



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA – UESB**

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E EXATAS – DQE**

**COLEGIADO DO CURSO DE QUÍMICA**

**CURSO DE BACHARELADO EM QUÍMICA**

**Manoel Alves Machado Filho**

**Uma abordagem computacional via Método de Monte  
Carlo para o estudo de sistemas magnéticos pelo  
Modelo de Ising**

**Uma abordagem computacional via Método de Monte  
Carlo para o estudo de sistemas magnéticos pelo  
Modelo de Ising**

Manoel Alves Machado Filho

Orientador: Nemésio Matos Oliveira Neto

Relatório de Estágio apresentado ao Departamento de Química e Exatas da  
Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia como requisito parcial para  
obtenção do diploma de Bacharel em Química.

Dezembro de 2009

## COMISSÃO EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Baraquízio Braga do Nascimento Junior  
Professor Adjunto do DQE da UESB - Coordenador de estágio

---

Prof. Dr. Nemésio Matos Oliveira Neto  
Professor Adjunto do DQE da UESB - Orientador

---

Prof. Dr. Marcos de Almeida Bezerra  
Professor Adjunto do DQE da UESB - Prof. Avaliador

Aprovado em: \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_

## **Apresentação do Grupo de Pesquisa**

O presente trabalho foi realizado no Grupo de Estudo em Sistemas Complexos liderado pelo professor Dr. Nemésio Matos de Oliveira Neto da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia. O Grupo é formado atualmente por 3 pesquisadores e 5 alunos distribuídos em duas linhas de pesquisas principais quais sejam: Simulação de Sistemas Biológicos e Simulações de Sistemas Magnéticos. Atualmente as pesquisas na parte de simulação do grupo são desenvolvidas de forma descentralizada em computadores pessoais dos integrantes devido à falta de estrutura disponibilizada pela Universidade. No entanto, a maior parte das simulações presentes neste trabalho foram realizadas em um computador base disponibilizado recentemente pelo líder do grupo no Laboratório de Física Geral II situado no 2º andar do módulo de Laboratórios do Campus de Jequié da Universidade.

A linha de pesquisa de Simulação de Sistemas Magnéticos do grupo tem a seguinte descrição de acordo com seu cadastro no Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico:

Objetivos: Estudo de propriedades físicas (calor específico, magnetização, função de espalhamento de nêutron, dentre outras) de sistemas magnéticos descritos, principalmente, pelo Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico e anisotrópico, sobre redes regulares e não-regulares. As propriedades físicas foram obtidas via simulações computacionais utilizando a Técnica de Monte Carlo com as dinâmicas de Metrópolis, Wolff, Super-Relaxamento, bem como as técnicas de integração de Runge-Kutta e Predictor-Corretor.

Palavras Chaves: Dinâmica de Spins; Modelo Heisenberg; Monte Carlo

Pesquisadores:

Candido Requião Ferreira  
Nemesio Matos de Oliveira Neto

Estudantes:

Luiz Fernando Silva Ferreira  
Manoel Alves Machado Filho

Árvore do conhecimento:

Ciências Exatas e da Terra; Física; Física da Matéria Condensada; Materiais Magnéticos e Propriedades Magnéticas;

Setores de aplicação:

Desenvolvimento de novos materiais  
Educação superior

# Ficha Catalográfica

JEQUIÉ - BA

2009

## FICHA CATALOGRÁFICA

Machado Filho, Manoel Alves

Uma abordagem computacional via Método de Monte Carlo para o estudo de sistemas magnéticos pelo Modelo de Ising. Departamento de Química e Exatas, Colegiado do Curso de Química, UESB, 2009.

Relatório de Estágio: Bacharelado em Química

Orientador: Dr. Nemésio Matos Oliveira Neto

1. Método de Monte Carlo
2. Modelo de Ising
3. Processo Estocástico
4. Números Aleatórios
5. Mecânica estatística

## **Agradecimentos**

Gostaria de agradecer primeiramente ao Deus em quem confio e que me guiou fielmente por todos os caminhos traçados até aqui, a fim de me proporcionar essa conquista.

A minha Mãe, por toda a sua paciência, carinho, amor e apoio incondicional durante toda a minha jornada na graduação e em especial nesse último período do estágio. Mãe, sem você eu jamais teria chegado até aqui. Eu te amo!

A toda a minha família, que sempre esteve disposta a me ajudar e, constantemente na torcida pela minha vitória. Em especial a Tia Lucinha, uma segunda mãe, por todo o seu apoio e empenho incondicional em me ajudar sempre que necessário.

A minha namorada, pelo apoio e pela disponibilidade a mim dedicada sempre que desejada ou necessitada. Obrigado “preta”, por toda a sua paciência e dedicação.

Aos meus amigos e colegas, que se fizeram presente durante o período de “lutas” travadas no estágio e na graduação de uma forma geral, em especial a Joedson e Luciano pelo auxílio direto na produção deste trabalho. A todos vocês meus amigos, essa conquista é nossa!

Ao meu orientador, Nemésio, pelo seu incentivo e apoio durante os últimos períodos da graduação, principalmente durante o estágio que foi realizado em seu recém-formado grupo de pesquisa. Cara, o seu espírito de trabalhar, produzir conhecimento, fazer ciência e formar opiniões é admirável!

Ao supervisor do estágio e amigo da turma Prof. Baraquízio, pelo seu empenho pessoal em dar ao curso de Bacharelado em Química um formato estruturado e organizado sempre pensando na qualidade dos profissionais que seriam formados. Professor, você foi fundamental para o sucesso dessa primeira turma.

## Sumário

<b>Lista de Figuras</b> .....	7
<b>Resumo</b> .....	8
<b>1. Introdução</b> .....	9
<b>1.1. Simulação Computacional</b> .....	9
<b>1.2. Método de Monte Carlo (MMC)</b> .....	11
<b>1.2.1. Cálculo de Áreas</b> .....	12
<b>1.2.2. Cinética Química</b> .....	13
<b>1.2.3. MMC para sistemas magnéticos</b> .....	15
<b>2. O modelo de Ising</b> .....	18
<b>3. Objetivo</b> .....	20
<b>3.2. Geral</b> .....	20
<b>3.3. Específico</b> .....	20
<b>4. Atividades Realizadas</b> .....	21
<b>5. Resultados e Discussões</b> .....	22
<b>6. Considerações Finais</b> .....	29
<b>7. Bibliografia</b> .....	30
<b>8. Anexos e Apêndices</b> .....	33
<b>8.1. Anexos: Publicações</b> .....	33
<b>8.2. Apêndices: Códigos desenvolvidos em linguagem FORTRAN 90</b> .....	35

## Lista de Figuras

Figura 1: Modelo esquemático da relação entre as três vias para abordagem de problemas da ciência contemporânea (COUTINHO, 2000).....	10
Figura 2. (a) Elipse em um quadrado de aresta $a$ e (b) distribuição de pontos aleatórios e homogêneos na superfície do quadrado (ANGELOTTI et al, 2008).....	12
Figura 3. Várias elipses distribuídas em uma superfície quadrada com aresta $a$ (ANGELOTTI et al, 2008).....	13
Figura 4: Energia ( $E$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de número de amostras ( $N$ ), para o caso 1D.....	24
Figura 5: Magnetização ( $m$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de temperatura ( $T$ ), para o caso 1D.....	25
Figura 6: Energia ( $E$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de temperatura ( $T$ ), para o caso 1D.....	25
Figura 7: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $teta$ ), para diferentes valores de campo externo com suas respectivas curvas obtidas analiticamente, para o caso 1D.....	26
Figura 8: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $teta$ ), para diferentes valores de número de amostras, para o caso 1D.....	27
Figura 9: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $teta$ ), para diferentes valores de campo externo, para o caso 2D.....	28

## **Resumo**

Apresentamos neste trabalho uma abordagem geral acerca de uma técnica de simulação computacional conhecida como Método de Monte Carlo (MMC), que foi utilizada para estudar sistemas magnéticos descritos pelo Modelo de Ising. Sempre que possível, comparamos os valores das propriedades de interesse obtidas das simulações com os resultados analíticos e/ou experimentais encontrados na literatura. Um algoritmo foi desenvolvido utilizando o MMC aliado à dinâmica proposta por Metrópolis, o que se constituiu uma poderosa ferramenta para o estudo de sistemas desse tipo. Programas próprios foram escritos em linguagem FORTRAN 90 para se implementar o algoritmo no estudo dos modelos propostos. Os estudos apresentados neste trabalho objetivaram, fundamentalmente, desenvolver uma compreensão adequada do uso do MMC e da dinâmica de Metrópolis para sua aplicação no tratamento de sistemas químicos complexos de interesse em trabalhos futuro de pós-graduação.

# 1. Introdução

Métodos de Química Teórica têm sido amplamente utilizados para estudar propriedades de sistemas físicos e químicos (FREITAS 1999). O ponto de partida nestes estudos é a proposição de modelos para representar o sistema real. Estes modelos, em linguagem matemática, são expressos por equações integrais e diferenciais cuja solução por métodos analíticos, em geral, não são triviais. Em linguagem técnica, os modelos propostos utilizam métodos de Mecânica Quântica para formular a representação atomística e métodos de Mecânica Estatística clássica para realizar a transposição para a Termodinâmica de sistemas macroscópicos (MQUARRIE, 1976; CHANDLER, 1987). As equações matemáticas resultantes são, em geral, muito complexas e envolvem um grande número de variáveis e parâmetros. Portanto, a utilização de metodologias numéricas é imprescindível. Em geral, nas abordagens numéricas são utilizados, por exemplo, parâmetros, funções de base, que caracterizam o grau de sofisticação pretendido para a solução do problema. Logo, em função da qualidade do modelo e da solução numérica das equações resultantes, podem-se obter informações qualitativas e quantitativas de grande relevância para a análise do sistema real.

