

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA  
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS  
CURSO DE FÍSICA

INTRODUÇÃO AO MÉTODO MONTE CARLO:  
EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

TRABALHO DE GRADUAÇÃO

Jonas Maziero

Santa Maria, RS, Brasil

2007

**INTRODUÇÃO AO MÉTODO MONTE CARLO:  
EXEMPLOS DE APLICAÇÃO**

**por**

**Jonas Maziero**

Trabalho de Graduação apresentado ao Curso de Bacharelado em Física,  
da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM,RS),  
como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Bacharel em Física**

**Orientador: Prof. Dr. Sergio Garcia Magalhães**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2007**

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos os que colaboraram de alguma forma para a realização desse trabalho e em particular:

- ao professor Sergio Garcia Magalhães, pela orientação;
- aos colegas do Laboratório de Mecânica Estatística e Teoria da Matéria Condensada, pela boa convivência e pelas discussões sobre física;
- aos meus familiares, que me ajudam em todos os momentos da minha vida;
- ao meu irmão Heleno Maziero, que é o grande responsável por eu fazer física;
- a minha namorada Jaqueline Metke, pela companhia e apoio;
- aos meus colegas e amigos;
- a todos os professores de quem fui aluno.

# RESUMO

Trabalho de Graduação  
Curso de Física  
Universidade Federal de Santa Maria

INTRODUÇÃO AO MÉTODO MONTE CARLO: EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

AUTOR: JONAS MAZIERO

ORIENTADOR: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Local e Data: Santa Maria, Março de 2007.

No presente trabalho, nós estudamos o método Monte Carlo em um nível introdutório. Este método foi aplicado, como forma de exemplo, em modelos e sistemas cujos resultados são conhecidos, com a finalidade de comparar com estes resultados os obtidos neste trabalho. Na primeira parte do trabalho, foram estudados alguns conceitos de probabilidade e estatística que estão fortemente relacionados com o método Monte Carlo. A partir desses conceitos, é apresentado o algoritmo de Metropolis. O objetivo deste algoritmo é estimar médias de propriedades físicas sobre um conjunto de configurações que é gerado através de um passeio aleatório no espaço configuracional. Nós aplicamos o algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising para estudar ferromagnetismo em um sistema bidimensional de spins localizados. Com isso, foi possível observar o comportamento da magnetização espontânea do sistema em função da temperatura, na ausência de campo magnético externo. Também foi estudado o comportamento da magnetização em função do campo magnético externo, para alguns valores de temperatura. Na última parte do trabalho, foi estudado o método Monte Carlo Variacional. Este método é baseado no princípio variacional da mecânica quântica. A sua essência é aplicar esse princípio para calcular o valor médio da energia, dada uma função de onda tentativa. O método Monte Carlo Variacional foi aplicado, em conjunto com o algoritmo de Metropolis, no cálculo da energia do estado fundamental de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Palavras-Chave: Método Monte Carlo, algoritmo de Metropolis, modelo de Ising, método Monte Carlo Variacional, partícula em um poço de potencial quadrado infinito.

# ABSTRACT

Graduation's Work  
Physics' Course  
Federal University of Santa Maria

INTRODUCTION TO MONTE CARLO METHOD: EXAMPLES OF APPLICATION

AUTHOR: JONAS MAZIERO

ADVISER: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Local and Date: Santa Maria, March, 2007.

In the present work, we study the Monte Carlo method in an introductory level. This method has been applied in models and systems whose results are known to compare with ours results. In the first part of this work, some concepts of probability and statistics related with the Monte Carlo method are study. By using these concepts the Metropolis' algorithm is presented. The main objective of this algorithm is calculate averages of physics properties which are obtained by ensembles of configurations generated from random walks in the configurational space. We apply the Metropolis' algorithm in the Ising model to study ferromagnetism of localized moments in a bidimensional system. The behavior of the spontaneous magnetization is observed when the temperature is changed in the absence of external magnetic field. We have been also analysed the behavior of the magnetization in an external magnetic field for some values of temperature. In the last part of this work, we have been studied the Variational Monte Carlo method. This method is based in the variational principle of quantum mechanics. It calculates the mean value of the energy by applying the variational principle. In this work the Variational Monte Carlo method has been applied, together with the Metropolis' algorithm, to calculate the energy of the ground state for a particle in an infinite square well.<sup>2</sup>

---

<sup>2</sup>Key-Words: Monte Carlo method, Metropolis' algorithm, Ising model, Variational Monte Carlo method, particle in an infinite square well.

# SUMÁRIO

## Lista de Figuras

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Introdução ao Método</b>	<b>10</b>
2.1	Integração pelo Método Monte Carlo . . . . .	10
2.2	Monte Carlo e as Propriedades Físicas . . . . .	11
2.2.1	Valor Médio e Função Densidade de Probabilidade . . . . .	11
2.2.2	Ensemble e Sistemas Ergódicos . . . . .	11
2.3	Amostragem Preferencial . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Algoritmo de Metropolis</b>	<b>14</b>
3.1	Processo de Markov e Algoritmo de Metropolis . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Modelo de Ising</b>	<b>16</b>
<b>5</b>	<b>Resultados I</b>	<b>18</b>
5.1	Análise de erros . . . . .	20
5.1.1	Condições periódicas de contorno . . . . .	20
5.1.2	Termalização . . . . .	20
<b>6</b>	<b>Monte Carlo Quântico</b>	<b>25</b>
6.1	Monte Carlo Variacional . . . . .	25
<b>7</b>	<b>Partícula em um Poço de Potencial Quadrado Infinito</b>	<b>29</b>

<b>8 Resultados II</b>	<b>32</b>
<b>9 Considerações Finais</b>	<b>34</b>
<b>Apêndice A</b>	<b>35</b>
<b>Apêndice B</b>	<b>37</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>39</b>

# LISTA DE FIGURAS

5.1	Rede quadrada com um spin em cada sítio $(i, j)$ . . . . .	18
5.2	Condições periódicas de contorno para uma rede quadrada de dimensões $L \times N$ . . . . .	21
5.3	Magnetização por spin (esquerda) e energia por spin (direita) em função do número de passos de Monte Carlo $p$ . . . . .	22
5.4	Magnetização espontânea em função da temperatura na ausência de campo magnético externo. . . . .	23
5.5	Energia em função da temperatura na ausência de campo magnético externo. . . . .	23
5.6	Calor específico em função da temperatura na ausência de campo magnético externo. . . . .	24
5.7	Magnetização em função do campo magnético externo para alguns valores de temperatura. . . . .	24
7.1	Potencial de um sistema de partícula em um poço de potencial quadrado infinito. . . . .	29
7.2	Funções de onda, dos três primeiros níveis, de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito. . . . .	31
7.3	Três primeiros níveis de energia. . . . .	31
8.1	Função de onda tentativa. . . . .	32
9.1	Primeiro quadrante de um círculo de raio $R = 1$ inscrito em um quadrado de lado $L = 2$ . . . . .	35
9.2	Círculo de raio $R = 1$ , onde está mostrado um elemento de área $dA$ . . . . .	36

# 1 INTRODUÇÃO

A simulação computacional é, naturalmente, uma consequência direta da construção dos primeiros computadores eletrônicos na década de 1940-50. As potencialidades destes computadores despertaram grande interesse nos físicos e matemáticos em sua utilização para estudar sistemas de muitas partículas. Mais recentemente, devido ao grande desenvolvimento científico e tecnológico, a capacidade de processamento e armazenamento dos computadores tem aumentado significativamente. Com isso, a simulação computacional vem sendo uma ferramenta cada vez mais utilizada na modelagem de sistemas físicos. Problemas que até bem pouco tempo eram inviáveis de serem tratados através de cálculo computacional, atualmente podem ser estudados de uma forma cada vez mais adequada.

O método Monte Carlo (Landau e Binder (2000))(Scherer (2005)) refere-se a cálculos que utilizam seqüências de números aleatórios para fazer simulações numéricas. Este método está baseado em conceitos e princípios da mecânica estatística e pode ser utilizado de diferentes maneiras: como uma técnica para calcular integrais, para modelar processos estocásticos, calcular propriedades de estado e para simular sistemas de partículas interagentes.

Em junho de 2003 foi comemorado o cinqüentenário da simulação computacional em Mecânica Estatística (Fernandes (2003)). Esta área de pesquisa teve como marco inicial o artigo publicado por Nicholas Metropolis et al. (Metropolis et al. (1953)) sobre o método Monte Carlo. Foi Metropolis que deu nome ao método (inspirado no interesse de Ulam por poker) durante o projeto Manhattan da segunda guerra mundial, devido à similaridade entre as simulações estatísticas e os jogos de azar e porque Monte Carlo, capital de Mônaco, era um centro de jogos de azar.

Embora o trabalho publicado em 1953 por Metropolis et al. (Metropolis et al. (1953)) (onde eles apresentaram o famoso *algoritmo de Metropolis*) seja considerado o mais importante, entre os trabalhos precursores que utilizaram o método Monte Carlo, ele não foi o

primeiro. Em 1948 Fermi e Richtmyer (Fermi e Richtmyer (1948)) utilizaram esse método no cálculo de integrais em seus estudos sobre difusão de nêutrons. Logo depois, em 1949, Metropolis e Ulam (Metropolis e Ulam (1949)) apresentaram uma descrição do método aplicado na resolução de equações diferenciais e integrais. Até hoje, muitos trabalhos tem sido feitos com e sobre o método Monte Carlo.

