SBI-IFUSP

305M810T2761

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

ALGORITMOS DE CLUSTER E PERCOLAÇÃO

MAURÍCIO BORGES BOUABCI

Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

Orientador: Prof. Dr. Carlos Eugenio Imbassahy Carneiro

banca examinadora: Prof. Dr. Carlos Eugenio Imbassahy Carneiro (IFUSP)

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody (IFSC-USP)

Prof. Dr. Sabino José Ferreira Neto (UFMG)

Profa. Dra. Vera Bohomoletz Henriques (IFUSP)

Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski (IFUSP)

Sylvio Carneiro
Prof. Sylvio Roberto Accioly Carneiro
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

B752a

D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Bouabci, Mauricio Borges

**Algoritmos de cluster e percolacao. Sao Paulo
1998.**

**Tese (Doutoramento) Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Geral.**

**Area de Concentração: Física da Materia
Condensada.**

**Orientador: Prof. Dr. Carlos Eugenio Imbassahy
Carneiro.**

**Unitermos: 1.Fisica da Materia Condensada;
2. Modelos de Percolacao; 3. Algoritmos de cluster;
4. Modelo de Blume Capel.**

USP/IF/SBI - 07/98

Existem algumas pessoas de nosso relacionamento que são especiais, de quem nos sentimos sempre muito próximos, basta estar junto a elas para nos sentirmos felizes. A elas dedico esta tese.

Agradecimentos

Já há dez anos estou no Instituto de Física da USP. Durante todo este tempo tive a alegria de conhecer e conviver com diversas pessoas que certamente deixarão profunda impressão sobre minha vida, e com as quais espero nunca perder contato, agora que estou de saída. Gostaria de aproveitar este espaço para agradecê-las.

Algumas delas tive a felicidade de conhecer logo que entrei na Física, como o Marcelo, a Gisele e o Iperó, de minha turma de graduação, e amigos insubstituíveis. Outros conheci já na Mecânica Estatística, como o Ricardo, a Inês e o Mário Tamashiro, todos ótimos companheiros. Preciso agradecer também à Adriana, que quebrou o código ético da profissão, e além de minha analista informal condenada a escutar minhas besteiras tornou-se também ótima amiga.

Por falar em besteira, agradeço ao pessoal de minha sala, Marcos, Nestor e, mais recentemente, Cristiane, por me aguentarem sem enlouquecer.

Faz também mais de seis anos que trabalho com o Prof. Carlos Eugenio, a quem agradeço por todo este tempo de orientação e paciência. Agradeço também aos Profs. Nestor Caticha e Mário de Oliveira, por estarem sempre dispostos a discutir comigo a respeito de minhas dúvidas, e aos Profs. Walter F. Wreszinski e Antônio Piza, com quem fiz diversos cursos que muito apreciei.

Sempre me senti muito à vontade no ambiente da Mecânica Estatística, e isto com certeza deve-se à convivência com pessoas como a Carla, Mingo, Suani, Thierry (agregado), Whilk, Sílvia, Nara, Rafael e Neli. Não dá para esquecer também do Cristiano, Kaline e

Roberta, com quem sempre me diverti e aprendi muito.

Meu reconhecimento também a uma turma que se uniu a esta mais recentemente, minha turma da ECA, Rogério, Ana Rita, Thiago, Bia, Daniel, Pepa, Kátia, Alô, Edu e Renata, mais a última a se agregar à trupe, a Susana. Adoro vocês.

Nem preciso citar a minha família, sempre um ponto de referência e apoio, que me mimaram a ponto de eu virar isto.

Todas estas pessoas, e outras injustamente não mencionadas, fizeram muito mais do que me ajudar com a tese, elas ajudaram e enriqueceram minha própria vida, eu seria capaz de falar sobre elas durante uma tese inteira.

Agradeço também à FAPESP, por ter financiado este projeto, além de viabilizar minha participação em escolas e congressos científicos. Fundamental também foi a permissão do Prof. Jorge de Lyra para que eu pudesse utilizar os computadores do Departamento de Física Matemática.

Por fim, o início: agradeço ao Carl Sagan e sua série Cosmos, que começaram tudo isto.

Resumo

O objetivo principal deste trabalho é o de investigar relações entre mapeamentos de modelos de spin em modelos de percolação e a existência de algoritmos de cluster capazes de simular de forma eficiente o modelo. Apresentamos um mapeamento do modelo de Blume-Capel em um modelo de percolação que permite reobter um algoritmo proposto anteriormente por nós através de uma prova de balanço detalhado, o que abre a possibilidade de descrevermos todo o diagrama de fases do modelo em termos de propriedades dos clusters formados. Isto é particularmente interessante, já que o modelo possui um ponto tricrítico, nunca antes analisado em termos de propriedades de percolação. Encontramos também um mapeamento para o modelo de Ashkin-Teller, e através dos algoritmos de cluster resultantes investigamos a possibilidade de existência de uma fase de Baxter Assimétrica. Analisamos também questões relacionadas ao comportamento de tamanho finito de sistemas que apresentam transições de fase de primeira ordem assimétricas. Finalmente, o algoritmo de cluster desenvolvido para o modelo de Blume-Capel é também generalizado, de forma a podermos aplicá-lo ao estudo do modelo de Blume-Emery-Griffiths.

Abstract

The main goal of this work is to investigate relations between mappings of spin models into percolation models and the possibility of devising an efficient cluster algorithm to simulate the model. We present a mapping of the Blume-Capel model into a percolation model that results in a cluster algorithm proposed previously by us through a detailed balance proof, enabling us to describe the whole phase-diagram in terms of cluster properties. This is particularly appealing, since the model has a tricritical point, a feature not yet analysed in terms of percolation properties. We present also a mapping for the Ashkin-Teller model, and using the obtained cluster algorithms we analyse the possibility of existence of the Asymmetric Baxter phase. We also address questions related to the finite-size behavior of systems in asymmetric first-order phase transitions. Finally, the cluster algorithm developed for the Blume-Capel model is generalized to the study of the Blume-Emery-Griffiths model.

Índice

Introdução	3
1 Método de Monte Carlo - Aspectos Gerais	7
1.1 Descrição Geral do Método	8
1.2 Simulação de Transições de 2ª Ordem	10
1.3 Simulação de Transições de 1ª Ordem	14
1.4 Simulação de Pontos Multicríticos	22
2 Algoritmos de Cluster - Possíveis Abordagens	27
2.1 Algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising	29
2.2 Algoritmo de Swendsen-Wang para o Modelo de Ising	35
2.3 Mapeamento do Modelo de Ising - Abordagem de Hu	38
2.4 Análise dos Algoritmos	42
2.5 Formulação de Kandel-Domany	47
2.6 Algoritmo de Embedding	51
3 Algoritmos de Cluster e Percolação no Modelo de Ashkin-Teller	53
3.1 O Modelo de Ashkin-Teller	54
3.2 Algoritmo de Cluster para o Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Ferromagnética.	60

3.3	Mapeamento do Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Ferromagnética em um Modelo de Percolação.	67
3.4	Algoritmo de Cluster para o Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Antiferromagnética	73
3.5	Mapeamento do Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Antiferromagnética em um modelo de percolação.	81
3.6	Resultados Numéricos	83
4	Mapeamento do Modelo de Blume-Capel em um Modelo de Percolação	97
4.1	O Modelo de Blume-Capel	98
4.2	Algoritmo de Cluster para o Modelo de Blume-Capel	102
4.3	Mapeamento em um Modelo de Percolação	106
4.4	Uma Abordagem Alternativa	131
5	Generalizações para o Modelo BEG	133
5.1	O Modelo de Blume-Emery-Griffiths	133
5.2	Algoritmo de Cluster para o Modelo BEG	136
5.3	Resultados Numéricos	141
	Conclusões	145

Introdução

O estudo das relações existentes entre modelos termodinâmicos e modelos de percolação teve início em 1969, quando Fortuin e Kastelyn introduziram o chamado Modelo de Clusters Aleatórios [FK72], unificando a descrição de diferentes modelos em termos de um modelo de percolação, e mostrando que é possível traduzir diversos conceitos termodinâmicos em termos de propriedades de percolação.

Ao longo dos anos, esta conexão revelou-se extremamente útil, tendo sido utilizada como ferramenta de estudo de diversos fenômenos físicos que ocorrem nos modelos de Ising e Potts, como por exemplo descontinuidades da magnetização espontânea na temperatura crítica de modelos unidimensionais com potenciais de interação de longo alcance [ACCN88]. Foi também através desta conexão que a desigualdade FKG (Fortuin-Kastelyn-Ginibre [FKG71]) foi introduzida, sendo esta desigualdade de extrema importância na análise matemática de fenômenos críticos, como por exemplo na determinação de cotas superiores para o valor de expoentes críticos.

Mais recentemente, a conexão com um modelo de percolação passou a ser utilizada também em simulações numéricas de modelos de spins [SW87], servindo como base para o desenvolvimento de algoritmos de cluster, que representam uma nova forma de se efetuar a simulação, que pode resultar vantajosa em relação às técnicas usuais, já que este tipo de algoritmo pode descorrelacionar as configurações geradas de forma mais eficiente, e também eliminar efeitos de histerese em transições de 1ª ordem.

O objetivo deste trabalho é o de mostrar que um algoritmo de cluster desenvolvido

anteriormente por nós para o Modelo de Blume-Capel [BC96] corresponde a um mapeamento deste modelo em um modelo de percolação. De certa forma, estaremos seguindo um processo inverso ao que ocorreu com o Modelo de Potts, onde a existência do mapeamento em um modelo de percolação permitiu que um algoritmo de cluster para efetuar simulações numéricas fosse desenvolvido. Aqui a situação é inversa: dispomos de um algoritmo de cluster, obtido através de uma prova de balanço detalhado, e queremos achar o mapeamento em um modelo de percolação que corresponda a este algoritmo.

Este mapeamento parece bastante promissor, porque teremos então a possibilidade de estender todas as técnicas mencionadas anteriormente para um modelo muito mais complexo, que possui toda uma linha crítica, além de transições de 1^a ordem e um ponto tricrítico. O algoritmo de cluster desenvolvido por nós é constituído também por dois tipos diferentes de cluster, o que enriquece a caracterização do modelo em termos de propriedades dos clusters formados.