## 1.1. Simulação Computacional

Denomina-se Simulação Computacional à proposição de modelos e solução das equações resultantes dele, utilizando-se de métodos numéricos e várias técnicas computacionais implementadas e executadas em um computador. Com a evolução recente dos computadores e programas, os experimentos computacionais estão sendo amplamente utilizados para estudar problemas básicos e aplicados em áreas como Química, Física, Biologia, etc. Detalhes ao nível microscópico de sistemas complexos que estão na interface destas ciências têm sido crescentemente abordados utilizando computadores. Também o desenvolvimento de recursos computacionais gráficos tem sido de grande valia para a ‘observação’ dos processos ao nível molecular.

Os experimentos computacionais têm um papel importante na ciência contemporânea por ser uma terceira via na abordagem de problemas, tão importante quanto às previsões teóricas e os resultados experimentais (COUTINHO, 2000).

Realizando comparações dos resultados do modelo obtidos da Simulação com resultados experimentais podemos testar o modelo. Comparando os resultados do modelo com as previsões teóricas temos uma via de teste da teoria. Essa importante relação foi esquematizada na Figura 1.

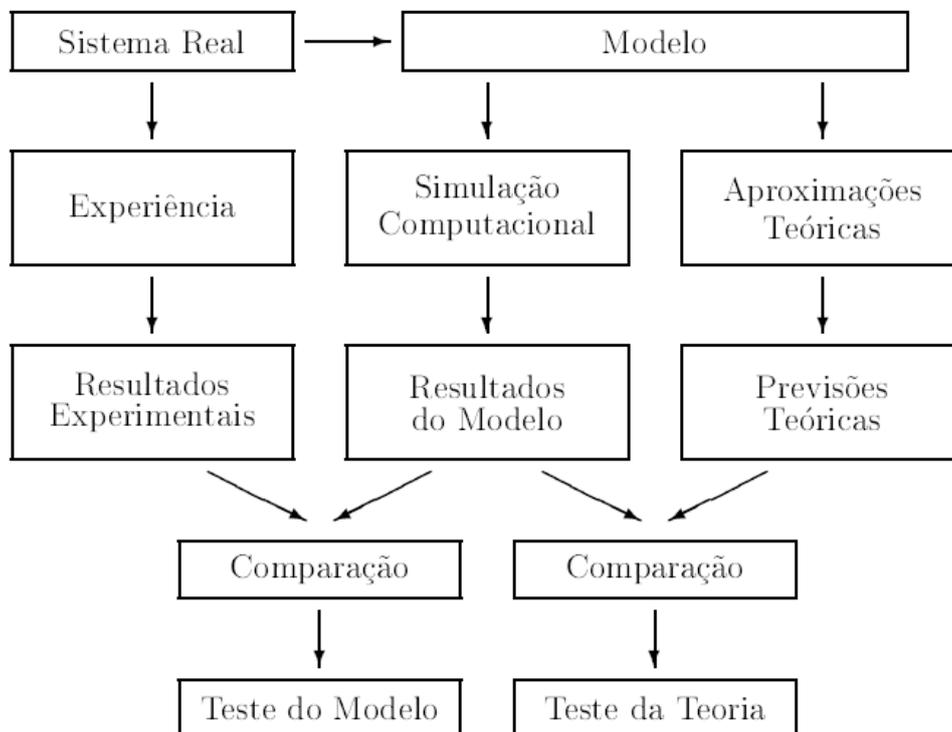


Figura 1: Modelo esquemático da relação entre as três vias para abordagem de problemas da ciência contemporânea (COUTINHO, 2000).

Em linhas gerais, os experimentos computacionais possibilitam a realização de estudos onde teoria e experimento são complementares para elucidar problemas. Em termos práticos, a utilização de metodologias de simulação computacional possibilita que sistemas físicos e/ou químicos de grande complexidade sejam explorados com ferramentas da Química Teórica. Assim, o desenvolvimento de métodos adequados de Simulação Computacional possibilita o surgimento de novas oportunidades para a interação entre pesquisa básica e aplicada, viabilizando colaborações para o desenvolvimento de novos produtos, materiais e tecnologias.

Dentre os principais métodos que são utilizados como técnica de simulações computacionais podemos citar a Dinâmica Molecular (Bielschowsky et al, 1994), onde são implementados os processos determinísticos, que a partir de potenciais de interação, as forças que atuam sobre as partículas do sistema podem ser calculadas e, as equações do movimento podem ser resolvidas para um dado intervalo de tempo. Na Dinâmica Molecular, as partículas se movem em trajetórias geradas a partir da integração das

equações de movimento, e as propriedades observáveis são obtidas através de médias temporais sobre as suas trajetórias.

Outra abordagem se dá pelo Método de Monte Carlo (MMC) onde um processo estocástico para gerar configurações é implementado. Neste método, posições de partículas sucessivas são selecionadas aleatoriamente e novas configurações são geradas, de tal forma a satisfazerem a distribuição de probabilidades de Boltzmann-Gibbs.

Neste trabalho utilizaremos a técnica do MMC, que será introduzida na próxima seção, para obtermos as propriedades termodinâmicas de sistemas físicos descritos pelo modelo de Ising.

## **1.2. Método de Monte Carlo (MMC)**

O Método de Monte Carlo tem sido assim denominado em homenagem ao caráter aleatório proveniente dos jogos de roleta de Monte Carlo no Principado de Mônaco. Existem registros isolados de sua utilização na segunda metade do século XIX, quando foram realizadas experiências empregando informações causuísticas (Pillana, 2002). Porém, seu nome e, principalmente, o estabelecimento de um desenvolvimento sistemático do método data de 1944, durante a Segunda Guerra Mundial, época em que foi utilizado como ferramenta de pesquisa para o desenvolvimento da bomba atômica. A simplicidade de seus algoritmos e eficiência na obtenção de resultados em condições extremamente difíceis (i.e. manipulação de grande quantidade de dados numéricos) justifica sua utilização em diversas áreas do conhecimento, como economia, física, química, medicina, entre outras (Woller, 1996).

Atualmente, a denominação “Método de Monte Carlo” tornou-se uma expressão geral associada ao uso de números aleatórios e estatística de probabilidade. Para que uma simulação de Monte Carlo esteja presente em um estudo basta que este faça uso de números aleatórios na verificação de algum problema. Ao estimar a probabilidade de ocorrência de um evento, pode-se simular um número independente de amostras do evento e computar a proporção de vezes em que o mesmo ocorre. No que se segue, daremos duas aplicações de MMC, uma no cálculo de áreas e outra em sistemas magnéticos.

### 1.2.1. Cálculo de Áreas

Um exemplo muito simples pode ser dado considerando-se a Figura 2. Na Figura 2a encontramos um quadrado de aresta  $a$  e uma elipse. A área do quadrado pode ser facilmente determinada como  $\text{Área}=a^2$ . Embora a expressão para a área da elipse seja trivial, podemos determiná-la utilizando o MMC como um experimento numérico. Para isso, distribuimos aleatória e homogeneamente um conjunto arbitrário de  $N$  pontos dentro da área do quadrado (Figura 1b). Contamos quantos pontos estão dentro da elipse ( $n_e$ ), quantos estão fora ( $n_o$ ) e, conseqüentemente,  $N= n_e+ n_o$ . A probabilidade de que um determinado ponto tenha caído dentro da área da elipse é, portanto,  $n_e/N$ . A área da elipse será determinada como sendo a probabilidade de encontrarmos pontos dentro da elipse multiplicados pela área do quadrado, ou seja,  $\text{Área}(\text{elipse})=a^2 \cdot n_e/N$ . A estimativa da área da elipse possui um erro em sua determinação que pode ser minimizado com o aumento do número de pontos distribuídos dentro do quadrado. Quando o número de pontos tende a infinito, a área determinada tenderá ao valor exato.

