

Simulação de um modelo físico simples

JOSÉ MIGUEL NUNES DA SILVA

Departamento de Física, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

Com a massificação do uso de microcomputadores torna-se possível ao entusiasta emprender um novo tipo de experiências com utensílios domésticos que não os clássicos fios e roldanas, lâmpadas e pilhas, ou mesmo díodos e transístores.

Aqui descreveremos como observar a evolução temporal de um importante modelo físico — o modelo de Ising — realizando uma experiência simulada num microcomputador (ZX Spectrum).

Introdução

O «modelo de Ising a 1D» introduzido em 1920 por W. Lenz [1] tem a sua primeira solução exacta em 1925 por E. Ising [2] (donde o nome do modelo). O estudo exacto da evolução temporal deste «sistema» deve-se a R. J. Glauber (1963) [3].

Um dos primeiros resultados em simulações em computador neste tipo de sistemas deve-se a Ogita e outros (1969) [4]. Para uma passagem em revista deste tema veja-se Binder (1976) [5].

Se bem que Ising tenha feito o seu estudo supondo o sistema em equilíbrio, com Glauber o sistema pode partir de um estado de não-equilíbrio relaxando para o estado de equilíbrio compatível com a temperatura T imposta pelo reservatório de calor em contacto com o sistema.

O sistema é um conjunto de «pausinhos», a que chamaremos spins, dispostos numa circunferência de forma ordenada. Spins vizinhos interactuam entre si com uma energia $-J$ caso apontem para o mesmo lado, e $+J$ caso um aponte para cima e o outro para baixo (supomos $J > 0$). A fim de fixarmos ideias representaremos o estado de cada spin pela variável $s_i = \pm 1$ consoante aponte para cima ($+1$) ou para baixo (-1). O índice $i = 1, 2, \dots, N$ refere a localização do spin na cadeia de N spins.

Desta forma a energia do sistema $E(\{s\})$, para uma dada configuração $\{s\} = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ no estado dos N spins, escreve-se como a soma sobre todas as energias de interacção ($-J s_i s_{i+1}$) entre spins vizinhos:

$$E(\{s\}) = - \sum_{i=1}^N J s_i s_{i+1}, \quad (1)$$

com $s_{N+1} = s_1$, de forma a que se feche a cadeia linear.

Como a descrição sugere, este modelo descreve, por exemplo, uma macro-molécula onde se situam, regularmente, átomos com momento magnético à semelhança de um cristal (unidimensional). Tais moléculas são-nos oferecidas presentemente pela Química e têm sido fonte de intensa investigação [6]. Aplicações deste modelo, e suas generalizações, são correntes no estudo das transições de fase [7].

Probabilidade de Transição

Mesmo no equilíbrio, e em consequência do contacto do sistema com o reservatório de calor, ou mesmo do próprio acoplamento entre spins, estes não estão quietos, havendo transições $s_i \rightarrow -s_i$. Suporemos, para simplificar, que não ocorrem transições em simultâneo.

Tal transição ocorre com uma dada probabilidade num pequeno intervalo de tempo Δt :

$$W_i(s_i) \Delta t.$$

No equilíbrio, a probabilidade por unidade de tempo de, estando o sistema no estado $\{\dots, s_i, \dots\}$, transitar para o estado $\{\dots, -s_i, \dots\}$, é igual à do processo inverso:

$$\begin{aligned} W_i(s_i) \exp(-\beta E(s_i)) = \\ W_i(-s_i) \exp(-\beta E(-s_i)) \end{aligned} \quad (2)$$

com $\beta^{-1} = K_B T$; K_B é a constante de Boltzmann.

Feitas as contas com a ajuda de (1) e (2) tem-se

$$\frac{W_i(s_i)}{W_i(-s_i)} = \frac{\exp[-\beta J s_i (s_{i-1} + s_{i+1})]}{\exp[+\beta J s_i (s_{i-1} + s_{i+1})]}$$

pelo que uma escolha possível (*) para $W_i(s_i)$ é

$$W_i(s_i) = \exp(-\beta J s_i (s_{i-1} + s_{i+1}))$$

Simulação

A) O fulcro nesta questão de executar a simulação reside em, a partir do gerador de números x distribuídos uniformemente no intervalo $[0, 1]$ (comando RND no ZX Spectrum), obter uma distribuição de valores de tempos de espera $t(x)$ obedecendo à distribuição dada $f(t)$ [8, 9]. Tal é bastante simples pois se x tem distribuição uniforme então

