

Modelo de Ising 2D e transições de fase no magnetismo

RODRIGO PEREIRA SILVA

Instituto de Física da Universidade de São Paulo
São Paulo – SP

Resumo

Transições de fase destacam-se como uma das classes de fenômenos mais gerais da natureza, já que tratam da diferença abrupta de comportamento de um sistema diante da mudança de um dos parâmetros aos quais está submetido. Uma amostra de sua generalidade está em estudos recentes (e outros nem tanto) mostrando que tanto sociedades e redes de interação humanas, quanto dinâmicas cerebrais e comportamento humano podem ser modelados a partir do formalismo de transições de fase [1, 2, 3]. Até os dias de hoje, o modelo de Ising ainda se classifica como um dos modelos que une de maneira mais harmoniosa simplicidade e eficiência na descrição de fenômenos de transições de fase observados. Neste trabalho, o modelo de Ising em duas dimensões foi tratado utilizando o algoritmo de Metrópolis, um tipo de método de Monte Carlo que se assemelha a um random walk guiado por probabilidades atualizadas a cada passo. Uma análise estatística feita a partir de temperaturas uniformemente distribuídas entre ~ 0 e 5.5 mostra que, para $T < T_c$, a grande maioria dos sistemas cai em um dos ground states, com $m = \pm 1$. Além disso, após $T > T_c$, nota-se que o sistema possui uma forte tendência a exibir magnetização compatível com o zero. Além disso, notou-se que o número de sítios na configuração influencia o comportamento do sistema: para grades $N \times N$ com valor alto de N , o comportamento do sistema se assemelha ao comportamento teórico previsto por Onsager. Usando uma grade com 500×500 spins, encontrou-se um expoente crítico para a magnetização de 0.129(1), que é próximo do previsto em teoria, de 0.125. A análise para um campo magnético externo não nulo aplicado sobre o sistema também apresentou frutos: pode-se notar que para temperaturas muito altas o sistema possui uma espécie de “inércia” para se alinhar com o campo; ao passo que a temperaturas subcríticas e à temperatura crítica o sistema torna-se bastante suscetível à magnetização externa. Uma análise da suscetibilidade magnética mostra uma singularidade em $T = T_c$, porém seu expoente crítico não pôde ser calculado, devido à baixa oscilação da magnetização média.

I. INTRODUÇÃO

I don't think anyone could explain why Probability works.
If you ask why it works, the first answer is: it doesn't
always work. It mostly works, except when it doesn't.
When doesn't it? Rarely. How rarely? Every so often.

Leonard Susskind

O estudo da Mecânica Estatística se faz necessário ao tratar de sistemas com uma quantidade muito grande de entidades para terem suas dinâmicas individualmente determinadas por meio das equações usuais da mecânica clássica. Dentro da Mecânica Estatística, o princípio fundamental empregado é de que o sistema atinge o equilíbrio – isto é, adquire características macroscópicas, como temperatura, bem definidas – quando o número de microestados acessíveis associado a esse macroestado é o maior possível. Do ponto de vista estatístico, o macroestado que fornece o maior número possível de microestados é o mais provável de ser ocupado [4]. Uma vez alcançado o equilíbrio, qualquer um dos microestados acessíveis é igualmente provável de ser ocupado pelo sistema.

Nesse contexto, o estudo de transições de fase surge. Uma

transição de fase pode ser definida como uma mudança abrupta das propriedades macroscópicas de um sistema devido à variação pequena de um parâmetro a ele associado, portanto, há uma quebra de simetria que anteriormente existia. Desde uma panela com água que começa a ferver após atingir a temperatura de ebulição, até a mudança de opinião de uma população sobre determinado tema após um acontecimento marcante, transições de fase são eventos absolutamente vastos e gerais na natureza. Devido a Ehrenfest, transições de fase em física podem ser classificadas de acordo com a n -ésima derivada do potencial termodinâmico que melhor descreve o sistema, usualmente a energia livre. Uma transição de fase de segunda ordem, por exemplo, indica uma descontinuidade na segunda derivada do potencial no ponto de transição [5].

Segundo [6], transições de fase de primeira e segunda ordem se diferenciam do ponto de vista de organizacional: enquanto a primeira envolve uma mudança da configuração física do sistema, a segunda não mostra diferença estrutural visível. Um exemplo clássico de transição de primeira ordem é a transição de fase entre um sólido e um líquido. Um microscópio poderoso seria capaz de mostrar que, devido à transição de fase, forma-se, abaixo da temperatura crítica, uma estrutura cristalina que não existia

na forma líquida, além de observar-se um salto descontínuo na densidade do sistema. Por outro lado, em transições de segunda ordem, a estrutura física não é alterada, ao passo que observa-se uma mudança na simetria dos estados pré e pós transição de fase. A transição de fase tratada em sistemas magnéticos é de segunda ordem, portanto será o foco da discussão neste trabalho.

No que tange as transições de fase de segunda ordem, é possível constatar que certas variáveis do problema seguem uma lei de potências nas vizinhanças da transição de fase, estes são os parâmetros de ordem. No caso do modelo de Ising, o parâmetro de ordem em questão é a magnetização média do sistema, dada por

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

onde N é o número total de spins na rede. Essa grandeza mede o quão alinhados para uma certa direção os spins estão, de modo que a quebra de simetria durante a transição de fase é claramente observada no comportamento da magnetização média [7]. Cabe aqui uma breve discussão sobre a magnetização: por definição, a magnetização, dada por M , é uma grandeza extensiva do problema, que depende do tamanho da amostra. Aqui, a magnetização analisada foi transformada numa variável intensiva tomando a média da magnetização por sítio. Assim, $\langle m \rangle = m = M/N$. Vale ressaltar também que neste trabalho foi tomada a liberdade de escrever $\langle m \rangle$ e m intercambiavelmente.