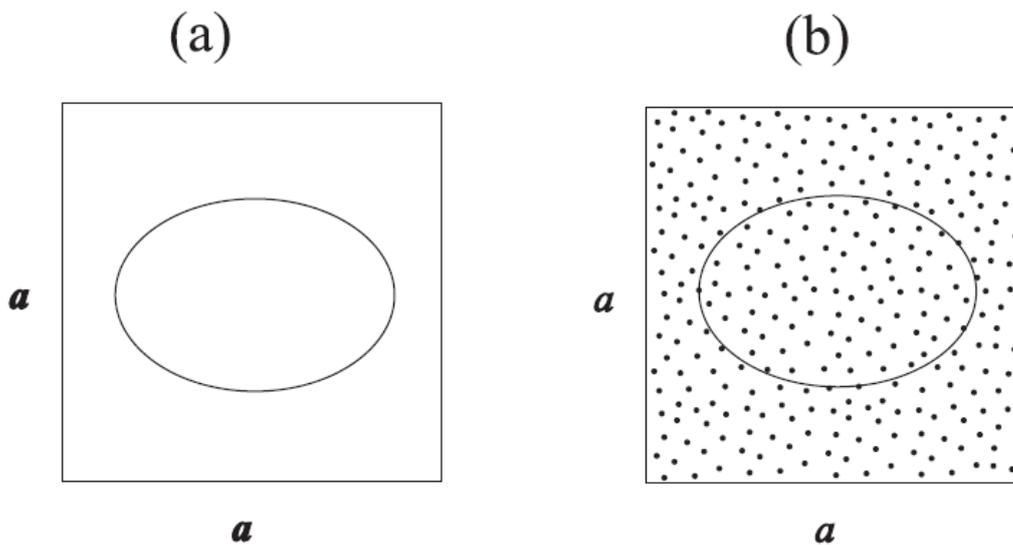
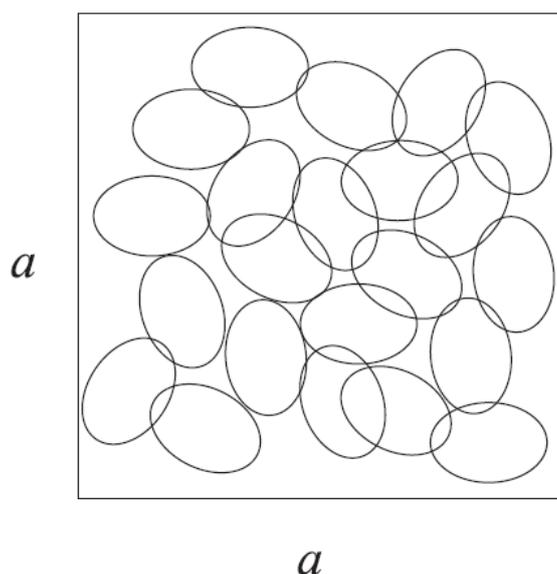


Figura 2. (a) Elipse em um quadrado de aresta  $a$  e (b) distribuição de pontos aleatórios e homogêneos na superfície do quadrado (ANGELOTTI et al, 2008).

Isto é um procedimento de Monte Carlo. Certamente que a área da elipse poderia ter sido determinada de forma muito mais precisa, rápida e direta utilizando-se alternativas de aproximação ou por uma fórmula analítica. Neste caso, o MMC poderia ser utilizado com o intuito de avaliar sua precisão numérica. Porém, se uma figura geométrica muito mais complicada estivesse inserida no quadrado ou se tivéssemos

várias elipses, como mostrado na Figura 3, e estivéssemos interessados em determinar não só a área de cada elipse, mas também a área de possíveis sobreposições das mesmas, o MMC tornar-se-ia uma alternativa muito atrativa a ser considerada. Para resolver este problema significativamente mais complicado, aplicaríamos a mesma distribuição de pontos na superfície do quadrado e seriam contados os pontos que caíssem nas regiões de interesse. A área de cada região específica seria a área do quadrado multiplicada pela probabilidade de encontrar pontos naquela região, ou seja,  $a^2 \cdot n_x/N$ .



*Figura 3. Várias elipses distribuídas em uma superfície quadrada com aresta  $a$  (ANGELOTTI et al, 2008).*

Este exemplo permite caracterizar a técnica de Monte Carlo como uma técnica simples desde que tenhamos um mecanismo confiável de gerar números aleatórios e possamos repetir o experimento um número considerável de vezes para minimizar o erro na estimativa.

### **1.2.2. Cinética Química**

O método de Monte Carlo pode ser adaptado para descrever inúmeros sistemas, desde partículas elementares até dinâmicas de galáxias; a particularidade para cada sistema dependerá das regras impostas aos sorteios. Atualmente já são simulados e estudados vários sistemas que poderiam descrever reações químicas de primeira e

segunda ordem e uma maneira possível de resolver as equações da cinética química é com o MMC.

O cálculo das propriedades macroscópicas de um sistema de  $N$  partículas, para  $N$  muito grande (por ex.,  $N \sim 10^{23}$ ), pode ser resolvido introduzindo-se valores médios. Por ex., em um gás, ao invés de se calcular a energia de cada partícula individualmente, calcula-se a energia média dessas  $N$  partículas (BRAGA, 2002). Para que essas médias não dependam do tempo é necessário que o sistema (fechado) esteja em equilíbrio termodinâmico.

O conceito de equilíbrio termodinâmico pode ser entendido com o seguinte exemplo: considere um gás **A** ocupando o compartimento esquerdo de um cilindro fechado, e um gás **B** ocupando o compartimento direito; ambos ligados por um êmbolo móvel. Considere também que os gases estão à mesma pressão e temperatura e ocupam o mesmo volume, de tal maneira que o êmbolo encontra-se inicialmente no centro do cilindro. Se considerarmos que o êmbolo é empurrado para a esquerda inicialmente, o gás **A** estará sob maior pressão. Ao se soltar o êmbolo, o mesmo executará um movimento oscilatório cuja amplitude de deslocamento diminui à medida que as pressões dos dois lados do cilindro tendem a se igualar. Se acompanharmos o movimento do êmbolo a olho nu, chegará um momento no qual não será mais possível observar esse deslocamento. Nesse instante, considera-se que o equilíbrio foi alcançado.

Como a pressão é o efeito macroscópico das colisões aleatórias das partículas dos gases com as paredes do cilindro e do êmbolo (MOORE, 2000), mesmo que o sistema tenha atingido o equilíbrio, em alguns instantes o número de colisões do lado **A** será maior que do lado **B**, e em outros instantes ocorrerá o contrário. Isso causa pequenos deslocamentos no êmbolo em torno da sua posição de equilíbrio. Esses pequenos deslocamentos são as flutuações do sistema e estão relacionados às frequências das colisões com o êmbolo e à amplitude de oscilação deste. No limite macroscópico essas flutuações são desprezíveis.

O intervalo de tempo que o sistema leva para atingir o equilíbrio termodinâmico é chamado de tempo de relaxação,  $\tau$ . Esse parâmetro depende da quantidade de partículas do sistema e do tipo de interação entre as mesmas.

Para a compreensão do conceito de equilíbrio, utilizaremos o Método de Monte Carlo e detalharemos a simulação da reação do tipo  $A \leftrightarrow B \rightarrow C$ .

Imagine que as moléculas, dentro de seus respectivos compartimentos, sejam numeradas. Inicialmente, elas se encontram todas no compartimento A (ou estados que

caracterizam suas propriedades, em particular, químicas). Os compartimentos B e C estão vazios. Faz-se, então, o primeiro sorteio. Se existir uma molécula em A com o número igual ao que foi sorteado (no primeiro sorteio sempre existirá), a mesma vai para o compartimento B; quimicamente isso significa que A se transformou em B. Realiza-se um novo sorteio. Desta vez, procura-se em B uma molécula que corresponda ao número sorteado. Se houver, essa molécula tem 50% de chance (ou qualquer probabilidade que tenhamos definido) de ir para C (transforma-se em C) e 50% de chance de voltar para A (transforma-se outra vez em A). Essa decisão pode ser tomada lançando-se uma moeda, por ex., “cara” vai para C e “coroa” volta para A. Quando a molécula correspondente ao número sorteado não existir no compartimento, nada acontece. Para o compartimento C não é necessário realizar nenhum sorteio, uma vez que a reação segue irreversivelmente para C. Segue o sorteio e, desta vez, voltado novamente para as moléculas do compartimento A, iniciando um novo passo (LÓPEZ-CASTILLO, 2000).

O método de sorteio pode ser efetuado de forma automática, com o auxílio de microcomputador. O processo de sorteio deve ser repetido até que o equilíbrio seja atingido, ou seja, a variação do valor médio de ocupação nos compartimentos seja mínima ou nula. Neste caso, o equilíbrio é atingido quando todas as moléculas estiverem “aprisionadas” no compartimento C (ou que A e B tenham se transformado quimicamente em C).

A maioria das equações de cinética química de primeira e segunda ordem geralmente apresentam soluções analíticas e assim podemos comparar os resultados obtidos de simulações com valores analíticos calculados. Ajustando corretamente o número de sorteios com o tempo real do problema, podemos utilizar sem maiores dificuldades as simulações de Monte Carlo para tratar os problemas de cinética química.

### **1.2.3. MMC para sistemas magnéticos**

Vamos introduzir a técnica do MMC no contexto dos sistemas magnéticos para mostrar as utilidades e vantagens de tal técnica no estudo de um sistema físico. Para tal propósito vamos considerar um sistema formado por  $N$  partículas com momentos magnéticos intrínsecos (spin). Assim, cada configuração do sistema, denotada por  $\{S_i\}$ , é obtida fornecendo o valor de cada spin  $s_i$ , com  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ .

Uma maneira de determinar as propriedades termodinâmicas do sistema é através de sua função partição, com a qual podemos realizar a conexão entre as

propriedades macroscópicas e microscópicas do sistema. Por exemplo, a magnetização, pode ser calculada como:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T) m(\{S_i\})$$

Sendo a soma realizada sobre todas as configurações acessíveis  $\{S_i\}$ ;  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $m(\{S_i\})$  e  $E(\{S_i\})$  são, respectivamente a magnetização e a energia do sistema na configuração  $\{S_i\}$  e  $Z$  é a função de partição dada por

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-E(\{S_i\})/k_B T).$$

A dificuldade logo aparece quando percebemos que para se obter tais propriedades a partir da função de partição teremos que realizar uma soma sobre todas as configurações acessíveis ao sistema. Para sistemas grandes (limite termodinâmico, i.e.  $N \rightarrow \infty$ ) a realização de tal soma se torna impraticável, pois o número de configurações aumenta consideravelmente com  $N$  (nº de spins). Por exemplo, num caso bem simples onde o spin possui 2 graus de liberdade (Modelo de Ising) numa rede quadrada com  $N = 32$  spin, temos  $2^{32 \times 32} \sim 10^{300}$  configurações distintas acessíveis ao sistema (FAISSAL, 2003).

