

Abel Nascimento Ribeiro Santos

Modelo de Ising
Um estudo sobre os Algoritimos Metropolis
e Wang-Landau

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos para obtenção do título de **MESTRE EM FÍSICA**.

Área de Concentração: Matéria Condensada

Orientador: Prof. Dr. João Antônio Plascak-UFPB

Co-orientadora: Dra. Alenxandra Valentim

Paraíba

2016

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

S237m Santos, Abel Nascimento Ribeiro.

Modelo de Ising Um estudo sobre os Algoritimos
Metropolis e Wang-Landau / Abel Nascimento Ribeiro
Santos. - João Pessoa, 2018.

61 f.

Coorientação: Alexandra Valentim.

Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Modelo de Ising bidimensional. 2. Monte Carlo. 3.
algoritmo de Metropolis e Wang-Landau. I. Valentim,
Alexandra. II. Título.

UFPB/CCEN



Universidade Federal da Paraíba
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ATA Nº 123

Aos três dias do mês de março do ano de dois mil e dezessete, às 14h00, reuniram-se, remotamente, os membros da Banca Examinadora constituída para examinar o candidato ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, Abel Nascimento Ribeiro Santos. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: João Antônio Plascak (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Sérgio André Fontes Azevedo (DF/UFPB) e Luiz Felipe Cavalcanti Pereira (UFRN). Dando início aos trabalhos, o Prof. João Antônio Plascak comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado Modelo de Ising: um estudo sobre os algoritmos de metrópolis e Wang-Landau. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: aprovado. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, José Sérgio Trindade Silva, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, 03 de março de 2017.

Dr. LUIZ FELIPE CAVALCANTI PEREIRA, UFRN

Examinador Externo à Instituição

Dr. SERGIO ANDRE FONTES AZEVEDO, UFPB

Examinador Interno

Dr. JOAO ANTONIO PLASCAK, UFPB

Presidente

ABEL NASCIMENTO RIBEIRO SANTOS

Mestrando



Universidade Federal da Paraíba
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE CORREÇÕES

ATA Nº 123

Autor: ABEL NASCIMENTO RIBEIRO SANTOS

Título: Modelo de Ising Um estudo sobre os Algoritmos Metropolis e Wang-Landau

Banca examinadora:

Prof. LUIZ FELIPE CAVALCANTI PEREIRA Examinador Externo à Instituição

Prof. SERGIO ANDRE FONTES AZEVEDO Examinador Interno

Prof. JOAO ANTONIO PLASCAK Presidente

Os itens abaixo deverão ser modificados, conforme sugestão da banca examinadora.

COMENTÁRIOS GERAIS:

Declaro, para fins de homologação, que as modificações, sugeridas pela banca examinadora, acima mencionadas, foram aceitas e serão cumpridas integralmente.

Prof. JOAO ANTONIO PLASCAK

Orientador

*Primeiramente a Deus.
Aos meus Pais Antônio Wilson e Hélia.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, criador desse frágil ser.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. João Antônio Plascak, pela paciência e orientação, de longe é, sem dúvida, o melhor professor que pode existir; nunca mediu esforços para mostrar o verdadeiro caminho acadêmico.

Ao meu pai, Antônio Wilson, pelo apoio nos momentos mais difíceis; um herói sem igual.

À minha mãe, Hélia, a pessoa com o coração mais doce e puro que pude conhecer.

À minha coorientadora, Dra. Alexandra Valentim, pelas conversas que teve papel marcante e fundamental para confecção dessa dissertação.

Aos meus irmãos, Gabriel e Loame, que sempre acreditaram em mim.

Aos meus amigos, representados por Mayrton Dias e Jéssica Balbino. Sem dúvida fazem parte de mim agora e contribuíram de forma significativa para o meu crescimento pessoal e intelectual.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para o meu crescimento intelectual.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

“O inimigo mais perigoso que você poderá encontrar será sempre você mesmo.”

Friedrich Nietzsche

“A perseverança é a mãe da boa sorte.”

M. Cervantes

Resumo

Apresentamos, nesse trabalho, um estudo computacional das propriedades termodinâmicas do modelo de Ising de spin $S = 1/2$, com interações ferromagnéticas, em uma rede quadrada a campo magnético externo nulo. Empregamos simulações de Monte Carlo, utilizando os algoritmos de Metropolis e Wang-Landau. Os expoentes críticos e as correspondentes temperaturas de transição foram obtidos por ambos métodos utilizando a teoria de escalonamento de tamanho finito. Foi feita uma comparação dos valores exatos com os resultados obtidos pelos dois algoritmos, tanto do ponto de vista quantitativo, como de tempo computacional.

Palavras-Chave: Modelo de Ising bidimensional, Monte Carlo, algoritmo de Metropolis e Wang-Landau.

Abstract

In this work we present a study of the thermodynamical properties of the spin-1/2 two-dimensional Ising model with ferromagnetic interactions at zero external magnetic field. We used Monte Carlo simulations, through Metropolis and Wang-Landau algorithms. The critical exponents and the corresponding critical temperatures are obtained by both methods using the finite-size scaling hypothesis. A comparison between the exact values and the results obtained from both algorithms was made, not only quantitatively but also in terms of computational times.

Keywords: Ising model two-dimensional, Monte Carlo, Metropolis and Wang-Landau algorithms.

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fase. (a) Pressão p contra a temperatura T de uma substância simples.(b) Plano campo aplicado H contra temperatura T para um magneto. As linhas cheias indicam transição de fase de primeira ordem. Figura retirada de [Stanley (Stanley)].	17
2.2	Alguns comportamentos termodinâmicos de fluidos e magnetos: isotermas, em diferentes temperaturas, da pressão p contra volume molar v (a) e campo externo aplicado H contra magnetização M (b); densidade ρ contra temperatura T (c) e parâmetro de ordem (magnetização) M contra temperatura T (d). Figura retirada de [Stanley (Stanley)].	18
3.1	Diagrama de fase do modelo de Ising ferromagnético em função do campo externo H e da temperatura T . A linha de coexistência de fase a campo nulo é indicada ao longo do eixo da temperatura e termina no ponto crítico T_c	30
4.1	Energia interna por spin E/N em função da temperatura T para o modelo de Ising na rede quadrada. Os pontos foram obtidos através da simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, com diversos tamanhos de rede, como descrito no texto. O gráfico menor mostra a faixa onde se encontra o ponto de inflexão da energia interna. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	36
4.2	Calor específico a volume constante c_V em função da temperatura para diversos tamanhos de rede. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	37

4.3	Máximo do calor específico c_V^{max} em função do $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta corresponde a um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	38
4.4	Módulo da magnetização por spin m a campo externo nulo em função da temperatura. Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, com diversos tamanhos de rede. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	38
4.5	Logaritmo do valor do módulo da magnetização por spin em seu ponto de inflexão $\ln(m_{if})$ em função de $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	39
4.6	Susceptibilidade magnética por spins em função da temperatura, para diversos tamanhos de rede. O gráfico menor mostra o máximo para as redes menores. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	40
4.7	Logaritmo do valor máximo da susceptibilidade em função do logaritmo do tamanho de rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta é obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	41
4.8	Logaritmo do valor máximo da derivada do logaritmo da magnetização em relação à temperatura, em função do $\ln(L)$. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a teoria de escalonamento de tamanho finito. A reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	42
4.9	Temperatura T_c^L em função de $L^{-1/\nu}$. Os pontos foram obtidos através do calor específico e a reta corresponde a um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	42
4.10	O mesmo que a figura 4.9 para o ponto de inflexão da magnetização. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	43
4.11	O mesmo que a figura 4.9 para a susceptibilidade. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	43

5.1	Logaritmo da densidade de estados $\ln g(E)$ em função da energia por spins E/N . Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau para diferentes redes. As linhas são os resultados exatos.	48
5.2	Erro relativo ε_{er} em função da energia por spins E/N . Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau e resultado exato para diferentes redes.	48
5.3	Energia por partícula via simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.	50
5.4	Calor específico a volume constante via simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.	50
5.5	Máximo do calor específico obtido da figura 5.4 em função do logaritmo do tamanho da rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a reta é um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	51
5.6	Magnetização a campo externo nulo. Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.	52
5.7	Logaritmo do valor do módulo da magnetização por spin em seu ponto de inflexão $\ln(m_{if})$ em função de $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	53
5.8	Susceptibilidade magnética por spins em função da temperatura, para diversos tamanhos de rede, de acordo com o algoritmo de Wang-Landau. O gráfico menor mostra o máximo para as redes menores.	53
5.9	Logaritmo do valor máximo da susceptibilidade em função do logaritmo do tamanho de rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta é obtida através de um ajuste linear.	54

5.10	Logaritmo do valor máximo da derivada do logaritmo da magnetização em relação à temperatura, em função do $\ln(L)$. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a teoria de escalonamento de tamanho finito. A reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	54
5.11	Temperatura T_c^L em função de $L^{-1/\nu}$. Os pontos foram obtidos através do calor específico e a reta corresponde ao ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.	55
5.12	O mesmo que a figura 5.11 para o ponto de inflexão da magnetização.	56
5.13	O mesmo que a figura 5.11 para a susceptibilidade.	56
5.14	Energia livre de Helmholtz $F(T) = k_b T \ln(Z)$ onde T , K_b e Z são respectivamente temperatura, constante de Boltzmann e função de partição de acordo com o algoritmo de Wang-Landau.	57
5.15	Entropia $S(T) = \frac{\partial F}{\partial T}$ em função da temperatura T de acordo com o algoritmo de Wang-Landau.	57

Lista de Tabelas

6.1	Resultados obtidos utilizando o algoritmos de Metropolis e Wang-Landau em comparação com os valores exatos.	58
6.2	Tempo de computação dos algoritmos de Metropolis e Wang-Landau para as várias redes. O tempo de Metropolis corresponde a somente uma temperatura fixa enquanto o de Wang-Landau é o tempo total.	59

Sumário

1. <i>Introdução</i>	13
2. <i>Transições de Fase e Fenômenos Críticos</i>	17
2.1 <i>Transições de fase</i>	17
2.2 <i>Ponto Crítico</i>	19
2.3 <i>Escalonamento de Tamanho Infinito</i>	20
2.4 <i>Hipótese de Escala de Tamanho Finito</i>	23
3. <i>Modelo de Ising</i>	28
4. <i>Algoritmo de Metropolis</i>	31
4.1 <i>Introdução</i>	31
4.2 <i>Algoritmo de Metropolis</i>	34
4.2.1 <i>Aplicação ao Modelo de Ising Bidimensional</i>	34
4.3 <i>Resultados</i>	35
5. <i>Algoritmo de Wang-Landau</i>	45
5.1 <i>Aplicação ao modelo de Ising</i>	46
5.2 <i>Resultados</i>	47
6. <i>Comparações entre os algoritmos de Metropolis e Wang-Landau e Conclusões</i>	58
6.1 <i>Comparações</i>	58
6.2 <i>Conclusões</i>	59
<i>Referências</i>	60

Introdução

A simulação computacional teve sua origem em meados do século XX e, desde então, vem participando com grande destaque em diversas áreas do conhecimento, como Física, Química, Biologia, Estatística, entre outras. Em particular, a simulação computacional na Física vem proporcionando melhor entendimento do comportamento macroscópico de diversos sistemas com interações microscópicas das mais variadas. Dessa forma, foi surgindo, ao longo do tempo, diversos métodos e algoritmos para o estudo de modelos teóricos, modelos esses que podem possuir, ou não, um apelo experimental. Os métodos mais conhecidos são, por exemplo, o método de Monte Carlo [Metropolis et al. (1953)], a dinâmica molecular [Rahman (1964)], a dinâmica de Langevin [Allen e Tildesley (1989)] e a dinâmica de spins [Costa et al. (1997)]. Entretanto, mesmo com os grandes avanços na computação, as simulações têm suas limitações, podendo apenas tratar de sistemas físicos com tamanhos finitos. No entanto, as propriedades físicas dos modelos estudados, no limite termodinâmico, podem ser estimadas através dos resultados obtidos para sistemas não muito grandes, através da teoria de escalonamento de tamanho finito [Gould et al. (1988)].

Na mecânica estatística, o desenvolvimento da simulação computacional mostra-se também muito pertinente, tanto qualitativa quanto quantitativamente, principalmente no estudo de transições de fase e fenômenos críticos, no qual se consegue descrever, com razoável perfeição, o comportamento crítico e multicrítico de alguns sistemas reais.

No que concerne as transições de fase e fenômenos críticos, sabemos que elas podem ocorrer em uma enorme variedade de sistemas, como fluidos simples e misturas de fluidos; materiais magnéticos e ligas metálicas; materiais ferroelétricos; superfluidos; supercondutores; cristais líquidos etc. Algumas das transições de fase mais corriqueiras que podemos presenciar são a ebulição da água em nossos fogões e a mudança de água para gelo que

ocorre em nossas geladeiras, transições essas controladas pela temperatura.

Embora sejam fenômenos muito comuns, os estudos sobre transições de fase somente tiveram início com a invenção do termômetro. Assim, por volta de 1762, Joseph Black, na Escócia, [Berche et al. (2009)] descobre o calor específico e o calor latente. Mas, o grande ponto de ignição dos fenômenos críticos veio com Cagniard de la Tour em 1822, na França [Berche et al. (2009)], seguido de Andrews, em 1869 [Andrews (1869)], na Irlanda, com a descoberta do ponto crítico. Foi Andrews quem viu, pela primeira vez, a opalescência crítica no CO_2 . Logo em seguida, em 1873, a tese de doutorado de van der Waals é publicada, contendo a primeira teoria de sucesso sobre a "continuidade dos estados líquido e gasoso da matéria", dando uma compreensão qualitativa, embora fenomenológica, da existência do ponto crítico em fluidos. A teoria de van der Waals [Salinas (1997)] baseia-se em correções feitas no volume e pressão na correspondente lei de Boyle para os gases ideais. Nesse caso, é levado em consideração a repulsão de caroço duro entre as moléculas e a correção devido a parte atrativa do potencial intermolecular.

Em paralelo, vários experimentos foram realizados em sistemas magnéticos. No início do século XX, as transições de fase em sistemas ferromagnéticos foram também, por sua vez, explicadas por uma teoria fenomenológica proposta por Curie e desenvolvida por Weiss [Salinas (1997)], a qual apresenta muitos pontos em comum com a teoria de van der Waals. A teoria fenomenológica proposta por Weiss sugere que cada momento magnético constituinte do sistema interage com outro momento magnético do sistema. Cada momento magnético está inserido em um campo médio, de forma que o campo seja proporcional à magnetização. Tais teorias são conhecidas por teorias clássicas, sendo utilizadas para uma abordagem qualitativa de diversos tipos de transições de fase.

Na década de 30, Lev Landau desenvolve uma teoria de campo médio geral, em que unifica as propostas para transições de fase em fluidos e sistemas magnéticos [Landau (1937)]. Landau introduz o conceito de parâmetro de ordem, que é uma quantidade que se torna zero na fase desordenada mais simétrica e é diferente de zero na fase ordenada e menos simétrica. Porém, sua teoria não leva em conta as flutuações que ocorrem na região crítica. Como a não analiticidade da energia livre no limite termodinâmico é uma característica da transição de fase, obtêm-se com o procedimento de Landau os chamados resultados clássicos para os expoentes críticos, ou seja, os valores dos expoentes críticos diferem dos valores experimentais e dos resultados exatos em alguns modelos de spins.

Os expoentes críticos são, na verdade, quantidades que descrevem a forma assintótica das diversas grandezas termodinâmicas perto do ponto crítico.

Como as teorias de campo médio não conseguem descrever adequadamente os fenômenos críticos do ponto de vista quantitativo, e tendo em vista que a maioria dos modelos propostos não possuem solução exata, torna-se necessário o desenvolvimento de técnicas aproximativas controláveis. Nesse ponto, a simulação computacional surge com o intuito de obter resultados em que métodos analíticos, e mesmo aproximações, falham [Landau e Binder (2014)].