Na busca de um mapeamento que nos conduzisse ao algoritmo de cluster proposto, fomos levados a reescrever a Hamiltoniana do modelo em termos de duas novas variáveis tipo Ising. A Hamiltoniana resultante é semelhante a do Modelo de Ashkin-Teller, o que nos motivou a estudar inicialmente um mapeamento para este modelo, na esperança de que esta análise nos auxiliasse no mapeamento do Modelo de Blume-Capel.

Mostramos então que é possível descrever o Modelo de Ashkin-Teller em termos de modelos de percolação, mais especificamente em termos de três modelos de percolação distintos, cada um deles apropriado ao estudo de uma certa região do diagrama de fases do modelo. Utilizando então os algoritmos de cluster a que estes mapeamentos nos conduzem, efetuamos um estudo numérico do diagrama de fases, a fim de determinar a existência ou não da fase de Baxter Assimétrica [DBGK80], questão ainda controversa na literatura.

Os métodos desenvolvidos para o mapeamento do Modelo de Ashkin-Teller foram realmente úteis para o mapeamento do Modelo de Blume-Capel, que foi assim desenvolvido

em termos de variáveis de Ising. O algoritmo resultante do mapeamento corresponde ao algoritmo desenvolvido através de uma prova de balanço detalhado, mostrando que as características dos clusters formados por este algoritmo estão diretamente ligadas a propriedades do modelo termodinâmico.

Finalmente, demonstramos que é possível generalizar o algoritmo proposto anteriormente para o Modelo de Blume-Capel de forma que ele possa ser aplicado também a uma grande região de variação dos parâmetros do Modelo de Blume-Emery-Griffiths, o que abre a perspectiva de que também neste modelo propriedades termodinâmicas possam ser explicadas em termos de propriedades de percolação.

Capítulo 1

Método de Monte Carlo - Aspectos Gerais

Discutimos neste capítulo aspectos relacionados à utilização do Método de Monte Carlo em Mecânica Estatística.

Através do Algoritmo de Metropolis, que constitui a maneira mais direta de implementarmos uma simulação de Monte Carlo, apresentaremos as dificuldades encontradas usualmente em simulações de transições de fases, como o problema da desaceleração crítica em transições de 2ª ordem e a presença de estados metaestáveis e curvas de histerese em transições de 1ª ordem. Muitas vezes, a decisão sobre qual a ordem de uma transição não é uma tarefa fácil, principalmente em regiões onde existem transições dos dois tipos próximas, como em pontos tricríticos. Nestas regiões a solução dos problemas mencionados é fundamental para o estudo das propriedades críticas do modelo.

Mostramos também como extrapolar resultados obtidos na simulação de uma rede finita a fim de obtermos propriedades críticas de uma rede infinita, como por exemplo os expoentes críticos.

1.1 Descrição Geral do Método

Em Mecânica Estatística, a utilização do Método de Monte Carlo está em geral relacionada ao cálculo de valores médios de quantidades físicas de interesse. A partir de um modelo Hamiltoniano para o sistema físico estudado, utilizamos geradores de números randômicos para simular a contribuição estatística de diferentes estados do modelo [Bin79][BS84][BH92].

A razão para utilizarmos este método é a de que em geral não é possível encontrar-se uma solução analítica para o modelo estudado, e por outro lado o cálculo numérico exato é inviável, devido ao grande número de estados possíveis. Se tentarmos escolher um certo número de configurações de forma arbitrária, não conseguiremos uma boa amostragem do espaço de configurações do sistema, uma vez que a maioria das configurações escolhidas terão peso estatístico pequeno.

O método de Monte Carlo resolve estes problemas através de uma amostragem por importância: selecionamos um certo número de configurações de modo que elas já satisfaçam a distribuição de probabilidades correta. Para alcançarmos este objetivo, partimos de uma configuração inicial qualquer do sistema e geramos novas configurações estocasticamente através de uma cadeia de Markov. As configurações geradas obedecerão a distribuição de equilíbrio correta se o procedimento utilizado obedecer à condição de balanço detalhado (para uma demonstração deste resultado, ver [Doo53]):

$$W_{\sigma \rightarrow \sigma'} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)} = W_{\sigma' \rightarrow \sigma} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma')} \quad , \quad (1.1)$$

onde W representa a probabilidade de transição entre duas configurações, e $\exp(-\beta \mathcal{H}(\sigma))$ é proporcional à probabilidade de termos a configuração σ , de acordo com a distribuição de Boltzmann.

É necessário também que possamos acessar todas as configurações do sistema, ou seja, o algoritmo deve ser ergódico.

Após um certo tempo transiente, atingiremos configurações características da distribuição de equilíbrio, e para calcularmos então médias estatísticas utilizamos a propriedade de ergodicidade da cadeia de Markov, substituindo a média sobre configurações por uma média sobre o tempo (por uma unidade de tempo entendemos a distância entre duas configurações vizinhas da cadeia).

A forma mais direta de efetuarmos uma simulação de Monte Carlo é através do algoritmo de Metropolis, que parte da seguinte escolha para a probabilidade de transição:

$$W_{\sigma \rightarrow \sigma'} = \begin{cases} 1 & \text{Se } \mathcal{H}(\sigma') < \mathcal{H}(\sigma) \\ e^{-\beta[\mathcal{H}(\sigma') - \mathcal{H}(\sigma)]} & \text{Se } \mathcal{H}(\sigma') > \mathcal{H}(\sigma) \end{cases} \quad (1.2)$$

A prova de que esta escolha para as probabilidades de transição satisfaz a condição de balanço detalhado é direta.

Como exemplo prático, vamos mostrar como o algoritmo de Metropolis é aplicado ao Modelo de Ising. A Hamiltoniana do modelo é definida por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1. \quad (1.3)$$

A partir de uma configuração de spins arbitrária, efetuamos as seguintes etapas:

1. Sorteamos um spin da rede.
2. Calculamos qual será a diferença de energia $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\sigma') - \mathcal{H}(\sigma)$, se o sinal do spin for invertido.
3. Se $\Delta\mathcal{H} < 0$, aceitamos a nova configuração com probabilidade $p = 1$.
4. Caso a energia do sistema aumente, calculamos a probabilidade de transição $e^{-\beta(\Delta\mathcal{H})}$.
5. Sorteamos um número randômico r entre 0 e 1.
6. Se r for menor do que W , aceitamos o novo sinal do spin, caso contrário a configuração de spins não é alterada.

Geramos assim uma nova configuração do modelo. Como ela possui no máximo apenas um spin diferente da configuração anterior, repetimos as etapas acima um número de vezes igual ao número de spins da rede, para que as configurações utilizadas no cálculo de médias não sejam muito correlacionadas. A tentativa de modificarmos um número de spins igual ao número total de spins da rede corresponde à uma unidade de tempo, ou a um passo de Monte Carlo. Calculamos então as quantidades físicas desejadas, e repetimos este procedimento por um certo número predeterminado de vezes, a fim de calcularmos médias estatísticas.

1.2 Simulação de Transições de 2ª Ordem

Uma grande vantagem do Método de Monte Carlo é a de que não efetuamos nenhuma aproximação no modelo estudado. O único erro envolvido é o erro estatístico no cálculo de médias, que será dado por $\sigma/\sqrt{N}$.

Mas para que o erro seja realmente dado pela expressão acima, é necessário que os dados utilizados no cálculo da média sejam estatisticamente independentes, o que nem sempre é o caso. Citamos na seção anterior o caso trivial onde apenas um spin da rede é modificado de cada vez, o que obviamente conduz a configurações muito correlacionadas.

Uma outra fonte mais sutil de correlação entre os dados obtidos ocorre em transições de segunda ordem, onde a divergência do comprimento de correlação ξ ocasiona um fenômeno conhecido como desaceleração crítica. Grandes blocos de spins na rede passam a agir de forma correlacionada, prejudicando a obtenção de dados estatisticamente independentes.

Para medirmos este efeito, é conveniente estudarmos o comportamento da função de correlação temporal $C(t)$, definida por

$$C(t) = \frac{\langle A(t)A(0) \rangle - \langle A(t) \rangle \langle A(0) \rangle}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}, \quad (1.4)$$

onde o operador A representa alguma grandeza física de interesse, como magnetização ou energia. Na figura (1.1) mostramos o comportamento da função de correlação no modelo

de Ising, quando estamos na temperatura crítica da rede infinita, e a simulação é efetuada através do algoritmo de Metropolis.

Figura 1.1: Correlação temporal no Modelo de Ising, para dois tamanhos de rede diferentes.

Vemos que em uma rede de tamanho $L = 64$ são necessários mais de 1000 passos de Monte Carlo antes que as configurações obtidas tornem-se estatisticamente independentes. Outro fato a ser notado é que o tempo de correlação aumenta com o tamanho da rede. Esta dependência pode ser descrita através da seguinte lei de escala [HH77]:

$$\tau \sim L^z, \quad (1.5)$$

onde τ é o tempo de correlação, e z é o chamado expoente crítico dinâmico. É este expoente que mede a real eficiência de um algoritmo, porque um expoente z elevado dificultará a obtenção de dados estatisticamente independentes em redes de maior tamanho, tornando necessário um grande número de passos de Monte Carlo.

No algoritmo de Metropolis, mudanças na rede propagam-se por difusão, através de um passeio aleatório. Para modificarmos uma configuração crítica de tamanho ξ são

necessários ξ^2 passos, e como $\xi \sim L$ o algoritmo apresenta um expoente crítico z próximo de 2.

Algoritmos de cluster representam um grande avanço no tratamento deste problema, porque ao efetuarmos mudanças não-locais na rede tornamos possível a obtenção de expoentes críticos dinâmicos menores.