No MMC ao sistema em estudo é permitido fazer em cada instante de tempo transição de uma dada configuração para uma nova configuração que pode ser igual ou não a anterior (OLIVEIRA-NETO, 2006). Como queremos obter as propriedades de equilíbrio (termodinâmico), tais probabilidades de transições entre configurações bem como as probabilidades associadas a cada configuração, devem satisfazer a condição de balanço detalhado.

Uma maneira de resolver este problema é realizando a soma apenas sobre as configurações de maior peso do sistema (amostragem por importância), sendo esta a essência do MMC. Tal método gera aleatoriamente uma série de configurações de equilíbrio, e independentes a uma dada temperatura ( $T$ ); como cada configuração  $\{S_i\}_T$  não depende da anterior, esta seqüência de configurações é uma cadeia de Markov. Em um processo Markoviano as condições finais do processo não dependem das condições prévias. Partindo-se de um sistema inicial  $c$ , o próximo estado na cadeia é obtido gerando-se randomicamente uma nova configuração  $c'$ . Estes dois estados estão ligados por uma probabilidade de transição, que é a probabilidade do sistema passar da

configuração  $c$  para a nova configuração  $c'$  que deve satisfazer a condição de balanço detalhado (SCHERER, 2005):

$$P(c \rightarrow c')P(c) = P(c' \rightarrow c)P(c'),$$

onde  $c'$  e  $c$  são duas configurações do sistema,  $P(c \rightarrow c')$  é a probabilidade de transição de  $c$  para  $c'$  (similar para  $P(c' \rightarrow c)$ ) e  $P(c)$  é a probabilidade associada à configuração  $c$  (similar para  $P(c')$ ).

## 2. O modelo de Ising

Proposto em 1920 a Ernest Ising por seu orientador de doutorado, o depois chamado modelo de Ising tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. A idéia central do modelo era a interação entre os momentos magnéticos vizinhos localizados em uma rede. Um modelo inicial unidimensional considera uma rede linear de  $N$  sítios, de momentos magnéticos  $S_i$ , com  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ , cuja interação com seus primeiros vizinhos  $S_{i+1}$  e  $S_{i-1}$ , é descrita pela Hamiltoniana na forma (LÍBERO, 2000):

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N S_i (S_{i+1} + S_{i-1}) - B \sum_{i=1}^N S_i$$

Sendo  $S_i = \pm 1$  e o termo  $J$ , chamado de termo de troca.  $J > 0$  favorecerá o alinhamento paralelo dos momentos e haverá uma tendência a formar uma fase ferromagnética. No caso em que  $J$  assumir valores negativos, o alinhamento antiparalelo dos spins será favorecido tendenciando a formação de uma fase antiferromagnética.

Para  $J > 0$  o alinhamento paralelo dos spins favorecido sofre competição com a desordem imposta pelo aumento da temperatura. Desta competição era de se esperar que abaixo de uma determinada temperatura crítica houvesse ordenamento de toda a cadeia. No entanto, esse modelo, unidimensional, não apresenta nenhuma transição para uma fase ordenada em qualquer temperatura diferente de zero.

Peierls, em 1936, foi o primeiro a demonstrar que o modelo de Ising em duas dimensões apresenta transição de fase em temperatura não nula, ou seja, a ordem de longo alcance que em uma cadeia linear de spins só era possível em temperatura nula persistia mesmo aumentando-se levemente a temperatura até uma dada temperatura crítica, acima da qual a ordem do sistema era quebrada. A partir desse momento o modelo criou certa euforia nos cientistas da época, pois agora ele dava esperanças de descrever uma transição de fase magnética.

A Hamiltoniana para o modelo de Ising bidimensional é da forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - B \sum_{i=1} S_i$$

onde  $S_i = \pm 1$ ,  $J > 0$ , e  $\langle \rangle$  indica que a soma é feita sobre os primeiros vizinhos.

Além do ferromagnetismo, o modelo de Ising também pode descrever outros sistemas físicos, como o gás de rede e a liga binária (LÍBERO, 2000).

Em 1952 Yang e Lee usaram o termo gás de rede para descrever um modelo em que  $M$  átomos ocupam aleatoriamente os  $N > M$  sítios de uma rede. A cada par de sítios vizinhos ocupados dá-se uma energia  $E = E_0$ ; se num par vizinho faltar pelo menos um átomo tem-se  $E = 0$ . A interação tem a mesma forma anterior,  $-JS_i(S_{i+1}+S_{i-1})$ , mas  $S_i$  pode ter os valores 0 (ausência de átomo) ou 1 (presença de átomo). Hidrogênio adsorvido em uma superfície de ferro é um sistema protótipo. Já a liga binária consiste em dois tipos de átomos ocupando aleatoriamente os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo (mesmo átomo) ou não se atribui energia diferente ao par. Neste caso,  $S_i = 1$  representa um tipo de átomo enquanto  $S_i = -1$  representa o outro tipo. O sistema protótipo pode ser uma liga cobre-zinco (LÍBERO, 2000).

Existem outras generalizações do modelo de Ising, como por exemplo, interações entre segundos vizinhos. Por questões de didática, vamos nos ater apenas ao caso de cadeias unidimensionais e redes bidimensionais (quadradas), com  $S_i = \pm 1$ , interações de primeiros vizinhos e condições de contorno periódicas. Além disso, neste trabalho trataremos apenas a versão do modelo para ferromagnetismo ( $J > 0$ ).

## **3. Objetivo**

### **3.1. Geral**

O presente estudo visa fornecer um embasamento teórico e prático necessário acerca de algumas das informações mais relevantes no tocante a uma técnica de simulação computacional muito utilizada atualmente e de grande importância em diversos campos da ciência: O Método Monte Carlo.

### **3.2. Específico**

Inicialmente pretendeu-se familiarizar o estudante com o sistema operacional Linux (Debian), Plotador de gráfico (Grace: xmgrace), linguagem de programação (Fortran) e a construção de um algoritmo.

Utilizando a técnica de simulação computacional do Método de Monte Carlo aliada a dinâmica de Metrópolis, modelaremos um sistema magnético descrito pelo modelo de Ising, objetivando obter propriedades físicas médias como energia, magnetização e calor específico de tal sistema.

#### 4. Atividades Realizadas

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES	MÊS				
	1	2	3	4	5
Revisão bibliográfica. Introdução ao Linux, Grace e Fortran.	X	X	X		
Implementação computacional dos modelos, utilizando o Método de Monte Carlo.		X	X		
Obtenção de resultados; discussão e análise. Otimização dos algoritmos.			X	X	
Construção do relatório final.					X

## 5. Resultados e Discussões

A técnica do Método de Monte Carlo (MMC) introduzida no contexto dos sistemas magnéticos foi a ferramenta escolhida e utilizada para se realizar a simulação computacional do modelo de Ising para se obter propriedades físicas médias do sistema no modelo ferromagnético.

Consideramos um sistema com  $N$  spins em que cada configuração do sistema, denotada por  $\{S_i\}$  (sendo  $i$  cada configuração possível) é obtida fornecendo o valor de cada spin  $s_j$ , com  $j = 1, 2, 3, \dots, N$  (sendo  $j$  a localização do spin no sistema). Inicialmente uma cadeia linear (sistema unidimensional ou 1D) foi considerada, com interações entre seus primeiros vizinhos e condições de contorno periódicas, como o sistema a ser simulado. Em seguida, consideramos uma rede quadrada (sistema bidimensional ou 2D), com as mesmas interações e condições de contorno utilizadas na descrição do modelos 1D. Já sabemos da literatura algumas informações acerca desses sistemas (que são o próprio modelo de Ising 1D e 2D), como por exemplo, o fato de no caso 1D não apresentar transição de fase em nenhuma temperatura diferente de zero e no 2D ele apresentar tal transição de fase em uma dada temperatura diferente de zero, denominada de temperatura crítica (LÍBERO, 2000).

Nas simulações, partimos de uma configuração aleatória da rede de spins. Escolhemos um sítio da rede e fazemos a mudança  $S_i \rightarrow -S_i$ . Se a diferença de energia entre a energia da configuração após a mudança,  $E'$ , e a energia antes,  $E$ , i.e.  $\Delta E = E' - E$ , for negativa aceitamos essa mudança em  $S_i$ . Se  $\Delta E > 0$ , sorteamos um número aleatório  $z$  no intervalo  $0 < z < 1$  e se  $e^{\frac{-\Delta E}{kT}} > z$  também aceitamos a mudança. Só a rejeitamos se  $e^{\frac{-\Delta E}{kT}} < z$ . Uma vez sorteado aleatoriamente  $N$  sítios, fazendo essas mudanças, usamos a configuração final de spins para calcular a média termodinâmica de interesse de acordo com um procedimento de média aritmética comum.

Assim, a dinâmica do MMC para o modelo de interesse é implementada e a atualização dos spins na rede é realizada de acordo com o seguinte algoritmo:

*Passo 1:* Sorteie um spin na rede.

*Passo 2:* Calcule a variação da energia  $\Delta E$  do sistema com o spin mudado (*flipped*).

