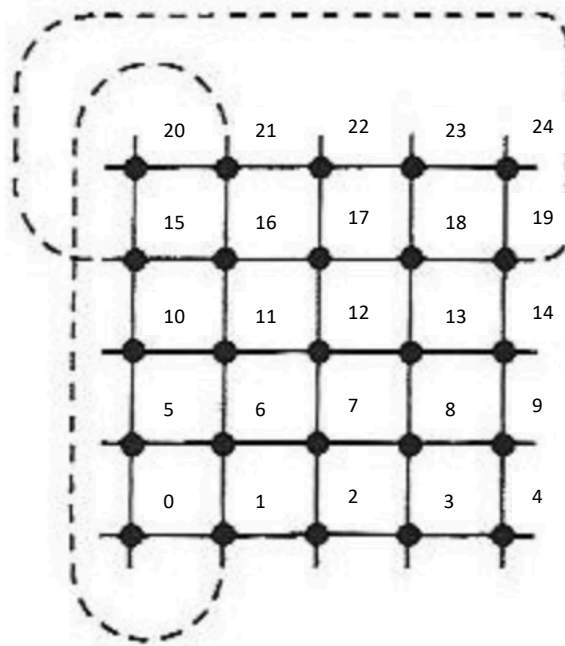


Implementação computacional do modelo de Ising.

Visando uma implementação um pouco mais otimizada do modelo de Ising do que um programador sem experiência na área faria, abaixo você será guiado em formas mais eficientes e gerais de representar modelos em redes.

Iremos considerar o modelo de Ising numa rede quadrada bidimensional com $L \times L$ sítios. A posição geométrica de cada sítio, ou seja, suas coordenadas x e y , pelo menos em nossa abordagem inicial, não será necessária. Assim, é mais conveniente e eficiente que cada sítio seja indexado por apenas um número inteiro. A convenção a ser adotada aqui é a representada na figura abaixo para uma rede 5x5.



De posse dessa convenção, o estado do sistema pode ser representado por um array unidimensional com $N = L^2$ elementos. Cada elemento recebe o valor ± 1 , indicando o valor da variável de spin do sítio correspondente. Uma sugestão é nomear esse array de S .

Uma vez definido o estado do sistema, devemos ser capazes de calcular a energia deste estado. Por definição, a energia é dada por

$$E = - \sum_{(i,j)} s_i s_j - B \sum_i s_i.$$

Por simplicidade vamos considerar apenas o caso $B = 0$. Nesta definição, o símbolo (i,j) representa os primeiros vizinhos na rede quadrada. Assim, por exemplo, o sítio 13 tem como primeiros vizinhos os sítios 14, 18, 12 e 8. Uma pergunta que cabe neste ponto é como trataremos os spins nas bordas. Quais seriam os vizinhos do sítio 4, por exemplo. Uma vez que estamos interessados, em geral, no comportamento do sistema no limite termodinâmico, ou seja, de um sistema muito grande, suas bordas devem ser irrelevantes. Assim, para minimizarmos os efeitos das fronteiras (bordas) da rede sobre

as propriedades do sistema, é comum usar condições de contorno periódicas. Neste tipo de tratamento das fronteiras, consideraremos que o sítio 4 tem como vizinho à esquerda o sítio 0 e como vizinho abaixo, o sítio 24. É como se transformássemos essa rede quadrada em um toro, unindo suas extremidades. Uma forma de guardarmos de forma adequada essas informações é utilizar uma tabela de vizinhos. Há diversas formas de fazermos isso. Aqui, iremos usar um array bidimensional onde o primeiro elemento representará o sítio da rede enquanto o segundo representará qual dos vizinhos estamos considerando. Utilizaremos o índice 0 para o vizinho à direita, o 1 para o vizinho acima, o 2 para o vizinho à esquerda e o 3 para o vizinho abaixo. Os sítios da linha inferior têm índice, k , menor que L . Já os da lateral esquerda são aqueles para os quais o resto da divisão inteira de k por L é zero. Os da lateral direita são aqueles para os quais o resto da divisão inteira de $k + 1$ por L é zero e os da linha superior são aquelas para os quais $k > N - 1 - L$. Podemos, então, usar o seguinte pseudocódigo:

```
Para  $k = 0, \dots, N - 1$  faça
     $viz(k, 0) \leftarrow k + 1$ 
    se  $(k + 1 \bmod L = 0)$   $viz(k, 0) \leftarrow k + 1 - L$ 
     $viz(k, 1) \leftarrow k + L$ 
    se  $(k > N - 1 - L)$   $viz(k, 1) \leftarrow k + L - N$ 
     $viz(k, 2) \leftarrow k - 1$ 
    se  $(k \bmod L = 0)$   $viz(k, 2) \leftarrow k + L - 1$ 
     $viz(k, 3) \leftarrow k - L$ 
    se  $(k < L)$   $viz(k, 3) \leftarrow k + N - L$ 
```

Uma vez que definimos a rede, os vizinhos e as variáveis de spin, podemos calcular a energia de qualquer configuração. Perceba, no entanto, que para contar cada par de spins apenas uma vez podemos considerar apenas os vizinhos à direita (0) e acima (1) de cada sítio. Então, um pseudocódigo do cálculo da energia fica:

```
 $E \leftarrow 0$ 
Para  $i = 0, \dots, N - 1$  faça
     $h \leftarrow s(viz(i, 0)) + s(viz(i, 1))$ 
     $E \leftarrow E - s(i) * h$ 
```

Neste ponto você deve estar se perguntando: “se precisamos de apenas de 2 dos 4 vizinhos, por que nos preocupamos em definir os 4 vizinhos anteriormente?” A definição dos 4 vizinhos se justifica pelo fato de o cálculo da energia total envolver um loop de tamanho N . Mas, ao flipar (mudar a direção) apenas um spin, podemos calcular a diferença de energia considerando apenas os 4 vizinhos. Assim, se fliparmos o spin do sítio i , ou seja, se fizermos $s'_i = -s_i$, a energia total do sistema após o flip, E_f , pode ser obtida da energia antes de fliparmos o spin, E_i , fazendo

$$E_f = E_i + 2 * s_i * \left(\sum_j s_j \right) = E_i - 2 * s'_i * \left(\sum_j s_j \right).$$

Essa última expressão mostra que as energias permitidas para o modelo de Ising estão no intervalo de $-2N$ a $2N$ em passos de 4, sendo que os estados de energia $-2N + 4$ e $2N - 4$ não são permitidos. Verifique essas afirmações.

Referências:

- M. Newman, G. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Claredon Press (1999)
- D. Landau, K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", Cambridge University Press (2014)
- W. Krauth, "Statistical Mechanics: Algorithms and Computations" Oxford University Press (2006)