Neste trabalho, vamos abordar o método de Monte Carlo aplicado ao modelo de Ising [Ising (1925)] bidimensional. Este método faz uso de números pseudo-aleatórios e, em geral, permite calcular as grandezas físicas do modelo em estudo para sistemas finitos razoavelmente grandes, com erros estatísticos, em princípio, tão pequenos quanto se queira. Um dos algoritmos mais usados é o de Metropolis [Metropolis e Ulam (1949)], que permite o cálculo direto das variáveis macroscópicas de um sistema físico em equilíbrio a uma dada temperatura T . O algoritmo de Metropolis tem como ideia básica considerar um sistema em contato com um reservatório térmico e partir de um microestado inicial arbitrário, que, em geral, não corresponde a um estado de equilíbrio. Cria-se então uma sequência de outros estados com probabilidade proporcional a exponencial de Boltzmann, e espera-se que, após um tempo não muito longo, entre em equilíbrio com o reservatório. Será abordado também um outro algoritmo, chamado Wang-Landau [Wang e Landau (2001)]. Este algoritmo permite calcular de forma alternativa a densidade de estados do sistema em consideração. Tal algoritmo realiza um passeio aleatório no espaço de microestados usando atualizações de um único spin e calcula diretamente a densidade de estados, isto é, o número de todos os microestados possíveis para dado nível de energia do sistema. A vantagem do algoritmo de Wang-Landau sobre o Metropolis é que, enquanto este último necessita de novas simulações ao se mudar a temperatura, o primeiro permite o cálculo de grandezas termodinâmicas em qualquer temperatura.

Aplicaremos, nesse trabalho, as técnicas de Metropolis e Wang-Landau ao modelo de Ising bidimensional de spin meio. Faremos um estudo da criticalidade usando a teoria de escalonamento de tamanho finito na obtenção dos expoentes críticos. Assim, no próximo capítulo, apresentamos alguns aspectos das transições de fase e fenômenos críticos, abordando o ponto crítico e a teoria de escalonamento de tamanho finito. No capítulo 3, damos

uma visão geral sobre o modelo de Ising. O capítulo 4 é dedicado a uma visão mais detalhada sobre simulação de Monte Carlo, em particular ao algoritmo de Metropolis aplicado ao modelo de Ising de spin-1/2. O algoritmo de Wang-Landau, bem como suas aplicações, são apresentados no capítulo 5. Uma comparação entre os resultados obtidos usando os diferentes algoritmos, assim como uma comparação com os resultados exatos para o modelo em estudo, serão apresentados no capítulo 6. Este último capítulo também contém as conclusões deste trabalho, assim como algumas perspectivas futuras.

Transições de Fase e Fenômenos Críticos

2.1 Transições de fase

As diversas fases termodinâmicas de uma substância simples podem ser representadas, por exemplo, num diagrama temperatura-pressão, como mostrado na figura 2.1(a). A coexistência entre duas fases termodinâmicas é representada por uma linha, pois para uma determinada pressão, a coexistência de fase deve ocorrer em uma temperatura bem definida. O ponto de encontro entre três linhas desse tipo é denominado ponto triplo, e há nesse caso a coexistência das três fases. Ao fim da linha de coexistência do líquido-gás temos o ponto crítico, em que o líquido e gás se tornam indistintos. Podemos notar que não temos um ponto crítico na linha sólido-líquido, provavelmente pela falta de simetria entre essas duas fases.

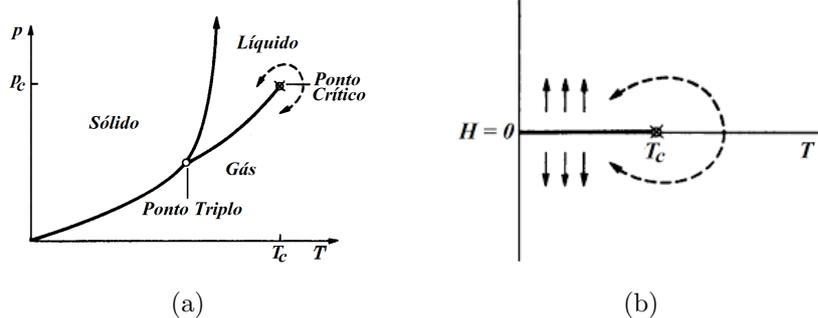


Figura 2.1: Diagrama de fase. (a) Pressão p contra a temperatura T de uma substância simples. (b) Plano campo aplicado H contra temperatura T para um magneto. As linhas cheias indicam transição de fase de primeira ordem. Figura retirada de [Stanley (Stanley)].

Ao se tratar de sistemas magnéticos, nota-se uma estreita analogia entre suas transições e a transição de fase em fluidos. Por exemplo, aplicando um campo externo H num sistema ferromagnético, a sua magnetização M aumenta, assim como a densidade ρ quando há um

aumento da pressão p num fluido. Deste modo, podemos associar o par (H, M) de um magneto com o par (p, ρ) para um fluido simples. No caso de um magneto, a magnetização M é o chamado parâmetro de ordem, de forma que é zero acima da temperatura crítica T_c e diferente de zero abaixo de temperatura crítica T_c . O diagrama no plano temperatura-campo externo da figura 2.1(b) ilustra essa analogia com o fluido, embora de forma bem mais simétrica, pois a linha de transição de primeira ordem encontra-se para $H = 0$.

Os gráficos da figura 2.2 mostram, de maneira mais detalhada, a semelhança de comportamentos termodinâmicos desses dois sistemas. No caso do fluido, o volume $v=V/n$ é o volume molar, em que V e n são volume total e número de moles, respectivamente, e o parâmetro de ordem é definido pela diferença $\psi = v_L - v_G$ ou $\psi_1 = \rho_L - \rho_G$. Note que na transição líquido-gás essa quantidade é descontínua, bem como a magnetização em função do campo para temperaturas menores que T_c .

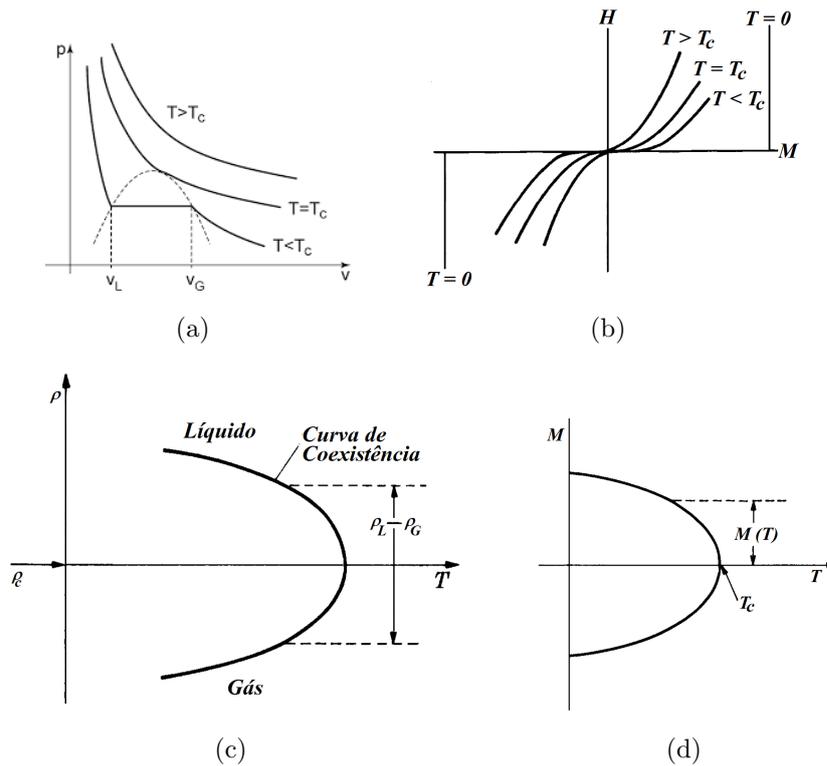


Figura 2.2: Alguns comportamentos termodinâmicos de fluidos e magnetos: isothermas, em diferentes temperaturas, da pressão p contra volume molar v (a) e campo externo aplicado H contra magnetização M (b); densidade ρ contra temperatura T (c) e parâmetro de ordem (magnetização) M contra temperatura T (d). Figura retirada de [Stanley (Stanley)].

A transição de fase, em que o volume molar ou magnetização apresentam um salto quando se atravessa a linha de coexistência, é denominada transição de fase descontínua ou

de primeira ordem. O nome primeira ordem vem do fato de a primeira derivada da energia livre ser descontínua. Quando essas quantidades são contínuas, a transição é dita contínua ou de segunda ordem. Nesse último caso, porém, a compressibilidade κ do fluido ou a susceptibilidade magnética χ tornam-se infinitas na temperatura crítica (o calor específico pode ou não divergir). Assim, a designação segunda ordem provém do fato de a derivada segunda do potencial possuir a singularidade. Neste trabalho trataremos especificamente de sistemas magnéticos com transições de fase de segunda ordem.

2.2 Ponto Crítico

No caso de sistemas magnéticos, o ponto crítico ocorre na passagem do estado ferromagnético (ordenado) para o estado paramagnético (desordenado) e acontece na temperatura $T = T_c$ a campo externo nulo. Abaixo dessa temperatura existe uma magnetização espontânea M , como pode ser visto, esquematicamente, na figura 2.2(d), e acima dessa temperatura $M = 0$. Outras grandezas termodinâmicas possuem seus respectivos comportamentos.

Para descrever o comportamento das diversas grandezas termodinâmicas de interesse nas proximidades do ponto crítico, foram definidos os chamados expoentes críticos, que dão a ideia do comportamento assintótico dessas grandezas em torno de T_c . Assim, temos para a magnetização

$$M(T, H = 0) \sim M_0(-t)^\beta, \quad (2.1)$$

onde $T < T_c$, $t = (T - T_c)/T_c$, M_0 uma constante e o sinal \sim indica o comportamento assintótico nas vizinhanças do ponto crítico. β é o expoente crítico da magnetização.

Dessa maneira, a susceptibilidade a campo nulo $H = 0$ diverge da forma

$$\chi(T, H = 0) \sim \begin{cases} \chi_+ t^{-\gamma}; & (T > T_c) \\ \chi_- (-t)^{-\gamma'}; & (T < T_c) \end{cases}, \quad (2.2)$$

onde χ_+ e χ_- são constantes e a princípio usamos expoentes críticos distintos γ e γ' para $T < T_c$ e $T > T_c$, embora as teorias de escala e experiências confirmam [Stanley (Stanley)] [Binney et al. (1992)] $\gamma = \gamma'$.

A capacidade térmica molar c_H a campo nulo possui o seguinte comportamento singular

$$c_{H=0} \sim \begin{cases} c_{H+} t^{-\alpha}; & (T > T_c) \\ c_{H-} (-t)^{-\alpha'}, & (T < T_c) \end{cases}, \quad (2.3)$$

onde c_{H+} e c_{H-} são constantes e $\alpha = \alpha'$ é o expoente crítico do calor específico.

Da isoterma crítica na figura 2.2(b), podemos ainda definir

$$M(t = 0, H) \sim M_1 H^{1/\delta}, \quad (2.4)$$

onde M_1 é uma constante e δ outro expoente crítico.

A função de correlação $\Gamma(r)$ entre dois spins σ_0 e σ_r , situados a uma distância r

$$\Gamma(r) = \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle - \langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_r \rangle, \quad (2.5)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa a média termodinâmica, tem um comportamento da forma

$$\Gamma(r) \sim \frac{\exp[-r/\xi(t)]}{r^{d-2+\eta}}, \quad (2.6)$$

onde η é o expoente crítico espacial, d a dimensão da rede e $\xi(t)$ é o comprimento de correlação, o qual dá a escala do alcance da correlação entre as flutuações do parâmetro de ordem, nesse caso, a magnetização. Quando $t \rightarrow 0$ o alcance das correlações entre flutuações diverge, ou seja o comprimento de correlação tem a forma

$$\xi(T, H = 0) \sim \begin{cases} \xi_+ t^{-\nu}; & (T > T_c) \\ \xi_- (-t)^{-\nu'}, & (T < T_c) \end{cases}, \quad (2.7)$$

onde $\nu = \nu'$ é o expoente do comprimento de correlação.

Sabe-se que os expoentes definidos acima não são totalmente independentes, isto é, existe uma quantidade de relações, chamadas de relações de escala, entre os mesmos. Embora haja uma grande quantidade de relações de escala, elas não são totalmente independentes, de forma que o conhecimento de dois expoentes é suficiente para a determinação dos restantes. As relações de escala em sistemas infinitos, devido a Widom, serão discutidas na próxima seção.

2.3 Escalonamento de Tamanho Infinito

Para analisar o comportamento crítico, é conveniente separar a energia livre correspondente ao sistema, nesse caso, a energia livre de Gibbs molar $eg(T, H)$, em uma parte regular $eg_r(T, H)$ e uma parte singular $eg_s(T, H)$, esta última contendo as singularidades associadas ao ponto crítico. Desse modo temos

$$eg(T, H) = eg_r(T, H) + eg_s(T, H). \quad (2.8)$$

A hipótese de escala, ou de homogeneidade, consiste em supor que eg_s seja uma função homogênea generalizada de suas variáveis. Assim, escrevendo eg_s em termos de $t = (T - T_c)/T_c$, temos

$$eg_s(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda eg_s(t, H), \quad (2.9)$$

onde λ é um parâmetro arbitrário, e a e b são expoentes bem definidos. Derivando ambos os lados da eq.(2.9) com relação ao campo externo H , obtemos

$$\lambda^b \frac{\partial eg_s(\lambda^a t, \lambda^b H)}{\partial H} = \lambda \frac{\partial eg_s(t, H)}{\partial H}. \quad (2.10)$$

Como a magnetização é a derivada da energia livre em relação ao campo externo (com sinal negativo), temos

$$\lambda^b m(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda m(t, H). \quad (2.11)$$

Desde que λ pode assumir qualquer valor, tomamos o valor específico $\lambda = (-1/t)^{1/a}$ e $H = 0$ para obter

$$m(t, 0) = (-t)^{\frac{b-1}{a}} m(-1, 0). \quad (2.12)$$

Quando $t \rightarrow 0^-$ temos o comportamento assintótico da magnetização e, comparando com eq.(2.1), nos leva a

$$\beta = \frac{b-1}{a}. \quad (2.13)$$

A equação acima fornece o expoente crítico β em termos destes parâmetros de escala a e b que são desconhecidos. Também o expoente δ pode ser expresso em termos dos parâmetros de escala ao se fazer $t = 0$ na eq.(2.11)

$$m(0, H) = \lambda^{b-1} m(0, \lambda^b H). \quad (2.14)$$

Uma escolha adequada é $\lambda = H^{-1/b}$, de modo que a equação acima tem a forma

$$m(0, H) = H^{\frac{1-b}{b}} m(0, 1). \quad (2.15)$$

Quando $H \rightarrow 0$ o comportamento assintótico é a eq.(2.4), portanto

$$\delta = \frac{b}{1-b}. \quad (2.16)$$

Para obter o expoente γ , podemos escrever a susceptibilidade magnética por partícula na forma

$$\chi(t, H) = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T = \lambda^{2b-1} \chi(\lambda^a t, \lambda^b H), \quad (2.17)$$

e escolhendo $\lambda = -t^{-1/a}$, e tomando $H = 0$ temos

$$\chi(t, 0) = (-t)^{-\frac{2b-1}{a}} \chi(-1, 0). \quad (2.18)$$

Uma comparação da equação acima com a eq.(2.2) mostra que

$$\gamma = \frac{2b-1}{a}. \quad (2.19)$$

O expoente α é obtido através do calor específico,

$$c_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H, \quad (2.20)$$

onde a entropia é dada por

$$s = - \left(\frac{\partial g_s}{\partial T} \right)_H. \quad (2.21)$$

Assim

$$\lambda^a s(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda s(t, H), \quad s(t, H) = \lambda^{a-1} s(\lambda^a t, \lambda^b H), \quad (2.22)$$

portanto

$$c_H = \lambda^{2a-1} c_H(\lambda^a t, \lambda^b H), \quad (2.23)$$

e fazendo $H = 0$ e escolhendo $\lambda = t^{-1/a}$ temos

$$c_H = t^{-\frac{2a-1}{a}} c_H(1, 0). \quad (2.24)$$

Quando $t \rightarrow 0$ temos o comportamento assintótico do c_H , eq. (2.3), deste modo

$$\alpha = \frac{2a-1}{a}. \quad (2.25)$$

Podemos então notar que os expoentes críticos podem ser obtidos através do conhecimento de apenas duas constantes, a e b .