Para efeitos de comparação, fornecemos na tabela abaixo valores assumidos pelo expoente crítico dinâmico dos algoritmos de Metropolis, Wolff e Swendsen-Wang, quando aplicados ao modelo de Ising, de acordo com dados compilados por Barkema e Newan [BN97].

dimensão	Metropolis	Wolff	Swendsen-Wang
2	2.167(1)	0.25(1)	0.25(1)
3	2.02(2)	0.33(1)	0.54(2)
4	-	0.25(1)	0.86(2)

Na prática, o expoente z é medido a partir da função de correlação $C(t)$. O comportamento desta função na temperatura crítica pode ser escrito como [MKB73]:

$$C(t) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i e^{-t/\tau_i} \quad , \quad (1.6)$$

onde C_i são constantes. Todos os tempos de correlação apresentam a mesma dependência com o tamanho da rede ($\tau_i \sim L^z$), e medimos z através do maior tempo de decorrelação, onde os erros envolvidos no ajuste são menores.

Outro aspecto importante a ser levado em consideração em transições de 2ª ordem é o de como extrapolar resultados obtidos em redes finitas a fim de se obter o comportamento de redes infinitas.

Nas proximidades de um ponto crítico, todos os comprimentos que caracterizam o sistema podem ser expressos em termos de um único comprimento, o comprimento de correlação ξ . Como este comprimento diverge no ponto crítico, concluímos que o sistema

não possui um comprimento característico, de onde resulta a sua invariância por transformações de escala [Hua87].

Em um rede finita, isto não pode acontecer, porque o comprimento de correlação pode ser no máximo proporcional à dimensão linear L do sistema, e portanto é em função deste comprimento que as quantidades físicas devem ser medidas. Esta é a hipótese de tamanho finito [Bar79], que pode ser escrita como

$$\xi(T) \sim L \quad , \quad (1.7)$$

onde $\xi(T)$ é o comprimento de correlação, que é função da temperatura T . Como o comprimento de correlação de uma rede infinita diverge como

$$\xi(T) \sim (T - T_c^\infty)^{-\nu} \quad , \quad (1.8)$$

concluimos que a temperatura crítica de uma rede infinita irá se aproximar da temperatura crítica da rede infinita de acordo com a seguinte lei de escala:

$$T_c^L = T_c^\infty + aL^{-1/\nu} \quad . \quad (1.9)$$

Outras leis de escala podem ser obtidas com o mesmo raciocínio. Por exemplo, sabemos que a susceptibilidade magnética diverge através da lei de escala

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.10)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$. Substituindo as expressões (1.7) e (1.8), encontramos

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \quad (1.11)$$

Através de leis de escala como estas, conseguimos extrair o comportamento de quantidades físicas de sistemas infinitos, através da extrapolação dos dados obtidos em redes de tamanhos finitos.

1.3 Simulação de Transições de 1ª Ordem

A principal dificuldade na simulação de transições de 1ª ordem refere-se à existência de estados metaestáveis, que dificultam a obtenção de configurações de equilíbrio do sistema.

Efeitos de metaestabilidade ocorrem porque em temperaturas próximas à temperatura de transição a energia livre do sistema possui dois ou mais mínimos (figura (1.2)), que representam diferentes fases do sistema. Separando estas regiões de mínimo existem barreiras de energia pronunciadas, e configurações com valores para a energia livre correspondentes aos da barreira são bastante improváveis.

Figura 1.2: Forma típica para a energia livre de um sistema em uma transição de 1ª ordem entre duas fases distintas.

Se utilizamos algoritmos locais para efetuar a simulação, para transitarmos entre os diferentes mínimos é necessário passarmos antes por estas configurações improváveis, o que torna o tempo de relaxação para o estado de equilíbrio proibitivamente grande. Só conseguimos efetivamente transitar entre as diferentes fases quando já nos encontramos bastantes distantes da transição (em relação à algum parâmetro de referência), e uma das fases já se tornou bastante desfavorável energeticamente. A consequência destes fatores é a observação de curvas de histerese, o que torna a localização de pontos de transição

bastante imprecisa.

Diversas propostas foram apresentadas com o objetivo de solucionar estas dificuldades. Berg e Neuhaus [BN91][BN92] desenvolveram um algoritmo multicanônico que simula uma distribuição multicanônica que não possui máximos tão pronunciados, o que torna as transições entre as diferentes fases mais frequentes. A distribuição canônica original é obtida após um processo de reconstrução das probabilidades originais.

Marinari e Parisi propuseram um método batizado por eles de “simulated tempering” [MP92], onde a temperatura é elevada ao status de uma variável dinâmica que assume valores ao longo de um conjunto pré-determinado, sendo que o sistema é sempre mantido em equilíbrio. A idéia é que em temperaturas mais altas é sempre mais fácil transitar-se entre as diferentes fases.

Outro trabalho a ser mencionado é o de Batrouni e Svetitsky [BS87], que utilizam técnicas de aceleração de Fourier para aumentar a velocidade de transição entre as diferentes fases.

A nossa abordagem neste trabalho será a de eliminarmos os estados metaestáveis através da utilização de algoritmos de cluster, o que nos possibilitará transitar entre as diferentes fases de forma direta, sem a necessidade de passarmos antes por configurações pouco prováveis. A principal vantagem deste método em relação aos citados anteriormente é a de que ele não necessita de nenhum parâmetro adicional, a Hamiltoniana original é simulada de forma direta.

A utilização de algoritmos de cluster na simulação de transições de 1ª ordem limitou-se até aqui ao estudo de modelos com simetria tipo Potts [RT90][Wan89][RW90], onde é possível a utilização direta dos algoritmos de Swendsen-Wang e Wolff. Por outro lado, simetrias apresentadas por estes modelos tornam alguns resultados elementares, como por exemplo a localização da linha de 1ª ordem do Modelo de Ising. Transições de 1ª ordem assimétricas, como a que ocorre no modelo de Blume-Capel, representam um grau maior

de dificuldade.

Mesmo após termos sido bem sucedidos na obtenção de estados de equilíbrio do sistema, devemos considerar ainda como efetuar uma análise de tamanho finito. Em transições de 1^a ordem o comprimento de correlação ξ não diverge, e é de se esperar que o tamanho da rede só apareça através de seu volume, sendo este o comportamento de escala esperado de qualquer quantidade física analisada.

Em transições de 1^a ordem simétricas, este argumento foi comprovado por uma análise fenomenológica desenvolvida por Binder e Landau [BL84][CLB86], através do estudo de distribuições de probabilidades. Como em uma transição de 1^a ordem duas ou mais fases coexistem, a distribuição de probabilidades para as configurações do sistema apresenta diversos picos, que correspondem às diferentes fases. A abordagem considerada pelos autores é a de que estes picos podem ser bem aproximados por gaussianas, e a distribuição de probabilidades total é dada simplesmente por uma sobreposição de gaussianas. Uma vez que dispomos da distribuição de probabilidades, todas as quantidades físicas de interesse podem ser obtidas através dos momentos da distribuição.

Tomando o Modelo de Ising como exemplo, em um ponto do diagrama de fases onde coexistem duas fases ($T < T_c$, $H = 0$) a distribuição de probabilidades para a magnetização pode ser escrita como

$$P_L(s) = \frac{L^{d/2}}{2(2\pi k_B T \chi_L)^{1/2}} \left[\exp\left(\frac{(-s - M_L)^2 L^d}{2k_B T \chi_L}\right) + \exp\left(\frac{(-s + M_L)^2 L^d}{2k_B T \chi_L}\right) \right], \quad (1.12)$$

onde M_L é o módulo da magnetização em cada um dos mínimos da energia livre (que estão centrados em $\pm M_L$).

Na presença de um campo magnético H , estes mínimos serão deslocados para $\pm M + \chi H$, e os pesos relativos de cada um dos picos da distribuição de probabilidades não serão mais iguais, sendo necessário o acréscimo de um fator de Boltzmann, $\exp\left(\frac{\pm H M_L L^d}{k_B T}\right)$. A

distribuição de probabilidades passa a ser dada então por

$$P_L(s) = \frac{L^{d/2}(2\pi k_B T \chi_L)^{-1/2}}{\cosh(H M_L L^d / k_B T)} \times \left[\exp\left(\frac{H M_L L^d}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-(s - M_L - \chi_L H)^2 L^d}{2 k_B T \chi_L}\right) + \exp\left(-\frac{H M_L L^d}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-(s + M_L - \chi_L H)^2 L^d}{2 k_B T \chi_L}\right) \right]$$

É fácil obter agora os momentos da distribuição em que estamos interessados. A magnetização será dada por

$$\langle s \rangle_L = \int_{-1}^{+1} s P_L(s) ds = \chi_L H + M_L \tanh\left(\frac{H M_L L^d}{k_B T}\right) \quad , \quad (1.13)$$

e a susceptibilidade magnética por

$$\chi(H, T, L) = \left(\frac{\partial \langle s \rangle_L}{\partial H} \right)_T = \chi_L + \frac{M_L^2 \left(\frac{L^d}{k_B T} \right)}{\cosh^2\left(\frac{H M_L L^d}{k_B T}\right)} \quad (1.14)$$

Vemos através desta expressão que a susceptibilidade terá um máximo de altura L^d e largura L^{-d} , comportando-se como uma função delta no limite $L \rightarrow \infty$.

Concluimos então que a representação da distribuição de probabilidades em termos de duas distribuições gaussianas conduz a um comportamento de tamanho finito que depende apenas do volume da rede, L^d .

No entanto, esta abordagem apresenta alguns problemas. O primeiro deles diz respeito à aproximação em termos de gaussianas centradas nos máximos da distribuição de probabilidades. Embora nas regiões de pico esta seja uma boa aproximação, esta representação não é correta na região de mínimos de probabilidades, onde configurações com contornos de energia desfavoráveis são relevantes no cálculo do peso estatístico de cada configuração.

Uma inconsistência mais séria aparece quando analisamos transições de 1ª ordem assimétricas. Em transições simétricas como a do Modelo de Ising, a simetria por inversões $s \leftrightarrow -s$ implica que a transição ocorrerá sempre para $H = 0$, independente do tamanho da rede. Em transições assimétricas não há porque esperar que a susceptibilidade seja igual dos dois lados da transição, podendo ocorrer que $\chi_+ \neq \chi_-$. Com isto, ocorrerá um

deslocamento do campo h que controla a transição, em relação ao valor esperado em um sistema infinito.