O nosso objetivo neste trabalho foi fazer um estudo introdutório sobre o método Monte Carlo. Como exemplo de aplicação, utilizamos o algoritmo de Metropolis e o modelo de Ising para estudar um fenômeno bastante importante em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. Estudamos também o método Monte Carlo Variacional, em conjunto com o algoritmo de Metropolis, aplicados para calcular a energia do estado fundamental de um sistema de partícula confinada em um poço de potencial quadrado infinito.

Este trabalho foi organizado conforme descrito a seguir:

O *capítulo 1* é reservado à introdução.

No *capítulo 2*, é feita uma introdução ao método Monte Carlo. No início deste capítulo é mostrada a integração pelo método Monte Carlo. Na seqüência, são apresentados alguns conceitos de probabilidade e estatística que são fortemente relacionados com esse método (valor médio, função densidade de probabilidade, ensemble e sistemas ergódicos). Na última parte desse capítulo são apresentados o método Monte Carlo modificado (MC) e o conceito de amostragem preferencial.

No *capítulo 3*, é apresentado o algoritmo de Metropolis. Este algoritmo é utilizado para gerar um conjunto de configurações consistente com a função densidade de probabilidade do sistema. Nesse capítulo, é apresentado também o conceito de processo de Markov e o princípio do balanço detalhado.

O *capítulo 4* é reservado ao modelo de Ising. Nesse capítulo é feita uma descrição desse modelo e são discutidos alguns aspectos históricos relacionados ao mesmo.

No *capítulo 5* estão apresentados alguns resultados (magnetização espontânea, energia e calor específico em função da temperatura, na ausência de campo magnético externo e também a magnetização em função do campo magnético externo para alguns valores de temperatura) obtidos através da aplicação do algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising no estudo de ferromagnetismo em um sistema bidimensional de spins localizados. Esse sistema está descrito nesse capítulo. Nesse mesmo capítulo estão colocados alguns erros

que devemos considerar nas simulações e os procedimentos para contornar esses erros ou ao menos estimá-los.

O *capítulo 6* é dedicado ao método Monte Carlo Variacional, esse método é derivado a partir do princípio variacional da mecânica quântica (a obtenção desse princípio está mostrada nesse capítulo) e é utilizado para calcular o valor médio da energia, dada uma função de onda tentativa.

O *capítulo 7* é destinado ao sistema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito. Nesse capítulo estão apresentados os cálculos e algumas ilustrações para as funções de onda e energias desse sistema.

No *capítulo 8* são apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir da aplicação do método Monte Carlo variacional, em conjunto com o algoritmo de Metropolis, para um sistema de partícula em um poço quadrado infinito.

O *Capítulo 9* foi reservado para as considerações finais desse trabalho.

Incluimos, por fim, no *apêndice A*, uma forma intuitiva para calcular áreas através da utilização de números aleatórios e o cálculo de áreas utilizando integração pelo método Monte Carlo. No *apêndice B*, estão colocadas as rotinas utilizadas neste trabalho para gerar números aleatórios.

## 2 INTRODUÇÃO AO MÉTODO

### 2.1 Integração pelo Método Monte Carlo

A estimativa do valor de uma integral definida é um bom exemplo de aplicação direta do método Monte Carlo. Consideramos a integral unidimensional

$$I = \int_a^b g(x)dx, \quad (2.1)$$

aplicando-se o teorema do valor médio (Leithold (1994)), essa integral é aproximada por

$$I_N = (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i). \quad (2.2)$$

Os pontos  $x_i$  são quaisquer, dentro do espaço de integração. O valor  $I_N$  pode ser obtido por meio de uma amostragem uniforme de pontos  $x_i$ , que cubra todo o espaço. O método Monte Carlo calcula  $I_N$ , selecionando os pontos  $x_i$  aleatoriamente no intervalo  $[a, b]$ <sup>1</sup>

$$I_N = (b - a) \langle g \rangle. \quad (2.3)$$

O símbolo  $\langle g \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i)$  representa a média de  $x_i$  dos pontos amostrados. O método Monte Carlo é uma abordagem mais apropriada para sistemas multidimensionais, pois seu custo computacional e o erro associado a esse cálculo independem da dimensão do sistema. Esse método é bastante utilizado no estudo de sistemas físicos, na integração necessária ao cálculo do valor médio de uma propriedade qualquer de interesse.

---

<sup>1</sup>Está exemplificada, no *apêndice A*, a utilização do método Monte Carlo no cálculo de integrais. Isto é feito através de uma estimativa para o valor de pi.

## 2.2 Monte Carlo e as Propriedades Físicas

O método Monte Carlo está fortemente associado com conceitos relacionados à probabilidade e estatística. A sua aplicação em cálculos de valor médio de propriedades físicas e a interpretação dos resultados exige a compreensão dos fundamentos de alguns desses conceitos.

### 2.2.1 Valor Médio e Função Densidade de Probabilidade

O valor médio, ou esperado, de uma variável aleatória  $u$  é dado pela seguinte equação (Salinas (1999))

$$\langle u \rangle = \sum_j u_j P(u_j). \quad (2.4)$$

Esta equação mostra a dependência do valor médio  $\langle u \rangle$  com a probabilidade  $P$  de ocorrência dos valores discretos  $u_j$  que a variável pode assumir. A probabilidade de um evento específico é um número que informa a ocorrência desse evento frente a um número limitado de possibilidades, quando da realização de um experimento.

Em sistemas físicos, as propriedades macroscópicas são variáveis contínuas, ou seja, apresentam um número infinito de valores no espaço de amostragem. Isso porque cada valor da propriedade está associado a pelo menos um dos infinitos microestados possíveis. Nesses casos, a probabilidade especificada anteriormente para um evento discreto é substituída por uma função densidade de probabilidade  $p(v)dv$ . A integral dessa função fornece a probabilidade de ocorrência dos microestados  $v$  incluídos no intervalo de integração. Considerando o espaço total disponível tem-se a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(v)dv = 1. \quad (2.5)$$

Usando esta função densidade de probabilidade, o valor médio de uma função de variável aleatória  $a$  contínua é calculado através da seguinte equação

$$\langle a \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a(v)p(v)dv. \quad (2.6)$$

### 2.2.2 Ensemble e Sistemas Ergódicos

Essas médias (Equações 2.4 e 2.6) são chamadas de médias de ensemble. Um *ensemble* é um conjunto de microestados consistentes com as condições de contorno que caracterizam

o sistema representado. As condições do sistema são impostas no ensemble pela função densidade de probabilidade. Acredita-se que para a maioria dos sistemas a média de ensemble seja igual a média temporal, que são as medidas experimentais de uma grandeza física. Os sistemas que obedecem esta equivalência são ditos *ergódicos*.

O valor médio da propriedade  $a$  pode ser calculado analiticamente pela Equação (2.6) apenas para sistemas muito simples. A função densidade de probabilidade para sistemas mais elaborados normalmente inviabiliza o cálculo analítico, tanto pelo número de variáveis envolvidas quanto pela sua complexidade. O cálculo numérico é a alternativa mais apropriada para a resolução dessas equações.

O método Monte Carlo é um método de cálculo numérico que é empregado a partir da geração de um conjunto de  $N$  microestados aleatórios e de uma função densidade de probabilidade  $p$  que caracteriza o sistema. Utilizando o teorema do valor médio, a Equação (2.6) é aproximada a um cálculo de média aritmética que é adequada à aplicação do método Monte Carlo

$$\langle a \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a(\mathbf{v}_i) p(\mathbf{v}_i). \quad (2.7)$$

No entanto a utilização direta dessa estratégia é pouco produtiva. Vários microestados gerados terão uma probabilidade muito baixa de ocorrerem, ou seja, os valores de  $p(\mathbf{v}_i)$  destes microestados são muito pequenos. Assim, eles pouco contribuem para a média. O esquema largamente aplicado a sistemas físicos é uma variante desse apresentado, conhecido como *Monte Carlo Modificado (MC)*. Essa técnica emprega o conceito de amostragem preferencial, tornando o método Monte Carlo mais eficiente.

## 2.3 Amostragem Preferencial

O MC não calcula a Equação (2.7) diretamente. Ao invés de utilizar todas as configurações geradas randomicamente e atribuir pesos de acordo com a função distribuição  $p(\mathbf{v}_i)$  para obter o valor médio, o MC seleciona as configurações mais prováveis por meio da função densidade  $p(\mathbf{v}_i)$ , conferindo pesos estatísticos iguais para todas elas, assim

$$\langle a \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a(\mathbf{v}_i). \quad (2.8)$$

As configurações  $\mathbf{v}_i$  são aquelas escolhidas pela função  $p(\mathbf{v}_i)$ . Apesar de todas as configurações possuírem o mesmo peso estatístico, existe uma diferença de contribuição

para a média de cada configuração, pois aquelas com maior probabilidade serão mais freqüentemente escolhidas para compor a média. Essa estratégia é o que denomina-se de *amostragem preferencial*. Ela baseia-se sempre na probabilidade de ocorrência para avaliar se a configuração do sistema é representativa. O cálculo dessa probabilidade requer que a constante de normalização da função densidade de probabilidade seja conhecida, ou seja, que a integração dessa função em todo o espaço seja realizada. Essa integração apresenta exatamente os mesmos inconvenientes que impedem a própria integração para o cálculo do valor médio da propriedade (Equação 2.6).