Existem, entretanto, certas desigualdades que relacionam alguns dos expoentes críticos. Uma dessas desigualdades pode ser obtida analisando o calor específico para sistemas magnéticos. O calor específico molar a campo magnético constante, c_H , e o calor específico molar a magnetização constante, c_M , são dados por

$$c_H = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_H \quad \text{e} \quad c_M = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_M, \quad (2.26)$$

as quais se relacionam através da fórmula

$$c_H - c_M = T \left\{ \left(\frac{\partial m}{\partial T} \right) \right\}^2 / \chi T. \quad (2.27)$$

Como c_H é maior que c_M e devem ser sempre positivos, a equação acima torna-se uma desigualdade

$$c_H \geq T \left\{ \left(\frac{\partial m}{\partial T} \right) \right\}^2 / \chi_T \quad (2.28)$$

e, usando as equações (2.3) e (2.2) e sabendo que

$$\left(\frac{\partial m}{\partial T} \right)^2 = (-t)^{2\beta-2}, \quad (2.29)$$

encontramos a relação

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (2.30)$$

que é conhecida como desigualdade de Rushbrooke. Há várias outras desigualdades que podem ser obtidas de forma semelhante, como, por exemplo, as de Griffiths e Fisher, dadas respectivamente por

$$\alpha + \beta(\delta = 1) \geq 2; \quad (2 - \eta)\nu \geq \gamma. \quad (2.31)$$

Notamos, agora, que a partir das equações (2.25), (2.13) e (2.19), a desigualdade de Rushbrooke se comporta como igualdade, isto é

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (2.32)$$

Na verdade, todas as desigualdades, obtidas de forma rigorosa, são igualdades, quando provenientes da teoria de escala de Widom, de resultados teóricos em modelos conhecidos e resultados experimentais. Entretanto, as relações de escala não são todas independentes entre si, de forma que somente dois expoentes críticos são necessários para que se obtenha os restantes, em concordância com a hipótese de escala de Widom.

2.4 Hipótese de Escala de Tamanho Finito

Os sistemas estudados em experimentos e simulações computacionais são limitados em tamanho. Portanto, a hipótese de escala tratada na seção anterior não é apropriada para o estudo de tal situação, pois foi desenvolvida com a condição de que o sistema esteja no limite termodinâmico. A teoria de escala de tamanho finito mostra como tirar vantagem das limitações mencionadas acima, e obter informações no limite termodinâmico partindo das propriedades correspondentes em sistemas finitos [Fisher e Barber (1972)]. Se alguma ou todas as dimensões geométricas do sistemas são feitas finitas, haverá modificação na singularidade, podendo esta singularidade até mesmo nem existir.

Em 1971, Fisher [Fisher e Barber (1972)] formulou uma lei de escala que leva em conta o tamanho do sistema podendo fazer uma conexão entre o comportamento de um sistema finito e seu equivalente no limite termodinâmico, permitindo obter as relações em termos de lei de potência que descrevem o comportamento de um sistema das quantidades de interesse nas vizinhanças da transição de fase contínua. Para o caso em que o comprimento do sistema L é muito maior que o comprimento de correlação do sistema infinito ξ_∞ , ou seja $L/\xi_\infty \gg 1$, espera-se que nenhum efeito significativo de tamanho finito seja observado, pois ξ_∞ não será limitado por L . Nesse caso, os spins internos distantes das fronteiras se comportam como os de uma rede infinita. Porém, se $L/\xi_\infty \ll 1$, os efeitos do tamanho finito manifestam-se nas grandezas termodinâmicas, já que o longo alcance de correlação é limitado pelo tamanho L do sistema. Esses efeitos são mais visíveis perto da temperatura crítica, pois algumas grandezas físicas apresentam singularidades em T_c .

Para determinada geometria, vamos considerar uma quantidade física A que seja função da temperatura reduzida t , a qual podemos calcular para L finito

$$A = A_L(t). \quad (2.33)$$

Como os efeitos de tamanho finito podem aparecer de acordo com a razão $\frac{L}{\xi_\infty}$, esperamos que a quantidade física $A_L(t)$ esteja relacionada com a sua correspondente função no limite termodinâmico da forma

$$\frac{A_L(t)}{A_\infty(t)} = f\left(\frac{L}{\xi_\infty(t)}\right). \quad (2.34)$$

A relação acima é a chamada hipótese de escala de tamanho finito, onde ξ_∞ e A_∞ são, respectivamente, o comprimento de correlação e a quantidade física no limite termodinâmico do correspondente sistema físico finito, e que se comportam da forma

$$A_\infty \sim t^{-\tau} \quad \text{e} \quad \xi_\infty \sim t^{-\nu}, \quad (2.35)$$

onde τ é o expoente crítico da quantidade A e ν o expoente crítico do comprimento de correlação ξ . Como discutido anteriormente, um sistema de tamanho L se comporta como um sistema no limite termodinâmico caso $L/\xi_\infty \gg 1$, ou $L/\xi_\infty \ll 1$ quando os efeitos de tamanho finito aparecem. Então a função $f(x)$ deve ter os seguintes comportamentos:

$$f(x) = \begin{cases} \rightarrow 1, & x \rightarrow \infty, \quad \text{com } t \ll 1 \\ \sim \left(\frac{L}{\xi_\infty}\right)^z, & x \rightarrow 0, \quad \text{com } L \gg 1 \end{cases}. \quad (2.36)$$

Para o segundo caso, onde $L \gg 1$ mas não infinito, e com $t \rightarrow 0$, não há transição de fase, pois L é finito e dessa forma $A_L(t)$ não é singular em T_c . Porém, a função $f(x)$ tem um comportamento do tipo lei de potência quando $x \rightarrow 0$. Conseqüentemente

$$A_L(t) \sim t^{-\tau} \frac{L^z}{\xi_\infty(t)^z} \sim t^{-\tau} t^{z\nu} L^z \sim t^{-\tau+z\nu} L^z. \quad (2.37)$$

Como A_L tem que ser finito, obtemos $z = \tau/\nu$ e nos leva a

$$A_L(t) \sim L^{\tau/\nu}. \quad (2.38)$$

Podemos então escrever a eq. (2.34) na seguinte forma equivalente

$$A_L(t) \sim L^{\tau/\nu} g(L^y t), \quad (2.39)$$

onde o expoente y ainda será determinado e a função $g(L^y t)$ deve ter o seguinte comportamento

$$g(L^y t) = \begin{cases} \rightarrow \text{const}, & t \rightarrow 0, \quad \text{com } L \gg 1 \text{ fixo, recaindo no caso (2.38)} \\ \sim A_L(t), & L \rightarrow \infty, \quad \text{com } t \ll 1 \text{ fixo, com } A_L(t) \text{ finito} \end{cases}. \quad (2.40)$$

$g(L^y t)$ tem então um comportamento assintótico do tipo $g(L^y t) \sim [L^y t]^w$ de modo que

$$A_L(t) \sim L^{\tau/\nu} L^{yw} t^w \sim L^{(\tau/\nu+yw)} t^w = \text{finito}, \quad (2.41)$$

donde conclui-se que $\tau/\nu + yw = 0$, ou $w = -\frac{\tau}{y\nu}$. Portanto,

$$A_L(t) \sim t^w. \quad (2.42)$$

Comparando a equação acima com a eq.(2.35), vemos que $w = \tau$, o que nos leva a $y = 1/\nu$. Assim, a hipótese de escala de tamanho finito para o caso de uma quantidade A toma a forma

$$A_L(t) = L^{\tau/\nu} g(L^{1/\nu} t). \quad (2.43)$$

Apenas por completeza, uma generalização da hipótese de escala (2.43) com a inclusão de um campo externo é dada por

$$A(t, H, L) = \ell^\phi A(\ell^{1/\nu} t, \ell^{yH} H, \ell^{-1} L), \quad (2.44)$$

sendo que o subíndice L em (2.43), que representa a dependência de A com o tamanho do sistema, é visto acima como uma variável e ℓ é um fator de escala.

Dessa forma, é possível relacionar a magnetização, calor específico e a susceptibilidade com o tamanho do sistema nas proximidades do ponto crítico [Landau et al. (2004)]. Para tanto, basta relacionar a eq.(2.43) acima com as equações (2.1), (2.2) e (2.3), que resultam em

$$m \sim L^{-\beta/\nu} M^0 (L^{1/\nu} t), \quad (2.45)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \chi^0 (L^{1/\nu} t), \quad (2.46)$$

$$c \sim L^{\alpha/\nu} c^0 (L^{1/\nu} t), \quad (2.47)$$

onde M^0 , χ^0 e c^0 são funções de escala que dependem de t e L através de $L^{1/\nu} t$.

Como as simulações lidam com sistemas finitos, o comprimento de correlação ξ (comprimento característico do sistema próximo à criticalidade) passa a ser limitado pelo tamanho L do sistema. Dessa forma, ξ tem uma dependência com L . Portanto, podemos relacionar uma temperatura pseudo-crítica T_c^L , de tal forma que ξ seja da ordem de L , ou seja

$$\xi(T_c^L) \sim L. \quad (2.48)$$

Outra possibilidade de se obter T_c^L é localizar os máximos da susceptibilidade e calor específico. No caso da magnetização, essa temperatura é obtida através do ponto de inflexão em função de T .

Com os argumentos acima, a teoria de escala permite fazer uma extrapolação dos dados obtidos nos sistemas finitos, com diversos valores de L , no limite termodinâmico. Tomando, por exemplo, o logaritmo natural das equações (2.45), (2.46) e (2.47), temos

$$\ln[M(T_c^L)] \simeq -\frac{\beta}{\nu} \ln[L] + \ln[M^0] \quad (2.49)$$

$$\ln[\chi(T_c^L)] \simeq \frac{\gamma}{\nu} \ln[L] + \ln[\chi^0] \quad (2.50)$$

$$\ln[c(T_c^L)] \simeq \frac{\alpha}{\nu} \ln[L] + \ln[c^0] \quad (2.51)$$

onde $M(T_c^L)$, $\chi(T_c^L)$ e $c(T_c^L)$ são a magnetização, a susceptibilidade magnética e o calor específico, respectivamente, na temperatura pseudo-crítica para um sistema de tamanho L . Vê-se, portanto, que nessa escala log-log obtém-se uma reta cuja declividade fornece não os expoentes críticos, mas as razões deles com o expoente ν .

Porém, essas relações mostram a necessidade de se obter, primeiramente, o expoente crítico ν . Sabendo-se o expoente ν , pode-se, além disso, determinar também a temperatura crítica T_c do sistema infinito, através de um gráfico de T em função $L^{-\nu}$, onde a intersecção

desse gráfico com o eixo da temperatura fornece T_c . Para isso, comparamos a eq. (2.7) com a eq. (2.48), e notamos que, quando $L \rightarrow \infty$, a temperatura pseudo-crítica T_c^L de um sistema finito obedece a seguinte lei de escala

$$\xi_+(T_c^L - T_c)^{-\nu} = L \rightarrow T_c^L = T_c + bL^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (2.52)$$

Para determinar o expoente ν vamos utilizar a eq.(2.49), e tomando a sua derivada em função da variável t temos

$$\frac{\partial \ln[M(T_c^L)]}{\partial t} \simeq -\frac{\partial \ln[M^0]}{\partial t} L^{-1/\nu}, \quad (2.53)$$

pois M^0 é função de $L^{-1/\nu}t$. Agora, tomando o logaritmo de ambos os lados, obtemos

$$\ln \left[\frac{\partial \ln[m_L]}{\partial t} \right] \simeq \ln \left[-\frac{\partial \ln[M^0]}{\partial t} \right] - \frac{1}{\nu} \ln[L], \quad (2.54)$$

de onde é possível fazer um ajuste linear dos dados num gráfico log-log. O expoente $1/\nu$ será então dado pela inclinação de tal reta. Tendo em mãos a razão $1/\nu$, torna-se acessível os valores de α , β , γ , e T_c .

Modelo de Ising

Para construir uma teoria microscópica das transições magnéticas, torna-se interessante considerar um modelo que incorpore as interações de curto alcance numa rede com dimensão d . Com esse objetivo, Lenz, em 1920, propôs a seu aluno de doutorado Ising, um modelo de spins que se tornou, não somente um dos mais importantes, como um dos mais citados. Alguns anos mais tarde, Ising encontrou a solução exata para o caso unidimensional. O caso bidimensional, com o campo externo nulo, só foi resolvido analiticamente em 1944 por Onsager [Onsager (1944)]. Até hoje, não há solução analítica para o modelo em duas dimensões, com campo externo aplicado, ou para dimensões maiores.

O modelo de Ising pode ser definido pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (3.1)$$

onde σ_i é uma variável que pode assumir os valores ± 1 , o símbolo $\langle ij \rangle$ diz que a soma deve ser realizada sobre os sítios dos primeiros vizinhos que interagem entre si através da interação de troca J . O segundo termo envolve as interações entre os spins com um campo externo aplicado H . Embora seja um modelo bem simples, existem alguns argumentos físicos que, de certa forma, justificam a escolha acima. Ao mesmo tempo, essa simplicidade não implica em se conseguir soluções exatas de forma analítica em qualquer dimensão espacial.

Um dos argumentos reside na hipótese de interação somente entre vizinhos mais próximos. Sabe-se, em geral, que as propriedades magnéticas de materiais com momentos localizados devem-se principalmente à interação de troca. Ao contrário do que se poderia pensar, verifica-se que a interação dipolar, de longo alcance, não é suficiente para produzir ordenamento magnético a temperatura ambiente. Esta seria capaz de causar ordenamento

somente a baixas temperaturas (poucos graus kelvin). A interação de troca tem sua origem em efeitos quânticos, particularmente na superposição das funções de onda orbitais de elétrons próximos um do outro[Ashcroft (1976)]. Dessa forma, espera-se que as interações mais relevantes sejam a pequenas distâncias, de modo que só vizinhos mais próximos estejam acoplados por essa interação. Isso justifica tomar somente interações entre primeiros vizinhos no hamiltoniano acima. Vemos ainda que, para $J > 0$, o alinhamento paralelo dos spins é favorecido, levando a um acoplamento ferromagnético, enquanto para $J < 0$ os spins se alinham antiparalelamente, e o modelo é antiferromagnético.

Obter a solução do modelo de Ising é calcular a função de partição canônica

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (3.2)$$

em que esta soma é feita sobre todas as configurações de spins $\{\sigma_i\}$, $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de boltzmann e, em seguida, obter a energia livre magnética g (analogia com a função de Gibbs de um fluido puro, que depende de parâmetros intensivos) por spin,

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta N} \ln Z \right], \quad (3.3)$$

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

Em 1925, Ising resolveu exatamente o modelo unidimensional e ficou desapontado, pois a energia livre é perfeitamente analítica, exceto em $T = H = 0$, ou seja, não há transição de fase nesse modelo em $d = 1$ para temperaturas finitas.

A solução bidimensional do modelo de Ising, encontrada por Onsager, representa uma referência no desenvolvimento das modernas teorias críticas. Osanger mostrou que para uma rede quadrada com interações de primeiros vizinhos, a campo externo nulo $H = 0$, o calor específico diverge assintoticamente com a forma logarítmica

$$c_{H=0} \sim \ln|T - T_c|, \quad (3.4)$$

com uma temperatura crítica bem definida

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (3.5)$$

Sendo assim, o modelo de Ising bidimensional apresenta uma transição de fase contínua a campo externo nulo. Este modelo também apresenta uma transição de fase de primeira ordem. Em um plano (H, T) , para qualquer $T < T_c$ e $H = 0$, há uma coexistência de

fases, com magnetizações opostas, como discutido anteriormente. Agora, variando H com T fixo, os momentos magnéticos invertem sua orientação ao cruzar a linha de coexistência, como podemos ver esquematicamente na figura 3.1 Até o presente momento (2016) não foi

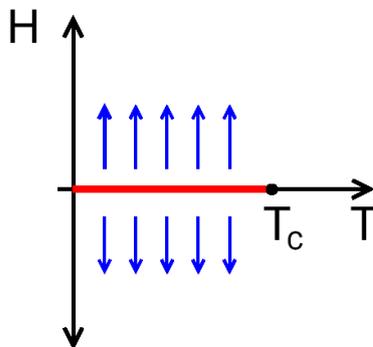


Figura 3.1: Diagrama de fase do modelo de Ising ferromagnético em função do campo externo H e da temperatura T . A linha de coexistência de fase a campo nulo é indicada ao longo do eixo da temperatura e termina no ponto crítico T_c

encontrada a solução analítica para o modelo de Ising em três dimensões. Porém, existem diversas técnicas numéricas que possibilitam a localização com um certo erro a temperatura crítica, uma delas é o método de Monte Carlo, que pode ter diferentes algoritmos. Neste trabalho serão apresentados dois algoritmos, sobre os quais serão testadas suas eficiências, tendo como referência o modelo bidimensional, uma vez que este tem resultado exato.