Quanto às transições de fase, para temperaturas superiores à temperatura crítica e na ausência de um campo magnético externo, o sistema encontra-se na fase paramagnética – espera-se então que os spins estejam aleatoriamente distribuídos em up e down ao longo da grade. Porém, para temperaturas mais baixas que a crítica, nota-se um alinhamento espontâneo dos sítios numa única direção (e que, a princípio, é aleatória), de modo que a magnetização resultante é não nula.

A necessidade de compreender os fenômenos de transição de fase é bem justificada. No entanto, estes fenômenos tendem a ser extremamente complexos – e, por diversas vezes, intratáveis – na maioria dos casos. Para estudar as características de transição de fase é necessário então propor um modelo físico tratável, isto é, cujas propriedades sejam calculáveis. É propícia então a introdução do modelo de Ising.

I. Modelo de Ising 1D

O modelo de Ising – e sua popularidade – nascem da possibilidade de estudar transições de fase, que são fenômenos complexos,

utilizando um modelo simples o suficiente para que se tenha uma solução analítica¹ para o problema. O modelo de Ising foi primeiramente proposto por Lenz² como um problema e dado para seu aluno de doutorado Ernst Ising³, o qual o resolveu para uma dimensão.

O modelo de Ising em uma dimensão consiste numa cadeia unidimensional de spins que interagem, à princípio, apenas com seus vizinhos imediatos. Cada sítio possui valores $\sigma \in \{-1, 1\}$ acessíveis. A força de interação entre os vizinhos é dada por uma constante J e o modelo admite que o sistema esteja sujeito a um campo magnético externo de intensidade h . A energia associada à cadeia numa determinada configuração $\{\sigma_i\}$ é dada por

$$E = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i, \quad (2)$$

que, por sua vez, possui uma função de partição canônica dada por [8]

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta E), \quad (3)$$

onde $\beta = 1/T$, em unidades nas quais a constante de Boltzmann é unitária e a soma é realizada sobre todas as configurações acessíveis ao sistema. Note que a energia calculada a partir da Eq. (2) contabiliza apenas spins que são vizinhos imediatos. Essa característica também é recorrente nos modelos de Ising para dimensões superiores. Diversas modificações no modelo, como a consideração de interações à longo alcance e forças de interação que variam ao longo da grade também existem, mas não serão escopo deste trabalho.

Ising obteve que a magnetização média do sistema depende da temperatura, da intensidade do campo magnético externo e da interação entre os spins de acordo com a relação [4]

$$m(T, h) = \frac{\sinh(\beta h)}{\left[\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J} \right]^{1/2}}. \quad (4)$$

A partir da solução obtida para o caso unidimensional, Ising descartou a possibilidade da magnetização espontânea do material, já que na ausência de um campo magnético externo ($h = 0$) a magnetização é nula independentemente das outras variáveis do sistema. Dessa forma, o modelo de Ising unidimensional não prevê a existência do ferromagnetismo. No entanto, o modelo já prevê a desmagnetização de um sistema sujeito a um campo magnético externo com o aumento da temperatura, como é possível observar na Fig. 1.

¹Note que o fato do modelo ser simples não implica necessariamente na simplicidade da solução. Muito pelo contrário: a solução, alcançada por Onsager para o caso bidimensional, é de grande complexidade na sua obtenção.

²Wilhelm Lenz (1888 – 1957) foi um físico alemão, dos grandes nomes da física do século XX, tendo trabalhado com cientistas ilustres, como Sommerfeld e Pauli. Wilhelm Lenz foi orientador de Ernst Ising entre os anos de 1922 e 1924.

³Ernst Ising (1900 – 1998) foi um físico alemão, responsável pela solução do modelo de Ising unidimensional. Tornou-se professor na Universidade de Bradley, Ilínois, onde trabalhou até sua aposentadoria, em 1976.

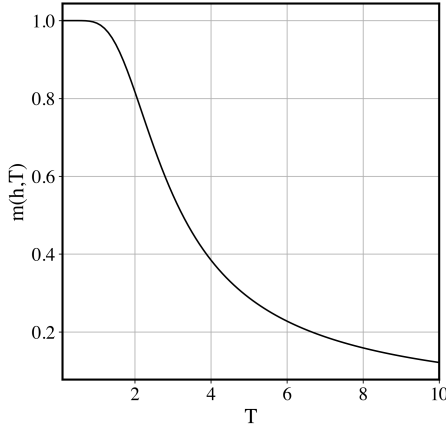


Figura 1: Solução analítica para o modelo de Ising em uma dimensão. É possível observar que para temperaturas elevadas há transição de fase, em que o sistema perde sua magnetização. Parâmetros utilizados: $h = J = 1$.

Como demonstrado por Ising, a energia livre do sistema por sítio, dada por [8]

$$f(T, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{N/T} \ln Z_N \right), \quad (5)$$

onde Z_N é a função de partição do sistema, é perfeitamente analítica no limite termodinâmico. Como já discutido anteriormente, a existência de transições de fase está intimamente ligada à não analiticidade da energia livre. Um argumento atribuído à Landau mostra que não é possível haver magnetização espontânea no modelo unidimensional considerando apenas interações de curto alcance.

Consideremos, para a análise, que uma cadeia com $N + 1$ sítios contém todos os spins alinhados, por exemplo, para cima. Vamos analisar o balanço de energia para desordenar esse sistema. Para criar sítios opostos, basta girar todos os spins da cadeia para baixo a partir de uma posição qualquer $i \neq 1$. Pela Eq. (2), a diferença de energia entre a configuração ordenada e desordenada é de $\Delta E = 2J$ e que, por construção, é positiva. No entanto, a diferença de entropia para se fazer isso é muito grande, já que o número de posições nas quais é possível girar todos os spins para baixo é N . Assim, $\Delta S = \ln N$. No limite termodinâmico, N é suficientemente grande para que a energia livre, dada por

$$\Delta F = \Delta E - T \Delta S = 2J - T \ln N, \quad (6)$$

seja negativa. Como a energia livre diminui diante do procedimento que descrevemos acima, existe a tendência da formação de aglomerados de spins de mesmo sinal, o que impede a criação de configurações magnetizadas [8].