Assim, essa abordagem centraliza o problema, mas não o soluciona definitivamente. Toda a dificuldade fica localizada na geração das configurações compatíveis com a função densidade de probabilidade proposta. Este problema é resolvido pelo algoritmo de Metropolis, apresentado no próximo Capítulo.

# 3 ALGORITMO DE METROPOLIS

O objetivo do MC não é seguir exatamente a dinâmica do sistema, mas sim, construir um conjunto de configurações que, no limite, obedeça a função densidade de probabilidade. Isso é feito no MC usando o conceito de processo de Markov.

## 3.1 Processo de Markov e Algoritmo de Metropolis

Considera-se uma seqüência de estados  $S_0, S_1, \dots, S_N$  de um sistema. A probabilidade de um desses estados ( $S_i$ ) ocorrer é dada pela fórmula das probabilidades totais (Salinas (1999))

$$P(S_i) = \sum_{k=1}^N P(S_i|S_k)P(S_k). \quad (3.1)$$

A probabilidade condicional  $P(S_i|S_k)$  é a chance de ocorrência de  $S_i$ , sendo que o estado  $S_k$  ocorreu. Uma seqüência de estados é um *processo de Markov* se para qualquer  $i$  forem obedecidas as seguintes relações

$$P(S_i|S_k) = 0 \text{ para } k \neq (i-1) \quad \text{e} \quad P(S_i|S_k) \neq 0 \text{ para } k = (i-1).$$

As relações colocadas acima estabelecem que nos processos Markovianos, cada configuração gerada depende exclusivamente da sua predecessora imediata. Portanto, a probabilidade de  $S_i$  ocorrer é

$$P(S_i) = P(S_i|S_{i-1})P(S_{i-1}). \quad (3.2)$$

A equação que governa a evolução temporal desses processos é a equação mestra (Salinas (1999))

$$\frac{\partial P(S_i)}{\partial t} = P(S_i|S_{i-1})P(S_{i-1}) - P(S_{i-1}|S_i)P(S_i). \quad (3.3)$$

Para a situação de equilíbrio do sistema, a seqüência de estados é temporalmente invariante, portanto

$$\frac{\partial P(S_i)}{\partial t} = 0. \quad (3.4)$$

Aplicando-se a Equação (3.4) na Equação (3.3), encontra-se a seguinte condição

$$P(S_i|S_{i-1})P(S_{i-1}) = P(S_{i-1}|S_i)P(S_i), \quad (3.5)$$

ou seja,

$$\frac{P(S_i|S_{i-1})}{P(S_{i-1}|S_i)} = \frac{P(S_i)}{P(S_{i-1})}, \quad (3.6)$$

condição essa conhecida como *princípio do balanço detalhado*. A Equação (3.6) indica que, no estado estacionário (Equação 3.4), a razão entre o número de transições de  $S_{i-1}$  para  $S_i$  e o número de transições de  $S_i$  para  $S_{i-1}$  é igual a razão entre as probabilidades do sistema estar no estado  $S_i$  e no estado  $S_{i-1}$ .

Utilizando a Equação (3.6) pode-se construir uma seqüência de estados que obedece a função densidade de probabilidade, utilizada no cálculo da razão entre as probabilidades dos estados, permitindo calcular o valor médio de qualquer propriedade através da Equação (2.8).

A seqüência é gerada, calculando-se a razão das probabilidades de duas configurações contíguas, o que não exige a integração em todo o espaço da função densidade de probabilidade porque a constante de normalização é cancelada entre o numerador e o denominador, avaliando qual delas é mais provável

$$\frac{P(S_i|S_{i-1})}{P(S_{i-1}|S_i)} = \frac{p(S_i)/\int_{-\infty}^{+\infty} p(S_k)dk}{p(S_{i-1})/\int_{-\infty}^{+\infty} p(S_k)dk} = \frac{p(S_i)}{p(S_{i-1})} = R. \quad (3.7)$$

Se  $R > 1$ ,  $S_i$  é a mais provável, se  $R < 1$ ,  $S_{i-1}$  é a configuração mais provável. A configuração selecionada é utilizada no cálculo da média da propriedade.

Essa estratégia para o cálculo das propriedades é conhecida como *algoritmo de Metropolis*. A aleatoriedade fica centrada na criação das configurações e na sua aceitação como representativa do sistema.

## 4 MODELO DE ISING

Em 1920 (Brush (1967)), Wilhelm Lenz propôs ao seu aluno de doutorado Ernest Ising um modelo para estudar ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo considerava uma cadeia linear de momentos magnéticos  $S_i$  interagindo com seus primeiros vizinhos  $S_{i+1}$  e  $S_{i-1}$ . O hamiltoniano do modelo de Ising (Salinas (1999)) para uma cadeia linear é dado por

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} \quad (4.1)$$

onde  $S_i$  pode assumir os valores  $\pm 1$  com o objetivo de representar os estados de um sistema de spin  $\frac{1}{2}$ .  $J$  é chamado de termo de troca. Para  $J > 0$  o alinhamento paralelo dos spins é favorecido. Por outro lado, a temperatura tende a impor desordem ao sistema. Como resultado da competição entre o ordenamento de toda a cadeia e a desordem provocada pela temperatura, era esperado que acima de uma certa temperatura crítica o sistema adquirisse um alto grau de desordem e não apresentasse mais momento magnético resultante. Entretanto, Ising conseguiu obter transição para a fase ordenada apenas em  $T = 0$ . Como a teoria de Pierre Weiss previa transição de fase em temperatura diferente de zero para qualquer dimensão do sistema, Ising não tentou investigar o modelo para os casos de dimensão maior que uma.

Em 1928, Heisenberg propôs um modelo semelhante ao de Ising, mas substituindo os  $S_i$  por operadores de spin  $\vec{S}_i$ . Assim o hamiltoniano de Heisenberg pode ser escrito na seguinte maneira

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.2)$$

As componentes  $S_i^x$ ,  $S_i^y$  e  $S_i^z$  de  $\vec{S}_i$  são operadores quânticos e não comutam entre si. Se considerarmos o caso de um cristal altamente anisotrópico na direção do eixo  $z$ , é muito provável que os spins atômicos se alinharem paralelamente ou antiparalelamente a direção do eixo  $z$ . Embora as componentes  $S_i^x$  e  $S_i^y$  não sejam exatamente nulas, podemos

desprez -las no hamiltoniano sem cometer um erro muito grave. Como resultado tem-se,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (4.3)$$

o qual,   chamado de hamiltoniano de Ising. Considerando que  $S^z$  pode assumir os valores  $\pm S$ , com  $S = 1$ , e que a intera o  $J_{ij}$    constante ( $J$ ) e se limita apenas aos primeiros vizinhos, tem-se

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (4.4)$$

que   o modelo de Ising. Foi adicionada ainda ao hamiltoniano, a intera o de cada spin com o campo magn tico aplicado  $h$ . O s mbolo  $\langle i, j \rangle$  indica que a soma   feita considerando-se apenas a intera o do  tomo  $(i, j)$  e os seus primeiros vizinhos. O primeiro termo do hamiltoniano   respons vel pelo comportamento cooperativo e a possibilidade de transi o de fase, o segundo termo   um termo paramagn tico . Este modelo, pela sua simplicidade, tem sido muito usado em Mec nica Estat stica, principalmente para o estudo de transi es de fase. Em 1944 Lars Onsager (Onsager (1944)), conseguiu calcular exatamente a fun o de parti o numa rede bidimensional, na aus ncia de campo magn tico externo, encontrando que a temperatura cr tica de transi o do estado ferromagn tico para o estado paramagn tico    $\frac{K_B T_c}{J} \simeq 2,27$ .

## 5 RESULTADOS I

O modelo de Ising, por sua formulação simples e solução exata em redes bidimensionais, é freqüentemente usado como referência quando se trabalha com técnicas de cálculo numérico. Neste Capítulo, estão apresentados os resultados obtidos a partir da aplicação do algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising para estudar ferromagnetismo em um sistema bidimensional de spins localizados. Esse sistema tem dimensões  $L \times N$ , onde  $L = 40$  e  $N = 40$  são, respectivamente, o número de spins em cada linha e coluna da rede. Os spins da rede são identificados pelo par de inteiros  $(i, j)$ . O símbolo  $s(i, j)$  especifica o valor do spin em um sítio  $(i, j)$  da rede. Representamos um spin para cima por  $s(i, j) = +1$  e um spin para baixo por  $s(i, j) = -1$ . O sistema descrito acima está ilustrado na Figura 5.1

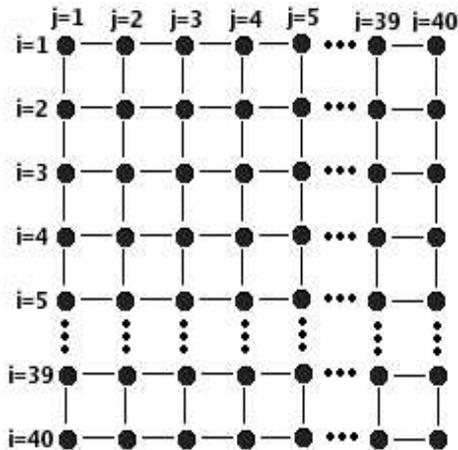


Figura 5.1: Rede quadrada com um spin em cada sítio  $(i, j)$ .