Algoritmo de Metropolis

4.1 Introdução

A mecânica estatística de equilíbrio possibilita obter propriedades macroscópicas do sistema em estudo através do conhecimento de seus estados microscópicos [Salinas (1997)]. Por exemplo, ao trabalharmos no ensemble canônico, o valor médio de uma quantidade A é calculado como

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

onde a soma percorre todas as configurações i do sistema, A_i é o valor da quantidade física A na configuração i , E_i é a energia deste estado, e Z é a função de partição no ensemble canônico dada por

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

com $\beta = 1/k_B T$.

Da eq. (4.1) podemos notar que a quantidade

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

representa a probabilidade de que ocorra a configuração i no equilíbrio térmico. Fazer a soma da eq. (4.1) ou (4.2) é uma tarefa árdua, mesmo para modelos simples, fato que torna obter a solução exata somente para pouquíssimos modelos teóricos. Por exemplo, no caso do modelo Ising, mesmo ele sendo finito, há muitas configurações, pois existem N sítios, e a soma deverá ser sobre 2^N configurações, significando que realizar essa soma de forma numérica torna-se uma tarefa impraticável. Para contornar este problema podemos usar métodos computacionais, tal como o método de Monte Carlo, que será brevemente discutido a seguir.

A ideia básica do método de Monte Carlo é aproximar a soma (4.1), sobre todas as configurações, por uma soma sobre um subconjunto aleatório C , ou seja,

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i \in C} A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i \in C} e^{-\beta E_i}}. \quad (4.4)$$

Podemos observar que, quanto maior for o número das configurações do subconjunto C , melhor será a aproximação. Porém, este método de amostragem é ineficiente e de difícil realização, devido às muitas configurações existentes. No entanto, algumas são um tanto improváveis de ocorrerem e certamente contribuem muito pouco para a média, enquanto existem outras configurações suficientemente importantes e que trazem grandes contribuições para o comportamento térmico do sistema. Podemos então escolher um subconjunto C que contenha a porção do espaço de configurações com as contribuições mais significativas para o cálculo do valor médio. Isso significa privilegiar essas configurações, ou seja, escolher as mesmas com uma probabilidade maior do que as outras. Se as escolhermos com uma probabilidade P_i , a eq. (4.4) fica

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i \in C} A_i P_i^{-1} e^{-\beta E_i}}{\sum_{i \in C} P_i^{-1} e^{-\beta E_i}}, \quad (4.5)$$

uma vez que no valor médio (4.1) todas as configurações entram com o mesmo peso. A escolha da distribuição de probabilidade P_i pode ser a mais variada possível. Se a escolhermos de acordo com a distribuição de Boltzmann, isto é,

$$P_i = p_i \propto e^{-\beta E_i}, \quad (4.6)$$

a média dada por (4.5) se reduz simplesmente a

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i \in C} A_i}{PMC}, \quad (4.7)$$

onde PMC é o número de configurações que se tem no subconjunto C (a razão de se escolher as letras PMC para o número de configurações ficará mais claro a seguir).

Para que se possa fazer a soma acima, será necessário obter as configurações que compõem o subconjunto C . Isso pode ser feito através da construção de um processo de Markov [Landau e Binder (2014)], também chamado de cadeia de Markov. O processo de Markov pode ser visto como a mudança de um estado i para um estado j , de forma que o novo estado j só dependa do estado anterior i . Assim, se partirmos de diferentes estados iniciais, nem sempre será gerado o mesmo estado final. Uma simulação de Monte

Carlo constrói exatamente uma tal sequência de estados utilizando o processo de Markov [Landau e Binder (2014)].

O ponto de partida para se gerar uma cadeia de Markov numa simulação de Monte Carlo é a chamada equação mestra (veja, por exemplo, [Tomé e de Oliveira (2001)])

$$\frac{dP_j}{dt} = \sum_i P_i w_{ij} - \sum_i P_j w_{ji}, \quad (4.8)$$

onde P_j é a probabilidade de o sistema se encontrar no estado j , no instante t , e w_{ij} é a taxa de transição do estado i para o estado j . Notamos que a variação no tempo de P_j consta de dois termos: um acréscimo, devido às transições dos estados i para o estado j , e um decréscimo, devido às transições do estado j para o estado i .

Além da equação mestra acima, devemos também garantir que o sistema seja ergódico, isto é, que qualquer estado acessível do sistema possa ser atingido a partir de qualquer outro estado.

Como no equilíbrio as probabilidades não devem variar no tempo, a eq. (4.8) resulta em

$$\sum_i P_{ieq} w_{ij} = \sum_i P_{jeq} w_{ji}. \quad (4.9)$$

Encontrar soluções para a equação acima não é de todo trivial. Porém, uma solução particular, e a mais simples, corresponde ao chamado balanço detalhado, onde temos

$$P_{ieq} w_{ij} = P_{jeq} w_{ji}. \quad (4.10)$$

Como dito anteriormente, queremos que no equilíbrio a distribuição de probabilidade P_{ieq} seja a de Boltzmann, deste modo, usando a condição de balanço detalhado acima podemos escolher w_{ij} de maneira que

$$\frac{P_{ieq}}{P_{jeq}} = \frac{w_{ji}}{w_{ij}} \Rightarrow \frac{w_{ji}}{w_{ij}} = e^{-\beta \Delta E_{ij}}, \quad (4.11)$$

onde

$$\Delta E_{ij} = E_j - E_i. \quad (4.12)$$

Note que, mesmo nesse caso particular, não temos uma forma definida para w_{ij} , somente que ela deve satisfazer a eq. (4.11) mais o princípio da ergodicidade. Entretanto, uma vez tenhamos uma proposta para w_{ij} , pode-se fazer um algoritmo que implemente uma cadeia de Markov e assim calcular o valor médio da grandeza desejada A da eq. (4.1). Existem várias possibilidades de se escolher essa taxa de transição. Uma delas, e muito usada, é devido a Metropolis et al., que será apresentada a seguir.

4.2 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo mais conhecido para se gerar uma cadeia de Markov em sistemas de spins é o chamado algoritmo de Metropolis, que foi proposto por Metropolis et al. em 1953 [Metropolis et al. (1953)]. As configurações são geradas a partir de uma configuração inicial arbitrária e a transição ocorre com uma taxa de probabilidade que depende da diferença de energia entre um estado inicial e final, da seguinte maneira

$$w_{ij} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E_{ij}}, & \text{se } \Delta E_{ij} > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E_{ij} < 0 \end{cases}, \quad (4.13)$$

onde é fácil mostrar que a taxa acima satisfaz a relação (4.11).

Para simular um sistema de N spins utilizando o algoritmo de Metropolis, deve-se primeiro escolher uma configuração inicial, que geralmente são todos os spins alinhados, ou uma configuração aleatória com relação ao ordenamento dos mesmos. Seleciona-se, então, uma nova configuração através da mudança de sinal de um determinado spin (esse spin pode ser escolhido aleatoriamente na rede ou a rede pode ser varrida de forma sequencial) e calcula-se a variação de energia ΔE_{ij} entre a nova configuração j e a configuração inicial i . Caso $\Delta E_{ij} < 0$, aceitamos a configuração j como nova configuração. Porém, se $\Delta E_{ij} > 0$, calcula-se o valor $p_{ij} = e^{-\beta\Delta E_{ij}}$ e compara-se com um número pseudo-aleatório r , onde $0 < r < 1$. Caso $p_{ij} > r$, aceita-se a configuração j , caso contrário, permanece a configuração i . Após esse procedimento, uma nova configuração é sorteada, e assim por diante. Ao se fazer esse procedimento para todos os spins da rede, a configuração é guardada e os valores das grandezas termodinâmicas são calculados. Isso corresponde a um passo de Monte Carlo (PMC). Vários passos de Monte Carlo são então realizados para se obter as médias termodinâmicas desejadas. Note que a mudança de um único spin nessa rede torna a nova configuração muito semelhante à anterior, de modo que depois de um passo de Monte Carlo, com a visita em toda a rede, a sua configuração final não estará tão correlacionada com a configuração inicial. Na seção seguinte, iremos aplicar esse algoritmo no modelo de Ising.

4.2.1 Aplicação ao Modelo de Ising Bidimensional

Consideramos uma rede quadrada de lado L , com condições periódicas de contorno, a fim de eliminar os efeitos de superfície. Identificamos os spins dessa rede pelo par de

inteiros (x, y) e seu valor por $s(x, y)$. Escolhemos como configuração inicial todos os spins alinhados, ou seja, atribuindo para todos o valor $s(x, y) = +1$. Dessa forma, o algoritmo de Metropolis pode ser sistematizado da seguinte forma:

1. Fazemos uma varredura sequencial na rede (x, y) , sendo que a nova configuração é obtida pela inversão do spin da vez $s(x, y)$ (troca de sinal).
2. Calculamos a diferença de energia ΔE_{ij} , através da eq. (4.12), entre as configurações com e sem a troca de sinal de $s(x, y)$.
3. Se $\Delta E_{ij} < 0$, aceitamos a transição, alterando a configuração para aquela com $-s(x, y)$ e atualizamos a energia $E_j = E_i + \Delta E_{ij}$ e a magnetização $M_j = M_i + 2s(x, y)$ (bem como outras grandezas termodinâmicas de interesse). Seguimos então para o passo 7.
4. Caso $\Delta E_{ij} > 0$, calculamos $p_{ij} = e^{-\Delta E_{ij}/k_B T}$, sorteamos um número pseudo-aleatório r e o comparamos com o valor de p_{ij} .
5. Caso $p_{ij} < r$, rejeita-se a transição e voltamos para o passo 1.
6. Caso $p_{ij} > r$, aceita-se a transição, atualiza-se a energia e a magnetização, e seguimos para o passo 7.
7. Após varrer toda a rede, temos um passo de Monte Carlo. Guardamos a energia $E(t)$ e a magnetização $M(t)$, onde t conta o número de passos de Monte Carlo (t representa, também, o tempo de Monte Carlo, que é diferente do tempo real que aparece na equação mestra).
8. Após um número PMC de passos de Monte Carlo, que é convenientemente escolhido dependendo da temperatura, tamanho de rede etc., podemos calcular as médias de interesse.

Note que o algoritmo acima deve ser rodado para cada temperatura considerada.

4.3 Resultados

A Figura 4.1 mostra a energia interna por spin E/N em função da temperatura T , onde esta última é medida em unidades de J/k_B (ou num sistema onde $k_B = 1$ e $J = 1$), para

vários valores do tamanho de rede L , sendo $N = L^2$. As médias foram tomadas com passos de Monte Carlo que variaram de $PMC = 10^6$ para as redes pequenas até $PMC = 4 \times 10^6$ para as redes maiores, após serem desprezados 10^4 passos de Monte Carlo iniciais para a termalização (isto é, após o sistema entrar em equilíbrio térmico). O gráfico inserido é uma

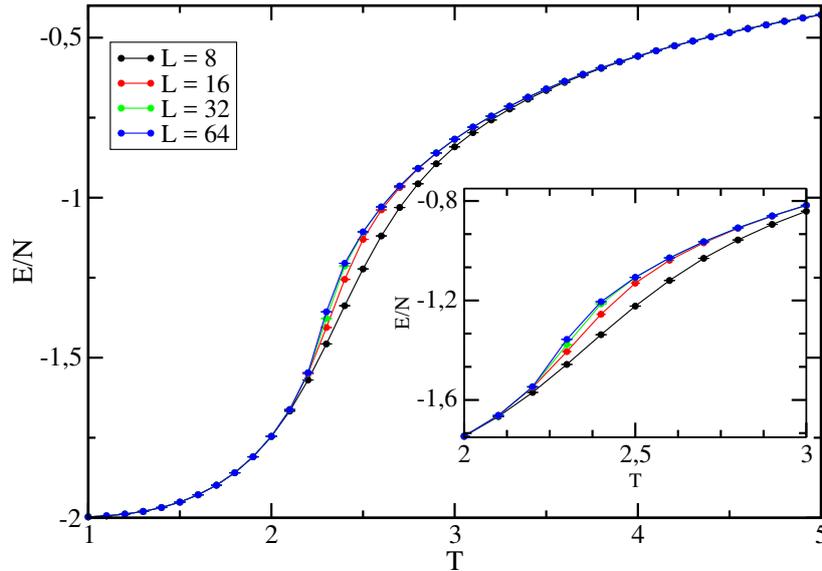


Figura 4.1: Energia interna por spin E/N em função da temperatura T para o modelo de Ising na rede quadrada. Os pontos foram obtidos através da simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, com diversos tamanhos de rede, como descrito no texto. O gráfico menor mostra a faixa onde se encontra o ponto de inflexão da energia interna. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

ampliação da faixa onde existe uma maior diferença para cada tamanho de rede. Vemos que essa faixa está compreendida entre $2 < T < 3$, sendo que fora dessa faixa os resultados são muito parecidos para qualquer que seja o tamanho da rede. Esse comportamento pode ser entendido ao se considerar o comprimento de correlação do sistema ξ . Para temperaturas longe da temperatura de transição o comprimento de correlação do sistema infinito é pequeno. Se ele for bem menor que o tamanho da rede finita, isto é $\xi < L$, os efeitos de tamanho finito serão mínimos, e a rede finita terá um comportamento parecido com a respectiva rede infinita. Caso contrário, os efeitos de tamanho finito serão bem mais pronunciados, como visto no intervalo mostrado na Figura 4.1.

Diferente da energia interna, o calor específico tem um comportamento bem mais significativo em torno da temperatura de transição, pois apresenta uma singularidade de acordo

com a eq. (2.3) e pode ser observado na Figura 4.2. Notamos que c_V possui um máximo, que cresce e se desloca para a esquerda à medida que o tamanho da rede aumenta. O

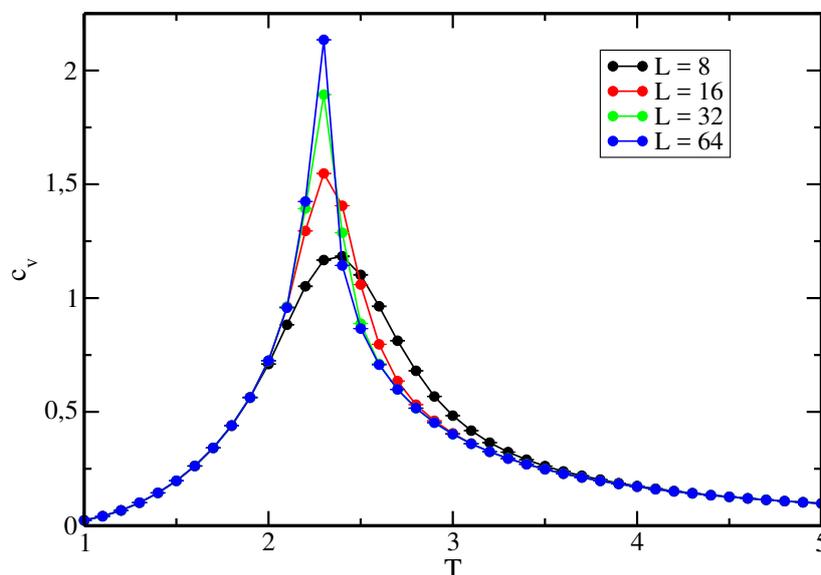


Figura 4.2: Calor específico a volume constante c_V em função da temperatura para diversos tamanhos de rede. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

calor específico da Figura 4.2 foi obtido através da flutuação térmica da energia interna de acordo com

$$c_V = \frac{\langle (E/N)^2 \rangle - \langle E/N \rangle^2}{T^2}. \quad (4.14)$$

Como o calor específico do modelo de Ising bidimensional, no limite termodinâmico, apresenta uma singularidade logarítmica, e não a tipo potência como a apresentada no capítulo anterior (o que significa que teremos um expoente crítico $\alpha = 0$ nesse caso), podemos fazer um gráfico do máximo do calor específico em função do logaritmo de L e verificar se os dados estão alinhados. A Figura 4.3 mostra o máximo do calor específico obtido da Figura 4.2, em função do $\ln(L)$, onde se pode notar um bom alinhamento dos pontos através de um ajuste linear, significando que o expoente α é realmente nulo.