*Passo 3:* Se  $\Delta E < 0$ , aceite a nova configuração com o spin sorteado (*fliped*) e retorna ao passo 1. Caso contrário vá para o passo seguinte.

*Passo 4:* Calcule a probabilidade de aceitação do “*fliped*”  $P_f = e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$ ;

*Passo 5:* Gere um número aleatório  $z$  uniformemente distribuído entre 0 e 1.

*Passo 6:* Se  $z \leq P_f$ , aceite a nova configuração com o spin sorteado mudado (*fliped*).

*Passo 7:* Retorne ao passo 1.

Após a realização dessa seqüência de passos milhares de vezes pode-se mostrar que é gerado um processo Markoviano em que as configurações atingem um equilíbrio termodinâmico.

No entanto, antes de implementarmos o modelo final do sistema para obter as propriedades de interesse, iremos discutir sobre alguns parâmetros que serão definidos aqui como parâmetros de mérito em simulações deste tipo.

Um primeiro parâmetro de mérito a ser considerado é a dependência do número de amostras sobre o qual é feita a média, ou seja, o número de vezes que repetimos o procedimento de percorrer toda a rede rejeitando e aceitando configurações. Na figura 4 apresentamos resultados de uma simulação utilizando apenas 1 amostra com outra utilizando 10000 amostras em função do tempo (passo de Monte Carlo), para a temperatura  $k_B T = 1,0$ . Percebemos claramente que aumentando o número de amostras os valores da propriedade física calculada oscilam menos e convergem suavemente para um valor mais bem definido.

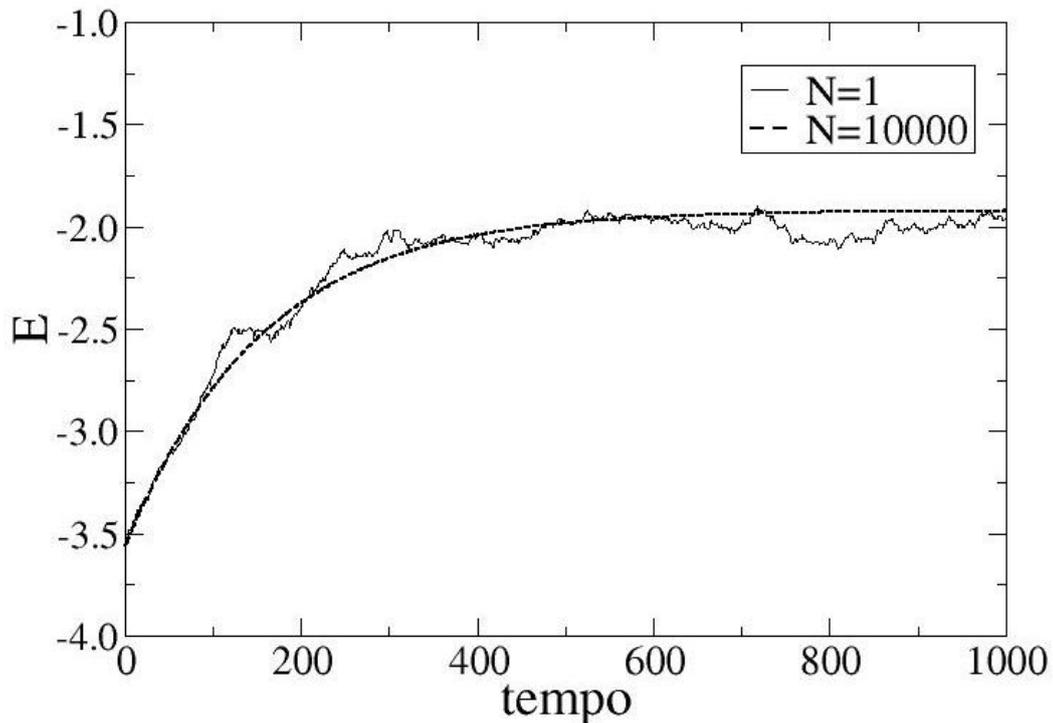


Figura 4: Energia ( $E$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de número de amostras ( $N$ ), para o caso 1D.

É claro que a configuração aleatória,  $\{S_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , com que se inicia o processo certamente não corresponde àquela de equilíbrio na temperatura de interesse. Para tanto, antes de calcularmos qualquer média percorremos toda a rede muitas vezes (até milhares de vezes) rejeitando e aceitando configurações. No final teremos uma rede termalizada, isto é, as configurações corresponderão ao equilíbrio termodinâmico naquela temperatura. Só então passamos a gerar novas configurações e calcular médias. Este tempo necessário até alcançar o equilíbrio é chamado de tempo transiente.

Outro parâmetro de mérito para simulações deste tipo é exatamente este número de vezes que percorremos a rede antes de termalizá-la, chamado de tempo transiente. Este tempo transiente é variável e depende da propriedade de interesse que está sendo calculada, da temperatura do sistema e do número de amostras, sendo um parâmetro importantíssimo a ser estudado. Um tempo transiente errado pode levar a uma consideração de valores de configuração na soma que não correspondem àquelas no equilíbrio termodinâmico numa dada temperatura, por exemplo, comprometendo o cálculo de uma média que reproduza à realidade. Nas figuras 5 e 6 essa dependência do tempo de termalização com a temperatura e com as propriedades de interesse, magnetização  $m$  e energia  $E$ , é apresentada.

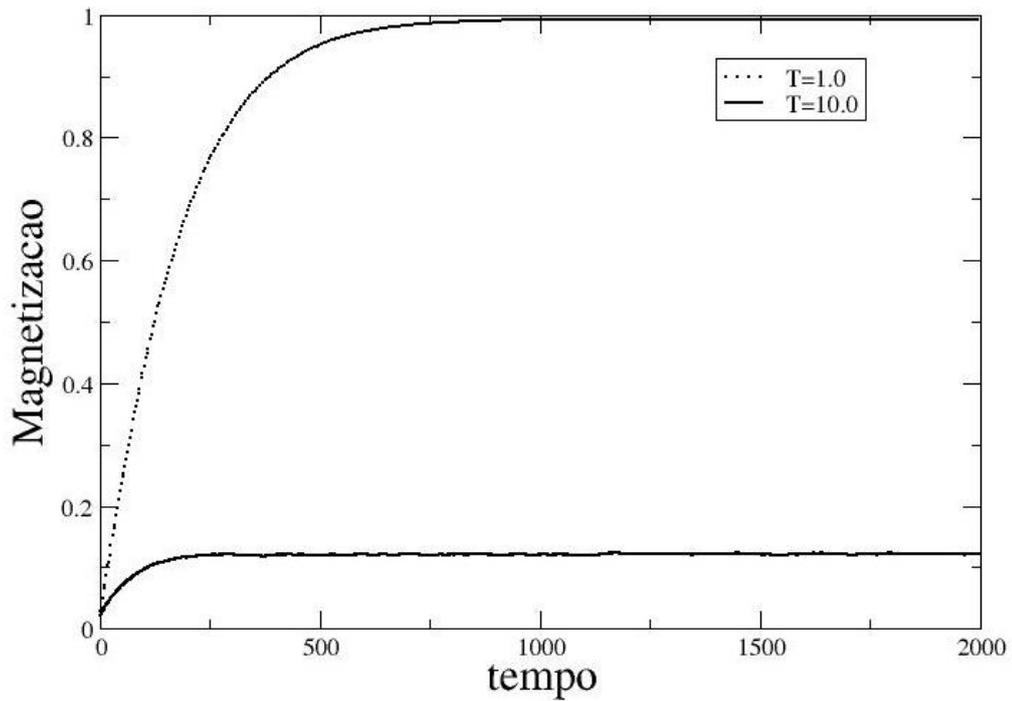


Figura 5: Magnetização ( $m$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de temperatura ( $T$ ), para o caso 1D.

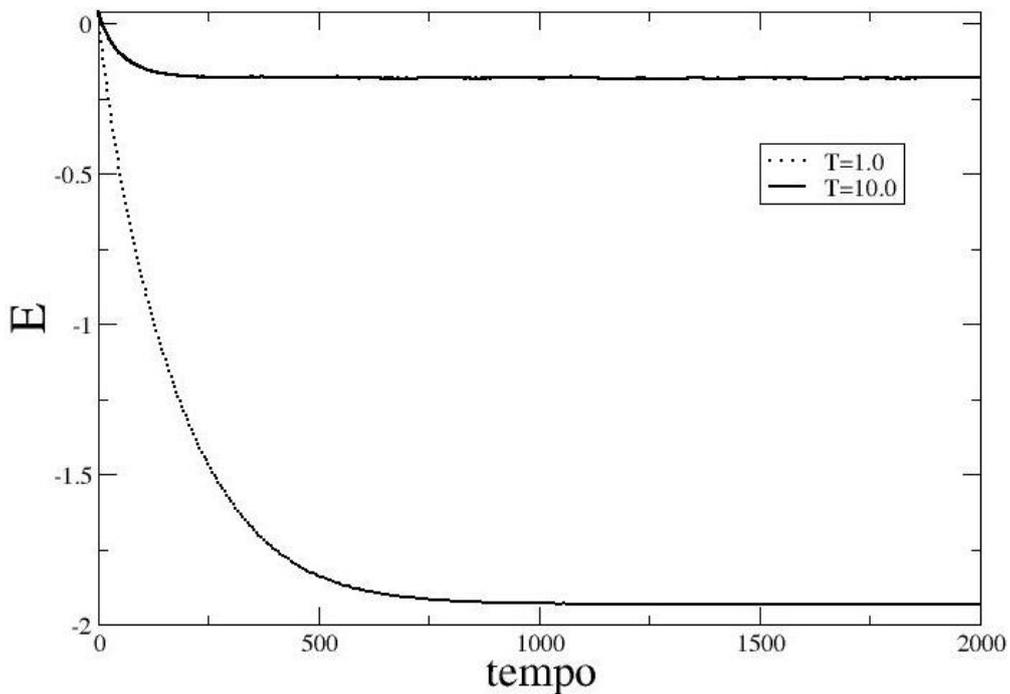


Figura 6: Energia ( $E$ ) versus tempo (passo de Monte Carlo) para dois valores de temperatura ( $T$ ), para o caso 1D.