Consideramos que esse sistema está em contato com um reservatório térmico, portanto em equilíbrio termodinâmico, e que o mesmo tem número de partículas e volume constantes. A probabilidade que o sistema esteja em um estado com energia  $E$ , é dada pela distribuição de Boltzmann ou distribuição Canônica

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E}, \quad (5.1)$$

onde

$$\beta = \frac{1}{K_B T} \quad (5.2)$$

com  $K_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$  sendo a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.  $Z$  é a função de partição, que é dada por

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad (5.3)$$

onde a soma é feita sobre todos os microestados. O conhecimento da forma funcional da função de partição em termos das variáveis macroscópicas do sistema permite o estabelecimento de várias relações termodinâmicas importantes, mas o cálculo da função de partição pode ser feito analiticamente apenas para sistemas simples, no entanto, através da utilização do algoritmo de Metropolis, é possível calcular propriedades físicas de sistemas complexos sem conhecer a função de partição do sistema. Nesse trabalho isso foi feito seguindo as etapas colocadas a seguir

1) Geramos uma configuração aleatória de spins (isso é feito utilizando-se um rotina<sup>1</sup> que fornece números aleatórios ( $na$ ) com distribuição uniforme entre 0 e 1. Para  $0 \leq na < 0.5$  tem-se  $s(i, j) = +1$  (spin para cima), para  $0.5 < na \leq 1.0$  tem-se  $s(i, j) = -1$  (spin para baixo). Os casos em que  $na = 0.5$  são rejeitados).

2) Calcula-se a energia correspondente a essa configuração (a energia correspondente à  $k$ -ésima configuração, é dada por  $\frac{E_k}{J} = - \sum_{\langle i, j \rangle} s(i, j) s(i', j') - \frac{H}{J} \sum_{i, j} s(i, j)$ , onde  $\langle i, j \rangle$  indica que a soma é feita somente sobre os primeiros vizinhos).

3) Mudamos de forma aleatória a orientação de um spin da rede e calculamos a energia da nova configuração  $E_{k+1}$  utilizando a equação colocada no item anterior.

4) Calculamos a razão entre as probabilidades das duas configurações contíguas  $\left( R = \frac{P_{k+1}}{P_k} = \frac{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_{k+1}}}{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_k}} = e^{-\beta(E_{k+1} - E_k)} = e^{-\frac{\Delta E}{K_B T}} \right)$  correspondente à transição da configuração  $k$  para a configuração  $k+1$ . Se  $\Delta E \leq 0$ , ou seja, se  $P_{k+1} \geq P_k$ , aceita-se a transição, se  $\Delta E > 0$ , ou seja, se  $P_{k+1} < P_k$ , compara-se a razão entre as probabilidades ( $R$ ) com um número aleatório ( $na$ ), se  $R \geq na$  aceita-se a transição, caso contrário rejeita-se a transição e retorna-se para a configuração inicial.

Chamamos um número de sorteios igual ao número de spins da amostra de ‘um passo de Monte Carlo ( $p$ )’, assim cada spin é sorteado, em média, uma vez. Os valores das variáveis macroscópicas (energia e magnetização) são armazenados a cada passo de Monte

---

<sup>1</sup>Esta rotina está colocada no apêndice B

Carlo. Depois de um certo número de passos de Monte Carlo, calcula-se o valor médio das variáveis macroscópicas.

Antes de mostrar os resultados das simulações, se faz necessário apresentar alguns itens importantes que devem ser considerados na análise de erros quando os cálculos das grandezas físicas de interesse (magnetização, energia) são feitos.

## 5.1 Análise de erros

Todo computador possui comprimento de palavra limitado, isso faz com que a precisão dos cálculos seja também limitada. Esse problema deve ser minimizado pelo programador, no entanto, esse erro computacional é pequeno comparado com o erro estatístico devido à limitada fração do número total de estados que podem ser amostrados. Se o processo for verdadeiramente estocástico o desvio padrão deve decrescer com  $p^{-1/2}$ . Outras fontes de erro que devem ser consideradas quando se faz simulação estão colocadas a seguir.

### 5.1.1 Condições periódicas de contorno

Visto que as simulações são feitas em sistemas finitos, uma questão importante que se estabelece é como tratar as bordas ou contornos da rede. Estes contornos podem ser tratados utilizando-se condições periódicas de contorno. Isto é feito a partir da construção de todo o sistema a partir de sub-sistemas idênticos ao que estamos simulando. Desta maneira o primeiro spin de uma linha ‘percebe’ o último spin da linha como o seu primeiro vizinho e vice-versa. O mesmo acontece para os spins nas extremidades de uma coluna. A Figura 5.2 ilustra esse procedimento para uma rede quadrada.

### 5.1.2 Termalização

Considerando que o sistema está inicialmente em uma configuração arbitrária, é necessário gerar um grande número de eventos para que a energia do sistema atinga um valor de ‘equilíbrio’. Isso se deve ao fato que uma certa configuração do sistema está fortemente correlacionada à sua configuração prévia. Assim, é necessário um grande número de eventos para que a ‘memória’ sobre a configuração inicial seja apagada. No presente trabalho utilizamos 5000 passos de Monte Carlo para termalização. A magnetização por spin e energia por spin em função do número de passos de Monte Carlo  $p$  estão mostradas

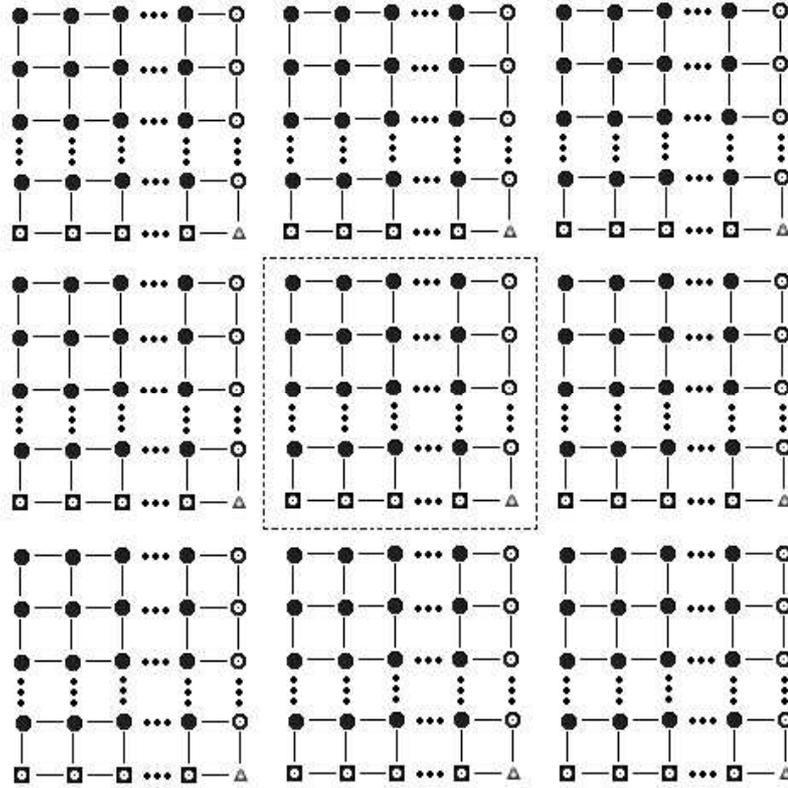


Figura 5.2: Condições periódicas de contorno para uma rede quadrada de dimensões  $L \times N$ .

na Figura 5.3.

Depois dessa pequena explicação sobre algumas das fontes de erro que devem ser consideradas quando se faz simulação computacional de sistemas físicos utilizando o método Monte Carlo, são apresentados os resultados obtidos neste trabalho a partir da aplicação do algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising para estudar um ferromagnetismo em um sistema bidimensional de spins localizados.

Na Figura 5.4 está mostrado o módulo da magnetização espontânea por spin em função da temperatura (ao longo deste trabalho, quando nos referirmos à temperatura estaremos nos referindo na verdade a  $K_B T/J$ ). Esse resultado foi obtido na ausência de campo magnético externo. Vale salientar que o valor da magnetização espontânea nessas condições pode ser tanto negativo quanto positivo. O que se fez foi considerar o módulo da magnetização. Outra alternativa seria não utilizar condições periódicas de contorno e colocar os spins das bordas da rede alinhados na direção de magnetização positiva. Nós obtivemos um valor de 0.011 para a temperatura crítica com um erro de 0.023.