O algoritmo de Metropolis não fornece apenas a energia interna, mas também a magnetização. O módulo da magnetização por spin $m = M/N$ está mostrada, em função da temperatura, na Figura 4.4 para vários tamanhos de rede. Diferente da energia interna, a magnetização é o parametro de ordem, significando que, no limite termodinâmico, ele

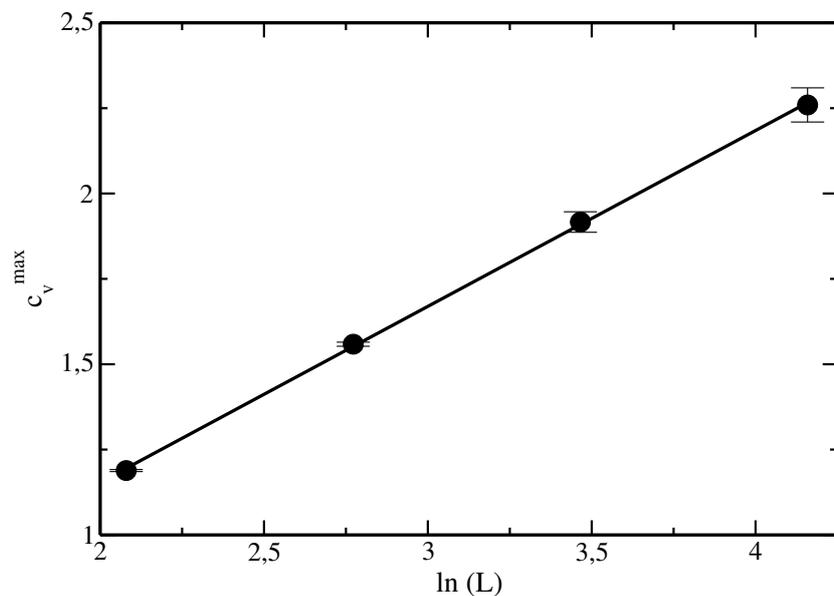


Figura 4.3: Máximo do calor específico c_V^{\max} em função do $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta corresponde a um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

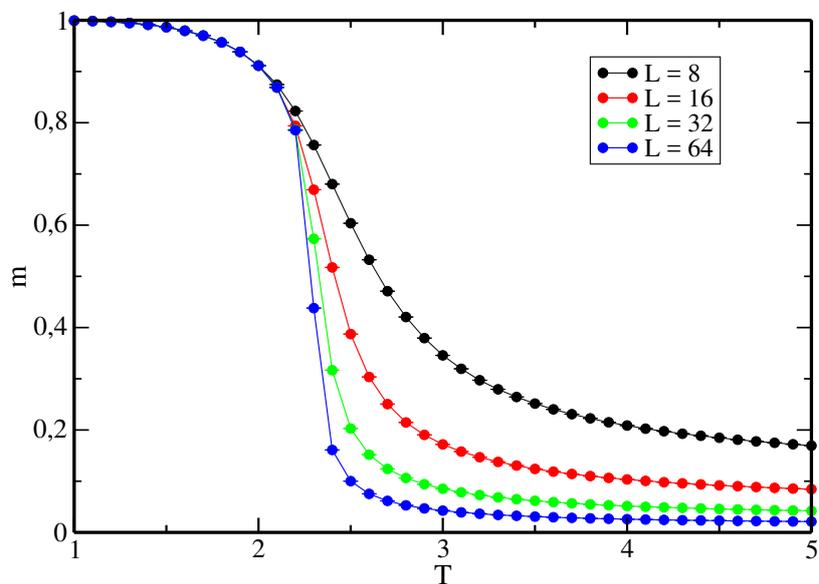


Figura 4.4: Módulo da magnetização por spin m a campo externo nulo em função da temperatura. Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis, com diversos tamanhos de rede. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

é diferente de zero abaixo da transição e nulo acima da transição. Podemos observar na Figura 4.4 que isso não ocorre para sistemas finitos, mas ao passo que o tamanho da rede aumenta o módulo da magnetização tende a zero sistematicamente para temperaturas mais altas. Lançando mão do escalonamento de tamanho finito visto no capítulo anterior, isto é, usando a eq. (2.49), podemos calcular a razão do expoente β pelo expoente ν , o qual é dado pela inclinação da reta formada pelo logaritmo do valor da magnetização no seu ponto de inflexão em função do $\ln(L)$, como pode ser visto na figura 4.5. O presente ajuste linear nos fornece a razão $\beta/\nu = 0.12(1)$, que deve ser comparado com o valor exato $\beta/\nu = 0.125$.

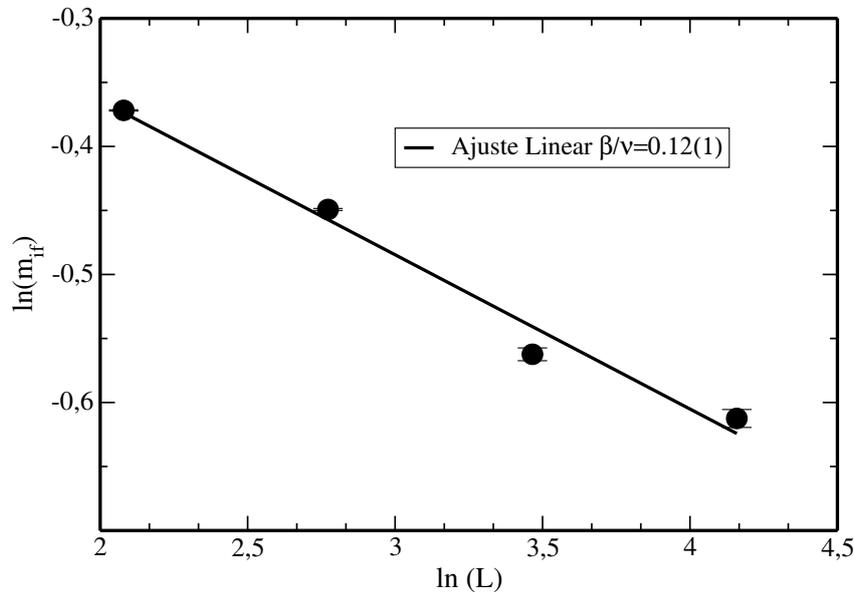


Figura 4.5: Logaritmo do valor do módulo da magnetização por spin em seu ponto de inflexão $\ln(m_{if})$ em função de $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

De maneira semelhante ao calor específico, a susceptibilidade magnética é calculada por meio da flutuação da magnetização (parâmetro de ordem):

$$\chi = \frac{\langle (m)^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{T}. \quad (4.15)$$

Por meio da expressão acima, e com os dados da magnetização obtidos pela simulação, podemos fazer um gráfico da susceptibilidade magnética em função da temperatura, o qual pode ser visto na figura 4.6. Vemos que a susceptibilidade magnética cresce rapidamente

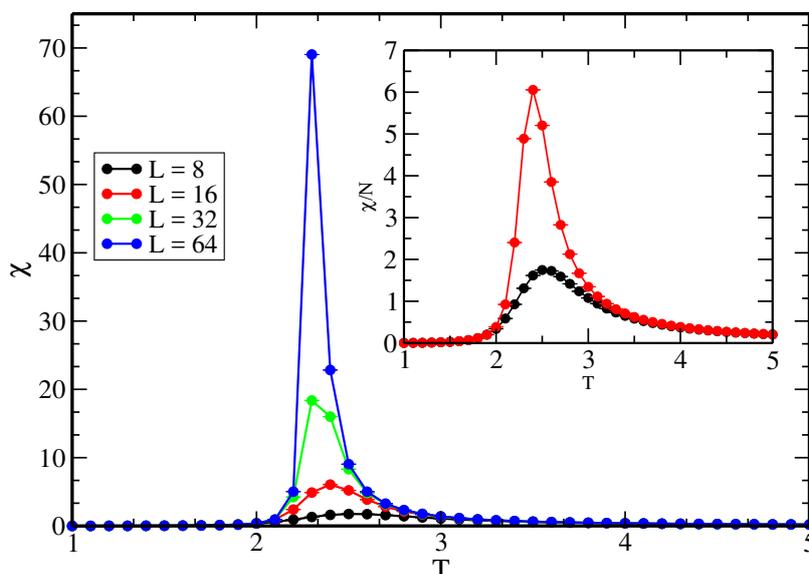


Figura 4.6: Susceptibilidade magnética por spins em função da temperatura, para diversos tamanhos de rede. O gráfico menor mostra o máximo para as redes menores. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

com o aumento da rede e o máximo desloca-se para esquerda. De acordo com a teoria fenomenológica de Landau, para transição de fase a susceptibilidade magnética diverge para uma rede de tamanho infinito, no entanto, na figura 4.7 não se observa uma divergência e sim, máximos, pois trata-se de redes finitas. A susceptibilidade magnética cresce muito mais rápido que o calor específico, isso ocorre devido à forma com que essas grandezas divergem no limite termodinâmico, o calor específico diverge logaritmicamente, enquanto a susceptibilidade magnética diverge com lei de potência. Localizando os máximos e usando o escalonamento de tamanho finito, de acordo com eq.(2.50), encontramos $\gamma/\nu = 1.7886(6)$, o qual é a inclinação da reta formada pelos pontos do máximo da susceptibilidade por spins χ em função do $\ln(L)$, e deve também ser comparado com o valor exato $\gamma/\nu = 1.75$.

Como dito anteriormente, existe a necessidade de encontrar o expoente crítico ν , pois os demais expoentes críticos são uma razão por tal expoente. O procedimento para determinar ν foi descrito pelas eq.(2.53) e (2.54). A partir dos pontos obtidos pela simulação de Monte Carlo, usamos uma derivada numérica disponível no programa xmgrace (o qual foi usado para plotar todos os gráficos que se encontram nessa dissertação). Desse modo, a figura 4.8 mostra os resultados assim obtidos para o logaritmo do valor máximo da derivada do

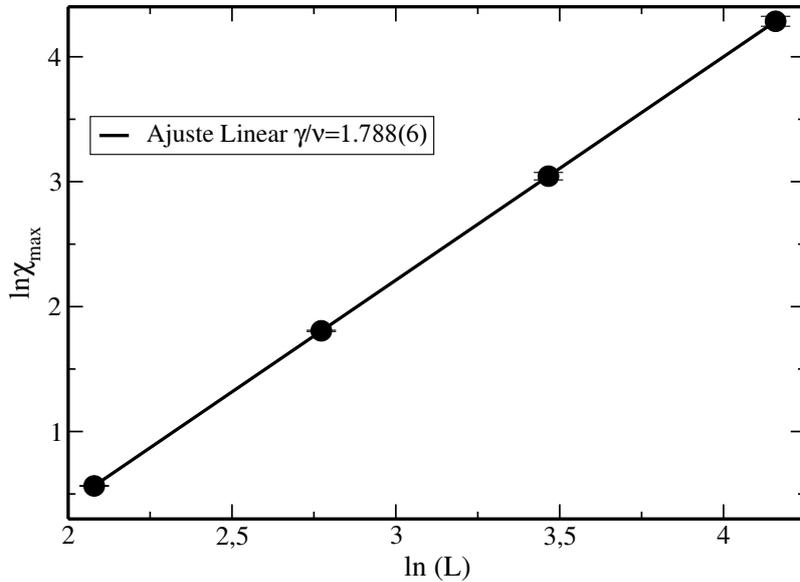


Figura 4.7: Logaritmo do valor máximo da susceptibilidade em função do logaritmo do tamanho de rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta é obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

logaritmo da magnetização em relação à temperatura, em função do $\ln(L)$. O ajuste linear fornece uma inclinação $1/\nu = 1.08(1)$, e pode ser comparada com o valor exato $1/\nu = 1$.

Uma vez que ν foi determinado, podemos estimar a temperatura crítica no limite termodinâmico através da eq.(2.52). Porém, como o máximo de cada quantidade física fornece uma temperatura diferente, podemos estimar uma temperatura crítica para cada uma das variáveis termodinâmicas estudadas. Nas figuras 4.9, 4.10 e 4.11 podemos ver a temperatura crítica extrapolada utilizando os dados do calor específico $T_c^{cv} = 2.267(1)$, magnetização $T_c^m = 2.27(2)$ e a susceptibilidade magnética $T_c^x = 2.271(2)$, respectivamente. Temos então uma estimativa média para temperatura crítica de acordo com o algoritmo de Metropolis $T_c = 2.27(1)$, que deve ser comparado com o valor exato $T_c = 2.2691\dots$

Podemos notar, de um modo geral, que, com exceção dos resultados da susceptibilidade, os dados das outras quantidades estudadas não se encontram tão bem alinhados, como seria esperado. Uma razão para isso está na precisão com que se faz a varredura da temperatura para se localizar os máximos, ou mesmo calcular as correspondentes derivadas numéricas. Isso pode ser minimizado ao se implementar as técnicas de histogramas, ou realizar varreduras em menores intervalos de temperatura (o que acarretaria um grande

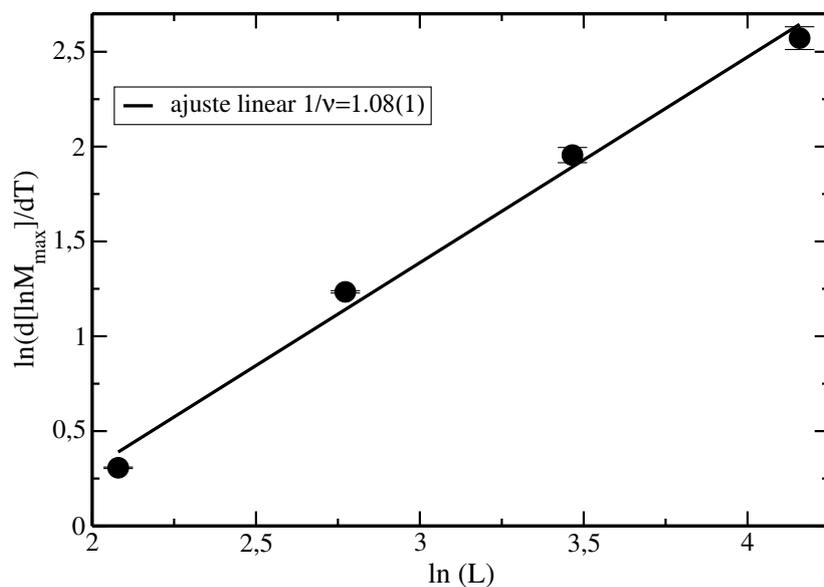


Figura 4.8: Logaritmo do valor máximo da derivada do logaritmo da magnetização em relação à temperatura, em função do $\ln(L)$. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a teoria de escalonamento de tamanho finito. A reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