O problema é que a forma de escala deste deslocamento depende da maneira como escolhemos a constante de normalização para a distribuição de probabilidades [BRK94]. A escolha utilizada até aqui corresponde à uma formulação onde a área abaixo de cada pico da distribuição é igual. Esta escolha conduz a um comportamento de escala para o deslocamento do campo h proporcional a L^{-2d} . Por outro lado, se considerarmos a constante de normalização escolhida de forma tal que a altura dos diferentes picos (ao invés da área) sejam iguais, encontraremos um comportamento de escala proporcional a L^{-d} . Desta forma, não conseguimos concluir qual o comportamento de tamanho finito a ser esperado em transições de 1^o ordem, e a abordagem via gaussianas torna-se inadequada para a análise de transições assimétricas.

Esta ambiguidade foi resolvida por Borgs e Kotechý [BK90] [BK92], que propuseram uma nova teoria para a análise de efeitos de tamanho finito em transições de 1^o ordem. A teoria consiste em representar a função de partição de diferentes modelos geometricamente, em termos de regiões de mínima energia separadas por contornos energéticos desfavoráveis. Desta forma, é possível mostrar que a função de partição de um modelo que descreve a coexistência de N fases, para $h = h_t$ (h é um campo que controla a transição, e h_t é o seu valor na transição), pode ser aproximada por

$$Z(h, L) \approx \sum_{q=1}^N \exp \{ -f_q(h) \beta L^d \} \quad , \quad (1.15)$$

onde $f_q(h)$ é uma energia livre metaestável para a fase q . Ao efetuarmos esta aproximação em baixas temperaturas, estaremos cometendo erro proporcional a e^{-L/L_0} , onde L_0 é uma constante. Dispondo desta aproximação, podemos calcular todas as quantidades físicas que estamos interessados. A conclusão obtida pelos autores é a de que o deslocamento do campo h obedece a uma lei de escala proporcional a L^{-2d} , se a transição for entre duas fases, e a L^{-d} , se a transição envolver um número maior de fases, como a do modelo de

Blume-Capel.

Uma outra questão relevante na análise de transições de 1ª ordem refere-se à própria classificação da ordem da transição, como definir se a transição é de 1ª ou 2ª ordem. Em princípio, ambas as transições possuem naturezas bastantes distintas: enquanto uma transição de 2ª ordem caracteriza-se pela divergência do comprimento de correlação ξ , em transições de 1ª ordem a presença de estados metaestáveis gera a existência de efeitos de histerese. Pela análise de qual dos dois efeitos ocorre a determinação da ordem de uma transição deveria ser tarefa direta. Mas isto nem sempre é verdade, porque existem ocasiões onde os dois efeitos podem ocorrer simultaneamente. Por exemplo, no modelo de Potts de cinco estados em duas dimensões ocorre o que é chamado de transição fracamente de 1ª ordem, onde, mesmo a transição sendo de 1ª ordem ocorrem efeitos típicos de uma transição de 2ª ordem, como o aumento do comprimento de correlação ξ . Isto torna a análise ainda mais complicada, porque além da metaestabilidade temos de simular redes grandes o suficiente para terem dimensão linear maior que o comprimento de correlação.

Outra forma de caracterizarmos a ordem da transição é através do estudo da estrutura gaussiana da distribuição de probabilidades [Bin81]. Com este objetivo, definimos o cumulante de quarta ordem U_L da seguinte forma:

$$U_L = \frac{1}{3} \left(1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{\langle E^2 \rangle_L^2} \right) \quad (1.16)$$

Se estivermos estudando uma transição de 2ª ordem, a distribuição de probabilidades apresentará apenas um mínimo, e no limite $L \rightarrow \infty$ teremos que $\langle E^4 \rangle = \langle E^2 \rangle^2$, e portanto $U_L \rightarrow 0$. Já em uma transição de 1ª ordem flutuações entre as diferentes fases farão com que o cumulante não se anule, passando a assumir um certo valor mínimo.

Existem também outras técnicas para estudar-se transições de 1ª ordem, baseadas na construção de histogramas [FS89] para a obtenção da distribuição de probabilidades, e que determinam a ordem da transição a partir de propriedades desta distribuição.

Considerando uma transição de 1^a ordem controlada pela temperatura, onde q fases ordenadas coexistem com uma fase desordenada, tal como pode ocorrer no modelo de Potts de q estados, Borgs e Janke [BJ92] propuseram a utilização da expressão (1.15) para determinarmos a temperatura de transição, partindo da observação de que nesta temperatura as energias livres $f_q(h)$ das diversas fases tornam-se iguais, e o ponto de transição passa a ser o ponto onde a razão entre o peso estatístico total das diversas fases ordenadas e o peso estatístico da fase desordenada torna-se igual ao número total de fases ordenadas:

$$R(V, \beta) \equiv \frac{\sum_{E \leq E_0} P_\beta(E)}{\sum_{E \geq E_0} P_\beta(E)} = q \quad , \quad (1.17)$$

onde E_0 é a energia do mínimo entre os dois picos, quando estes possuem alturas iguais. A técnica consiste então em regularmos primeiramente a altura dos dois picos, até que elas tornem-se iguais, determinando desta forma E_0 . Em seguida ajustamos a temperatura, até que encontremos $R(V, \beta) = q$, e esta será a temperatura de transição.

Uma outra técnica foi proposta ainda por Lee e Kosterlitz [LK90], baseada no comportamento da altura da barreira entre os dois mínimos de energia livre em função do tamanho da rede. A partir de um histograma para a energia, podemos calcular o número de vezes que um observável X é obtido através da expressão

$$\exp[-A(X, L, M)] = M \mathcal{Z}^{-1}(\beta) \sum_{E_1} \Omega(E_1, X) \exp(-\beta E_1) \quad , \quad (1.18)$$

onde M é o número de passos de Monte Carlo, e $\Omega(E_1, X)$ é o número de estados com energia E_1 . Em uma transição controlada pelo campo magnético X é escolhido como sendo a magnetização, e em uma transição controlada pela temperatura X é a energia.

Para valores fixos de β , L , e M a quantidade $A(X, L, M)$ terá a mesma forma de $F(X, L)$, a energia livre do sistema, e podemos escrever $\Delta A = A(X) - A(X') = F(X) - F(X') = \Delta F$, e uma medida de ΔA corresponde a uma medida de ΔF .

No ponto de transição, $F(X, L)$ possui dois mínimos pronunciados que correspondem às duas fases que coexistem em X_1 e X_2 , separadas por um máximo em X_M , que corresponde a configurações como barreiras de domínios entre as duas fases (ver figura (1.2)). Se definirmos agora um campo de escala g que move o sistema ao longo da fronteira de fases, de tal forma que o ponto crítico corresponda a $g = 0$, a linha de 1ª ordem a $g < 0$ e a fase desordenada a $g > 0$, podemos expandir $F(X, L)$ na forma

$$F(X, L) = L^d f_0(X, g) + L^{d-1} f_1(X, g) \quad , \quad (1.19)$$

onde a densidade de energia livre f_0 é mínima e constante para $X_1 \leq X \leq X_2$, e o termo de superfície f_1 possui um máximo em X_M . Concluimos então que F possui mínimos em $X_1(L) = X_1 - \mathcal{O}(L^{-1})$ e $X_2(L) = X_2 + \mathcal{O}(L^{-1})$. Já o máximo possuirá altura

$$\Delta F(L) = F(X_m, L) - F(X_1, L) = B(g)L^{d-1} + \mathcal{O}(L^{d-2}) \quad . \quad (1.20)$$

Esta expressão é válida em transições de 1ª ordem, onde a energia livre apresenta uma estrutura de mínimos.

A idéia agora é classificarmos a ordem da transição através do comportamento de ΔF . Se estivermos em uma transição de 1ª ordem, ΔF aumentará com o tamanho da rede, já que os mínimos tornam-se mais pronunciados, sendo esperado um comportamento com L^{d-1} para tamanhos de rede suficientemente grandes. Já um ΔF constante corresponde a uma transição de 2ª ordem. Lee e Kosterlitz mostraram que o método pode ser utilizado com sucesso nos modelos de Potts e Ising.

A grande qualidade deste método é o fato dele poder ser utilizado mesmo quando $L \ll \xi$. Se nos encontramos nas proximidades de um ponto multicrítico, o comprimento de correlação ξ aumentará, mesmo se a transição for de 1ª ordem, inviabilizando muitas das técnicas descritas anteriormente.

Talvez a forma mais direta de analisarmos a ordem de uma transição de fases seja através do comportamento de escala de quantidades físicas como magnetização, sus-

ceptibilidade etc. Enquanto que em transições de 2ª ordem estas apresentarão um comportamento que dependerá dos expoentes críticos, em uma transição de 1ª ordem esta dependência ocorrerá com potências do volume da rede, de acordo com a teoria de Borgs e Kotecký. Mas a situação não é tão clara, porque a teoria é válida apenas para baixas temperaturas (no Modelo de Ising, até $T \approx T_c/2$), resta ainda entender o comportamento de escala nas proximidades de um ponto multicrítico. Este estudo não foi até aqui realizado com sucesso, porque para este fim é necessária a simulação de redes grandes o suficiente para que $L \gg \xi$, e a obtenção de estados de equilíbrio para redes desta magnitude é virtualmente impossível, se utilizamos algoritmos convencionais. É necessário que transições entre as diferentes fases possam ser obtidas com facilidade, conforme acontece quando utilizamos algoritmos de cluster.

1.4 Simulação de Pontos Multicríticos

Efetuar uma simulação nas proximidades de um ponto multicrítico significa enfrentar todos os problemas mencionados até aqui para transições de 1ª e 2ª ordem, ao mesmo tempo, além de novos problemas introduzidos pela mistura de efeitos típicos de cada uma das transições.