Para fazer os cálculos, tanto de magnetização como de energia, foram utilizados 500000 passos de Monte Carlo. Para temperaturas próximas da temperatura crítica ( $T_c$ , tempe-

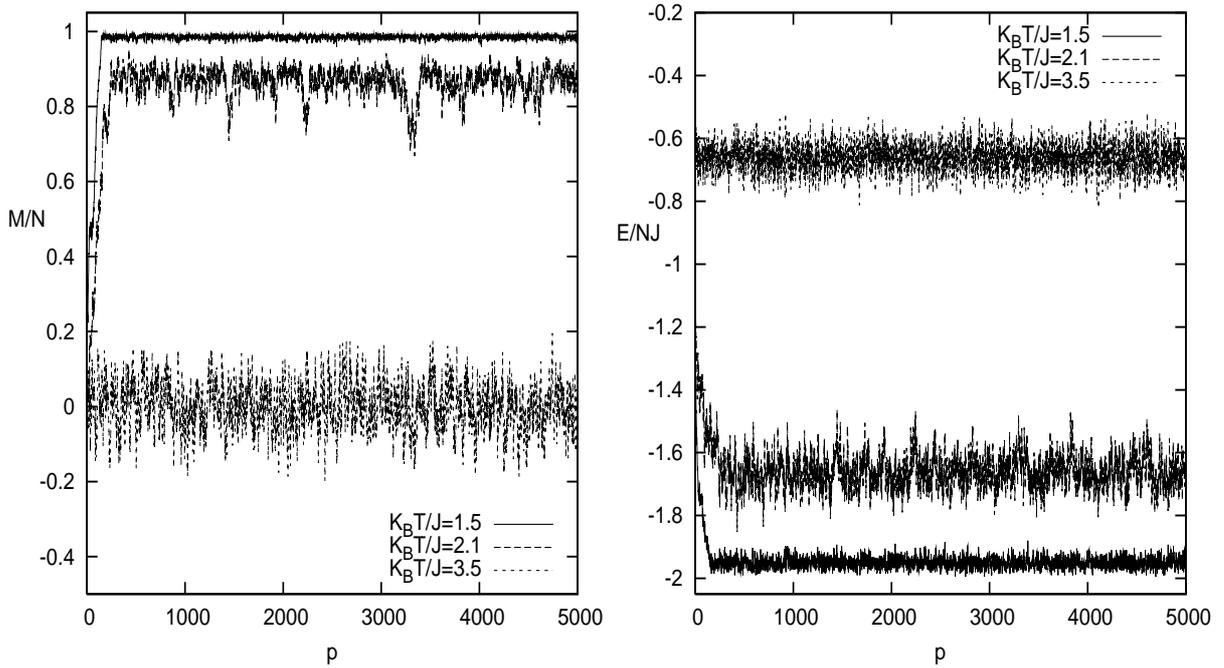


Figura 5.3: Magnetização por spin (esquerda) e energia por spin (direita) em função do número de passos de Monte Carlo  $p$ .

ratura de Curie), foram utilizados 900000 passos de Monte Carlo com a finalidade de compensar as maiores flutuações em torno da média (da magnetização e energia) quando comparadas com as flutuações existentes para temperaturas mais afastadas da temperatura crítica.

Na Figura 5.5 está mostrado o resultado para a energia por spin ( $E/NJ$ ) em função da temperatura ( $K_B T/J$ ). Esse resultado foi obtido na ausência de campo magnético externo e utilizando os mesmos parâmetros usados no cálculo da magnetização espontânea.

Agora, tendo calculado a energia do sistema em função da temperatura, podemos obter o calor específico através da seguinte expressão

$$C = \frac{\partial U}{\partial T}. \quad (5.4)$$

O resultado obtido para o calor específico do sistema em função da temperatura está mostrado na figura 5.6. Este comportamento do calor específico indica que acontece uma transição de fase em uma temperatura de aproximadamente  $\frac{K_B T_c}{J} = 2.27$ . Podemos observar na Figura 5.4 que acontece transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética nesta temperatura.

O método Monte Carlo permite, além do cálculo de magnetização espontânea, observar

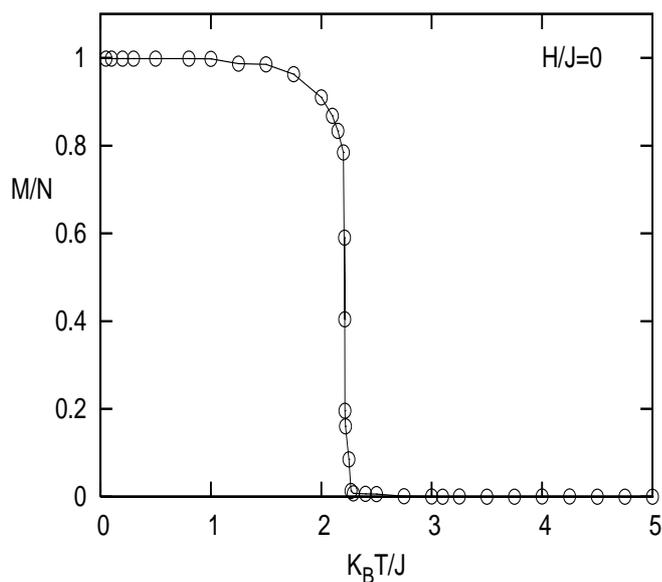


Figura 5.4: Magnetização espontânea em função da temperatura na ausência de campo magnético externo.

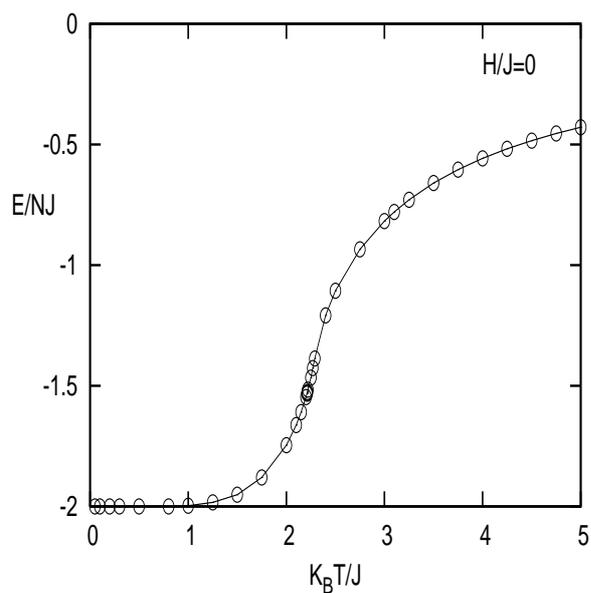


Figura 5.5: Energia em função da temperatura na ausência de campo magnético externo.

o comportamento da magnetização do sistema quando é aplicado um campo magnético externo. Na Figura 5.7 estão mostrados os resultados obtidos para a magnetização em função do campo magnético externo para três valores diferentes de temperatura.

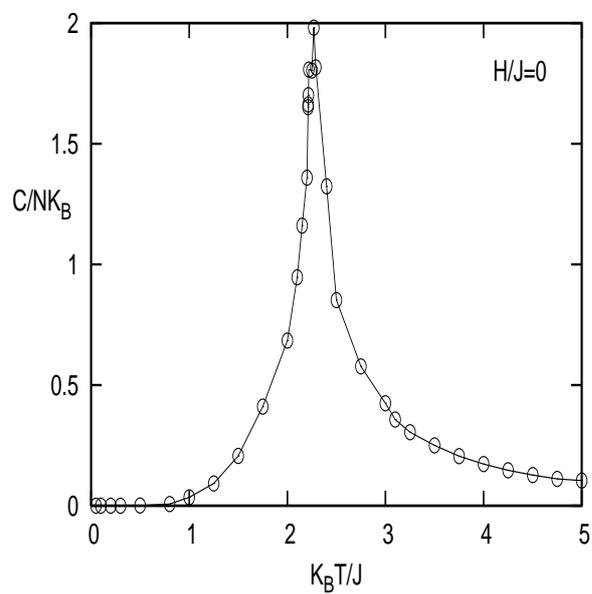


Figura 5.6: Calor específico em função da temperatura na ausência de campo magnético externo.

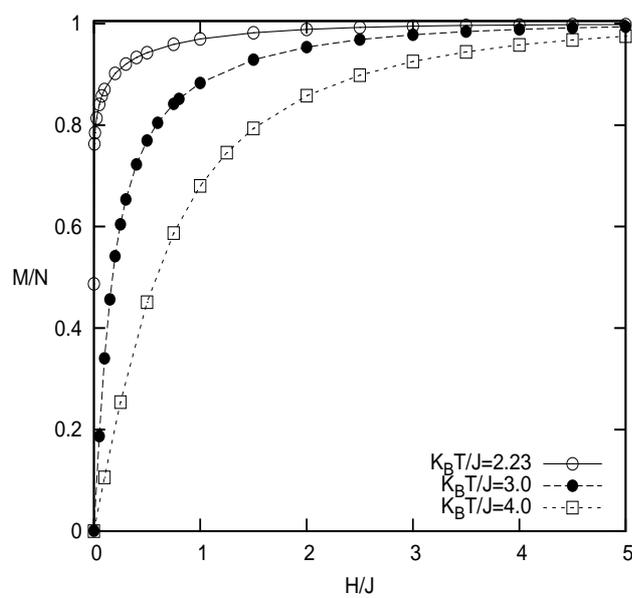


Figura 5.7: Magnetização em função do campo magnético externo para alguns valores de temperatura.

# 6 MONTE CARLO QUÂNTICO

O conjunto de técnicas que aplicam o MC para calcular propriedades quânticas de sistemas atômicos e moleculares é conhecido como Monte Carlo Quântico (MCQ). Esta utilização do MC é relativamente recente quando comparada com seu emprego em sistemas clássicos, no entanto, o uso do MCQ está em expansão devido às constantes inovações neste campo de pesquisa. Este crescente interesse é reflexo direto da disponibilidade e do contínuo desenvolvimento dos recursos computacionais que permitiram este tipo de cálculo sofisticado, não apenas para pequenas moléculas, mas também para grandes e variados sistemas moleculares.