A magnetização total do sistema, frequentemente considerada o parâmetro de ordem de sistemas magnéticos, é dependente da temperatura e de um campo magnético

externo, ao qual a rede é submetida. Neste caso, a desordem imposta pelo aumento gradativo da temperatura é contrabalanceada pelo aumento da magnitude do campo externo aplicado. Na figura 7 é apresentado o resultado da simulação realizada sobre 10000 amostras, para uma cadeia linear de 100 spins sob diferentes valores de campo externo exibindo a dependência da magnetização total do sistema com a temperatura e o campo externo aplicado. Os valores obtidos analiticamente também são expressos a fim de confirmar a exatidão dos valores obtidos pelo experimento computacional.

Devemos verificar a dependência da qualidade do resultado obtido para a magnetização total do sistema com o número de amostras sobre o qual repetimos nosso experimento. Na figura 8 apresentamos o resultado de simulações feitas para uma cadeia linear de 100 spins sob campo externo igual  $B = 0,1$  em função da temperatura para diferentes números de amostras e observamos que quando o número de amostras que utilizamos para realizar nossa média é aumentado, o resultado obtido converge para o esperado de forma mais suave e com menos oscilações, garantindo uma média mais reprodutível para a propriedade de interesse.

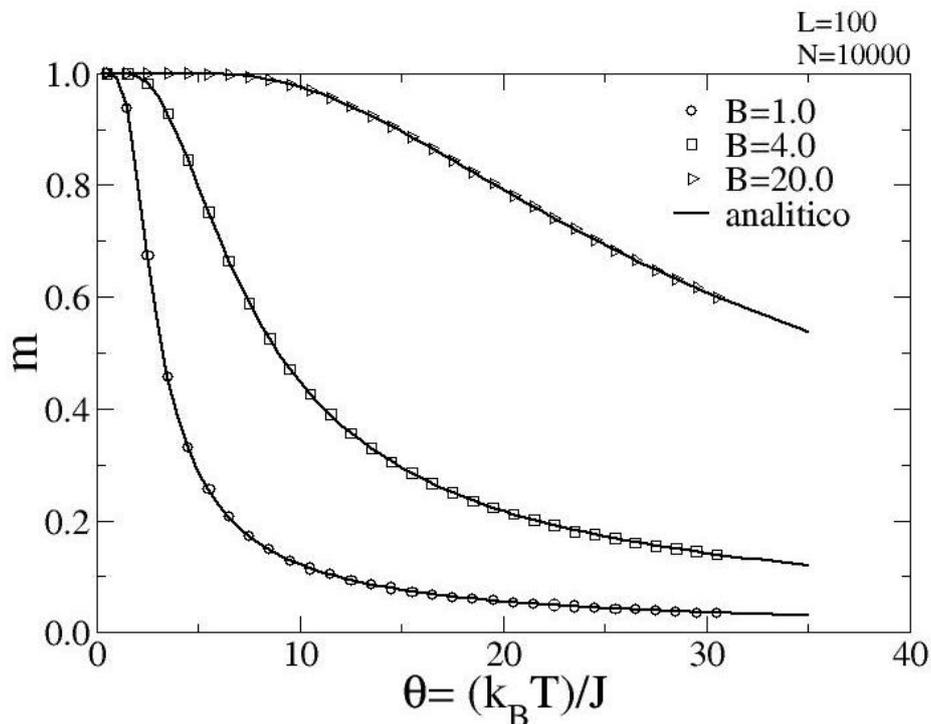


Figura 7: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $teta$ ), para diferentes valores de campo externo com suas respectivas curvas obtidas analiticamente, para o caso 1D.

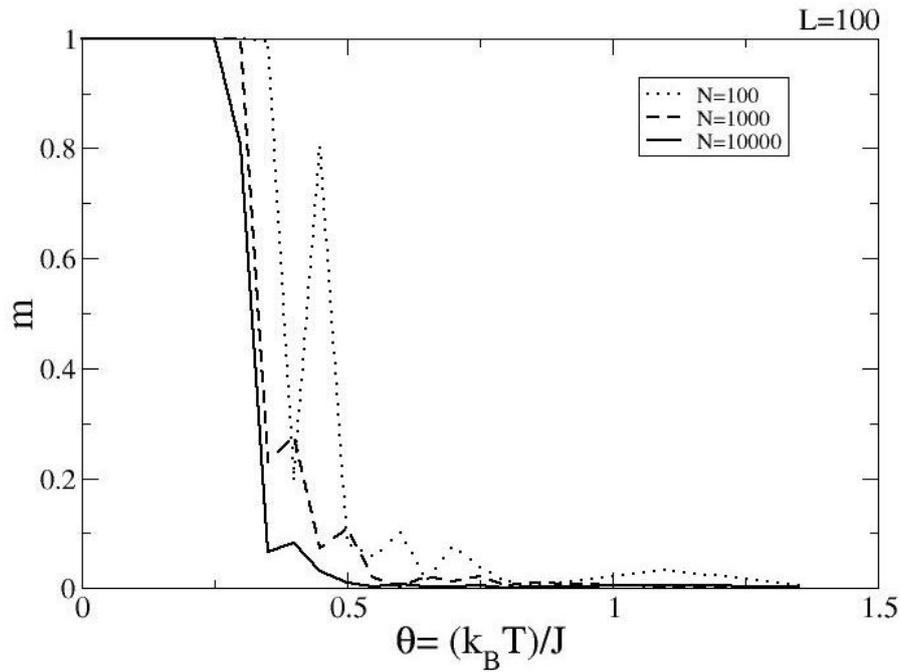


Figura 8: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $teta$ ), para diferentes valores de número de amostras, e campo  $B = 0,1$ , para o caso 1D.

No caso de uma rede quadrada (caso bidimensional) o sistema exibe magnetização espontânea sob campo nulo, o que não acontece no caso 1D, mesmo a temperaturas diferentes de zero até um dado ponto de temperatura crítica ( $T_c$ ) acima do qual o sistema passa a exibir magnetização nula caracterizada pela desordem no alinhamento dos momentos dos spins na rede. Quando um campo externo mesmo de baixa magnitude é aplicado, a temperatura crítica eleva-se consideravelmente e uma temperatura maior é exigida para se obter uma transição de fase. Esse resultado foi confirmado pelo nosso experimento computacional e pode ser verificado na figura 9.

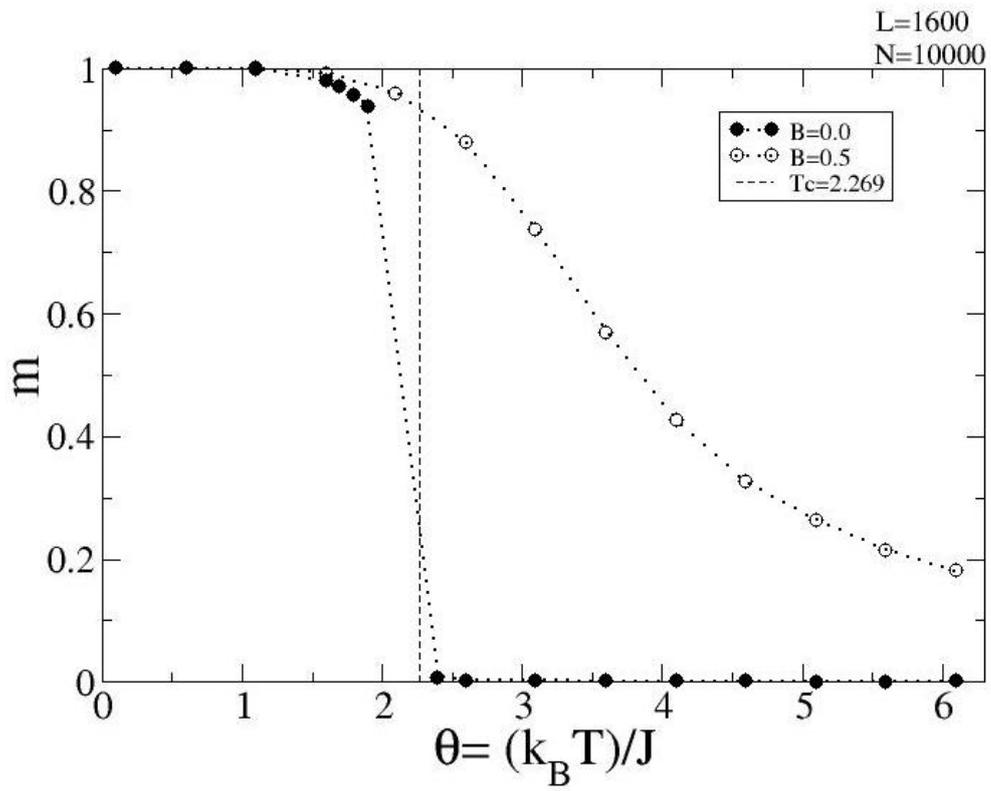


Figura 9: Magnetização ( $m$ ) versus temperatura ( $\theta$ ), para diferentes valores de campo externo, para o caso 2D.