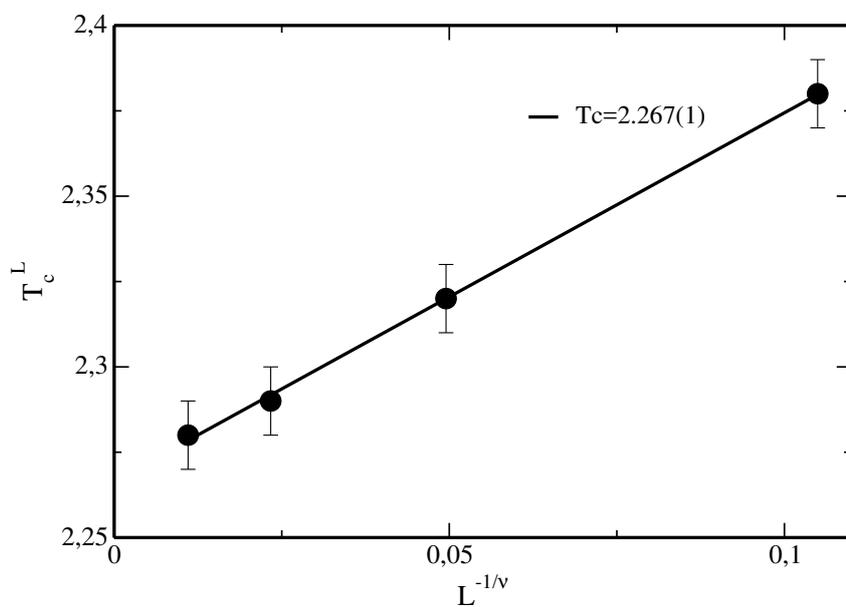


Figura 4.9: Temperatura T_c^L em função de $L^{-1/\nu}$. Os pontos foram obtidos através do calor específico e a reta corresponde a um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

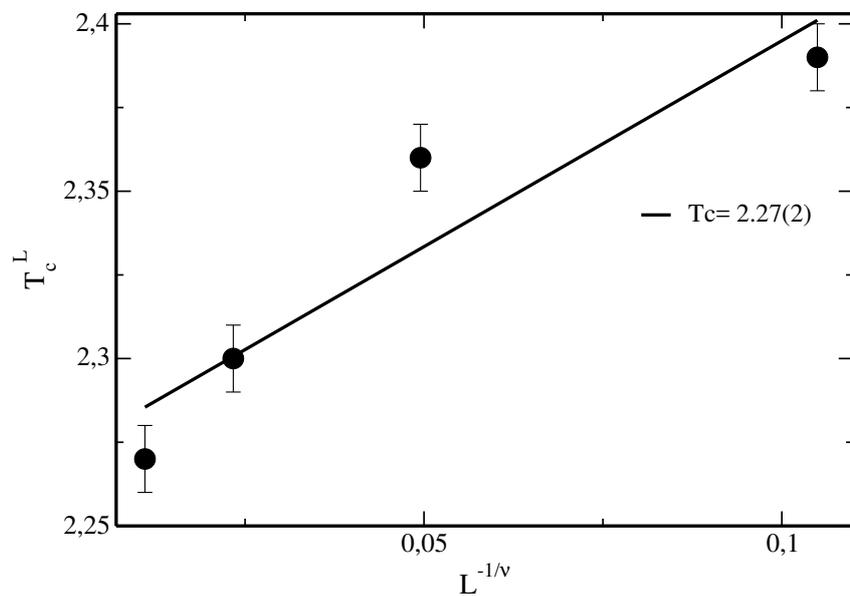


Figura 4.10: O mesmo que a figura 4.9 para o ponto de inflexão da magnetização. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

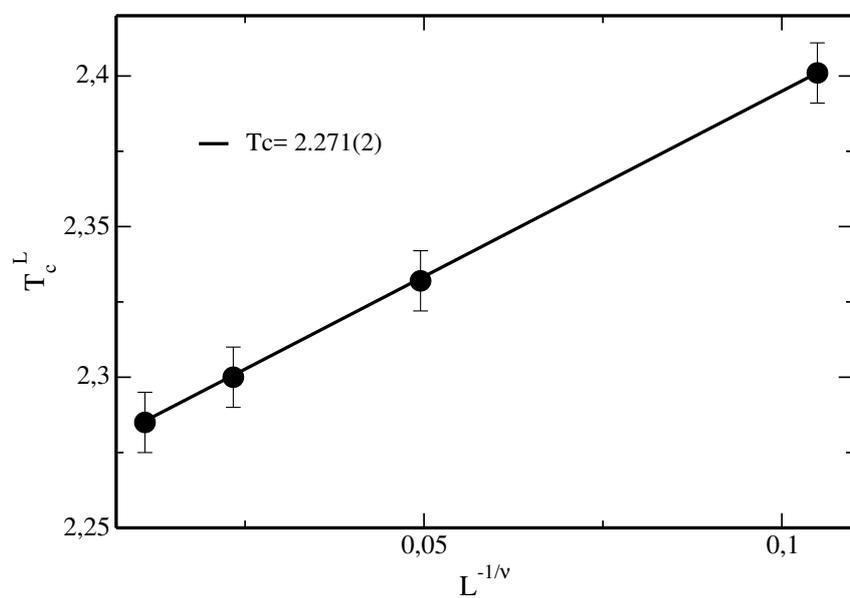


Figura 4.11: O mesmo que a figura 4.9 para a susceptibilidade. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

incremento no tempo computacional). Outra razão está na escolha de passos de Monte Carlo muito pequenos. Ao se implementar mais PMC, melhores estimativas serão obtidas. Apesar disso, os resultados obtidos foram bem satisfatórios para os tamanhos de rede considerados. Entretanto, ao invés de se implementar técnicas de histogramas simples, faremos o estudo, no próximo capítulo, do mesmo modelo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, que tem se mostrado muito promissor nos estudos de transições de fases em sistemas de spins na rede.

Algoritmo de Wang-Landau

Numa tentativa de melhorar as simulações de Monte Carlo, principalmente no que se refere aos problemas encontrados nos mínimos locais e na desaceleração crítica, Wang e Landau propuseram um algoritmo bastante robusto que se mostrou muito eficiente Wang e Landau (2001), não somente no trato de modelos de spins na rede, como também em várias áreas da Física.

Os algoritmos tipo Metropolis, para redes grandes, ficam *presos* em certos mínimos de energia quando a temperatura é suficientemente baixa, de modo que mesmo com longos passos de Monte Carlo, o algoritmo não consegue visitar todos os estados acessíveis ao sistema. Por outro lado, quando se está perto da temperatura de transição, o sistema demora muito tempo para atingir o estado de equilíbrio (a chamada desaceleração crítica), tornando as simulações tipo Metropolis muito ineficientes e longas, exatamente na região de interesse físico. O algoritmo de Wang-Landau (Wang-Landau) vem exatamente na direção de sanar esses problemas, pois ao invés de calcular configurações do sistema, ele calcula a sua densidade de estados.

O ponto de partida do algoritmo é a função de partição, que pode ser escrita da seguinte forma

$$Z = \sum_i e^{-\beta E} = \sum_E g(E) e^{-\beta E}, \quad (5.1)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados em função da energia (na verdade, é o número de estados com energia E no ensemble microcanônico). Como E tem valores discretos bem determinados para redes finitas, se soubermos $g(E)$, a função de partição do sistema, e por conseguinte todas as propriedades termodinâmicas, podem ser determinadas, e com a vantagem de serem obtidas para *todas* as temperaturas (no algoritmo de Metropolis, ao se mudar a temperatura, uma nova simulação deve ser realizada).

A ideia geral desse algoritmo é realizar um passeio aleatório no espaço das energias com uma probabilidade proporcional ao inverso da densidade de estados $1/g(E)$, e construir um histograma das visitas de cada energia $H(E)$. No início do passeio aleatório, a densidade de estados é desconhecida, de modo que atribuímos para todas energias $g(E) = 1$. Começamos então o passeio mudando os estados dos spins aleatoriamente. Se E_1 e E_2 são as energias antes e depois do spin ser mudado, a transição de probabilidade é dada por

$$p(E_1 \rightarrow E_2) = \min \left[\frac{g(E_1)}{g(E_2)}, 1 \right]. \quad (5.2)$$

Cada vez que um nível de energia é visitado, atualiza-se a correspondente densidade de estados multiplicando-a por um fator $f > 1$, i.e., $g(E) \rightarrow g(E) * f$. Em geral, o fator inicial $f = f_0 = e^1 = 2,71828\dots$. O passeio continua até que o histograma $H(E)$ seja *plano*. Nesse ponto, zera-se o histograma $H(E) = 0$, muda-se o fator f_0 para $f_1 = \sqrt{f}$ e repete-se o procedimento. O algoritmo termina quando o fator de multiplicação torna-se muito próximo de um, por exemplo $f_{final} = e^{10^{-8}}$. Vamos, na próxima seção, detalhar alguns passos desse algoritmo para o caso do modelo de Ising em duas dimensões Landau et al. (2004).

5.1 Aplicação ao modelo de Ising

Consideramos novamente uma rede quadrada de lado L , com condições periódicas de contorno, de modo a eliminar os efeitos de superfície. Os spins dessa rede podem ser identificados através do par de inteiros (x, y) e seus valores são dados por $s(x, y) = \pm 1$. Escolhemos uma configuração inicial arbitrária, com valores distintos para $s(x, y)$. Assim, podemos sistematizar o algoritmo da seguinte forma:

1. No início do passeio aleatório consideramos $g(E) = 1$ e $f_0 = e^1$.
2. Escolhemos, aleatoriamente, um spin na rede e calculamos $\mu = g(E_i)/g(E_j)$, onde E_i é a energia sem mudar o valor desse spin e E_j é a energia com o valor desse spin mudado.
3. Se o número pseudo-aleatório $r < \mu$, aceitamos a nova configuração j e atualizamos $g(E_j) \rightarrow f \times g(E_j)$ e somamos ao histograma $H(E_j) = H(E_j) + 1$.

4. Caso $r > \mu$ permanecemos na configuração i e atualizamos $g(E_i) \rightarrow f \times g(E_i)$ e somamos ao histograma $H(E_i) = H(E_i) + 1$.
5. Após um determinado número de PMC, escolhido de acordo com o tamanho da rede, verificamos se $H(E)$ está *plano*, com base num critério de $x\%$, escolhido também de acordo com o tamanho da rede (por exemplo, $x = 80$ ou $x = 90$). Caso não seja *plano*, voltamos ao passo 2 até que esse critério seja estabelecido.
6. Com $H(E)$ *plano*, mudamos o valor do fator de multiplicação por $f_n = \sqrt{f_{n-1}}$, e zeramos o histograma $H(E_j) = 0$.
7. Se $f_n > f_{min}$, voltamos ao passo 2, caso contrário, terminamos a simulação.

Podemos observar que o algoritmo não depende da temperatura e, de posse de $g(E)$, todas as quantidades de interesse podem ser calculadas (a menos de grandezas que dependam da magnetização, como será discutido a seguir).

5.2 Resultados

O algoritmo de Wang-Landau foi aplicado ao modelo de Ising bidimensional de spin-1/2 usando os seguintes parâmetros: *i*) a cada $1,5 \times 10^4$ passos de Monte Carlo (PMC), foi verificado se o histograma $H(E)$ estava *plano* para redes de tamanho $L = 8$ e $L = 16$, e em redes maiores foi usado 10^5 PMC; *ii*) o critério para $H(E)$ estar plano foi de 90%, isto é, o histograma é considerado plano se $H(E)$, para todos os valores possíveis de E , não for menor que 90% do valor médio $\langle H(E) \rangle$. *iii*) a simulação é finalizada com $f_{final} = e^{10^{-10}}$. Simulações extras, variando o número de passos de Monte Carlo, bem como o critério de planicidade foram realizadas a fim de se obter parâmetros convenientes de acordo com memória e tempo de computação. Os valores acima mostraram-se adequados para os tamanhos de rede considerados.

A figura 5.1 mostra $\ln g(E)$ em função da energia por spin E/N para diversos valores de tamanho de rede. Note que, como o número de estados torna-se muito grande à medida que L cresce, o que se obtém, na verdade, é o logaritmo dessa quantidade. Nessa figura estão também os resultados exatos para cada tamanho de rede, apenas para uma comparação grosseira. Deve-se salientar que, embora na escala da figura 5.1 os resultados são praticamente coincidentes, existe uma discrepância, ou erro simulacional, o qual é bem

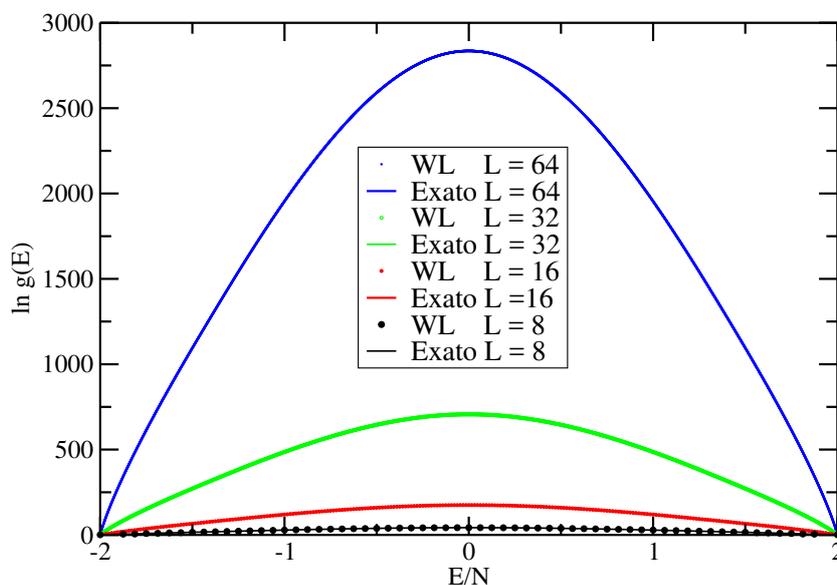


Figura 5.1: Logaritmo da densidade de estados $\ln g(E)$ em função da energia por spins E/N . Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau para diferentes redes. As linhas são os resultados exatos.

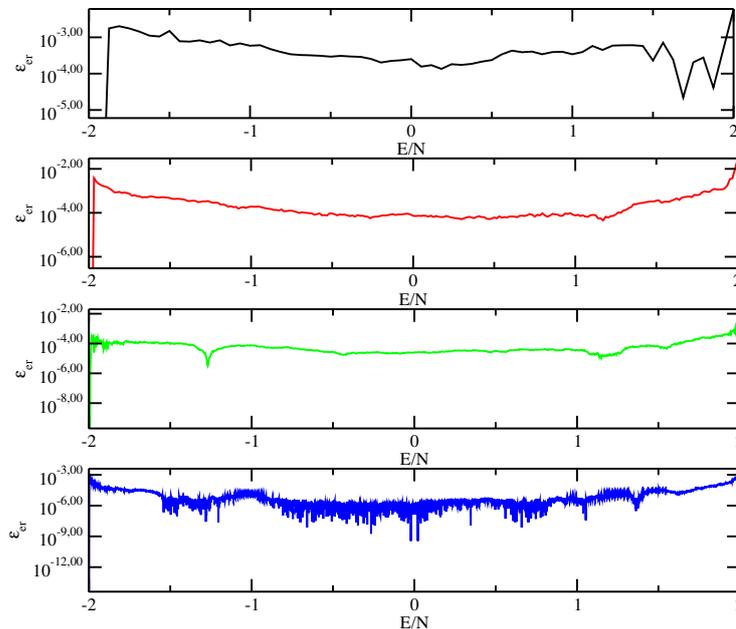


Figura 5.2: Erro relativo ε_{er} em função da energia por spins E/N . Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau e resultado exato para diferentes redes.

pequeno para as simulações aqui realizadas, mesmo para as redes grandes. As figuras 5.2

mostram o erro relativo dado por

$$\varepsilon_{er} = \frac{|\ln g(E) - \ln g(E)_{ex}|}{\ln g(E)_{ex}}, \quad (5.3)$$

onde se nota claramente a boa precisão que se obtém utilizando o algoritmo de Wang-Landau.

O valor médio da energia interna $\langle E \rangle$ é dado através da equação

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/T}}{\sum_E g(E) e^{-E/T}}, \quad (5.4)$$

onde estamos também usando $k_B = 1$ e $J = 1$. Diferente do algoritmo de Metropolis, vemos que esse valor médio pode ser calculado para qualquer valor de temperatura, uma vez que $g(E)$ é conhecido. A energia por partícula pode ser vista na figura 5.3, em que o gráfico inserido é uma ênfase na faixa onde há uma maior diferença entre os diversos tamanhos de rede.