## 6.1 Monte Carlo Variacional

O esquema mais simples dentre todos os métodos MCQ é o Monte Carlo Variacional (MCV). Este método pode ser interpretado como uma generalização da simulação de Monte Carlo. A sua atual importância é devida a sua simplicidade e por ser o ponto de partida das demais simulações MCQ. A essência desse método é a aplicação do MC no princípio variacional da mecânica quântica para calcular o valor esperado da energia, dada uma função de onda tentativa.

O princípio variacional é a formulação mais eficiente e difundida para encontrar soluções aproximadas da equação de Schrödinger. Ele estabelece que a energia associada à função de onda aproximada é superior ou igual à energia associada à função de onda exata do sistema. Este princípio pode ser derivado a partir de um sistema de interesse, cujo operador hamiltoniano  $H$  é independente do tempo e de uma função de onda tentativa  $\psi$ , não normalizada. Neste caso, o valor médio (ou esperado) da energia é calculado pela

seguinte expressão

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi^*(\omega) H \psi(\omega) d\omega}{\int \psi^*(\omega) \psi(\omega) d\omega} \quad (6.1)$$

Escrevendo  $\psi(\omega)$  como uma expansão em termos de um conjunto completo de autofunções ortogonais de  $H$ ,  $\psi(\omega) = \sum_i a_i \phi_i$ , lembrando que  $H\phi_i = E_i \phi_i$ , tem-se a equação (6.1) escrita na seguinte forma

$$\langle E \rangle = \frac{\int \sum_j a_j^* \phi_j^*(\omega) H \sum_k a_k \phi_k(\omega) d\omega}{\int \sum_j a_j^* \phi_j^*(\omega) \sum_k a_k \phi_k(\omega) d\omega} = \frac{\int \sum_j a_j^* \phi_j^*(\omega) \sum_k a_k E_k \phi_k(\omega) d\omega}{\int \sum_j a_j^* \phi_j^*(\omega) \sum_k a_k \phi_k(\omega) d\omega} \quad (6.2)$$

Utilizando a ortogonalidade das autofunções pode-se escrever

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_j \sum_k a_j^* a_k E_k \delta_{jk}}{\sum_j \sum_k a_j^* a_k \delta_{jk}}, \quad (6.3)$$

onde a função delta de Kronecker,  $\delta_{jk}$ , indica que todos os termos da integral são iguais a zero, exceto aqueles em que  $j = k$ . A equação (6.3) pode ser escrita da seguinte maneira

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_k |a_k|^2 E_k}{\sum_k |a_k|^2}. \quad (6.4)$$

Considerando  $E_0$  o menor auto-valor de  $H$  tem-se então

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_k |a_k|^2 E_k}{\sum_k |a_k|^2} \geq \frac{\sum_k |a_k|^2 E_0}{\sum_k |a_k|^2} = E_0, \quad (6.5)$$

estabelece-se, assim, o princípio variacional:  $\langle E \rangle \geq E_0$ .

A forma da função de onda não é especificada neste princípio. O cálculo da energia pode então ser realizado com qualquer função bem comportada (contínua, normalizável e com derivadas parciais contínuas). No tratamento de sistemas multieletrônicos, o princípio da indistinguibilidade eletrônica exige que a função de onda eletrônica seja anti-simétrica para férmions.

O princípio variacional permite também avaliar a qualidade das funções empregadas no

cálculo da energia uma vez que, a função de onda tentativa estará mais próxima da função de onda exata quanto mais próxima a energia a ela associada estiver da energia exata. Em outras palavras, quanto menor a energia, melhor a função de onda. A confiabilidade e a popularidade dos métodos variacionais estão justamente nesta certeza da energia calculada ser sempre maior que a energia exata, proporcionando um parâmetro de comparação entre as funções de onda tentativa e também entre os resultados calculados e os experimentais. O cálculo do valor esperado da energia resume-se, portanto, a resolver as integrais da equação (6.1).

Vários métodos podem ser empregados para solucionar estas integrais. A utilização do MC com amostragem preferencial para este fim, reestrutura a equação (6.1) para a forma de uma equação para o cálculo de média.

Multiplicando o integrando do numerador por  $\psi(\omega)/\psi(\omega)$ , pela esquerda do operador hamiltoniano, obtém-se

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi^*(\omega)\psi(\omega)\frac{H\psi(\omega)}{\psi(\omega)}d\omega}{\int \psi^*(\omega)\psi(\omega)d\omega}. \quad (6.6)$$

Definindo-se a energia local ( $E_L$ ) como

$$E_L(\omega) = \frac{H\psi(\omega)}{\psi(\omega)}, \quad (6.7)$$

tem-se que

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi^*(\omega)\psi(\omega)E_L(\omega)d\omega}{\int \psi^*(\omega)\psi(\omega)d\omega}. \quad (6.8)$$

Utilizando-se do teorema do valor médio e do conceito de amostragem preferencial do MC (equação 2.8), a equação (6.8) é alterada para a forma de uma média ponderada

$$\langle E \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E_L(\omega_i) = \langle E_L \rangle_{\psi^2}, \quad (6.9)$$

sendo que M é o número de pontos utilizados para o cálculo da média. O subscrito  $\psi^2$  indica que esta média é obtida de uma população de pontos distribuídos segundo a função peso  $p(\omega)$ :

$$p(\omega) = \frac{|\psi(\omega)|^2}{\int |\psi(\omega)|^2 d\omega}. \quad (6.10)$$

Esta função peso é a própria função densidade de probabilidade eletrônica. Desta

maneira, o cálculo do valor esperado da energia é transformado de uma integral para uma simples média aritmética. O valor médio da energia é, então, igual à média da energia local, calculada nos pontos do espaço de fase gerados (equação 3.7) de acordo com a função peso. O erro neste cálculo é dado pelo desvio padrão, que representa a dispersão dos pontos utilizados ao redor da média

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle E_L^2 \rangle - \langle E_L \rangle^2}{M-1}}. \quad (6.11)$$

O MCV apresenta uma particular e importante característica, além daquelas herdadas do princípio variacional. Considerando o caso em que a função de onda tentativa é uma autofunção ( $\phi$ ) do hamiltoniano, a energia local calculada em cada ponto do espaço de fase ( $E_L(\omega)$ ) é uma constante ( $E_x$ )

$$E_L(\omega) = \frac{H\phi(\omega)}{\phi(\omega)} = \frac{E_x\phi(\omega)}{\phi(\omega)} = E_x. \quad (6.12)$$

Conseqüentemente, o valor médio da energia apresentará um desvio padrão (equação 6.11) igual a zero. Esta constatação permite afirmar que o erro associado aos resultados é causado unicamente pela imprecisão da função de onda tentativa, podendo o desvio padrão ser empregado como uma medida na avaliação da qualidade destas funções. Assim, o MCV estabelece adicionalmente que quanto mais próxima a função de onda tentativa estiver da função de onda exata, menor será o desvio padrão associado à média da propriedade calculada.

Na prática, o MCV consiste em calcular a média da energia local (ou qualquer outra propriedade local), a partir de pontos distribuídos conforme a função densidade de probabilidade. Por isto, a qualidade dos resultados está intrinsecamente relacionada com a função de onda tentativa.

# 7 PARTÍCULA EM UM POÇO DE POTENCIAL QUADRADO INFINITO

Consideramos uma partícula se movendo em um potencial do tipo

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}, \quad (7.1)$$

a função de onda que descreve o movimento dessa partícula satisfaz a seguinte condição de contorno

$$\psi(x) = 0 \begin{cases} x \leq 0 \\ x \geq a \end{cases} \quad (7.2)$$

A Figura 7 ilustra este sistema

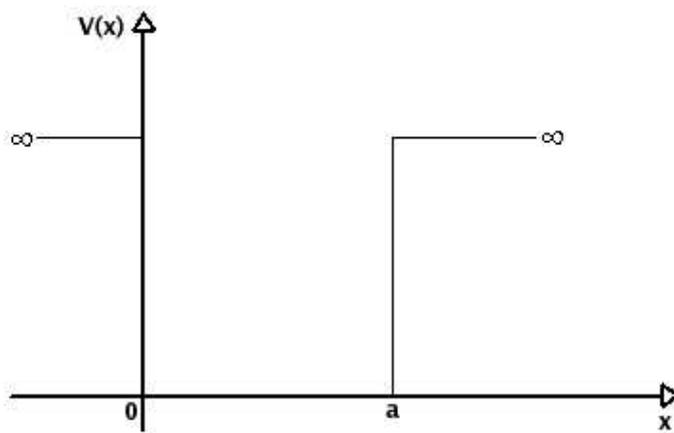


Figura 7.1: Potencial de um sistema de partícula em um poço de potencial quadrado infinito.

Uma partícula em um potencial desse tipo é completamente livre para se mover no espaço  $0 < x < a$ , mas sobre essa partícula age uma força infinita que não deixa ela escapar

para outras posições.