II. O Modelo de Ising 2D

O modelo de Ising em 2D consiste em um cadeia bidimensional de spins, conforme exemplifica a Fig. 2, para uma cadeia reduzida 3×3 . Nessa cadeia, cada spin interage com os spins imediatamente vizinhos com uma força de interação J . Neste trabalho, consideraram-se condições de contorno cíclicas, isto é, os spins nas extremidades interagem com os spins das outras extremidades.

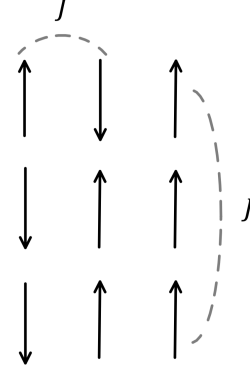


Figura 2: Esquema de uma cadeia de spins em duas dimensões. Os spins podem estar para cima (spin up +1) ou para baixo (spin down -1). Cada spin interage com seus vizinhos imediatos com uma força de interação J .

A energia associada a uma dada configuração $\alpha = \{\sigma_{(i,j)}\}$ de spins é dada por

$$E_\alpha = -J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} \sigma_{\mathbf{x}} \sigma_{\mathbf{x}'} - h \sum_{\mathbf{x}} \sigma_{\mathbf{x}} \quad (7)$$

onde $\mathbf{x} = (i, j)$ é a localização do spin em coordenadas de linhas e colunas, respectivamente. A notação $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle$ significa que a somatória é tomada em cada termo $\sigma_{\mathbf{x}}$ e nos seus spins imediatamente vizinhos $\sigma_{\mathbf{x}'}$, portanto nos sítios $\mathbf{x}' = (i \pm 1, j)$ e $\mathbf{x}' = (i, j \pm 1)$. Ao inverter um spin da cadeia na posição \mathbf{x} por meio da operação $\sigma_{\mathbf{x}} \rightarrow \tilde{\sigma}_{\mathbf{x}} = -\sigma_{\mathbf{x}}$, a diferença das energias associadas a cada configuração, chamada de E_{flip} (isto é, a energia associada ao ato de “flipar” o spin), é dada por

$$E_{\text{flip}} = 2J\sigma_{(i,j)} [\sigma_{(i+1,j)} + \sigma_{(i-1,j)} + \sigma_{(i,j+1)} + \sigma_{(i,j-1)}] + 2h\sigma_{(i,j)}, \quad (8)$$

onde $\sigma_{(i,j)}$ é o sítio original. Para isso, pode-se observar as energias associadas ao spin sendo analisado. O spin $\sigma_{(i,j)}$ tem energia ϵ dada por

$$\epsilon = -J\sigma_{(i,j)} [\sigma_{(i+1,j)} + \sigma_{(i-1,j)} + \sigma_{(i,j+1)} + \sigma_{(i,j-1)}] - h\sigma_{(i,j)}, \quad (9)$$

enquanto o spin $\tilde{\sigma}_{(i,j)}$ tem energia $\tilde{\epsilon}$ associada

$$\tilde{\epsilon} = -J\tilde{\sigma}_{(i,j)} [\sigma_{(i+1,j)} + \sigma_{(i-1,j)} + \sigma_{(i,j+1)} + \sigma_{(i,j-1)}] - h\tilde{\sigma}_{(i,j)}. \quad (10)$$

Note que os sítios vizinhos se mantêm inalterados, já que o spin a ser invertido é apenas aquele localizado na posição (i, j) . Assim,

a energia E_{flip} é dada apenas pela diferença das energias $\tilde{\epsilon} - \epsilon$, já que o restante da configuração permanece inalterada e, portanto, com a mesma energia, que se cancela ao tomarmos a diferença das energias.

O sistema termodinâmico evolui no sentido de diminuir a energia armazenada na configuração, dado o estado macroscópico do sistema. O modelo de Ising em duas dimensões possui uma solução analítica, alcançada por Onsager em 1944, 20 anos depois do trabalho original de Ising [8]. O trabalho original de Onsager – diga-se de passagem, um esforço matemático homérico – pode ser encontrada em [9].

A solução analítica prevê que o parâmetro de magnetização do sistema é dado por [7]

$$m(T) = \begin{cases} [1 - \sinh^{-4}(2J/T)]^{1/8} & , \quad T < T_c \\ 0 & , \quad T > T_c \end{cases} \quad (11)$$

Assim, nota-se que de fato há um caráter abrupto no comportamento do parâmetro de magnetização ao passar pela temperatura crítica, no entanto, vemos que é possível ter magnetização para campos externos nulos, como pode-se constatar pela Fig. 3.

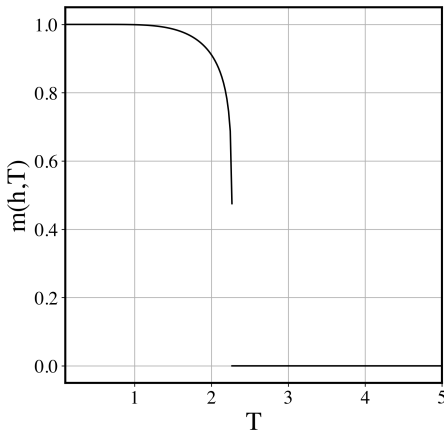


Figura 3: Solução analítica para o modelo de Ising em 2D, para $J = 1$ e $h = 0$. Pode-se observar que agora o modelo prevê a magnetização espontânea e, conseqüentemente, a existência de ferromagnetismo. O comportamento abrupto da função também indica mudança de fase

Além disso, a partir da solução de Onsager, observa-se que a temperatura crítica, para a qual ocorre a transição de fase, é dada pela expressão

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269J, \quad (12)$$

em unidades de k_B . Assim, observa-se que a força de interação entre os spins J é uma constante de proporcionalidade que influencia na temperatura crítica do sistema.

A análise feita para a energia livre do sistema pode também ser feita para o modelo bidimensional, por meio do argumento de Peierl [10]. Tomemos um domínio magnético formado por vários spins alinhados e que possui um perímetro associado L , como mostra a linha em vermelho que demarca o domínio em azul, na Fig. 4. A figura mostra que existirão L interfaces entre um spin up e um spin down. Assim, de modo análogo ao que foi argumentado para o caso unidimensional, $\Delta E = 2JL$.