A capacidade térmica C_v pode ser obtida a partir das flutuações da energia interna como

$$C_v = \frac{\partial E(T)}{\partial T} \equiv \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}. \quad (5.5)$$

O calor específico é obtido de $c_v = C_v/N$, e seu comportamento está mostrado na figura 5.4. Nota-se, nessa figura, que os pontos de máximo são um tanto mais suaves que nos dados utilizando o algoritmo de Metropolis, pelo fato de podermos variar a temperatura em intervalos de nossa escolha, sem necessidade de simulações adicionais. Isso permite também localizar, com mais facilidade, a temperatura crítica para os seus respectivos tamanhos de rede.

A figura 5.5 mostra um ajuste linear dos valores do máximo do calor específico em função do logaritmo do tamanho da rede, como obtido da figura 5.4. Podemos observar, como esperado, que o comportamento linear indica uma lei de escala com expoentes $\alpha/\nu = 0$.

No cálculo de quantidades termodinâmicas que não foram acumuladas no vetor da densidade de estados $g(E)$, torna-se necessário realizar uma simulação microcanônica adicional para estimar médias microcanônicas das grandezas de interesse (ou então calcular a densidade de estados bidimensional $g(E, M)$ que, além de acarretar um aumento significativo do tempo de computação, aumenta muito a memória a ser utilizada). Por exemplo, o cálculo

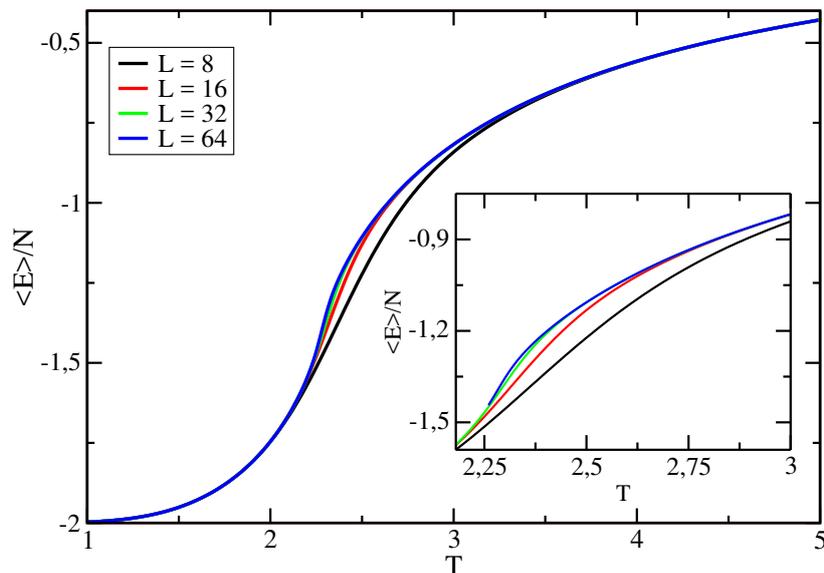


Figura 5.3: Energia por partícula via simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.

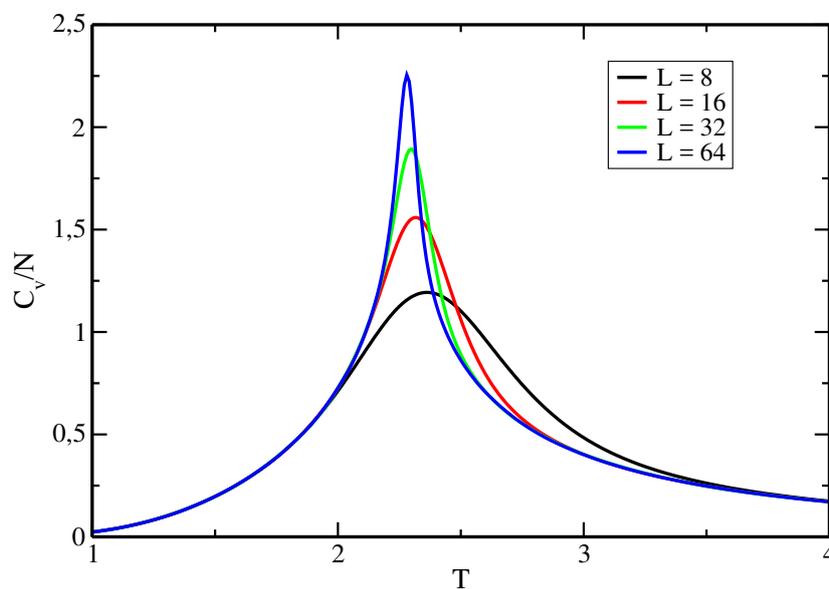


Figura 5.4: Calor específico a volume constante via simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.

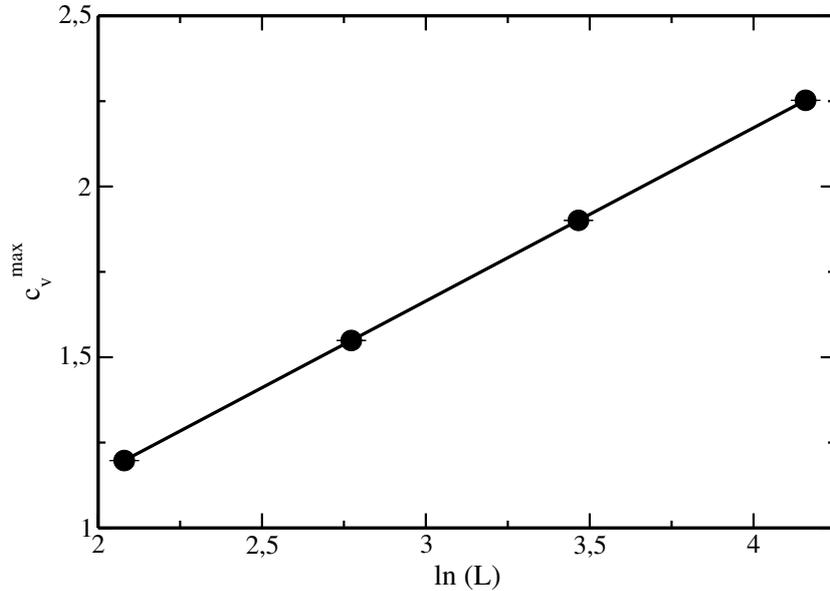


Figura 5.5: Máximo do calor específico obtido da figura 5.4 em função do logaritmo do tamanho da rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a reta é um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

de quantidades termodinâmicas como a magnetização no ensemble canônico

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_E \langle M(E) \rangle g(E) e^{-E/T}}{\sum_E g(E) e^{-E/T}}, \quad (5.6)$$

demanda uma simulação microcanônica para estimar $\langle M \rangle$. Essa simulação pode ser realizada após a convergência de $g(E)$, implementando-se mais uma interação do algoritmo na qual não se modifica a densidade de estados, mas acumula-se $HM(E)$. Explicitamente, $\langle M(E) \rangle$ é obtido como a média microcanônica de

$$\langle M(E) \rangle = HM(E)/H(E), \quad (5.7)$$

sendo $HM(E)$ um vetor que acumula o valor da magnetização para cada configuração visitada com a mesma energia E , e $H(E)$ o vetor que acumula o número de vezes que cada configuração com determinada energia E foi visitada durante a simulação. Essa simulação microcanônica adicional termina quando $H(E)$ for considerado plano com o mesmo critério usado para obter $g(E)$, i. e., o histograma é considerado plano se $H(E)$, para todos os valores possíveis de E , não for menor que 90% do valor médio $\langle H(E) \rangle$.

A figura 5.6 mostra o módulo da magnetização em função da temperatura para vários

valores de rede. O mesmo comportamento qualitativo observado nas simulações de Metropolis ocorre nesse caso.

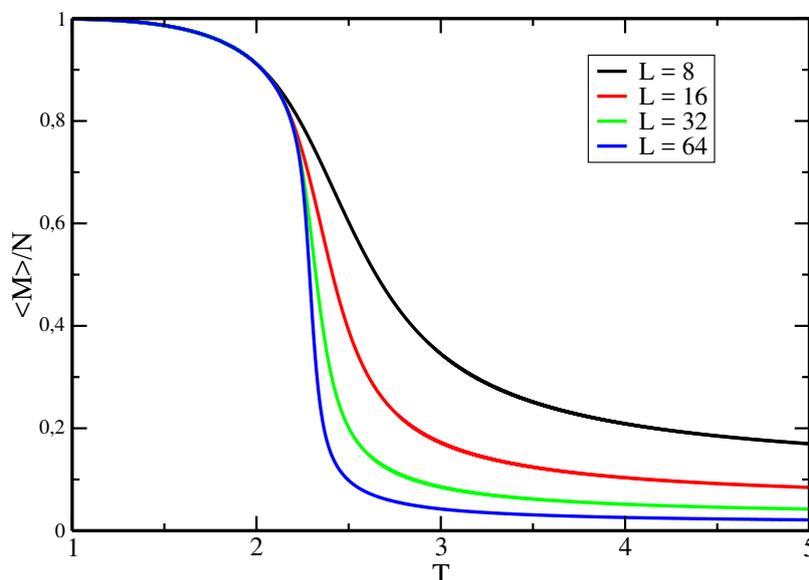


Figura 5.6: Magnetização a campo externo nulo. Pontos obtidos através da simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wang-Landau, para diversos tamanhos de rede.

Com os dados da figura 5.6 em mãos, podemos determinar o valor da magnetização no ponto de inflexão e, como anteriormente, obter a razão entre os expoentes β/ν . A figura 5.7 mostra os correspondentes resultados de onde se obtém, através de um ajuste linear, $\beta/\nu = 0,127(4)$, que deve ser comparado ao valor exato $\beta/\nu = 0,125$.

A susceptibilidade magnética pode ser obtida de modo análogo. A figura 5.8 mostra χ em função da temperatura e a figura 5.9 os correspondentes máximos em função do tamanho de rede. Dessa última figura, um ajuste linear fornece $\gamma/\nu = 1,768(4)$, que deve ser comparado ao valor exato $\gamma/\nu = 1,75$.

A figura 5.10 mostra os valores do logaritmo do valor máximo da derivada do logaritmo da magnetização em relação a temperatura, como função do logaritmo do tamanho de rede, de acordo com o algoritmo de Wang-Landau. Dessa figura temos $1/\nu = 1,05(1)$, enquanto o valor exato é $1/\nu = 1$.

As figuras 5.11, 5.12 e 5.13 mostram a temperatura de transição para as redes finitas em função do logaritmo do tamanho de rede obtido, respectivamente, através do calor

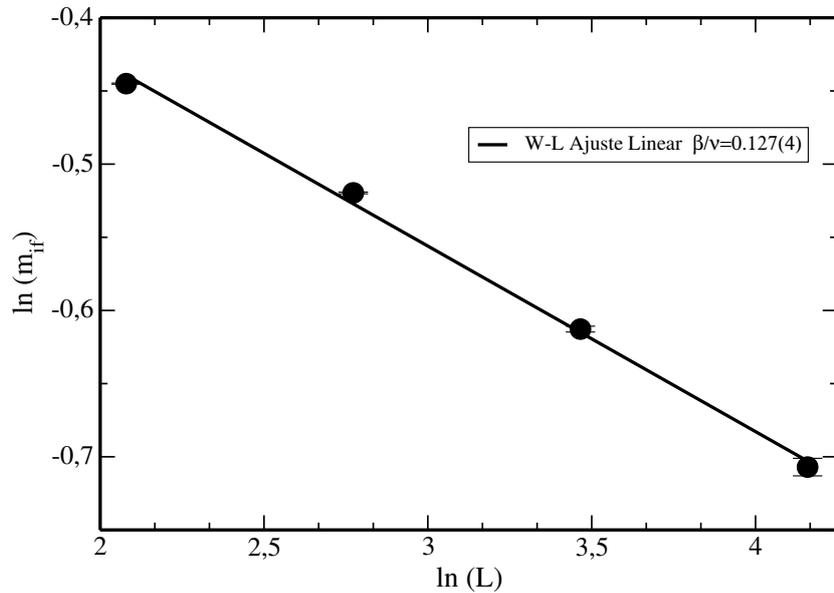


Figura 5.7: Logaritmo do valor do módulo da magnetização por spin em seu ponto de inflexão $\ln(m_{if})$ em função de $\ln(L)$. Os pontos foram obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

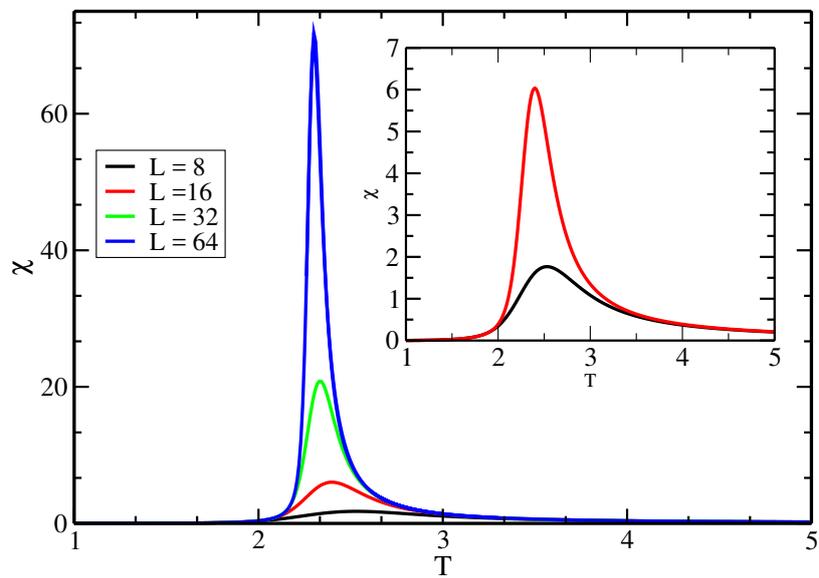


Figura 5.8: Susceptibilidade magnética por spins em função da temperatura, para diversos tamanhos de rede, de acordo com o algoritmo de Wang-Landau. O gráfico menor mostra o máximo para as redes menores.

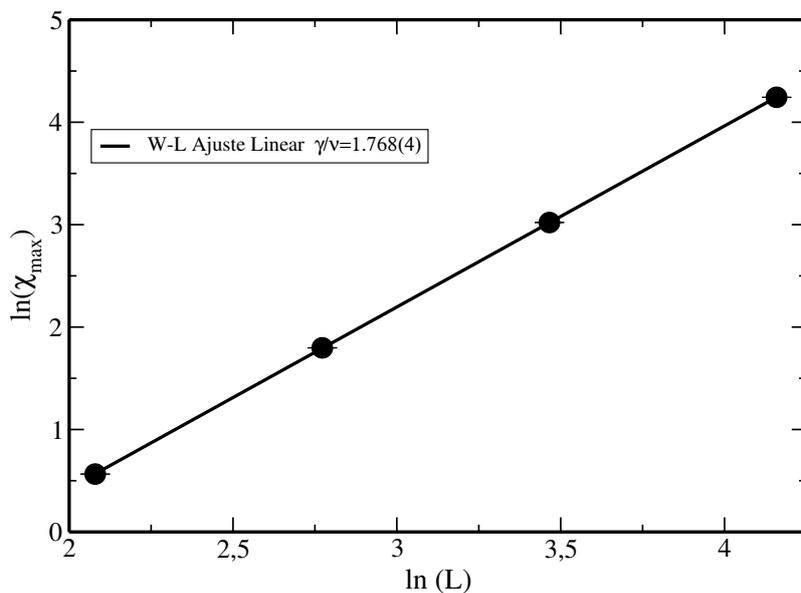


Figura 5.9: Logaritmo do valor máximo da susceptibilidade em função do logaritmo do tamanho de rede. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Metropolis e a reta é obtida através de um ajuste linear.

