SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO DO PROBLEMA DE ISING TRIDIMENSIONAL

Guilherme M. Lopes, Luís F. M. Franco*.

Resumo

O modelo de Ising, tópico clássico da mecânica estatística, é um processo estocástico que permite a obtenção direta de dados termodinâmicos relacionados à criticalidade e transição de fases. O presente trabalho objetivou elaborar um código que realizasse a simulação computacional do caso tridimensional de tal modelo visando, além da obtenção direta destas propriedades, a geração de estruturas que mimetizam a configuração de rochas porosas, unindo-as, a posteriori, a trabalhos na área de fluidodinâmica computacional (CFD) para o estudo do escoamento nestes meios.

Palavras-chave: Ising, simulação, Monte Carlo, estocástico.

Introdução

O modelo de Ising é um problema clássico de mecânica estatística que permite o estudo de fenômenos como criticalidade e transição de fases. Resolvido para um sistema unidimensional por Ising (1925) e bidimensionalmente por Onsager (1943), pela dificuldade inerente aos problemas de muitos corpos, o problema tridimensional não possui solução analítica. Assim, resta a simulação computacional como única alternativa para investigar este caso.

Proposto inicialmente para descrever a magnetização de determinados materiais quando submetidos a baixas temperaturas, o modelo pode também ser aplicado em problemas termodinâmicos de transição de fases, sendo que o agrupamento dos dipolos magnéticos em regiões positivas e negativas é comparável visualmente a conformações adquiridas por rochas porosas.

A análise estatística dos dados obtidos durante a simulação permite averiguar a confiabilidade do algoritmo. A magnetização, susceptibilidade, energia interna e capacidade térmica, são calculadas respectivamente

$$M = \langle M(\sigma) \rangle$$

$$X = \frac{1}{k_B T} \{ \langle M(\sigma)^2 \rangle - M^2 \}$$

$$U = \langle E(\sigma) \rangle$$

$$C = \frac{1}{k_B T^2} \{ \langle U(\sigma)^2 \rangle - U^2 \}$$

Resultados e Discussão

Para a simulação, foi considerada a configuração inicial do sistema como xadrez, a qual corresponde à maior energia, e o programa foi executado até que a equilíbrio fosse atingida, ou seja, até que a energia permanecesse em uma determinada faixa de oscilação.

Figura 1. Propriedades termodinâmicas e magnéticas

Para o cálculo das propriedades, somente a segunda metade dos dados foram utilizadas uma vez que estas correspondem aos dados da equilíbrio. Simulações foram feitas para um sistema de 10^3 spins, utilizando $4 \cdot 10^7$ passos para uma faixa de baixas temperaturas.

A partir da análise dos dados da Figura 1 observou-se uma temperatura crítica com $\beta_c = 0,224$. Este resultado mostrou-se condizente com Cosme (2013), $\beta_c = 0,222$. Entretanto, nota-se visualmente que algumas simulações destoaram do comportamento esperado, tal fato justificava-se pela ocorrência de estados não estáveis.

Para as estruturas geradas, na Figura 2 nota-se a separação dos dipolos para um sistema com 24^3 spins, simulado para $4 \cdot 10^7$ passos em condição subcrítica.

Figura 2. (a) Estrutura inicial - (b) Estrutura final a 4 K.

Conclusões

Dessa forma, conclui-se que o algoritmo apresentou resultados satisfatórios. As estruturas geradas para o caso supercrítico podem ser futuramente aplicadas para o estudo em escoamento de meios porosos. Ressalta-se que as discrepâncias quanto a energia interna devem ser investigadas mais detalhadamente.

Agradecimentos

Agradeço ao PIBIC pelo financiamento da bolsa, à Faculdade de Engenharia Química da Unicamp, mais pormenorizadamente, aos pesquisadores do LESC (Laboratório de Engenharia de Sistemas Complexos) pelo suporte técnico e computacional.

COSME, Catarina Martins. **Monte Carlo methods in critical systems**. 2013. 71 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Departamento de Física e Astronomia, Universidade de Porto, Porto, 2014. Cap. 1.

FERRENBURG, A. M.; XU, J.; LANDAU, D. P., **Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model**, *Phys. Rev. E*, 97, 043301, 2018

SALINAS, Sílvia R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2. ed. São Paulo: Usp, 2013. 464 p.

TOMÉ, Tânia; OLIVEIRA, Mário José de. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**. São Paulo: Usp, 2001. 242 p.