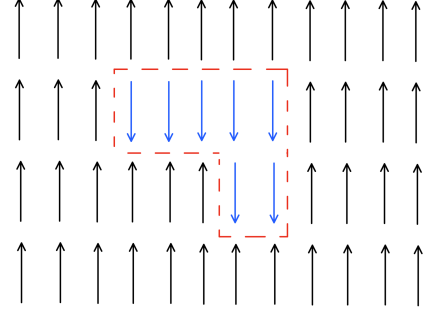


Figura 4: Esquema de um domínio magnético, cujo perímetro vale L

O argumento de Peierl mostra que o número de microestados acessíveis aumenta com L dramaticamente, de modo que $\Omega \sim c^L$, onde c é um número entre 2 e 3. Assim, a energia livre será dada por

$$\Delta F = 2LJ - TL \ln c. \quad (13)$$

Assim, vemos que existem temperaturas

$$T < \frac{2J}{\ln c}, \quad (14)$$

para as quais $\Delta F > 0$, diferentemente do caso unidimensional, portanto o sistema não tenderá a formar domínios de alinhamento oposto. Assim, prevê-se a existência da magnetização espontânea. Esse argumento pode ser encontrado com mais detalhe em [11].

II. MÉTODO NUMÉRICO

O método computacional utilizado para obter o estado de equilíbrio do sistema foi o método de Metrópolis, um tipo de simulação de Monte Carlo que utiliza a geração de números aleatórios e que baseia seu funcionamento em cadeias de Markov. Por isso, vale a digressão para falar um mínimo sobre cadeias de Markov e sua relação com o algoritmo.

I. Cadeias de Markov e as transições de Ising

Uma cadeia de Markov é definida como uma sucessão de estados aleatoriamente escolhidos, tal que o estado seguinte não depende de estados anteriores, mas apenas do atual. Um exemplo clássico de uma cadeia de Markov é o caminho aleatório, onde, para

conhecer a posição do caminhante no próximo passo (sorteado entre 1 e -1) basta saber qual a posição atual e as probabilidades associadas ao passo 1 e -1. Portanto, além do estado atual, toda a informação necessária para atualizar o sistema para um novo estado aleatório é a distribuição de probabilidades associada à transição [12]. Essa probabilidade de transições é dada pela matriz de transição, \mathcal{P} .

Assim, se uma distribuição de probabilidades de transição inicial é dada pelo vetor $\mathbf{P}(t = 0) \equiv \mathbf{P}_0$ que contém as probabilidades associadas a cada possível estado, então a distribuição de probabilidades do próximo passo é dada por

$$\mathbf{P} = \mathcal{P}^T \mathbf{P}_0, \quad (15)$$

onde T denota a transposta da matriz. Analisando mais a fundo \mathcal{P} , trata-se de uma matriz quadrada que possui elementos P_{ij} , onde j é o estado atual e i é um possível estado de transição – por isso a necessidade de tomar a transposta de \mathcal{P} . Assim, na representação matricial,

$$\mathcal{P}_{ij} = \begin{pmatrix} P_{1,1} & P_{1,2} & \dots & P_{1,j} & \dots & P_{1,n} \\ P_{2,1} & P_{2,2} & \dots & P_{2,j} & \dots & P_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{i,1} & P_{i,2} & \dots & P_{i,j} & \dots & P_{i,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n,1} & P_{n,2} & \dots & P_{n,j} & \dots & P_{n,n} \end{pmatrix} \quad (16)$$

onde, por construção, $\sum_{i=1}^n \mathcal{P}_{ij} = 1$, já que a probabilidade de saltar do estado atual j para algum próximo estado i é normalizada.

Seguindo a lógica da Eq. (15), após N passos, \mathbf{P} será dado por

$$\mathbf{P} = (\mathcal{P}^T)^N \mathbf{P}_0. \quad (17)$$

Um estado estacionário para os vetores \mathbf{P} é dado pela equação

$$\mathbf{P} = \mathcal{P}^T \mathbf{P}, \quad (18)$$

isto é, após aplicar a matriz de transição sobre as probabilidades atuais, elas se mantêm iguais. É possível provar que existe uma distribuição de probabilidades estacionária na qual, para quaisquer pares de estados α_i e α_j , a equação

$$P_{\alpha_i} \mathcal{P}_{\alpha_i \alpha_j} = P_{\alpha_j} \mathcal{P}_{\alpha_j \alpha_i} \quad (19)$$

vale [13]. A equação acima pode ser escrita de uma maneira mais elucidativa⁴:

$$\frac{P_{\alpha_i}}{P_{\alpha_j}} = \frac{\mathcal{P}_{\alpha_j \alpha_i}}{\mathcal{P}_{\alpha_i \alpha_j}}. \quad (20)$$

No modelo de Ising, a probabilidade do sistema estar no estado α é dada por [7]

$$P_{\alpha} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad (21)$$

onde Z é a função de partição do sistema. Assim, usando a Eq. (20), é possível escrever, para os estados α_i e α_j ,

$$\frac{P_{\alpha_i}}{P_{\alpha_j}} = \exp[-\beta(E_{\alpha_i} - E_{\alpha_j})] = e^{-E_{\text{flip}}/T}, \quad (22)$$

onde E_{flip} é dado pela Eq. (8). Note que não é necessário calcular a função de partição do sistema para computar esta razão, tarefa essa que seria extremamente exigente do ponto de vista computacional.