$$dx = \Pr(x \in]x_0, x_0 + dx]) = \Pr(t(x) \in]t(x_0), t(x_0 + dx)])$$

Logo

$$dx = \int_{t(x_0)}^{t(x_0 + dx)} f(t') dt'$$

concluindo-se que $t(x)$ satisfaz

$$x = \int_{-\infty}^{t(x)} f(t') dt' \quad (3)$$

Como

$$W = \sum_{i=1}^N W_i$$

é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer pelo menos uma transição, então a probabilidade de não ocorrer qualquer transição durante um período de tempo t , e que representaremos por $p(t)$, satisfaz a equação:

$$p(t + dt) = (1 - W dt) p(t)$$

Consequentemente

$$p(t) = \exp(-Wt) \quad (4)$$

$$t(x) = -(1/W) \ln(1 - x) \quad (5)$$

como resulta de (3) e (4) com $f(t) = W p(t)$ para $t \geq 0$, $f(t) = 0$ para $t < 0$ [$\int f(t) dt =$ probabilidade de a transição ocorrer em $(t, t + dt)$].

B) Um outro problema se coloca que é o de localizar o spin que vai sofrer transição (depois de passado o tempo t calculado em (5)). Neste caso o equivalente de $p(t)$ é a distribuição discreta

$$p_i = W_i/W, \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

ou seja: a probabilidade de ser o spin i a sofrer a transição.

Introduzindo temporariamente a probabilidade $p_0 = 0$, resulta de simples interpretação de (3) que, se y tiver distribuição uniforme, então

$$\sum_{k=0}^{i(y)-1} p_k < y \leq \sum_{k=0}^{i(y)} p_k \quad (6)$$

Outro método, talvez mais sugestivo, de obter (6) será o de construir um segmento

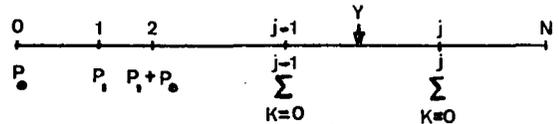


Fig. 1—Disparando» uniformemente o «dardo» para y e escolhe-se a posição i com a probabilidade p_i .

de comprimento 1 seccionado em segmentos de comprimento p_i como indica a figura 1: ao «disparar-se», uniformemente, o «dardo» para y está-se a escolher a posição i com a probabilidade p_i .

Considerações Complementares

Com as considerações que se seguem julgamos que o leitor não terá dificuldade em interpretar o fluxograma da figura 2 e a listagem do programa usado, apresentada em apêndice.

(*) Possível mas não única.

i) Observemos que

$$W_i(s) = \begin{cases} Z1 & \text{se } s_i(s_{i-1} + s_{i+1}) > 0 \\ 1 & \text{se } s_{i+1} = -s_{i-1} \\ (Z1)^{-1} & \text{se } s_i(s_{i-1} + s_{i+1}) < 0 \end{cases}$$

com $Z1 = \exp(-2\beta J)$. Notemos que se $T \rightarrow 0$, $Z1 \rightarrow 0$ e se $T \rightarrow \infty$, $Z \rightarrow 1$.

ii) Com vista a poupar tempo de computação construímos uma tabela para o cálculo do tempo. Notando que

$$t = -1/W \ln x \\ = 1/W (2 \ln 10 - \ln(\text{Int}(100x) + \epsilon))$$

com $|\epsilon| < 1$, então

$$t \approx 1/W (TO - \ln n)$$

onde $n = \text{Int}(100x) + 1$ e $TO = 2 \ln 10$.

iii) Por simplicidade optámos por um estado inicial com $s_i = +1$, $i = 1, 2, \dots, N$. Outras condições iniciais seriam interessantes de analisar.

iv) Com a alteração de s_i há que alterar $W_{i\pm 1}$:

$$W'_{i\pm 1} = \exp(-\beta J s_{i\pm 1} (s'_i + s_{i\pm 2})) \\ = \exp(-\beta J s_{i\pm 1} (s_i + s_{i\pm 2} + 2s'_i)) \\ = W_{i\pm 1} (Z1)^{s'_i s_{i\pm 1}}$$

v) Define-se uma função caracterizadora do estado do sistema em função do tempo t :