## 6. Considerações Finais

Apesar do avanço de diversas técnicas analíticas, hoje disponíveis com o progresso alcançado pelos computadores, o cálculo numérico passou a ser uma ferramenta importante com profundo impacto no desenvolvimento das ciências em geral.

Para enfatizar aqui a importância de cálculos numéricos, basta dizer que ainda não sabemos a solução analítica exata do modelo de Ising em três dimensões, mas de simulações numéricas sabemos todas as suas características. Soma-se também o fato de em simulações podermos alterar parâmetros físicos e/ou químicos de forma conveniente, que dificilmente conseguiríamos experimentalmente (por exemplo, parâmetros de rede, valores de potenciais atômicos, número de amostras, temperatura, pressão etc). Dentre as técnicas numéricas, a de Monte Carlo tem destaque em todas as áreas da Química e Física Teóricas. Aliada a dinâmica de Metrópolis, como apresentado neste trabalho, podemos perceber a poderosa ferramenta em que se constitui no estudo de sistemas magnéticos.

O modelo de Ising é uma aproximação para sistemas reais mais complexos, mas com o grande mérito de ter solução exata, da qual aprendeu-se muito sobre magnetismo e mecânica estatística em geral. Aqui, nos restringimos apenas a sua aplicação no ferromagnetismo.

Em resumo, a aplicação do Método de Monte Carlo (MMC) aliado à técnica de Metrópolis no estudo do modelo de Ising deve continuar pelo novo milênio como um ótimo laboratório, tanto no desenvolvimento de novas técnicas, como para apresentação didática de conceitos, nem sempre aparentes em outros sistemas mais sofisticados, que sem dúvidas são imprescindíveis para a adequada formação de recursos humanos interessados em aplicar tais conceitos em estudos e trabalhos posteriores.

## 7. Bibliografia

ANGELOTTI, W. F. D., FONSECA, A. L., TORRES, G. B., CUSTODIO, R., Uma abordagem simplificada do Método de Monte Carlo Quântico: da solução de integrais ao problema da distribuição eletrônica, *Quim. Nova*, Vol. 31, Nº 2, 433-444 (2008)

BARLETTE, V.E. & FREITAS, L.C.G. “Termodinâmica Estatística de Líquidos com o Método de Monte Carlo. I. Metodologia” *Quim. Nova*, 22(2): 254, (1999).

BIELSCHOWSKY, C. E., ARBILLA G., TOGASHI, D. M., Técnicas Computacionais em Química, *Quim. Nova* 17(2) (1994).

BINDER, K., HEERMAN, D. W., Applications of the Monte Carlo methods in statistical physics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1984).

BRAGA, J. P.; Físico-Química: Aspectos Moleculares e Fenomenológicos, Ed. UFV: Viçosa, cap. 1, (2002).

CHANDLER, D., Introduction to Modern Statistical Mechanics. Oxford University Press, New York, (1987).

FAISSAL, A. B., Dissertação de Mestrado, “Transições de Rugosidade no Modelo de Ising Unidimensional com Interação de Alcance Longo”, Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, (2003).

FERNANDES, F. M. S. S., RAMALHO, J. P. P., O Método de Monte Carlo de Metrópolis, *Rev. Ciência*, Sr. VI, 15-19, (1991).

HERMANN, D.W., Computer Simulations Methods, Springer-Verlag, (1986).

K. COUTINHO, “Método Monte Carlo Aplicado a Simulação de Líquidos”, no Livro de Resumos da VII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, pp. 48-73, (2000).

LÍBERO, V. L., De Ising a Metrópolis, Revista Brasileira do Ensino de Física, vol. 22, nº 3, Setembro, 346-352, (2000).

LÓPEZ-CASTILLO, A., SOUZA FILHO, J. C., Simulação Do Equilíbrio: O Método De Monte Carlo. Quim. Nova, Vol. 30, No. 7, 1759-1762, (2007).

MCQUARRIE, D. A., Statistical Mechanics. Harper and Row, New York, (1976).

METROPOLIS, N., ROSEMBLUTH, A.W., ROSEMBLUTH, M.N.,TELLER, A.H., TELLER, E., “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”. *J. Chem. Phys.* 21: 1087,(1953).

MOORE, W. J.; Físico-Química, Edgard Blucher/EDUSP: São Paulo, cap. 9, (2000).

NEWMAN, M. E. J., BARKEMA, G.T., Monte Carlo methods in statistical physics, Oxford: Clarendon Press (1999).

OLIVEIRA-NETO, N. M., Tese de Doutorado, “Álgebras de Heisenberg generalizadas: partículas compostas e estados de quase-equilíbrio”, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, (2006)

PLLANA, S.; History of Monte Carlo Method, 2002, <http://www.geocities.com/CollegePark/Quad/2435/>

QUEIROZ, S. L. A., Fenômenos Críticos em Sistemas Magnéticos: Teoria, Revista Brasileira do Ensino de Física, vol. 22, nº 3, Setembro, 339-345, (2000).

RUBINSTEIN, R.Y., Simulation and the Monte Carlo Method , John Wiley & Sons, (1981).

SALINAS, S. R. A., Introdução a Física Estatística Edusp, :São Paulo, (1999).

SCHERER, C., Métodos Computacionais da Física, Livraria da Física, São Paulo, (2005).

WOLLER, J.; The Basics of Monte Carlo Simulations, Physical Chemistry Lab,  
Spring: University of Nebraska – Lincoln, (1996).

## 8. Anexos e Apêncices

### 8.1. Anexo: Publicações

O estudo realizado neste trabalho e apresentado neste relatório gerou uma publicação de trabalho nos anais da II Escola de Inverno do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, onde os resultados parciais obtidos foram apresentados na forma de um pôster. Abaixo segue o resumo do trabalho apresentado e a cópia do certificado de apresentação:

Manoel Alves Machado Filho e Nemesio Matos Oliveira-Neto  
Departamento de Química e Exatas  
Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia-UESB - Jequié-BA

*Título:* Uma Introdução à Simulação de Monte Carlo Aplicada ao Modelo de Ising 1 e 2D

*Resumo:* Neste trabalho temos como objetivos obter as propriedades físicas médias do modelo de Ising 1D e 2D, com interação entre primeiros vizinho, na presença de campo externo e com condição de contorno periódica. Tais propriedades serão obtidas via simulação computacional utilizando a técnica de Monte Carlo. Usaremos inicialmente a dinâmica de Metropolis, na qual a atualização é feita sobre cada spin individualmente ("single spin update"). Depois, pretendemos incluir a dinâmica de Wolff, onde a atualização é feita sobre um agregado de spins simultaneamente ("cluster spin update"). Como ponto final, nesta introdução, verificaremos a influência nas propriedades físicas (calor específico, magnetização, energia) quando aumentamos o alcance das interações entre os spins na rede, bem com a inclusão de impurezas não-magnéticas no modelo.



## 8.2. Apêndice: Códigos desenvolvidos em linguagem FORTRAN 90

Códigos Fonte dos programas utilizados para simular os sistemas descritos pelo Modelo de Ising 1D e 2D pelo MMC para obtenção das propriedades físicas de interesse, quais foram: magnetização, energia e calor específico.

### *Modelo de Ising 1D:*

```
program ising1D
implicit none
real*8:: Temp_max, Temp_min, deltaTemp, deltaTemp_aux
parameter (Temp_max=44.d-1, Temp_min=2.d-1, deltaTemp=25.d-2)
integer:: t_max, N, trans, L, i
parameter (t_max=10**2, N=10**4, trans=10**4, L=100)
integer:: t, n_amostra, idum, n_spin
real*8:: P1, Temp, deltaE
real*8:: Em, B, Emedio, Mmedio, Cv, Emedio2
real*8:: ran2, z, M_aux
real*8:: S(0:L+1), M(0:t_max), E(0:t_max), Em2(0:t_max)

open(1,file="1D_N=10000.dat", status="unknown")

write(1,*) "#", "L=", L
write(1,*) "#", "Numero de amostras=", N

      S=-1.d0

      n_spin=0
      do while (n_spin.le.L/4)
        z=ran2(idum)
        i=int(z*L)+1
        if (S(i)==1.d0) goto 100
        n_spin=n_spin+1
        S(i)=1.d0
100    enddo

      S(0)=S(L)
      S(L+1)=S(1)
      Em=0.d0
      M_aux=0.d0

      do i=1, L
        M_aux = M_aux + S(i)/L
        Em = Em - 5.d-1 *S(i)*(S(i+1)+S(i-1) - B)/L
      enddo

!%%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NA TEMPERATURA %%%%%%%%%%%

      Temp=Temp_min
```

```

do while (Temp.le.Temp_max)

%%%%%%%%%%%%%% CONDIÇÕES INICIAIS %%%%%%%%%%%%%%%
B=0.d0
idum=-1.d0
E=0.d0
M=0.d0
Em2=0.d0

!%%%%%%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NAS AMOSTRAS %%%%%%%%%%%%%%%

do n_amostra=1, N

!%%%%%%%%%%%%%% CONDIÇÕES INICIAIS %%%%%%%%%%%%%%%

E(0)=Em
M(0)=M_aux

!%%%%%%%%%%%%%% TRANSIENTE %%%%%%%%%%%%%%%

do t=1, trans
z=ran2(idum)
i=int(z*L)+1
deltaE=2.d0*S(i)*(S(i+1)+S(i-1) + B)
P1 = dexp(-deltaE/Temp)
if (deltaE.lt.0d0) then
Em=Em+deltaE/L
M_aux=-2.d0*S(i)/L+M_aux
S(i)=-S(i)
else
z=ran2(idum)
if(z.le.P1) then
Em=Em+deltaE/L
M_aux=-2.d0*S(i)/L + M_aux
S(i)=-S(i)
endif
endif

S(0)=S(L)
S(L+1)=S(1)
enddo

!%%%%%%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NO TEMPO %%%%%%%%%%%%%%%

do t=1, t_max
z=ran2(idum)
i=int(z*L)+1
deltaE=2.d0*S(i)*(S(i+1)+S(i-1) + B)
P1 = dexp(-deltaE/Temp)
if (deltaE.lt.0d0) then
Em=Em+deltaE/L
M_aux=-2.d0*S(i)/L+M_aux
S(i)=-S(i)
else
z=ran2(idum)
if(z.le.P1) then
Em=Em+deltaE/L