II. Algoritmo de Metrópolis

O algoritmo de Metrópolis funciona da seguinte forma: o sistema se encontra inicialmente numa configuração α_j , de modo que uma nova configuração α_i é proposta, escolhida a partir de uma distribuição de probabilidade $f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)$. Depois desse novo estado ser escolhido, ele será aceito e o sistema será atualizado com uma probabilidade $a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)$, ou rejeitado com probabilidade $1 - a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)$. Assim, em se tratando de eventos independentes, a probabilidade de transição entre estados será dada por

$$\mathcal{P}_{\alpha_j \alpha_i} = f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i). \quad (23)$$

Pela Eq. (20), temos então que a razão entre as probabilidades de ocupar os estados α_i e α_j é

$$\frac{P_{\alpha_i}}{P_{\alpha_j}} = \frac{f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)}{f(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) a(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)}. \quad (24)$$

Em outras palavras,

$$a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) = a(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) \frac{P_{\alpha_i} f(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)}{P_{\alpha_j} f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)}. \quad (25)$$

Para que a equação acima seja válida para quaisquer estados α_j e α_i , tal que o primeiro suceda o segundo, a probabilidade de aceitação deve seguir a distribuição [7]

$$a(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) = \min \left[1, \frac{P_{\alpha_i} f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)}{P_{\alpha_j} f(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)} \right]. \quad (26)$$

Como a diferença entre o estado atual e o proposto é de apenas um spin flipado, então por simetria temos que $f(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) = f(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)$. Portanto, por meio da Eq. (22), a probabilidade de aceitar um novo estado será dada por

$$a(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = \min \left[1, \exp(-E_{\text{flip}}/T) \right]. \quad (27)$$

Com essas informações, podemos desenhar o procedimento do algoritmo da seguinte forma:

- Escolhemos aleatoriamente um sítio na grade de spins.

⁴Note que razão está sendo feita sobre elementos da matriz \mathcal{P} , que denota a probabilidade de transição do estado α_j para o estado α_i e vice-versa.

- Calculamos E_{flip} associado ao sítio escolhido, utilizando a Eq. (8).
- Se $E_{\text{flip}} < 0$, então aceitamos a nova configuração, já que a energia associada é menor. Caso contrário, aceitamos a nova configuração com uma probabilidade $\exp(-E_{\text{flip}}/T)$. Para testar essa probabilidade, comparamos o valor obtido com um número aleatório sorteado entre 0 e 1, uniformemente distribuído.

Dessa forma, o sistema gera configurações α sequencialmente até que atinja uma configuração compatível com a distribuição canônica $P = e^{-E_{\text{flip}}/T}$. Um problema com esse método é o de prever em que momento o algoritmo começa a gerar novas configurações que atingiram um estado verdadeiramente estacionário assintótico [6]. Por vezes, ao invés de atingirmos um mínimo global de energia do sistema, o qual está associado com um estado de equilíbrio, atingimos um mínimo local, sem a possibilidade de verificar em qual tipo de mínimo nos encontramos. Uma maneira de evitar esse tipo de problema neste trabalho foi o de iterar a grade de spins o máximo possível de vezes – sem, é claro, comprometer a praticidade computacional. Outro cuidado necessário a ser tomado com o algoritmo é de tomar os sítios aleatoriamente a cada varredura. Caso os sítios sejam tomados sequencialmente podem-se criar correlações indesejadas entre os sítios.

Um exemplo de evolução do algoritmo encontra-se na Fig. 5. Vale ressaltar que esta não é uma evolução temporal do sistema, mas a apenas evolução da simulação numérica ao longo das varreduras realizadas na grade de spins.

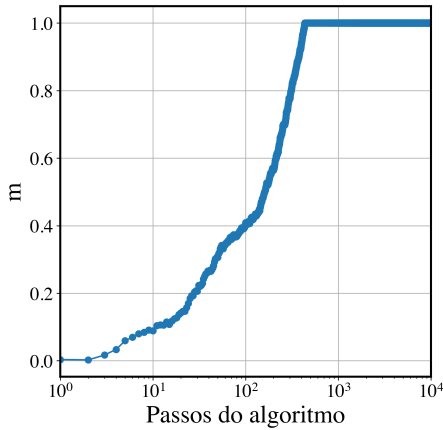


Figura 5: Evolução da magnetização de acordo com as varreduras que o algoritmo de Metrópolis performa sobre as configurações. Parâmetros: $J = 1$, $h = 0$, $T = 0.1 = 0.04T_c$ e uma grade 100×100 spins.

A configuração de entrada fornecida contém spins aleatoriamente distribuídos entre up e down, o que justifica a

magnetização nula do sistema na primeira iteração. Conforme o algoritmo avança, observa-se um aumento gradual da magnetização média, o que indica uma ordenação crescente dos spins da cadeia. Por fim, a cadeia atinge um estado estacionário de magnetização unitária e ali permanece. Essa evolução se justifica pela temperatura na qual o sistema está sujeito: espera-se, para $T < T_c$ que a configuração final tenha uma ordenação grande e uma magnetização compatível com 1.

III. Manual do usuário para o código

Abaixo, a Tabela 1 elenca os argumentos de input para o algoritmo de Metrópolis.

Parâmetro	Significado
config	Configuração inicial de spins
N_var	Número de varreduras
seed	Seed para o gerador de números aleatórios
T	Temperatura a qual o sistema está sujeito
h	Intensidade do campo externo
J	Intensidade de interação entre spins

Tabela 1: Tabela de argumentos para o algoritmo de Metrópolis

Como saída, o algoritmo fornece a magnetização da configuração final, bem como todas as magnetizações das configurações intermediárias, e a configuração final.

III. RESULTADOS E DISCUSSÃO

De maneira geral, o algoritmo de Metrópolis no contexto do modelo de Ising em 2D é computacionalmente exigente. Foi necessária a utilização de bibliotecas especializadas em melhorar o desempenho do código para possibilitar análises mais completas do sistema.

Uma análise preliminar possível de ser feita é sobre a in-

variância por escala nas configurações de spin submetidas à temperatura crítica T_c , como pode-se observar na Fig. 6. A figura mostra que para grades de diferentes tamanhos, o aspecto geral da configuração é o mesmo. Esse efeito é explicado pela teoria de renormalização que diz que, no ponto crítico, a distribuição de probabilidades das flutuações de magnetização das configurações de spin são invariantes por escala⁵.