Explicamos na última seção como utilizar propriedades da distribuição de probabilidades (ou da energia livre do sistema, de forma análoga) de modo a definir o ponto de transição como o ponto onde os máximos possuem a mesma altura. No entanto, nas proximidades de um ponto multicrítico este tipo de análise deve ser efetuado com o máximo cuidado, sendo necessária a utilização de redes bastante grandes para conseguirmos tirar conclusões à respeito do comportamento termodinâmico do sistema.

Isto acontece devido à uma certa mistura entre efeitos típicos de cada espécie de transição, quando estas se encontram muito próximas. Por exemplo, nas proximidades de um ponto tricrítico uma estrutura com dois picos de energia já ocorre mesmo enquanto

a transição ainda é de 2ª ordem [BS84], é necessário uma análise de tamanho finito com redes bastante grandes para verificarmos que os picos tendem a se colapsar. De forma semelhante, a ausência de efeitos de histerese não implica necessariamente que a transição seja de 2ª ordem. Podemos estar lidando simplesmente com uma transição fracamente de 1ª ordem, onde ocorre também um aumento do comprimento de correlação ξ . Todos estes fatores tornam bastante delicada a análise do sistema, tornando necessário simular-se redes com dimensão linear maior que o comprimento de correlação.

Vemos assim que a simulação nas proximidades de um ponto multicrítico envolve necessariamente a utilização de redes maiores. Isto representa uma grande limitação para algoritmos usuais, devido a dificuldade experimentada por eles na obtenção de estados de equilíbrio do sistema.

Vamos descrever nesta seção duas técnicas desenvolvidas para a simulação de pontos tricríticos, em particular para o Modelo de Blume-Capel.

D. P. Landau e R. Swendsen [LS81][LS86] efetuaram um estudo das propriedades tricríticas deste modelo utilizando o formalismo do grupo de renormalização de Monte Carlo [Ma76][Swe79]. A localização do ponto tricrítico foi obtida através da simulação simultânea de duas redes de tamanhos diferentes, mas com a razão entre as suas dimensões lineares igual ao fator de escala da transformação do grupo de renormalização. Assim, após termos procedido a uma etapa de renormalização da rede maior ficamos com duas redes de igual tamanho, que devem apresentar os mesmos valores para as funções de correlação, se a Hamiltoniana original estiver em um ponto fixo da transformação. A localização do ponto tricrítico é estabelecida como sendo o ponto onde a diferença entre o valor das funções de correlação anula-se.

Outra técnica, baseada em uma forma de escala para a distribuição de probabilidades quando expressa em termos de campos de escala convenientes foi proposta por Bruce e Wilding [BW92][WN96]. O procedimento pode ser descrito da seguinte forma, tomando

como exemplo o Modelo de Blume-Capel:

A partir da função de partição do modelo,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[K\phi - \mu \sum_{i=1}^N S_i^2 + H \sum_{i=1}^N S_i \right] \quad S_i = \pm 1, 0, \quad (1.21)$$

onde K , μ e H são definidos em unidades de temperatura, e $\phi = \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$, definimos os seguintes observáveis:

A densidade ρ ,

$$\rho = L^{-d} \sum_i S_i^2, \quad (1.22)$$

a densidade de energia,

$$u = L^{-d} K^{-1} \phi, \quad (1.23)$$

e a magnetização,

$$m = L^{-d} \sum_i S_i. \quad (1.24)$$

O comportamento do sistema nas proximidades do ponto tricrítico é controlado por três campos de escala [Rie72][LS84], g , λ e h . Em geral, cada um destes campos é formado por combinações lineares dos campos termodinâmicos T , μ e H . Como no Modelo de Blume-Capel a energia é invariante por uma inversão no sinal dos spins, sabemos que o ponto tricrítico estará localizado no plano $H = 0$, e o campo de escala h coincide com o campo magnético H . Os outros dois campos de escala, g e λ , serão ortogonais a H , estando localizados no plano $\mu - T$. Escrevemos então

$$\begin{aligned} h &= H - H_t \\ \lambda &= (\mu - \mu_t) + r(K - K_t) \\ g &= (K - K_t) + s(\mu - \mu_t) \end{aligned} \quad (1.25)$$

onde os subscrito t indica valores referentes ao ponto tricrítico e os parâmetros r e s controlam a direção dos campos λ e g . O campo g é escolhido de forma a ser tangente

à curva de coexistência no ponto tricrítico, o campo λ pode assumir qualquer direção no plano $\mu - T$ (não paralela a g). Definimos agora operadores de escala na forma

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{M} \rangle &\equiv L^{-d} \partial \ln Z_L / \partial h \\ \langle \mathcal{D} \rangle &\equiv L^{-d} \partial \ln Z_L / \partial \lambda \\ \langle \mathcal{E} \rangle &\equiv L^{-d} \partial \ln Z_L / \partial g\end{aligned}\quad , \quad (1.26)$$

de onde segue que

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{M} \rangle &= m \\ \langle \mathcal{D} \rangle &= \frac{1}{1 - sr} [\rho - su] \\ \langle \mathcal{E} \rangle &= \frac{1}{1 - sr} [u - r\rho]\end{aligned}\quad . \quad (1.27)$$

A idéia é efetuar o seguinte ansatz para o comportamento da distribuição de probabilidades $p_L(\rho, u, m)$ no ponto tricrítico (válido para L suficientemente grande):

$$p_L(\rho, u, m) \simeq \frac{1}{1 - sr} p_L^* \left(a_1^{-1} L^{d-y_1} \mathcal{M}, a_2^{-1} L^{d-y_2} \mathcal{D}, a_3^{-1} L^{d-y_3} \mathcal{E} \right) \quad , \quad (1.28)$$

onde p_L^* é uma função universal invariante por escala, que caracteriza o ponto tricrítico. a_i são fatores métricos não universais e y_i são expoentes tricríticos.

O ponto tricrítico pode ser obtido agora através do cumulante de quarta ordem,

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \quad (1.29)$$

A invariância por escalas da distribuição p_L implica que no ponto tricrítico o cumulante U_L será igual para todos os tamanhos de rede.

Na prática, determinamos inicialmente a linha de transição de 1^ª ordem e a sua extensão analítica (região onde a linha já não é física), localizando então o ponto sobre a linha onde o cumulante U_L torna-se invariante por escalas. A linha de 1^ª ordem é

encontrada através do método de histogramas, para um dado valor de T fixo ajustamos os valores de D e s , até que a distribuição $p_L(\mathcal{D})$ torne-se simétrica em $\mathcal{D} - \langle \mathcal{D} \rangle$.

Através deste método, e utilizando redes quadradas de dimensões lineares entre $L = 12$ e $L = 40$, Wilding e Nielaba [WN96] encontraram os seguintes valores para a localização do ponto tricrítico: $D_t = 1.9665(3)$ e $T_t = 0.608(1)$, em excelente acordo com os resultados de Landau e Swendsen, $D_t = 1.965(15)$ e $T_t = 0.609(3)$, e com resultados através de cálculos com matrizes de transferência, $D_t = 1.965(5)$ e $T_t = 0.610(5)$ [Bea86]. Ao que parece, o método não é tão sensível a problemas de tamanho finito mencionados anteriormente, uma vez que o tamanho das redes simuladas é relativamente pequeno. Ressaltamos que, mesmo para estes tamanhos de rede, estatísticas bastante elevadas (20 milhões de passos de Monte Carlo) foram necessárias para a obtenção de estados de equilíbrio, uma vez que a simulação foi efetuada com o algoritmo de Metropolis usual.

Capítulo 2

Algoritmos de Cluster - Possíveis Abordagens

Neste capítulo discutiremos possíveis abordagens para a formulação de algoritmos de clusters, tomando como referencial o Modelo de Ising.

Foi para o estudo deste modelo que Swendsen e Wang propuseram o seu algoritmo [SW87], conhecido agora como algoritmo de Swendsen-Wang, que utiliza um mapeamento do Modelo de Potts em um Modelo de Percolação descoberto por Fortuin e Kasteleyn em 1969 [FK72] como uma nova forma de efetuar-se simulações de Monte Carlo do modelo. Mostraremos aqui como escrever a função de partição do modelo de forma a realizarmos a simulação numérica através de algoritmos de clusters, e também como chegar ao mapeamento em um modelo de percolação. Utilizaremos para este fim de uma combinação entre as abordagens elaboradas por Sokal [SS96] e por Hu [Hu84], que torna a prova bastante elegante e simples. Esta será também a abordagem utilizada por nós em outros capítulos, ao descrevermos o mapeamento do Modelo de Blume-Capel e de Ashkin-Teller.

Descreveremos aqui também uma variante do Algoritmo de Swendsen-Wang conhecida como algoritmo de Wolff, desenvolvida por U. Wolff em 1989 [Wol89], e que pode ser interpretada como um algoritmo de Swendsen-Wang com dinâmica modificada. Ao con-

trário do Algoritmo de Swendsen-Wang, não é necessária aqui uma prova de mapeamento, trabalhamos apenas com a condição de balanço detalhado. Este algoritmo é muito mais fácil de ser implementado na prática, além de ter desempenho melhor que o de Swendsen-Wang em dimensões maiores que dois. Ele nos fornece também uma grande maleabilidade na forma de definirmos as probabilidades de formação de clusters, o que levanta a questão sobre qual probabilidade resulta em uma dinâmica mais eficiente, e qual o significado desta probabilidade especial.

A generalização destes algoritmos para outros modelos não é de forma alguma trivial, tendo cada caso de ser examinado em particular. Diversas formulações foram sugeridas de forma a possibilitar a aplicação destes algoritmos em outros modelos, mas surge aqui um novo problema, de que muitas vezes as formulações encontradas resultam em dinâmicas pouco eficientes. Descreveremos aqui duas sugestões diferentes, uma de Niedermayer [Nie88] e outra de Brower e Tamayo [BT92], conhecida como algoritmo de embedding.

Um grande avanço na compreensão do porquê de certas definições de clusters funcionarem na prática enquanto que outras não, mesmo satisfazendo à condição de balanço detalhado, foi obtido através de um trabalho de Kandel e Domany [KD91], que propuseram um formalismo geral para a elaboração de algoritmos de cluster. Através deste formalismo podemos encontrar as diversas formas possíveis de transformarmos um modelo de spins em um modelo de ligações, e também nos fornece algumas indicações dos motivos que tornam algumas formulações eficientes ou não.