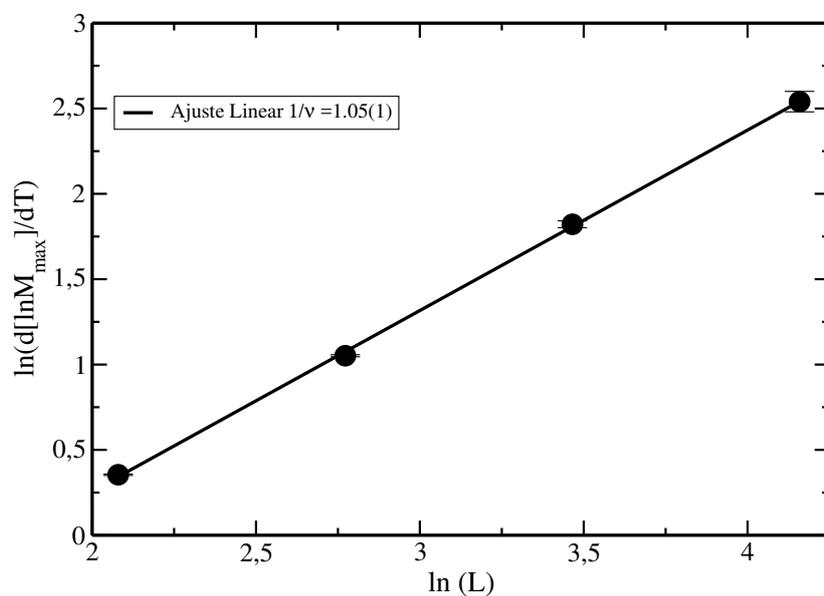


Figura 5.10: Logaritmo do valor máximo da derivada do logaritmo da magnetização em relação à temperatura, em função do $\ln(L)$. Pontos obtidos utilizando o algoritmo de Wang-Landau e a teoria de escalonamento de tamanho finito. A reta foi obtida através de um ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

específico, magnetização e susceptibilidade. As correspondentes temperaturas críticas extrapoladas são $T_c^{cv} = 2,272(1)$, $T_c^m = 2,276(1)$ e $T_c^x = 2,273(2)$, com uma estimativa para temperatura crítica de acordo com o algoritmo de Wang-Landau $T_c = 2,273(8)$, que deve ser comparado com o valor exato $T_c = 2,2691, \dots$

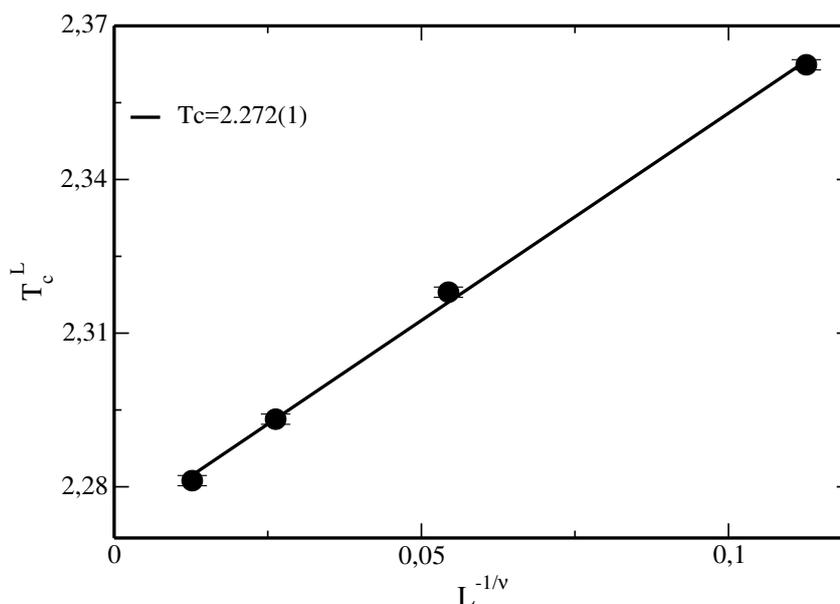


Figura 5.11: Temperatura T_c^L em função de $L^{-1/\nu}$. Os pontos foram obtidos através do calor específico e a reta corresponde ao ajuste linear. As pequenas barras na horizontal são barras de erro.

Finalmente, para termos uma ideia melhor da versatilidade do método de Wang-Landau frente aos algoritmos tipo Metropolis, mostramos nas figuras 5.14 e 5.15 a energia livre de Helmholtz e a entropia como função da temperatura. Essas quantidades não são triviais de serem obtidas com outros tipos de algoritmos mais convencionais.

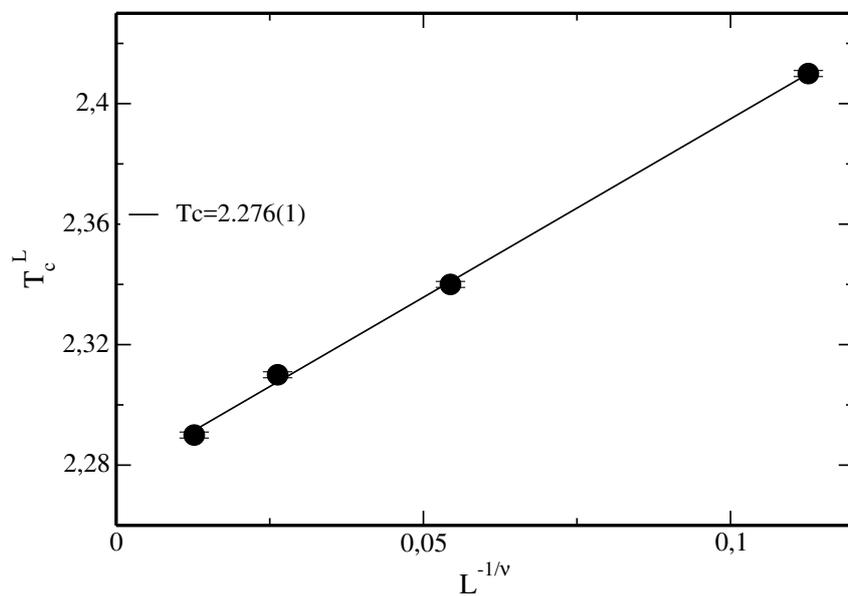


Figura 5.12: O mesmo que a figura 5.11 para o ponto de inflexão da magnetização.

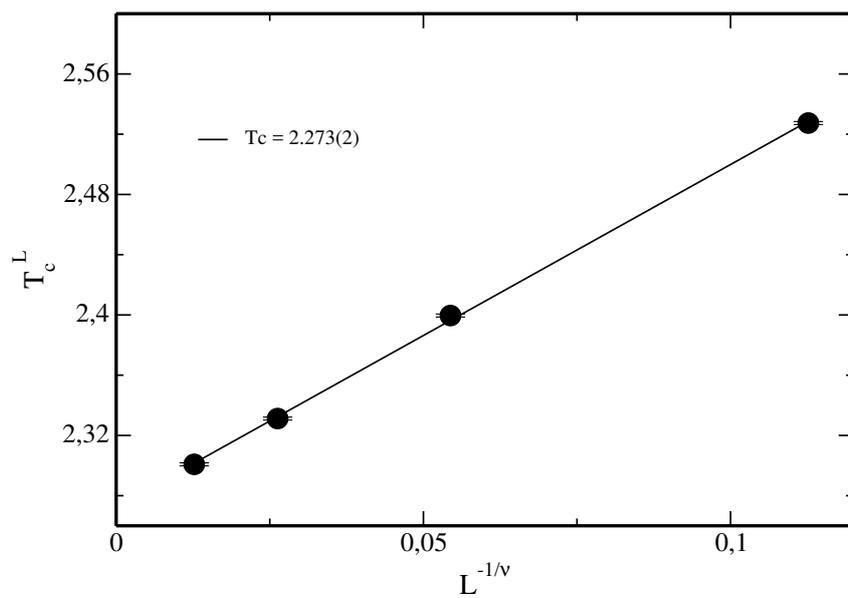


Figura 5.13: O mesmo que a figura 5.11 para a susceptibilidade.

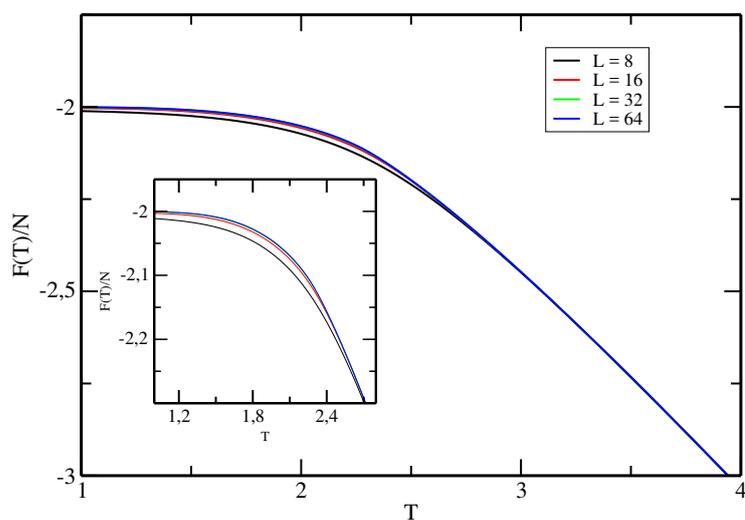


Figura 5.14: Energia livre de Helmholtz $F(T) = k_b T \ln(Z)$ onde T , K_b e Z são respectivamente temperatura, constante de Boltzmann e função de partição de acordo com o algoritmo de Wang-Landau.

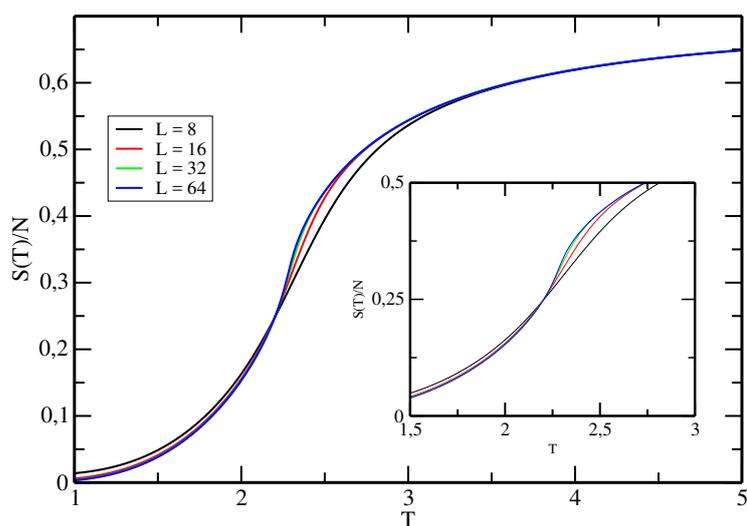


Figura 5.15: Entropia $S(T) = \frac{\partial F}{\partial T}$ em função da temperatura T de acordo com o algoritmo de Wang-Landau.

Comparações entre os algoritmos de Metropolis e Wang-Landau e Conclusões

6.1 Comparações

A tabela abaixo 6.1 mostra uma comparação dos resultados obtidos para a temperatura de transição e os correspondentes expoentes críticos, segundo os algoritmos de Metropolis e Wang-Landau. Podemos notar que, em geral:

1. a precisão do Wang-Landau é maior que a precisão do Metropolis. Isso pode ser entendido pois no Wang-Landau a temperatura pode ser varrida com o intervalo desejado, enquanto que no Metropolis a cada temperatura deve-se fazer uma nova simulação.
2. os valores do Wang-Landau estão mais próximos dos valores exatos.
3. analisando as figuras que apresentam os ajustes, os dados obtidos através do algoritmo Wang-Landau encontram-se melhor alinhados do que os correspondentes dados do Metropolis.

A tabela 6.2 mostra o tempo de computação dos algoritmos de Metropolis e Wang-

Tabela 6.1 - Resultados obtidos utilizando o algoritmos de Metropolis e Wang-Landau em comparação com os valores exatos.

algoritmo	T_c	α/ν	β/ν	γ/ν	$1/\nu$
Metropolis	2,27(1)	0	0,12(1)	1,788(6)	1,08(1)
Wang-Landau	2,273(8)	0	0,127(4)	1,768(4)	1,05(1)
exato	2,269...	0	0,125	1,75	1

Tabela 6.2 - Tempo de computação dos algoritmos de Metropolis e Wang-Landau para as várias redes. O tempo de Metropolis corresponde a somente uma temperatura fixa enquanto o de Wang-Landau é o tempo total.

L	8	16	32	64
Metropolis	32s	1m	17m	69m
Wang-Landau	40s	6m	101m	3003m

Landau para as redes utilizadas nesse trabalho com os parâmetros descritos no texto. Enquanto que para o algoritmo de Wang-Landau o tempo é o total, no caso de Metropolis temos o tempo de computação para somente uma dada temperatura. Nas simulações de obtenção dos pontos de máximo, utilizamos, em geral, da ordem de 15 a 20 temperaturas. Salientamos que os intervalos de temperaturas onde ocorrem os máximos são diferentes, dependendo da grandeza física em estudo. Por exemplo, para a rede $L = 64$, realizamos 13 temperaturas para o calor específico c_V e magnetização m e 9 temperaturas para a susceptibilidade χ dando um tempo total de $(13 + 9) \times 69 = 1518m$.

6.2 Conclusões

De um ponto vista geral, o algoritmo de Wang-Landau mostra-se mais versátil para se obter as propriedades críticas do modelo de Ising de spin-1/2 do que o algoritmo de Metropolis, para as redes estudadas. O tempo computacional para o algoritmo de Wang-Landau aumenta à medida que as redes tornam-se maiores, utilizando-se os parâmetros descritos nesse trabalho. No entanto, podemos citar a utilização da simulação paralela para que o tempo de simulação no algoritmo de Wang-Landau seja otimizado. É claro que para se obter resultados mais precisos seriam necessárias simulações mais longas, tanto usando o Metropolis quanto o Wang-Landau, bem como considerar redes maiores.

Como extensão natural deste trabalho podemos citar: (i) considerar redes maiores e obter os expoentes críticos e a temperatura de transição com maiores precisões; (ii) podemos notar que os dados apresentados nos ajustes lineares não estão tão alinhados como esperado. Isso indica que correções de escala devem ser importantes e devem ser levadas em conta nas redes utilizadas, as quais são, na verdade, ainda muito pequenas; (iii) aplicar os métodos a modelos mais gerais como, por exemplo, o modelo de Blume-Capel de spin-1 e maiores, ou mesmo em outros modelos discretos.

Referências Bibliográficas

- Allen M. P., Tildesley D. J., Computer simulation of liquids. Oxford university press, 1989
- Andrews T., Bakerian Lecture: On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter., Proceedings of the Royal Society of London, 1869, vol. 18, p. 42
- Ashcroft N. W., Solid state physics, Saunders College, Philadelphia, 1976, p. 120
- Berche B., Henkel M., Kenna R., Critical phenomena: 150 years since Cagniard de la Tour, Revista Brasileira de Ensino de Física, 2009, vol. 31, p. 2602
- Binney J. J., Dowrick N. J., Fisher A. J., Newman M., The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group. Oxford University Press, Inc., 1992
- Costa B., Costa J., Landau D., Monte Carlo and spin dynamics study of the anisotropic Heisenberg model in two dimensions, Journal of applied physics, 1997, vol. 81, p. 5746
- Fisher M. E., Barber M. N., Scaling theory for finite-size effects in the critical region, Physical Review Letters, 1972, vol. 28, p. 1516
- Gould H., Tobochnik J., Christian W., An introduction to computer simulation methods. vol. 1, Addison-Wesley New York, 1988
- Ising E., Beitrag zur theorie des ferromagnetismus, Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 1925, vol. 31, p. 253
- Landau D., Tsai S.-H., Exler M., A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling, American Journal of Physics, 2004, vol. 72, p. 1294

-
- Landau D. P., Binder K., A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge university press, 2014
- Landau L. D., On the theory of phase transitions. I., Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1937, vol. 11, p. 19
- Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E., Equation of state calculations by fast computing machines, The journal of chemical physics, 1953, vol. 21, p. 1087
- Metropolis N., Ulam S., The monte carlo method, Journal of the American statistical association, 1949, vol. 44, p. 335
- Onsager L., Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, Physical Review, 1944, vol. 65, p. 117
- Rahman A., Correlations in the motion of atoms in liquid argon, Physical Review, 1964, vol. 136, p. A405
- Salinas S. R., Introdução a Física Estatística. Edusp, 1997
- Stanley H. E., Introduction to phase transitions and critical phenomena, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, by H Eugene Stanley, pp. 336. Oxford University Press, Jul 1987.
- Tomé T., de Oliveira M. J., Dinâmica estocástica e irreversibilidade. Edusp, 2001
- Wang F., Landau D., Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states, Physical review letters, 2001, vol. 86, p. 2050