$$M = M(t) = (1/N) \sum_{k=1}^N s_k$$

Em resultado da alteração de s_i temos

$$M' = M + (2/N) s'_i$$

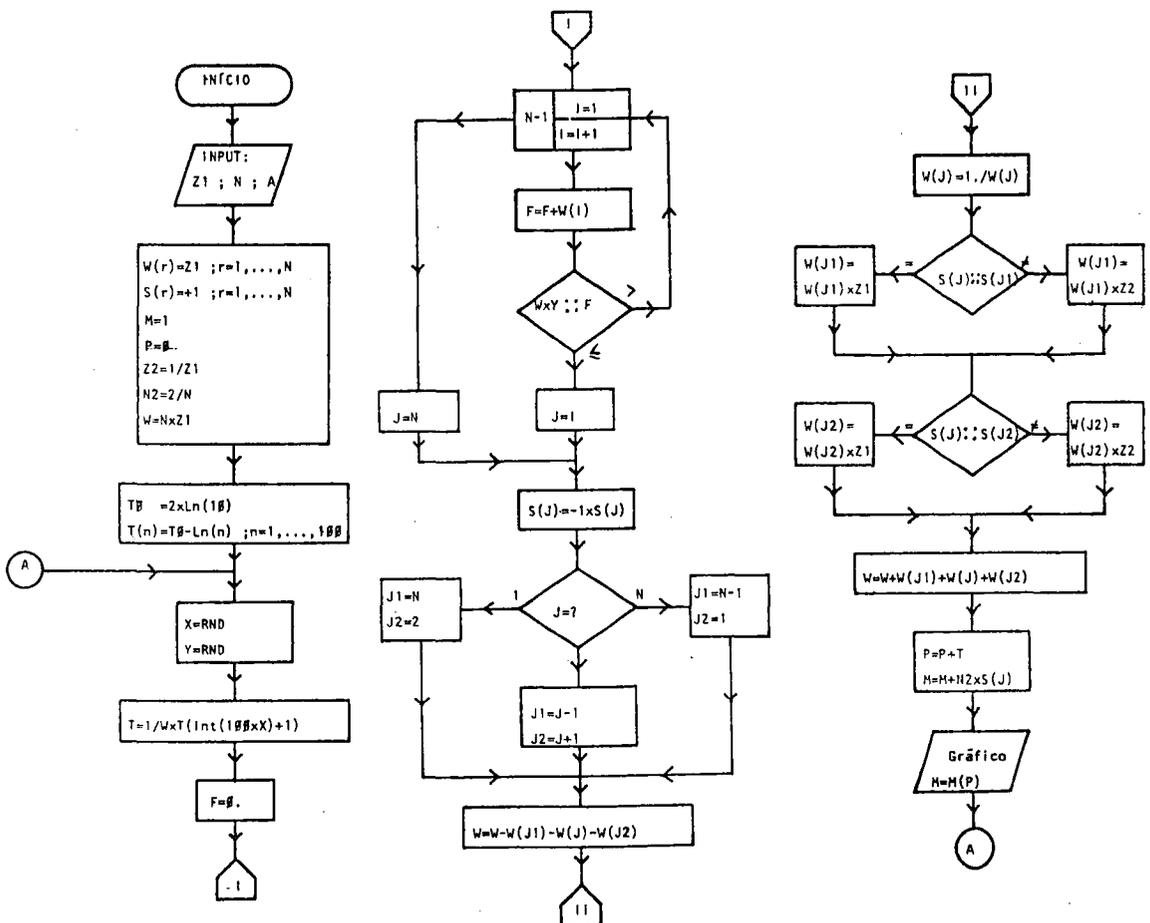


Fig. 2 — Fluxograma.

Conclusões

Neste caso escolheu-se estudar a evolução de $M(t)$. Outras grandezas de interesse podem

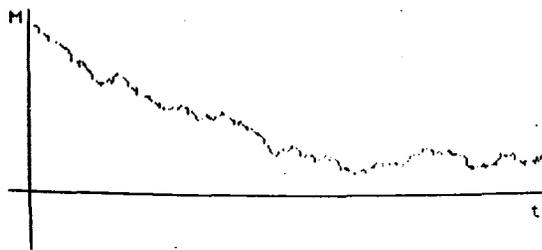


Fig. 3—Gráfico obtido para $N=200$ e $Z1=0,999$.

ser analisadas de modo semelhante: por exemplo, a função de correlação

$$C(t)_k = (1/N) \sum_i s_i s_{i+k}.$$

Tudo isto está dependente da velocidade do microcomputador utilizado e do tipo de linguagem de programação. No caso presente, usando um ZX Spectrum e programando em Basic, um valor aceitável para $N=200$ permite obter com rapidez resultados interessantes.

Para temperaturas $T \neq 0$ a solução analítica [3] prevê decaimento exponencial:

$$M(t) \sim \exp(-(1-\gamma)t/\alpha),$$

onde $\gamma = \tanh(2\beta J)$ e α é um factor de escala. Este facto é bem ilustrado pelo gráfico da figura 3 obtido para $N=200$ e $Z1=0,999$.

Para $T=0$ o modelo é algo problemático em virtude de «ocorrer» aí uma transição de fase [7].

Generalizações

A generalização a duas ou mais dimensões é imediata e deixada à curiosidade do leitor.

De especial interesse é o caso bidimensional pois, sendo pouco mais complicado que o unidimensional, não teve, até à data, solução analítica exacta e é um sistema com tempe-

ratura de transição finita [7] ($Z1 = \sqrt{2} - 1$ para $T=T_c$), podendo estudar-se o sistema quer na fase ordenada, $T < T_c$, quer na fase desordenada, $T > T_c$.