No entanto, esta formulação está longe de nos dar uma forma fechada de como descobrir qual o algoritmo de cluster apropriado para uma dado modelo, em geral ela nos fornece apenas os valores das probabilidades de modo que a condição de balanço detalhado seja satisfeita, mas estes valores dependem de qual tipo de ligações estamos considerando, o que deve ser decidido com base em considerações físicas sobre o modelo.

Como uma forma de evitar-se esta ambiguidade, Cattandella *et al.* [CFN⁺94] sugeriram

que fosse utilizada como condição adicional que as probabilidades de ligação fossem definidas de forma tal que a transição de percolação do algoritmo proposto coincidissem com a transição termodinâmica. Isto de fato é o que acontece no Modelo de Ising quando efetuamos o mapeamento em um modelo de percolação, e é um dos problemas encontrados na simulação de vidros de spin: se utilizamos uma probabilidade de ligação igual a do modelo de Ising as duas transições não coincidem, e a performance do algoritmo é bastante fraca.

Apresentaremos neste capítulo todas estas técnicas desenvolvidas para a criação de algoritmos de cluster, e que serão utilizadas em capítulos posteriores como guia para a elaboração de algoritmos em outros modelos. Discutiremos também os motivos que tornam algumas formulações ineficientes, e como evitar que isto aconteça.

2.1 Algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising

A Hamiltoniana do Modelo é definida por

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1, \quad (2.1)$$

onde a somatória é sobre primeiros vizinhos, e $\beta = 1/k_B T$.

O algoritmo consiste das seguintes etapas:

1. Sorteamos um spin da rede, chamado de spin semente, por ser o primeiro spin a pertencer ao cluster.

(1)

-	-	-	+	+	+
+	+	+	+	+	-
+	+	⊕	-	-	+
-	+	+	+	+	+
-	-	+	+	+	-
+	+	+	+	+	-

2. Ligamos spins vizinhos que possuem o mesmo sinal do spin semente com probabilidade $p = 1 - \exp(-2K)$. Cada spin ligado é um novo spin pertencente ao cluster.

(2)

-	-	-	+	+	+
+	+	+	+	+	-
+	+	⊕	-	-	+
-	+	⊕	⊕	+	+
-	-	⊕	+	+	-
+	+	+	+	+	-

3. Ligamos os vizinhos dos novos spins pertencentes ao cluster com probabilidade igual à do item anterior.

(3)

4. Continuamos este processo até que não existam mais novos vizinhos a serem considerados.

(4)

5. Invertamos o sinal dos spins pertencentes ao cluster, com probabilidade $W_u = 1$.

(5)

6. A partir da nova configuração de spins obtida reiniciamos o processo, a partir da etapa 1.

Para que este algoritmo simule as propriedades de equilíbrio do modelo é suficiente que ele obedeça a condição de balanço detalhado:

$$W(\sigma \rightarrow \sigma')e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)} = W(\sigma' \rightarrow \sigma)e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma')}, \quad (2.2)$$

ou

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \sigma')}{W(\sigma' \rightarrow \sigma)} = e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} \quad (2.3)$$

Vamos começar analisando a diferença de energia entre as configurações inicial e a final. Notando que a energia interna do cluster não se modifica após a inversão do sinal de seus spins, e que o restante da rede não é modificado, concluímos que a diferença de energia será devida apenas à ligações no contorno do cluster. Assim,

$$\exp\{-\beta\Delta\mathcal{H}\} = \exp\left\{-2K \left[l_{++}(\partial C) - l'_{++}(\partial C)\right]\right\}, \quad (2.4)$$

onde ∂C é a superfície do cluster, constituída por vizinhanças entre sítios no cluster e sítios fora do cluster, e $l_{++}(\partial C)$ e $l'_{++}(\partial C)$ é o número de vizinhanças entre spins iguais no contorno do cluster, nas configuração inicial e final, respectivamente.

Por outro lado, a probabilidade de transição de um cluster para outro pode ser escrita na forma

$$W(\sigma \rightarrow \sigma') = W_C W_v \prod_{\langle ij \rangle \in \partial C} [1 - p(\sigma_i, \sigma_j)] = W_C W_v e^{-2K l_{++}(\partial C)}, \quad (2.5)$$

onde C significa cluster, W_C é a probabilidade de ligarmos os spins do cluster e W_v é a probabilidade de virarmos o cluster (que neste caso é igual a um).

Como todos os spins do cluster possuem o mesmo sinal, tanto na transição direta quanto na reversa, a probabilidade de ligarmos o cluster é igual em ambas as transições. A probabilidade de virarmos o cluster também é igual, de modo que na equação (2.3) só devemos considerar o termo da produtória no contorno do cluster, que representa a probabilidade de não ligarmos o cluster com a sua vizinhança. Observamos então que a probabilidade de ligação foi escolhida de forma tal a termos obedecida a condição de balanço detalhado.

O algoritmo deve também ser ergódico, o que de fato acontece, porque é sempre possível criarmos um cluster constituído por apenas um spin, o que garante que qualquer configuração de spins possa ser obtida.

No entanto, esta não é a única formulação possível para um algoritmo que trabalhe com a criação de um único cluster no modelo de Ising. Por exemplo, poderíamos ter optado por ligarmos também spins diferentes, definindo as probabilidades de ligação da seguinte forma:

$$\begin{aligned} p_{ig} &= 1 - \exp(-3K) \\ p_{dif} &= 1 - \exp(-K) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Isto é possível porque o que importa é que a razão entre a probabilidade de não ligarmos o cluster com a sua vizinhança na transições direta e inversa seja igual a diferença de energia entre estas configurações. Para as probabilidades tomadas como exemplo isto seria obtido da seguinte forma:

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \sigma')}{W(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{e^{-2Kl_{++}(\beta C)} e^{-Kl_{+-}(\beta C)}}{e^{-3Kl'_{++}(\beta C)} e^{-Kl'_{+-}(\beta C)}} \quad (2.7)$$

onde l_{+-} é o número de vizinhanças entre spins diferentes. Observando que

$$\begin{aligned} l'_{+-} &= l_{++} \\ l_{+-} &= l'_{++} \end{aligned} \quad (2.8)$$

vemos que o equilíbrio com a diferença de energia entre as configurações continua a ser obedecido.

Notamos assim que o fato de que apenas a razão entre as probabilidades importar na prova de balanço detalhado nos permite definir as probabilidades de ligação de um número infinito de formas diferentes.

Mas isto é uma falsa liberdade: na prática resulta que a probabilidade de ligação que une apenas spins iguais é a única que conduz a simulações eficientes. Quando utilizamos outras probabilidades, como a definida acima, o que acontece é que os clusters formados tornam-se muito grandes, alterando praticamente todos os spins da rede, e efetivamente não modificando quase nada.

O que a probabilidade $p = 1 - \exp(-2K)$ tem de especial é que ela corresponde a probabilidade encontrada quando mapeamos o Modelo de Ising em um modelo de percolação. Assim, a liberdade fornecida pelo algoritmo de Wolff é ilusória, para conseguirmos uma simulação eficiente é necessário que os clusters formados possuam uma transição de percolação que coincida com a transição termodinâmica do modelo estudado.

2.2 Algoritmo de Swendsen-Wang para o Modelo de Ising

Em 1987, Swendsen e Wang inventaram uma forma radicalmente nova de efetuar-se simulações numéricas [SW87], baseados em um trabalho de Fortuin e Kastelyn [FK72], que mapearam o Modelo de Ising em um modelo de percolação. Mostraremos nesta seção como este mapeamento pode ser obtido, e como obter o algoritmo de Swendsen e Wang a partir dele. Para isto, utilizaremos uma abordagem introduzidas originalmente por Sokal [SS96] e por Hu [Hu84], e que serão utilizadas em outros modelos estudados nesta tese.

A função de partição do Modelo de Ising é dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta\mathcal{H}) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j\right) \quad (2.9)$$

Podemos reescrever Z da seguinte forma:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} \left[e^{-K} + (e^K - e^{-K}) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \right] \quad (2.10)$$

ou

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^K \left[e^{-2K} + (1 - e^{-2K}) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \right] \quad (2.11)$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^K \left[(1 - p) + p \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \right] \quad (2.12)$$

onde $p = 1 - e^{-2K}$. O fator e^K que aparece na última expressão é uma constante, sendo portanto desconsiderado daqui por diante (podemos pensar que redefinimos a Hamiltoniana original, acrescentando uma constante de forma tal que o estado fundamental tenha energia zero).

Vamos introduzir agora, em cada vizinhança $\langle ij \rangle$, uma variável extra n_{ij} , que pode

assumir valores $n_{ij} = 0$ e 1 . A função de partição (2.12) pode ser reescrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{n\}} \prod_{\langle ij \rangle} [(1-p)\delta_{n_{ij},0} + p\delta_{n_{ij},1}\delta_{\sigma_i\sigma_j}] \quad (2.13)$$

Podemos considerar que a variável $\{n\}$ representa a existência (ou não) de uma ligação entre os sítios $\langle ij \rangle$, ($1 =$ ligado, $0 =$ ligação ausente). Chamaremos esta função de partição de função de partição conjunta, e é com respeito a ela que definiremos o algoritmo de Swendsen-Wang para o Modelo de Ising, que consiste das seguinte etapas:

1. Varremos toda a rede criando ligações entre sítios vizinhos i e j com probabilidade $p = 1 - e^{-2K}$, se $\sigma_i = \sigma_j$. Se a ligação for aceita, associamos ao par ij uma variável de ligação $n_{ij} = 1$. Caso contrário, não haverá ligação, e $n_{ij} = 0$.
2. Identificamos clusters como conjuntos de sítios conectados por ligações $n_{ij} = 1$, ou sítios isolados. Dois sítios estão no mesmo cluster se existe um caminho de ligações entre eles. Desta forma cada spin da rede pertence a um cluster no final do processo.
3. Para cada cluster associamos uma nova variável de Ising, sendo que os dois valores possíveis possuem igual probabilidade ($p = 1/2$).
4. Após termos associado novos valores de Ising para cada cluster, repetimos o processo, a partir da etapa 1.