A equação de Schrödinger independente do tempo, para esse sistema, pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x), \quad (7.3)$$

ou

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0. \quad (7.4)$$

Fazendo  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  podemos escrever

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0. \quad (7.5)$$

Esta última equação nada mais é que a equação para o oscilador harmônico simples, cuja solução é dada por

$$\psi(x) = A \operatorname{sen}(kx) + B \operatorname{cos}(kx) \quad (7.6)$$

Aplicando agora as condições de contorno temos que  $\psi(0) = A \operatorname{sen}(k \cdot 0) + B \operatorname{cos}(k \cdot 0) = 0$ . Para que esta igualdade seja satisfeita devemos ter  $B = 0$ . A função de onda também deve obedecer a seguinte condição  $\psi(a) = A \operatorname{sen}(k \cdot a) + 0 \operatorname{cos}(k \cdot a) = 0$ . Para que esse equação seja satisfeita devemos ter  $k_n a = n\pi$ , com  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Temos com isso que a função que descreve esse sistema é dada por  $\psi(x) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ . Usando a condição de normalização

$\int_0^a \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$  obtemos  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ . Podemos escrever então que

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (7.7)$$

Algumas das primeiras funções de onda que descrevem a partícula em um poço de potencial quadrado infinito estão mostradas na Figura 7.2.

Podemos escrever  $k_n = \frac{n\pi}{a}$ , ou seja,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (7.8)$$

Na equação acima vemos que a energia total do sistema é quantizada, ou seja, pode assumir somente alguns valores. A Figura 7.3 ilustra os primeiros autovalores de energia para uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito.

A energia do primeiro autovalor nos interessa particularmente. Para esse sistema ela é

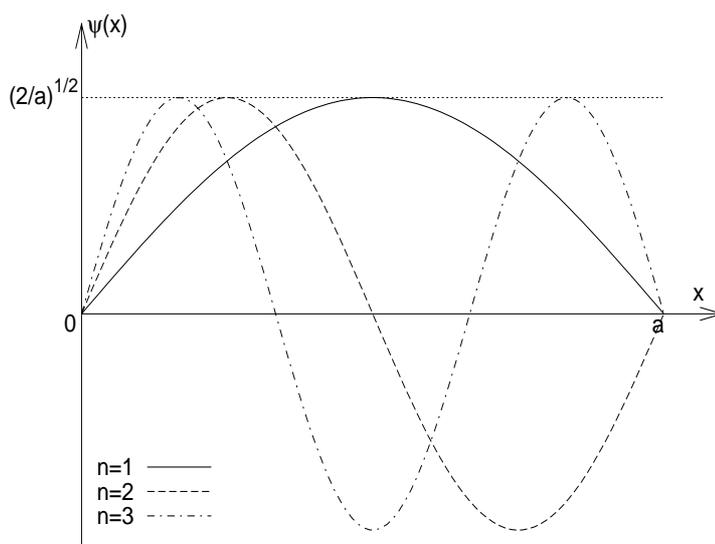


Figura 7.2: Funções de onda, dos três primeiros níveis, de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito.

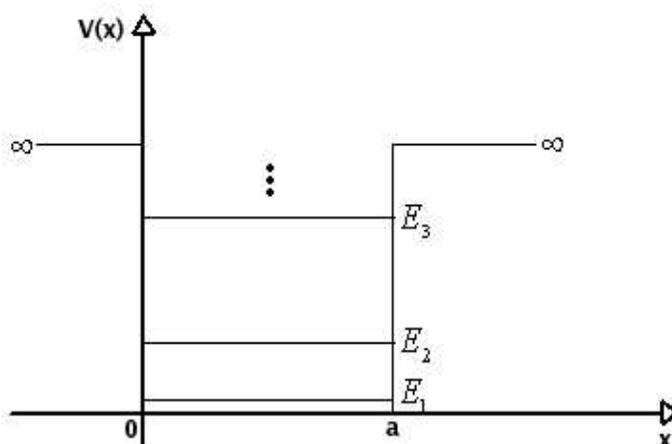


Figura 7.3: Três primeiros níveis de energia.

dada por  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ . Esta é a chamada energia de ponto zero, é a menor energia que uma partícula que está limitada a mover-se na região  $0 < x < a$  pode ter, ou seja, essa partícula não pode ter energia nula. Esse fenômeno é resultado do princípio da incerteza (Eisberg e Resnick (1979)). Isso contrasta com a idéia da física clássica, que todo movimento cessa quando o sistema tem uma energia mínima (na temperatura zero absoluto).

No próximo capítulo estão apresentados os resultados da simulação feita utilizando o método Monte Carlo Variacional para calcular a energia de ponto zero para uma partícula em um de potencial quadrado infinito.

## 8 RESULTADOS II

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos a partir da aplicação do método Monte Carlo Variacional, em conjunto com o algoritmo de Metropolis, para o cálculo da energia do estado fundamental de um sistema de uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito. Para fazer os cálculos utilizamos uma função de onda tentativa que seja contínua, diferenciável, com derivadas contínuas e que satisfaça as condições de contorno para esse sistema. A função de onda tentativa escolhida é

$$\psi_T = Tx(1-x), \quad (8.1)$$

onde  $T$  é a constante de normalização. Essa função de onda tentativa está mostrada na figura 8.1.

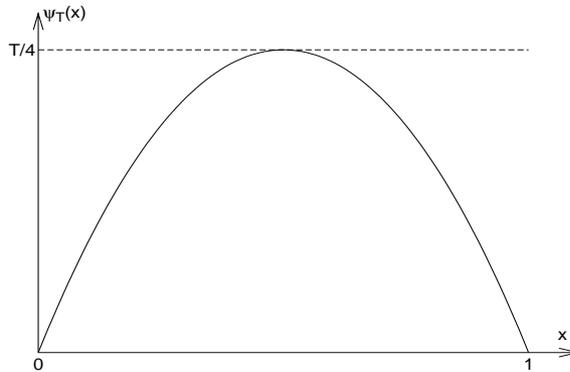


Figura 8.1: Função de onda tentativa.

Utilizando a equação (6.7) e a função de onda tentativa (8.1) podemos escrever a energia local, em unidades nas quais  $\hbar^2 = 2m = 1$ , na seguinte forma

$$E_L(x) = \frac{H\psi_T(x)}{\psi_T(x)} = -\frac{1}{\psi_T(x)} \frac{d^2\psi_T(x)}{dx^2} = \frac{2}{x(1-x)}, \quad (8.2)$$

A probabilidade de encontrar a partícula em uma determinada posição  $x$  é dada por

$$P(x) = |\psi_T(x)|^2 = T^2 x^2 (1-x)^2. \quad (8.3)$$

Utilizando o método de Metropolis é possível amostrar a densidade de probabilidade do sistema gerando uma seqüência de configurações  $x_1, x_2, \dots, x_N$  sem conhecer a constante de normalização  $T$ . A partir desse conjunto de configurações gerado podemos calcular o valor médio da energia para o estado fundamental

$$\langle E_T \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_L(x_i). \quad (8.4)$$

O sub-índice  $T$  indica que a média é feita usando-se a densidade de probabilidade gerada usando-se a função de onda tentativa  $\psi_T$ .

O cálculo da energia é feito conforme descrito abaixo

- 1) Escolhe-se um configuração inicial arbitrária  $x_i$ .
- 2) Gera-se uma nova configuração fazendo  $x_{novo} = x_i + (\epsilon - \frac{1}{2})\Delta$ , onde  $\epsilon$  é um número aleatório com distribuição uniforme entre 0 e 1 e  $\Delta$  é um parâmetro do qual os resultados são independentes. (Neste trabalho, utilizamos  $\Delta = 1.2$  de modo que metade que aproximadamente metade das transições são aceitas).
- 3) Compara-se a razão entre as probabilidades das duas configurações  $R = \frac{P(x_{novo})}{P(x_i)}$  com um número aleatório  $na$ . Se  $R \geq na$  aceita-se a nova configuração, caso contrário rejeita-se a configuração e volta-se para a configuração inicial.

Depois de feito esse processo um certo número de vezes calcula-se o valor médio da energia. Como a configuração inicial é arbitrária, os primeiros passos são descartados a fim de utilizar somente as configurações posteriores ao ‘equilíbrio’ do sistema. (Neste trabalho foram descartadas as primeiras mil configurações).

O algoritmo de Metropolis introduz correlações entre as configurações amostradas. Uma maneira para se solucionar esse problema é através da utilização de médias por bloco. No presente trabalho foram utilizados dez mil blocos com dez mil configurações para cada bloco. Para calcular o valor médio da energia, calculamos a energia média de cada bloco utilizando a energia local de cada configuração e aplicando a equação (8.4). Utilizando o valor médio da energia de cada bloco, calculamos o valor médio da energia do estado fundamental de uma partícula em um poço de potencial infinito usando a equação (8.4) (mas agora trocando a energia local pela energia média de cada bloco). O valor obtido para a energia foi de  $\langle E_T \rangle = 9.86269693$ . O erro estimado para esse valor é obtido usando-se a equação (6.11) e é de  $\pm 0.11107789$ .

## 9 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho teve como objetivos principais fazer um estudo introdutório sobre o método Monte Carlo e, como forma de exemplo, aplicar este método em modelos e sistemas cujos resultados são conhecidos, podendo assim comparar com estes resultados, os obtidos neste trabalho.