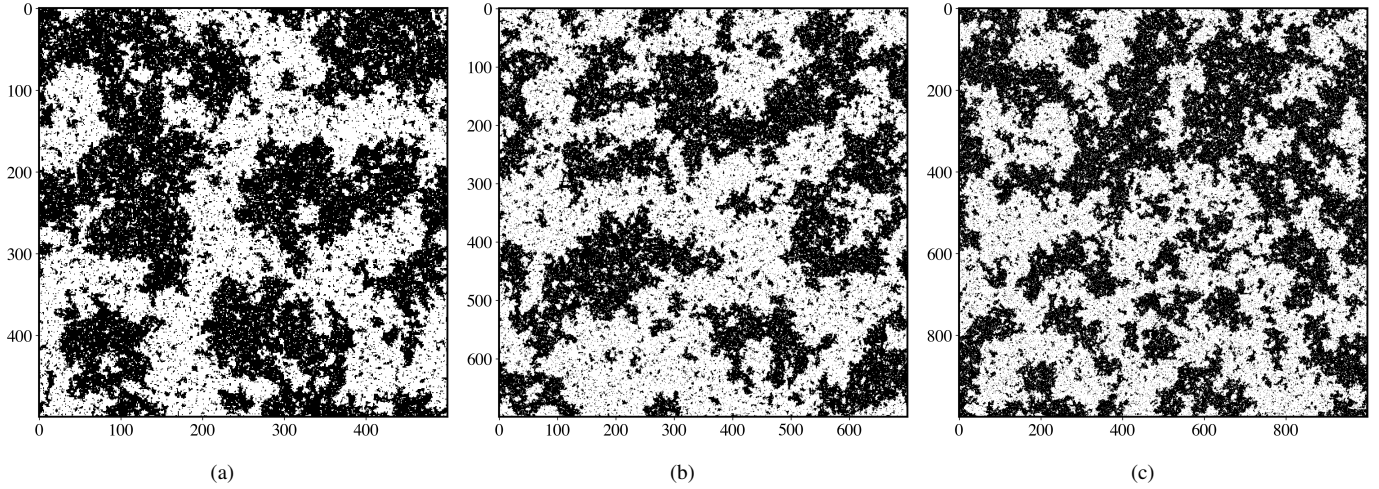


Figura 6: Configuração final para uma série de escalas diferentes, todas submetidas à temperatura crítica, ressaltando a invariância na escala. (a) Grade 500×500 , (b) grade 700×700 , (c) grade 1000×1000 . Em todas as grades, o parâmetros utilizados foram: $J = 1$, $h = 0$, $T = T_c = 2.269$, para uma configuração inicial de spins up e down uniformemente distribuídos.

Além disso, nota-se que o sistema tende favorecer fortemente as configurações coerentes em temperaturas baixas ($T < T_c$) ao observarmos a Fig. 7, onde 10^4 realizações foram feitas para temperaturas uniformemente distribuídas entre 10^{-10} e 5.5. Os insets mostram histogramas das magnetizações antes e após a temperatura crítica. É possível perceber que para valores $T > T_c$ o sistema perde sua magnetização, apresentando uma média de magnetização compatível com o zero: $\mu = -9 \times 10^{-4} \pm 0.11$. O desvio padrão elevado se deve às amostras que não mudaram de fase após T_c , provavelmente ocasionadas pelo fato da grade utilizada ser de tamanho reduzido (50×50 spins) – para uma análise do comportamento da magnetização do sistema de acordo com seu tamanho, vide texto abaixo. No entanto, é possível observar que a grande maioria dos pontos está contida na porção $\mu \pm \sigma$, o que é reforçado por uma análise estatística feita posteriormente, mostrando que aproximadamente 94% dos pontos para $T > T_c$ encontram-se nessa região.

Para temperaturas baixas, observamos que a maioria das

configurações cai nos extremos de magnetização, exibindo dois picos no histograma da figura. Uma hipótese para justificar os pontos que não caíram nos ground states para temperaturas baixas ($T < T_c$) é de que a simulação encontrou um mínimo de energia local e se manteve preso à configuração associada. É provável que ao utilizar mais varreduras o número de pontos com magnetização $m \neq \pm 1$ diminua.

A dependência do sistema com número de spins pode ser observada na Fig. 8. Nota-se que o aumento do sistema contribui para a aproximação do comportamento da magnetização da solução analítica devido a Onsager, dado pela Eq. (11). Observou-se também que para um número de spins reduzido o sistema exibe uma grande quantidade de flutuações. Por isso, para suavizar as curvas exibidas, foi feita uma série de 20 simulações para cada valor de temperatura e, em seguida, tomada a média sobre estas. Esse procedimento foi utilizado para as curvas para 10×10 spins e 30×30 spins, que foram os que apresentaram flutuações mais intensas e frequentes. A partir de 50×50 , os gráficos passam a se

⁵Inicialmente desenvolvida por Kenneth Wilson no início da década de 1970, a teoria de renormalização teve por motivação compreender e calcular parâmetros em regimes de criticalidade. A princípio, a renormalização investiga como o aumento na escala do sistema influencia na distribuição de configurações do sistema [6, 8]. Não vou me estender no tópico neste estudo, pois o tratamento é avançado e foge aos propósitos do trabalho. Porém, as figuras são bonitas.

comportar mais regularmente e as curvas tendem a se aproximar mais da solução analítica.

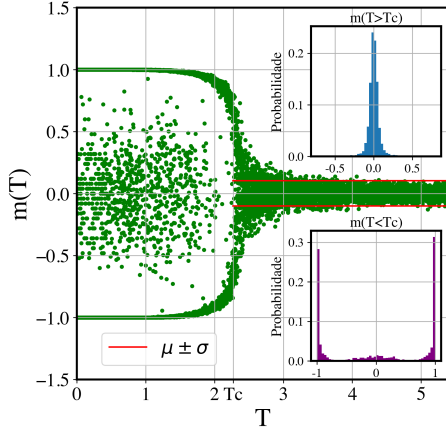


Figura 7: Simulação de Monte Carlo para 10^4 realizações, com temperaturas escolhidas uniformemente entre 10^{-10} e 5.5. É possível observar que para temperaturas baixas ($T < T_c$) o sistema favorece fortemente os estados coerentes, com $m_0 = \pm 1$. Os insets mostram os histogramas normalizados das amostras, para $T > T_c$ (em azul) e $T < T_c$ (em roxo). Parâmetros: configuração inicial com 50×50 spins uniformemente divididos entre up e down, 1000 varreduras, $h = 0$ e $J = 1$.