Se somamos sobre a variável de ligação n voltamos ao Modelo de Ising original. O que acontece se somamos sobre a variável de spin?

Ao efetuarmos esta soma, devemos notar que sítios conectados por ligações n_{ij} devem ter o mesmo sinal de spin, devido a presença do vínculo $\delta_{\sigma_i\sigma_j}$. Assim, cada cluster (conjunto de spins conectados por ligações) possui apenas dois estados possíveis, e a função de partição passa a ser dada por

$$Z = \sum_{\{n\}} \left(\prod_{\langle ij \rangle: n_{ij}=1} p \right) \cdot \left(\prod_{\langle ij \rangle: n_{ij}=0} (1-p) \right) 2^{n_c} \quad (2.14)$$

onde n_c é o número total de clusters (o que inclui clusters formados por apenas um spin). Eliminamos assim a variável de spin, e esta é a função de partição do chamado Modelo de Clusters Randômicos (random-cluster model). Este é um modelo de percolação generalizado, que corresponderia a um modelo de percolação de ligações usual se tivéssemos apenas um estado de spin possível. A presença do termo 2^{n_c} introduz correlações não locais no modelo de percolação.

O que o algoritmo de Swendsen-Wang faz é gerar configurações com peso estatístico dado pela função de partição (2.13), criando alternadamente novas configurações de ligações a partir de configurações de spins, e novas configurações de spins a partir de configurações de ligações.

Vimos assim que é possível mapear o modelo de Ising em um modelo de percolação, e que podemos utilizar a função de partição conjunta dos dois modelos para a elaboração de um algoritmo de cluster.

A mesma ambiguidade encontrada na definição das probabilidades de ligação para o algoritmo de Wolff também acontece aqui. Por exemplo, podemos reescrever a Hamiltoniana na forma

$$\beta\mathcal{H} = -\frac{3K}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{K}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.15)$$

o que resultaria, se seguirmos o mesmo formalismo utilizado acima, em um modelo de percolação com duas probabilidades diferentes,

$$\begin{aligned} p_{ig} &= 1 - e^{-3K} \\ p_{dif} &= 1 - e^{-K} \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde p_{ig} é a probabilidade de ligarmos spins iguais, e p_{dif} a probabilidade de ligarmos

spins diferentes. Formulamos assim o mapeamento de forma a obter probabilidades de ligação alternativas equivalentes as citadas anteriormente para o algoritmo de Wolff, e concluímos que aqui também existem infinitas formas de efetuarmos o mapeamento.

2.3 Mapeamento do Modelo de Ising - Abordagem de Hu

Nesta seção apresentaremos outra forma de se mapear o modelo de Ising em um modelo de percolação, proposta por Hu em 1984 [FK72], onde pela primeira vez foi proposta a utilização deste mapeamento para a criação de uma simulação de Monte Carlo baseada em clusters. A formulação de Hu é bastante apropriada para o cálculo de propriedades físicas do modelo de Ising, e será utilizada por nós também no cálculo de propriedades físicas do modelo de Blume-Capel, quando expresso em termos de um modelo de percolação.

A função de partição para o Modelo de Ising na presença de um campo magnético pode ser escrita como

$$Z_N(K, B) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\sum_{\langle ij \rangle} K(\sigma_i \sigma_j + 1) + B \sum_i \sigma_i - 2KN_b \right] \quad (2.17)$$

onde N_b é número de vizinhanças no grafo G , que é o conjunto de todos os sítios e todas as ligações. $B = H/k_b T$, onde H é o campo magnético aplicado. Redefinimos a energia do sistema de forma que ela se anule para $T = 0$, quando $B = 0$. Podemos reescrever esta expressão como

$$Z_N(K, B) = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + (e^{2K} - 1)\delta_{\sigma_i \sigma_j}] \cdot \prod_i e^{B\sigma_i} \cdot e^{-2KN_b} \quad (2.18)$$

Vamos expandir agora a produtória sobre ligações $\langle ij \rangle$ e utilizar subgrafos $G' \subseteq G$ (G' é um subgrafo de G onde nem todas as ligações estão presentes) para representar os termos da expansão

$$\prod_{\langle ij \rangle} [1 + (e^{2K} - 1)\delta_{\sigma_i \sigma_j}] = [1 + (e^{2K} - 1)\delta_{\sigma_i \sigma_j}] \cdot [1 + (e^{2K} - 1)\delta_{\sigma'_i \sigma'_j}] \cdots [1 + (e^{2K} - 1)\delta_{\sigma''_i \sigma''_j}]$$

Na expansão diagramática acima, 1 corresponde à ausência de ligação e $(e^{2K} - 1)\delta_{\sigma_i\sigma_j}$ à presença de ligação. Por exemplo, uma rede sem nenhuma ligação corresponde a um produto de 1's. Um subgrafo com apenas uma ligação entre os sítios i' e j' corresponde a $[(1)^{N_i-1}(e^{2K} - 1)\delta_{\sigma_{i'}\sigma_{j'}}]$, e assim por diante. Na figura 2.1 representamos um possível subgrafo G' em uma rede G 4×4 .

Figura 2.1: Possível subgrafo G' em uma rede G 4×4 . X e $\bullet$ representam diferentes estados de Ising.

Se dois sítios estão conectados através de uma sequência de ligações, dizemos que eles pertencem ao mesmo cluster. O termo $\delta_{\sigma;\sigma'}$ impõe que spins pertencentes ao mesmo cluster possuam o mesmo sinal. Ao efetuarmos a soma sobre todos os possíveis estados de spin de um subgrafo G' , apenas termos onde todos os spins de um cluster possuem o mesmo sinal contribuirão.

A expressão (2.18) pode ser reescrita então da seguinte forma:

$$Z_N(K, B) = \sum_{G' \subset G} p^{u(G')} (1-p)^{N_b-u(G')} \prod_c 2 \cosh[Bn_c(G')] \quad (2.19)$$

onde $p = 1 - e^{-2K}$, $e(G')$ é o número total de ligações presentes em um grafo G' , $\prod_c$ é uma produtória sobre todos os clusters c existentes em G' e $n_c(G')$ é o número de sítios do cluster c .

A partir desta expressão podemos calcular a magnetização, definida por

$$M(G, p) = \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial B} \ln \mathcal{Z} \quad (2.20)$$

ou

$$M(G, p) = \lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N \mathcal{Z}} \sum_{G' \subseteq G} p^{e(G')} (1-p)^{N_h - e(G')} \cdot \frac{\partial}{\partial B} \left(\prod_c 2 \cosh[B n_c(G')] \right) \quad (2.21)$$

Ao derivarmos em relação a B o termo com a produtória sobre todos os clusters, obtemos a seguinte contribuição:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial B} \left(\prod_c 2 \cosh[B n_c(G')] \right) &= (2 \sinh B n_1) n_1 (2 \cosh B n_2) \cdots (2 \cosh B n_c) + \\ &+ (2 \cosh B n_1) (2 \sinh B n_2) n_2 \cdots (2 \cosh B n_c) + \\ &+ \cdots + \\ &+ (2 \cosh B n_1) (2 \cosh B n_2) \cdots (2 \sinh B n_c) n_c \end{aligned} \quad (2.22)$$

Quando $B \rightarrow 0$, $\sinh(B n_i) \rightarrow 0$, e apenas contribuições de clusters com um número infinito de spins não se anulam. Encontramos desta forma que

$$M = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{-1} \sum_{G' \subseteq G} \Pi(G', p) \frac{N^*}{N} \quad (2.23)$$

onde $\Pi(G', p) = p^{e(G')} (1-p)^{N_h - e(G')} 2^{n_c(G') - 1}$, e N^* é o número total de spins que pertencem aos clusters que percolam. A expressão acima mostra que a magnetização no Modelo de Ising é igual à probabilidade de um sítio da rede pertencer a um cluster que percola.

A susceptibilidade magnética é dada por

$$\chi(G, p) = \lim_{B \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \ln \mathcal{Z} \quad (2.24)$$

e pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \chi(G, p) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{-1} \sum_{G' \subseteq G} \Pi(G', p) \sum_c \frac{n_c^2(G')}{N} \\ &+ \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{-2} \sum_{G' \subseteq G} \sum_{G'' \subseteq G} \Pi(G', p) \Pi(G'', p) \frac{[N^*(G') - N^*(G'')]^2}{2N} \end{aligned} \quad (2.25)$$

onde $\sum_c^f$ é uma soma sobre todos os clusters que não percolam. O primeiro termo desta expressão é o tamanho médio de um cluster escolhido aleatoriamente na rede. O segundo termo se anulará sempre que a probabilidade de ligação p for menor que a probabilidade de percolação p_c . Mesmo para $p > p_c$, podemos argumentar que a contribuição deste termo será finita, porque termos que contribuirão para a soma possuirão valores de N^* diferentes no máximo por $\sqrt{N}$, e a contribuição permanece finita. Desta forma, a susceptibilidade é dada pelo tamanho médio dos clusters finitos, e ambas quantidades possuem o mesmo expoente crítico.

É possível também encontrar uma relação entre a função de conectividade entre pares no modelo de percolação e a função de correlação entre spins. Esta é dada por:

$$\langle \sigma_a \sigma_b \rangle = \frac{1}{ZN(K, B)} \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + (e^{-2K} - 1) \delta(\sigma_i, \sigma_j)] \sigma_a \sigma_b \cdot \prod_i \exp(B \sigma_i) \cdot e^{-2KN_t} \quad (2.26)$$

Podemos expandir em grafos esta produtória de forma completamente análoga à efetuada anteriormente. Se os sítios a e b pertencerem ao mesmo cluster de G' , eles terão a mesma componente de spin, e $\sigma_a \sigma_b$ é igual a 1. Se eles pertencerem a clusters diferentes, $\sigma_a \sigma_b$ é igual a 1 ou -1 com igual probabilidade, e a contribuição deste grafo G' para a somatória é zero. Encontramos assim que, para $B = 0$,

$$\langle \sigma_a \sigma_b \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\sum_{G' \subseteq G} p^{c(G')} (1-p)^{N_t - c(G')} 2^{u_c(G') - 1} \delta(c_a, c_b) \right] / Z \quad (2.27)$$

onde $\delta(c_a, c_b)$ é igual a 1 quando a e b estão no mesmo cluster, e zero quando estão em clusters diferentes. A expressão no lado direito desta igualdade nada mais é do que a função de conectividade entre pares do modelo de percolação. Concluimos então que os expoentes ν_p e $\nu_{p'}$ para o comprimento de correlação nas proximidades de p_c e η_p para a função de conectividade entre pares nas proximidades de p_c são iguais aos valores correspondentes no Modelo de Ising.