```

```

M_aux=-2.d0*S(i)/L + M_aux

S(i)=-S(i)
endif
endif
E(t)= E(t) + Em/N
M(t)= M(t) + M_aux
Em2(t)= Em2(t) + Em**2.d0/N
S(0)=S(L)
S(L+1)=S(1)
enddo

!%%%%%%%% FIM DO LOOP NO TEMPO %%%%%%%%%
enddo

!%%%%%%%% FIM DO LOOP NAS AMOSTRAS %%%%%%%%%

!%%%%%%%% CALCULO DAS MEDIAS %%%%%%%%%
Mmedio=0.d0
Emedio=0.d0
Emedio2=0.d0
Cv=0.d0
do t=1, t_max
M(t) = M(t)/N
Em2(t) = Em2(t)
Emedio = Emedio + E(t)
Mmedio = Mmedio + M(t)
Emedio2 = Emedio2 + Em2(t)
Cv = Cv + (1.d0/Temp**2.d0)*(Em2(t)-E(t)**2.d0)
enddo

!%%%%%%%% MANDA ESCREVER %%%%%%%%%

write(1,10) Temp, Emedio/t_max, Emedio2-Emedio**2.d0, abs(Mmedio/t_max), Cv/t_max
deltaTemp_aux=deltaTemp

if (Temp.le.85.d-2.and.Temp.ge.2.d-1) deltaTemp_aux=5.d-2
Temp=Temp+deltaTemp_aux

enddo

!%%%%%%%% FIM DO LOOP NAS TEMPERATURAS %%%%%%%%%
10 format(15F25.10)

end program

!%%%%%%%% SUB-ROTINA PARA GERAÇÃO DE NÚMERO ALEATÓRIO%%%%%%%%

FUNCTION ran2(idum)

```

**Modelo de Ising 2D:**

```

program ising2D
implicit none
real*8:: Temp_max, Temp_min, deltaTemp, deltaTemp_aux
parameter (Temp_max=61.d-1, Temp_min=1.d-1, deltaTemp=5.d-1)
integer:: t_max, N, trans, L, i, k, j
parameter (t_max=2*10**2, N=10**4, trans=10**3, L=40)
integer:: t, n_amostra, idum, n_spin
real*8:: P1, Temp, deltaE
real*8:: Em, B, Emedio, Mmedio, Cv, Emedio2, Em2
real*8:: ran2, z, M_aux
real*8:: S(0:L+1, 0:L+1), M(0:t_max), E(0:t_max), E2(0:t_max)

      open(1,file="ARQUIVO.dat", status="unknown")

      write(1,*) "#", "L=", L
      write(1,*) "#", "Numero de amostras=", N

!%%%%%%%%% VARRENDO A REDE PARA ATRIBUIR VALORES AOS SPINS %%%%%%%%%%

      S=-1.d0

!%%%%%%%%DISTRIBUIÇÃO ALEATORIA DOS VALORES DOS SPINS ENTRE 1 E -1 %%%%%%%%%%
      n_spin=0
      do while (n_spin.le.L/2)
        z=ran2(idum)
        i=int(z*L)+1
        z=ran2(idum)
        j=int(z*L)+1
        if (S(i,j)==1.d0) goto 100
        n_spin=n_spin+1
        S(i,j)=1.d0
100      enddo

!%%%%%%%%% CONDIÇÕES DE CONTORNO %%%%%%%%%%

      do i=1,L
        S(0, i)=S(L, i)
        S(i, L+1)=S(i, 1)
        S(L+1, i)=S(1, i)
        S(i, 0)=S(i, L)
      enddo

!%%%%%%%%% CÁLCULO DA MAGNETIZAÇÃO E ENERGIA POR SPIN %%%%%%%%%%

      Em=0.d0
      M_aux=0.d0
      Em2=0.d0
      do i=1, L
        do j=1, L
          M_aux = M_aux + S(i,j)/L**2
          Em = Em - 1d0*S(i,j)*(S(i, j-1)+S(i+1,j) + S(i-1,j) + S(i, j+1)- B)/L**2.d0/2.d0
          Em2 = Em2 + Em**2
        enddo
      enddo

!%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NA TEMPERATURA %%%%%%%%%%
      Temp=Temp_min
      do while (Temp.le.Temp_max)

```

```
!%%%%%%%%% CONDIÇÕES INICIAIS %%%%%%%%%%
```

```
B=5.d-1  
idum=-1.d0  
E=0.d0  
M=0.d0  
E2=0.d0
```

```
!%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NAS AMOSTRAS %%%%%%%%%%
```

```
do n_amostra=1, N
```

```
!%%%%%%%%% CONDIÇÕES INICIAIS %%%%%%%%%%
```

```
E(0)=Em  
M(0)=M_aux  
E2(0)=Em2
```

```
!$$$$$$$$$ TRANSIENTE %%%%%%%%%%
```

```
do t=1, trans  
z=ran2(idum)  
i=int(z*L)+1  
z=ran2(idum)  
j=int(z*L)+1  
deltaE=2.d0*S(i,j)*(S(i, j-1)+ S(i, j+1) + S(i+1,j) + S(i-1,j) + B)  
P1 = 1.d0*dexp(-deltaE/Temp)  
if (deltaE.lt.0d0) then  
Em=Em+deltaE/L**2.d0  
M_aux=-2.d0*S(i,j)/L**2.d0 + M_aux  
S(i,j)=-S(i,j)  
else  
z=ran2(idum)
```

```
if(z.le.P1) then  
Em=Em+deltaE/L**2.d0  
M_aux=-2.d0*S(i,j)/L**2.d0 + M_aux  
S(i,j)=-S(i,j)  
endif  
endif
```

```
do k=1,L  
S(0, k)=S(L, k)  
S(k, L+1)=S(k, 1)  
S(L+1, k)=S(1, k)  
S(k, 0)=S(k, L)  
enddo
```

```
enddo
```

```
!%%%%%%%%% INICIO DO LOOP NO TEMPO %%%%%%%%%%
```

```
do t=1, t_max  
z=ran2(idum)  
i=int(z*L)+1  
z=ran2(idum)  
j=int(z*L)+1  
deltaE=2.d0*S(i,j)*(S(i, j-1)+ S(i, j+1) + S(i+1,j) + S(i-1,j) + B)  
P1 = 1.d0*dexp(-deltaE/Temp)  
if (deltaE.lt.0d0) then
```

```

Em=Em+deltaE/L**2.d0
M_aux=-2.d0*S(i,j)/L**2.d0 + M_aux
S(i,j)=-S(i,j)
else
z=ran2(idum)
if(z.le.P1) then
Em=Em+deltaE/L**2.d0
M_aux=-2.d0*S(i,j)/L**2.d0 + M_aux
S(i,j)=-S(i,j)
endif
endif

E(t)= E(t) + Em/N
M(t)= M(t) + M_aux
E2(t)= E2(t) + Em**2.d0/N

do k=1,L
S(0, k)=S(L, k)
S(k, L+1)=S(k, 1)
S(L+1, k)=S(1, k)
S(k, 0)=S(k, L)
enddo

enddo

!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FIM DO LOOP NO TEMPO %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

enddo

!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FIM DO LOOP NAS AMOSTRAS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% CALCULO DAS MEDIAS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
Mmedio=0.d0
Emedio=0.d0
Emedio2=0.d0
Cv=0.d0
do t=1, t_max
M(t) = M(t)/N
Emedio = Emedio + E(t)
Mmedio = Mmedio + M(t)
Emedio2 = Emedio2 + E2(t)
Cv = Cv + (1.d0/Temp**2.d0)*(E2(t)-E(t)**2.d0)
enddo

!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MANDA ESCREVER %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

write(1,10) Temp, Emedio/t_max, abs(Mmedio/t_max) , Cv/t_max

deltaTemp_aux=deltaTemp
if (Temp.le.70.d-1.and.Temp.ge.65.d-1) deltaTemp_aux=1.d-1
Temp=Temp+deltaTemp_aux

enddo

!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FIM DO LOOP NAS TEMPERATURAS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

10 format(15F25.10)

end program

```

!%%%%%%%%SUB-ROTINA PARA GERAÇÃO DE NÚMERO ALEATÓRIO%%%%%%%%

FUNCTION ran2(idum)