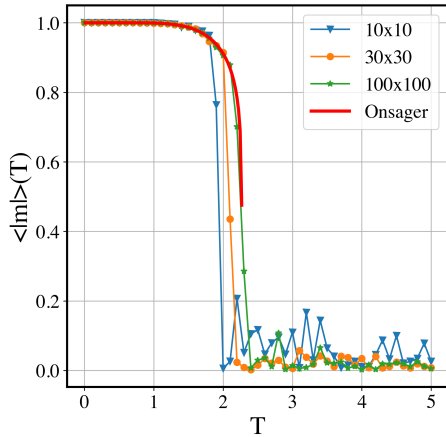


Figura 8: Progressão do módulo da magnetização média para diversos tamanhos de grades. Na figura, \blacktriangledown são para 10×10 spins, \bullet são para 30×30 e \star são para 100×100 . Em vermelho cheio, a solução analítica de Onsager. Nota-se que quanto maior o número de spins, mais próxima da solução analítica se chega. Parâmetros utilizados: $J = 1$, $h = 0$, 10^4 varreduras.

Motivado pela discussão anterior sobre o comportamento do sistema com o tamanho deste, é possível determinar a lei de potência que a magnetização segue nas vizinhanças da tempe-

ratura crítica. Utilizou-se para isso uma grade com 500×500 spins, com 10^4 varreduras na grade. A razão para utilizar uma quantidade tão elevada é que o comportamento do sistema se mostra mais próximo daquele previsto pela teoria, aumentando assim a chance de um bom ajuste. Pela Fig. 9 é possível notar que tanto o ajuste quanto a solução analítica de Onsager ajustam bem os pontos simulados, em preto. O inset mostra a diferença entre o ajuste e a solução analítica, que não ultrapassa a ordem de $\sim 10^{-3}$. Utilizando a Eq.(11) como ajuste para os pontos simulados e mantendo o expoente externo $1/8 = 0.125$ como parâmetro de ajuste, chegou-se a um expoente ajustado de 0.129(1), o que é próximo da solução analítica em questão.

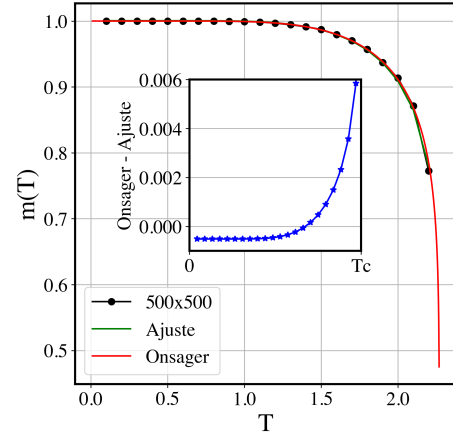


Figura 9: Ajuste da solução analítica de Onsager conforme a Eq. (11), utilizando uma configuração de 500×500 spins. Sobrepõe-se na figura a função ajustada com um parâmetro de ordem 0.129(1) e a função analítica, com parâmetro de ordem 0.125. O inset mostra a diferença absoluta nas duas curvas: a analítica e a ajustada. Parâmetros utilizados: $h = 0$, $J = 1$, 10^4 varreduras da grade, com configuração inicial homogênea.

Até o momento, estudou-se o sistema não submetido a nenhum campo magnético externo. Agora, vale analisar o comportamento dos sítios ao submetê-los a um campo externo constante de intensidade h , apontado na direção paralela de magnetização natural do sistema (up ou down). A Fig. 10 mostra a dependência de m com h , com um campo externo que cresce monotonicamente, com intensidades variando entre -1.5 e 1.5 . As curvas foram analisadas para uma série de temperaturas; duas subcríticas, uma crítica e uma supercrítica. Aqui, parece haver uma relação inversamente proporcional entre a suscetibilidade de alinhamento da configuração ao campo externo e a temperatura na qual o sistema se encontra. As curvas para $T = 0.1$ e $T = 1$ são praticamente idênticas, apresentando grande suscetibilidade ao campo, ao passo que as temperaturas crítica e supercrítica não respondem imediatamente; apresentando uma transição suave,

especialmente a temperatura supercrítica. Essa resistência da configuração ao campo à temperaturas altas pode ser analisada a partir da probabilidade de flipar os spins: aqui, $e^{-E_{\text{flip}}/T}$ é alta, já que T é grande. Assim, os spins constantemente estão mudando de alinhamento e a criação de sítios grandes o suficiente para produzir magnetização considerável é muito improvável. Assim, é necessário um campo externo h intenso que aumente os valores de E_{flip} (vide Eq. (8)), de modo a compensar a alta temperatura T e diminua a probabilidade de flipar os spins. No extremo oposto, as configurações à temperatura baixa apresentam uma probabilidade de flipar o spin baixa, o que implica na possibilidade de facilmente alinhar os spins de acordo com um campo externo. De fato, vemos pelas curvas que uma intensidade ínfima de h é o suficiente para produzir magnetizações máximas (em módulo) para $T = 0.1$ e $T = 1$.

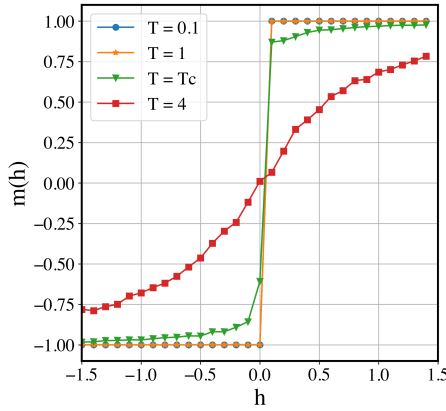


Figura 10: Dependência da magnetização com h para várias temperaturas. Nota-se que o sistema é resistente à ação de um campo externo quando se encontra em temperaturas muito altas. À temperatura crítica T_c e à temperaturas baixas, os spins são mais suscetíveis. Parâmetros utilizados: $J = 1$, cadeia de 100×100 spins, com 10^3 varreduras realizadas sobre a grade.