Já depois de termos submetido para publicação este trabalho, um «revisor científico» da revista teve a gentileza de nos comunicar a existência de um trabalho posterior [10] onde o problema bidimensional é abordado de forma comparável, mas seguindo um método diferente.

Apêndice

Listagem do programa em Basic para o ZX Spectrum:

```
5 INPUT «N=»; N
10 DIM W(N): DIM S(N): DIM T(100)
20 INPUT «Z1=»; Z1
30 INPUT «A=»; A
32 PLOT 0,85: DRAW 255,0
34 PLOT 10,0: DRAW 0,175
36 PRINT AT 0,0; «M»
38 PRINT AT 12,31; «t»
40 FOR R=1 TO N
50 LET W(R)=Z1: LET S(R)=+1
60 NEXT R
70 LET P=0
80 LET Z2=1./Z1
90 LET N2=2./N
100 LET W=NxZ1
110 LET W1=1/W
120 LET T0=2xLn 10
130 FOR R=1 TO 100
140 LET T(R)=T0-Ln R
150 NEXT R
160 LET M=1.
170 REM
180 RANDOMIZE: LET X=RND
190 LET Y=RND
200 LET T=W1xT(INT(100xX)+1)
210 LET F=0.
220 FOR I=1 TO N-1
230 LET F=F+W1xW(I)
240 IF Y<=F THEN LET J=I: GO TO 270
250 NEXT I
```

```

260 LET J=N
270 LET S(J)=-1xS(J)
280 IF J=1 THEN LET J1=N: LET J2=2:
GO TO 310
290 IF J=N THEN LET J1=N-1: LET J2=1:
GO TO 310
300 LET J1=J-1: LET J2=J+1
310 LET W=-W(J1)-W(J)-W(J2)
320 LET W(J)=1./W(J)
340 IF S(J)xS(J1)>0 THEN LET W(J1)=
=W(J1)xZ1: GO TO 360
350 LET W(J1)=(J1)xZ2
360 IF S(J)xS(J2)>0 THEN LET W(J2)=
=W(J2)xZ1: GO TO 380
370 LET W(J2)=W(J2)xZ2
380 LET W=W+W(J1)+W(J)+W(J2)
390 LET W1=1./W
400 LET P=P+T
410 LET M=M+N2xS(J)
420 PLOT 10+PxA,Mx85+85
430 GO TO 180

```

BIBLIOGRAFIA

- [1] LENZ, W. — Z. Phys., **21**, 613 (1920).
- [2] ISING, E. — Z. Phys., **31**, 253 (1925).
- [3] GLAUBER, R. J. — J. Math. Phys., **4**, 294 (1963).
- [4] OGITA, N.; UEDA, A.; MATSUBARA, T.; MATSUDA, H. e YONEZAWA, F. — J. Phys. Soc. of Japan **26** (Sup.), 145 (1969).
- [5] BINDER, K. — in «Phase Transitions and Critical Phenomena», vol. **5B**, eds.: C. Domb e M. S. Green (Academic Press, 1976).
- [6] STEINER, M.; VILLAIN, J.; WINDSOR, C. G. — Adv. Phys., **25**, 87 (1976).
- [7] STANLEY, H. E. — Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Clarendon Press, Oxford, 1971).
- [8] SOBOL — The Monte Carlo Method (The University of Chicago Press, 1974).
- [9] MA, S. K. — in «Critical Phenomena» — Lecture Notes in Physics, vol. **54**, Ed. J. Brey e R. R. Jones (Springer-Verlag, 1976).
- [10] KERTÉSZ, J.; CSERTI, J.; SZÉP, J. — Eur. J. Phys. **6**, 232 (1985).

LIVRARIA ESCOLAR EDITORA



A Livraria Técnico-Científica do País
Serviço rápido de assinaturas
de revistas científicas

LIVRARIA — Rua da Escola Politécnica, 80-A
Telefs. 664040 - 672561
Telex 18570 ESCOLI P - PORTUGAL
1200 LISBOA
Filial no Porto — Rua da Boa Hora, 43 4000 PORTO
Telex 27247 ESCOP - P

LIVRARIA BRITÂNICA



THE ENGLISH BOOKSHOP
Para todos os seus livros
de inglês

Rua S. Marçal, 168-A Telef. 328472 1200 LISBOA
Filial no Porto:
Rua da Boa-Hora, 43 Telef. 382786 4000 PORTO

Edwards



VENDIDO POR
MENDES DE ALMEIDA, LDA.



Av 24 de Julho, 52 - AG
Telex 13559 ALMEDA P
Telef. 663371 1200 LISBOA