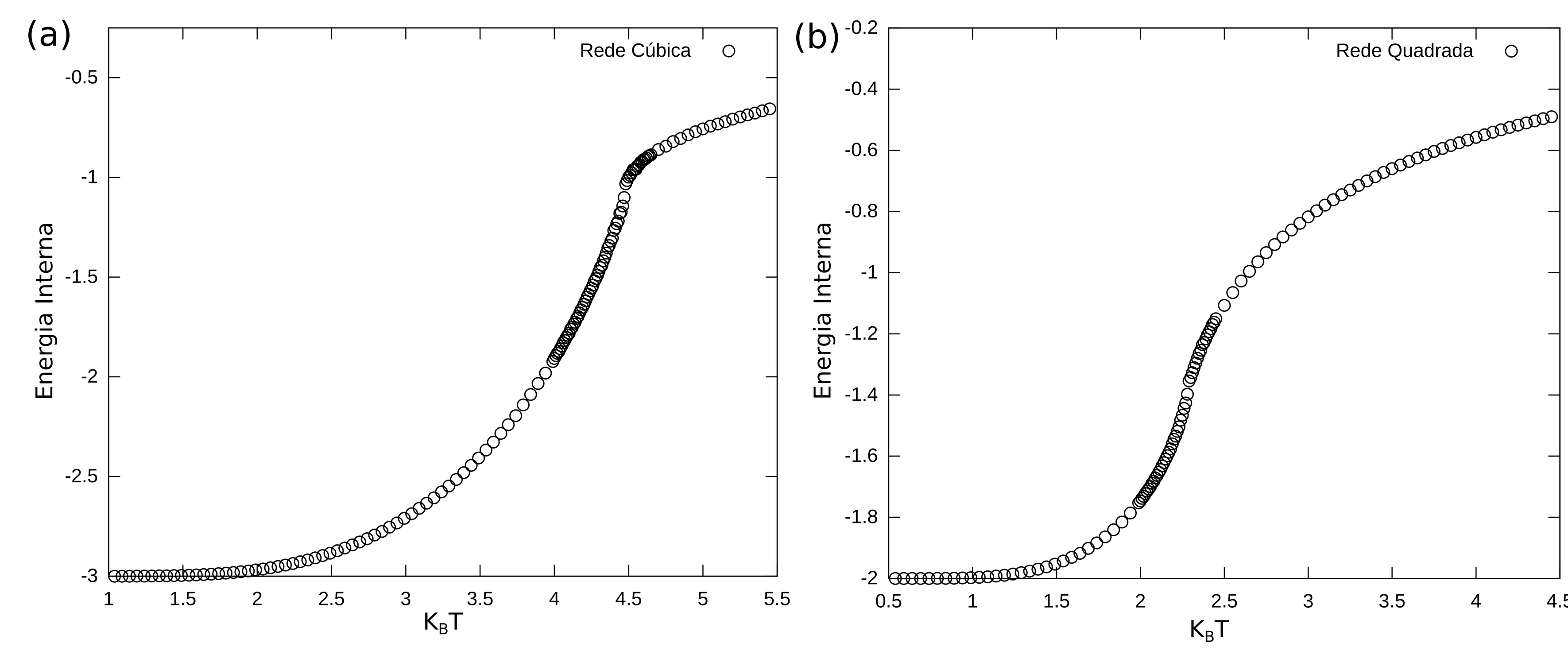

Figura 4 - Podemos perceber uma mudança de comportamento da energia interna na T_C, que leva à uma descontinuidade no comportamento do calor específico magnético.

Na geometria quadrada foi utilizada uma rede com 10 mil (100x100) spins. Para cada valor de temperatura foram realizados 50 milhões de passos de Monte Carlo. Na geometria cúbica, utilizamos uma rede de 125 mil (50x50x50) spins, com 100 milhões de passos de Monte Carlo para cada temperatura.

CONCLUSÕES

Com base em nossos resultados, concluimos que o MMC é uma ferramenta muito eficiente para o tratamento de sistemas clássicos de spins, apresentando grande precisão para as configurações em duas e três dimensões. A simplicidade de programação do algoritmo permite buscar outras aplicações, seja para outras geometrias de rede ou em diferentes modelos de sistemas clássicos de spins.

Com este trabalho também foi possível compreender noções de mecânica estatística e termodinâmica. O estudo do MMC permitiu perceber a vasta aplicação dos métodos estocásticos e o quanto estes métodos são acurados.

REFERÊNCIAS

Kadanoff, L. P., *J. Stat. Phys.* **137** (2009) 777.
Newman, M. E. J., e Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Clarendon Press, 1999.
Salinas, S. R. A., *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 2005.