Vale ressaltar que existe uma diferença clara de resultados ao mudarmos ligeiramente o procedimento da simulação descrita acima. Para as curvas da Fig. 10, a cada valor de h utilizado, gerou-se uma nova configuração inicial de spins. No entanto, se uma única configuração inicial for gerada e utilizada para todos os valores de h , os resultados são discrepantes, especialmente para o caso da temperatura $T = 0.1$, que sequer sofre influência do campo magnético externo: se mantém com magnetização $m = -1$ ao longo de toda a variação de h . A razão para isso no momento não é clara, e precisa ser investigada mais a fundo.

Por fim, uma análise pode ser feita da susceptibilidade magnética χ_M do sistema, que é uma grandeza relacionada com

as flutuações da magnetização, dada por [4]

$$\chi_M = \frac{1}{T} \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right). \quad (28)$$

Para cada temperatura, o sistema foi simulado 100 vezes. A partir disso foi possível levantar a estatística das flutuações. A Fig. 11 mostra o resultado da simulação.

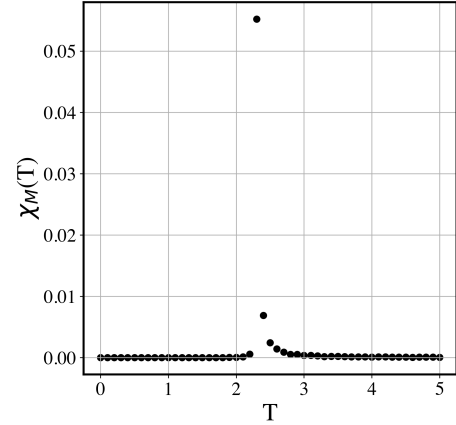


Figura 11: Suscetibilidade magnética em função da temperatura. Nota-se que há um ponto singular em $T = T_c$, conforme prevê a teoria. Parâmetros: 100×100 spins numa configuração inicial uniforme, com $J = 1$, $h = 0$ e 10^3 varreduras feitas. A cada temperatura, repetiu-se a simulação 100 vezes.

É possível notar que as regiões nas vizinhanças da temperatura crítica flutuam pouco demais para extrair qualquer informação delas. No entanto, ainda é verificável que a susceptibilidade tem um ponto singular em $T = T_c$, conforme previsto em teoria [7]. No entanto, análises mais complexas desta grandeza, como o ajuste do expoente crítico nas proximidades de T_c , são inviabilizadas pelo comportamento da função, que se anula na maior parte dos pontos simulados.

IV. CONCLUSÃO

O modelo de Ising aliado ao método de Metrópolis consiste num ferramental poderoso na análise de sistemas em regimes de criticalidade. Vemos, a partir das simulações realizadas, que as previsões de Onsager que preveem uma temperatura crítica de transição do regime ferromagnético para o paramagnético de fato se concretizam. Estatisticamente falando, grande parte das simulações realizadas para sistemas sujeitos a temperaturas supercríticas apresentarão magnetização nula; ao contrário, aqueles sujeitos a temperaturas subcríticas mostram magnetização espontânea – isto é, sem a presença de campos magnéticos externos. A análise dos expoentes do parâmetro de ordem também é compatível com o que prevê a teoria, sendo avaliado em 0.129(1). Um aspecto passível de melhorias são as curvas de magnetização por temperatura para grades contendo poucos sítios. As curvas são muito ruidosas, a ponto de impedir análises mais profundas. É provável que realizar a média sobre muitas simulações para a mesma temperatura suavize a curva, método que foi utilizado no presente relatório, mas que pode ser melhorado ao realizar mais simulações por temperatura.

REFERÊNCIAS

- [1] P. FRONCZAK, A. FRONCZAK, and J. A. HOLYST. Phase transitions in social networks. *The European Physical Journal B*, 59(1):133–139, 2007.
- [2] D. TSAREV, A. TROFIMOVA, A. ALODJANTS, and A. KHRENNIKOV. Phase transitions, collective emotions and decision-making problem in heterogeneous social systems. *Scientific reports*, 9(1):1–13, 2019.
- [3] J. A. S. KELSO, S. L. BRESSLER, S. BUCHANAN, et al. A phase transition in human brain and behavior. *Physics Letters A*, 169:134–144, 1992.
- [4] R. K. PATHRIA and P. D. BEALE. *Statistical mechanics*. Elsevier, 3rd edition, 2016.
- [5] F. SCHWABL. *Statistical Mechanics*. Springer, 3 edition, 2002.
- [6] C. GARROD. *Statistical Mechanics and Thermodynamics*. Oxford University Press, 1 edition, 1995.
- [7] PADILLA I. G. and CUEVAS F. J. P. The hobbyhorse of magnetic systems: the ising model. *European Journal of Physics*, 37(6):065103, 2016.
- [8] S. R. A. SALINAS. *Introdução à Física Estatística*. EDUSP, 2 edition, 2005.
- [9] L. ONSAGER. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4), 1944.
- [10] C. BONATI. The peierls argument for higher dimensional ising models. *European Journal of Physics*, 35(3):035002, 2014.
- [11] R. B. GRIFFITHS. Peierls proof of spontaneous magnetization in a two-dimensional ising ferromagnet. *Physical Review*, 136(2A):A437, 1964.
- [12] E. BEHRENDTS. *Introduction to Markov chains*, volume 228. Springer, 2000.
- [13] C. P. ROBERT and G. CASELLA. The metropolis—hastings algorithm. In *Monte Carlo Statistical Methods*, pages 231–283. Springer, 1999.