Na primeira parte do trabalho, nós estudamos alguns conceitos de probabilidade e estatística que estão fortemente relacionados com o método Monte Carlo. A partir desses conceitos é apresentado o algoritmo de Metropolis. Esse algoritmo é utilizado para gerar um conjunto de configurações consistentes com a função densidade de probabilidade do sistema. Nós utilizamos o algoritmo de metropolis, junto com o modelo de Ising, para estudar magnetismo em um sistema bidimensional de spins localizados. A partir disso, foi possível calcular a magnetização espontânea, energia e calor específico em função da temperatura na ausência de campo magnético externo. Os resultados obtidos estão com boa concordância em relação aos resultados exatos de Onsager (Onsager (1944)). Um aspecto positivo do método Monte Carlo é que, além da magnetização espontânea na ausência de campo magnético externo, que possui solução exata, ele também possibilita o cálculo da magnetização com campo magnético externo diferente de zero.

Na última parte do trabalho, nós estudamos o método Monte Carlo Variacional, este método é muito importante pela sua simplicidade e por ser o ponto de partida para os outros tipos de simulações do método Monte Carlo Quântico. A essência do método Monte Carlo Variacional é aplicar o princípio variacional da mecânica quântica para calcular o valor médio da energia, dada uma função de onda tentativa para o sistema. Nós aplicamos esse método, junto com o algoritmo de Metropolis, para calcular a energia do estado fundamental de uma partícula em um poço de potencial infinito. O resultado obtido para a energia está em bom acordo com o resultado exato.

# APÊNDICE A

Antes de apresentarmos o exemplo de integração propriamente dito, vamos mostrar uma maneira intuitiva para calcular áreas utilizando números aleatórios. Isso é feito a partir de um conjunto de pontos gerados de forma aleatória, mas onde cada ponto do conjunto ocorre com a mesma frequência que os demais (isso acontece quando o número de pontos do conjunto for muito grande). Faremos isso usando uma rotina<sup>1</sup> que gera números aleatórios com distribuição uniforme entre 0 e 1. Consideramos o primeiro quadrante de um círculo de raio ( $R = 1$ ) inscrito em um quadrado de lado ( $L = 2$ ), como mostrado na figura 9.1.

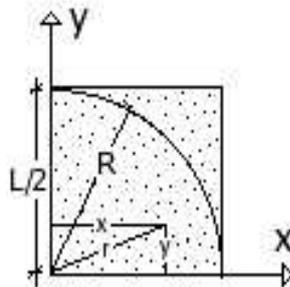


Figura 9.1: Primeiro quadrante de um círculo de raio  $R = 1$  inscrito em um quadrado de lado  $L = 2$ .

Vamos ter um ponto  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  no interior do quadrante para cada par  $(x,y)$  de números aleatórios gerados. Como os pontos são distribuídos uniformemente, temos, para um número muito grande de pontos, que a razão entre o número de pontos dentro do quarto de círculo ( $N_c$ ) e a área do quarto de círculo ( $A_c$ ) deve ser igual à razão entre o número total de pontos, ou seja, o número de pontos dentro do quarto de quadrado ( $N_q$ ) e a área do quarto de quadrado ( $A_q$ ). A partir dessa relação, obtemos a seguinte expressão para o valor de pi

$$\pi = 4 \frac{N_c}{N_q}. \quad (9.1)$$

Para calcular o valor de pi, basta gerar uma certa quantidade de números aleatórios e observar quantos estão dentro e quantos estão fora do quarto de círculo mostrado na

---

<sup>1</sup>Esta rotina está colocada no apêndice B

figura 9.1. Assim é só utilizar a equação (9.1) para obter o valor de pi. Na tabela abaixo, estão colocados os valores de pi, obtidos usando-se diferentes quantidades de pontos

$N_q$	10	$10^3$	$10^5$	$10^7$	$10^9$
$\pi$	3.6	3.18	3.1418	3.1417192	3.14169007

Depois de feita essa primeira abordagem, de como calcular áreas usando números aleatórios, podemos calcular o valor de pi, ou seja, o valor da área de um círculo de raio unitário, usando integração. A área encerrada pelo círculo mostrado na figura 9.2 é  $A = \pi R^2 = \pi$ , pois  $R = 1$ , portanto temos que o valor de pi pode ser calculado através da seguinte equação

$$\pi = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^1 r dr \simeq 2\pi \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i, \quad (9.2)$$

onde  $N$  é o número de pontos no espaço de integração. Parece redundante usar o valor exato de pi para calcular seu valor aproximado, no entanto, isso se justifica pelo fato de ser um simples exemplo de como fazer integração usando o método Monte Carlo.

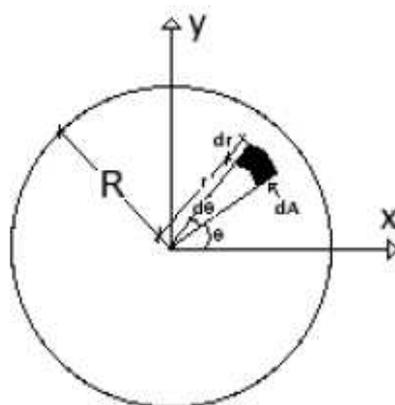


Figura 9.2: Círculo de raio  $R = 1$ , onde está mostrado um elemento de área  $dA$ .

Na tabela abaixo estão colocados os valores de pi para diferentes números de pontos no espaço de integração.

$N_q$	10	$10^3$	$10^5$	$10^7$	$10^9$
$\pi$	2.67640351	3.12988358	3.14019209	3.14181365	3.14158315

O erro aproximado nesses cálculos é  $erro \propto N^{-1/2}$ . Portanto, a aplicação do método Monte Carlo é mais apropriada para calcular integrais multidimensionais pois seu erro é independente desse parâmetro. O oposto acontece com os métodos determinísticos (regra do trapézios, Simpson, etc), onde o erro aumenta a medida que se aumenta o número de dimensões.

# APÊNDICE B

Neste apêndice, está colocado o código das rotinas utilizadas para gerar números aleatórios. Para utilizar essas rotinas deve-se colocá-las em um formato adequado com os espaços e as demais configurações utilizadas no ForTran 77.

As duas primeiras partes do código, que está colocado a seguir, são utilizadas para gerar um número inteiro, aleatório e negativo (idum) para ser utilizado como semente inicial na rotina ran3<sup>1</sup>. A rotina ran3 é utilizada então para gerar os números aleatórios usados nas simulações. Nós utilizamos como semente para a rotina ran3, com exceção da primeira, o último número aleatório gerado.

```
*****
LN=1
call ran1(nu,LN)
do i=1,LN
if(nu(i).lt.1.d-1)nu(i)=nu(i)+3.d0
nuu=12.d0*nu(i)
end do
idum=-nint(nuu)
*****

SUBROUTINE ran1(nu,LN)
REAL rand
INTEGER*4 i,j,d,timeArray(3),LN
PARAMETER (d=10000000)
REAL*8 nu(d)
call itime(timeArray)
i=rand(timeArray(1)+timeArray(2)+timeArray(3))
do j=1,LN
nu(j)=rand(0)
end do
RETURN
END
*****

FUNCTION ran3(idum)
INTEGER idum
```

---

<sup>1</sup>Esta rotina pode ser encontrada, junto com a uma descrição do seu funcionamento, na referência (Press et al. (1987)).

```

INTEGER MBIG,MSEED,MZ
REAL ran3,FAC
PARAMETER (MBIG=1000000000,MSEED=161803398,MZ=0,FAC=1./MBIG)
INTEGER i,iff,ii,inext,inextp,k
INTEGER mj,mk,ma(55)
SAVE iff,inext,inextp,ma
DATA iff /0/
if(idum.lt.0.or.iff.eq.0)then
  iff=1
  mj=MSEED-iabs(idum)
  mj=mod(mj,MBIG)
  ma(55)=mj
  mk=1
  do 11 i=1,54
    ii=mod(21*i,55)
    ma(ii)=mk
    mk=mj-mk
    if(mk.lt.MZ)mk=mk+MBIG
    mj=ma(ii)
  11 continue
  do 13 k=1,4
    do 12 i=1,55
      ma(i)=ma(i)-ma(1+mod(i+30,55))
      if(ma(i).lt.MZ)ma(i)=ma(i)+MBIG
    12 continue
  13 continue
  inext=0
  inextp=31
  idum=1
  endif
  inext=inext+1
  if(inext.eq.56)inext=1
  inextp=inextp+1
  if(inextp.eq.56)inextp=1
  mj=ma(inext)-ma(inextp)
  if(mj.lt.MZ)mj=mj+MBIG
  ma(inext)=mj
  ran3=mj*FAC
  RETURN
END
*****

```

# REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BRUSH, S. G. History of the Lenz-Ising model. *Reviews of Modern Physics*, v. 39, p. 883, 1967.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica, Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. [S.l.]: Editora Campus Ltda, 1979.
- FERMI, E.; RICHTMYER, R. D. Notes on census-taking in Monte Carlo calculations. *Arquivo do Laboratório de Los Alamos*, 1948.
- FERNANDES, F. M. S. S. Cinquentenário da simulação computacional em mecânica estatística. I os primeiros passos. *Química, Bol. Soc. Port. Quím.*, v. 90, p. 39–43, 2003.
- LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000.
- LEITHOLD, L. *O Cálculo com Geometria Analítica*. Terceira edição. [S.l.]: Editora HARBRA ltda, 1994.
- METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, Jun 1953.
- METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, v. 44, p. 335, 1949.
- ONSAGER, L. Crystal statistics. I. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, n. 3-4, p. 117–149, Feb 1944.
- PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes in FORTRAN 77*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1987.
- SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. Segunda edição. [S.l.]: Editora da USP, 1999.
- SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. Primeira edição. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.