Com este formalismo é possível mostrar também que a energia interna e o calor específico são proporcionais ao número médio de ligações $e(G')$ e as flutuações de $e(G')$, respectivamente.

A abordagem de Hu é uma forma elegante e simples de se obter o mapeamento do modelo de Ising em um modelo de percolação, chamado por Hu de Modelo de Percolação de Ligações Correlacionadas.

2.4 Análise dos Algoritmos

É possível interpretar o algoritmo de Wolff como sendo um algoritmo de Swendsen-Wang modificado, onde após termos construído todos os clusters sorteamos um sítio da rede de forma aleatória e modificamos os spins deste cluster com probabilidade $W_v = 1$.

Como consequência, o algoritmo de Wolff trabalhará a maior parte do tempo com os clusters de maior tamanho, porque a probabilidade de sortearmos um dado cluster é proporcional ao seu tamanho. Isto ajuda a entender porque este algoritmo possui expoente crítico dinâmico z menor que o do algoritmo de Swendsen-Wang em dimensões maiores do que dois, já que estes são os clusters mais relevantes nas proximidades de uma transição de segunda ordem, por refletirem o aumento do comprimento de correlação.

Interpretando o algoritmo de Wolff desta forma, podemos deduzir também a mesma relação encontrada no algoritmo de Swendsen-Wang, entre a susceptibilidade magnética do Modelo de Ising e o tamanho dos clusters formados. A menos de fatores constantes, a susceptibilidade é dada na região paramagnética por

$$\chi = \frac{1}{L^d} \left\langle \left(\sum_k \sigma_k \right)^2 \right\rangle \quad (2.28)$$

onde L é a dimensão linear do sistema, d é a dimensão e a somatória é sobre todos os spins da rede. Esta expressão pode ser reescrita como

$$\chi = \frac{1}{L^d} \left\langle \left(\sum_x a_x c_x \right)^2 \right\rangle \quad (2.29)$$

onde x é um rótulo para os clusters, c_x é o tamanho do cluster x e a_x é uma variável que pode assumir os valores ± 1 , dependendo do sinal dos spins que formam o cluster. Desta forma, a susceptibilidade passa a ser dada por

$$\chi = \frac{1}{L^d} \left\langle \sum_{x,y} a_x a_y c_x c_y \right\rangle \quad (2.30)$$

Como o sinal dos spins de cada cluster não depende do sinal dos outros clusters (os clusters não interagem entre si), $\langle a_x a_y \rangle = \delta_{xy}$, e

$$\chi = \frac{1}{L^d} \left\langle \sum_x c_x^2 \right\rangle = \left\langle \sum_x \frac{c_x}{L^d} c_x \right\rangle \quad (2.31)$$

Por outro lado, a probabilidade de sortearmos um dos clusters de Swendsen-Wang formados é dada por $\frac{c_x}{L^d}$, e portanto o tamanho médio do cluster é

$$\langle c \rangle = \left\langle \sum_x \frac{c_x}{L^d} c_x \right\rangle \quad (2.32)$$

Concluimos então que a susceptibilidade é igual ao tamanho médio dos clusters formados pelo algoritmo de Wolff, da mesma forma que para o algoritmo de Swendsen-Wang.

Uma consequência direta desta relação é que podemos encontrar uma lei de escala para o tamanho dos clusters formados. Escrevendo a susceptibilidade como

$$\chi = \frac{1}{L^d} \sum_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle c \rangle \quad , \quad (2.33)$$

e levando em conta que para $T \rightarrow T_c$ a função de correlação entre pares apresenta o comportamento crítico

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad , \quad (2.34)$$

concluimos que o tamanho médio dos clusters formados obedece a lei de escala

$$\langle c \rangle \propto L^{2-\eta} \quad , \quad (2.35)$$

ou seja, a dimensão de Hausdorff dos clusters formados é dada por $D = 2 - \eta$.

O fato da probabilidade de ligação $p = 1 - e^{-2K\delta_{s_i s_j}}$ ser a especial probabilidade que faz com que as transições de percolação e termodinâmica coincidam resulta em diversas consequências físicas desejáveis. Por exemplo, se estivéssemos ligando também spins diferentes, da forma sugerida em seções anteriores, não teríamos encontrado uma relação entre a magnetização do modelo de Ising e a probabilidade de um dado spin pertencer a um cluster que percola, ou que a susceptibilidade é dada pelo tamanho médio do cluster, porque o argumento apresentado acima não seria válido (os spins do cluster não possuiriam todos o mesmo sinal).

Fica claro então que para a simulação do modelo de Ising esta é a probabilidade conveniente, e que o critério a ser seguido é o de que as transições de percolação e termodinâmicas devem coincidir.

No entanto, a utilização desta probabilidade em modelos tipo vidros de spin resulta bastante insatisfatória, porque devido a presença de interações antiferromagnéticas e a impossibilidade de satisfazer-se certas ligações (ligações frustradas), as transições de percolação e termodinâmicas deixam de coincidir. É interessante dispormos então de um método que nos permita variar o tamanho dos clusters formados. Vamos analisar aqui de forma mais metódica como podemos variar as probabilidades de ligação, seguindo a formulação original de Niedermayer [Nie88].

Tomando como exemplo o modelo de Ising, onde a energia de par de spins i e j é dada por

$$\beta E_{ij} = -K s_i s_j \quad , \quad (2.36)$$

e considerando que podemos ligar tanto spins iguais $P(-K)$ quanto spins diferentes $P(K)$, vamos analisar a condição de balanço detalhado, da mesma forma que no algoritmo de Wolff. Tomando como referência duas configurações que diferem apenas por uma inversão do sinal dos spins pertencentes a um dado cluster, e levando em conta que a probabilidade de ligarmos o cluster é igual nas transições direta e reversa, concluimos que devemos

analisar apenas a região de fronteira entre o cluster e o restante da rede. Supondo que nesta fronteira existam m spins paralelos e n spins antiparalelos (e o contrário depois de invertemos o sinal dos spins do cluster), encontramos que a condição de balanço detalhado é dada por

$$\frac{W_v(\sigma \rightarrow \sigma')}{W_v(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \left[e^{-2K} \frac{1 - P(K)}{1 - P(-K)} \right]^{n-m} \quad (2.37)$$

Nos algoritmos utilizados até aqui, definimos $P(K) = 0$ e $P(-K) = 1 - e^{-2K}$, o que torna o lado direito da expressão acima igual a 1, e portanto podemos atribuir qualquer valor para as probabilidades de transição W_v , desde que iguais.

Além desta escolha, qualquer par de probabilidades de ligação que obedeça a condição

$$\frac{1 - P(K)}{1 - P(-K)} = e^{2K} \quad (2.38)$$

resultará na possibilidade de escolhermos probabilidades de transição iguais a 1.

A proposta de Niedermayer foi definirmos uma probabilidade de ligação mais geral, controlada por um parâmetro adicional E_0 , da seguinte forma:

$$P(E_{ij}) = \begin{cases} 1 - e^{-\beta(E_0 - E_{ij})} & \text{Se } E_{ij} < E_0 \\ 0 & \text{de outra forma} \end{cases} \quad (2.39)$$

Através do parâmetro E_0 podemos variar a probabilidade de ligação, de forma a controlarmos o tamanho do cluster. Mesmo que a condição (2.38) deixe de ser satisfeita, compensamos através das probabilidades de transição.

Se E_0 for menor que o menor valor de energia possível ($-J$), todas as probabilidades de ligação se anularão, e recairemos no algoritmo de Metropolis.

Se E_0 for maior que o maior valor de energia possível, o lado direito da equação (2.37) será sempre igual a um, e podemos definir probabilidades de transição iguais a 1. Quanto maior E_0 , maior a probabilidades de ligação, e maior o cluster formado. Quando $E_0 \rightarrow \infty$ toda a rede pertencerá ao cluster.

Se E_0 for igual ao valor máximo de energia, reobtemos o algoritmo de Wolff (ou Swendsen-Wang) original.

Para valores de E_0 entre os valores mínimos e máximos de energia, o lado direito da equação (2.37) deixa de ser igual a 1, e devemos compensar isto através da probabilidade de transição. Conseguimos assim clusters menores que os criados pelo algoritmo de Wolff, e que podem ser úteis por exemplo para a simulação de vidros de spin, onde a transição de percolação para clusters de Wolff ocorre para valores de temperatura maiores que a probabilidade de transição.

Apesar de muito promissora em teoria, esta forma de variarmos o tamanho dos clusters formados através de um parâmetro adicional resulta na prática em resultados bastantes pobres. Isto acontece porque logo que a probabilidade de transição deixa de ser igual a um ela diminui exponencialmente com o tamanho da fronteira entre o cluster e o restante da rede.

Concluimos assim que não existe escapatória: se desejamos estabelecer um algoritmo de cluster que simule de forma apropriada o modelo estudado, este deve ser definido de forma tal que consigamos satisfazer a condição de balanço detalhado através apenas de probabilidades de ligação, sem alterarmos as probabilidades de transição. Embora a solução encontrada para o Modelo de Ising seja clara, em outros modelos a escolha de probabilidades de ligação apropriadas está longe de ser trivial. Além disto, podem existir mais do que uma só espécie de cluster relevante para o modelo estudado, em geral cada tipo de transição está associada a um diferente cluster, cada um deles formado por diferentes probabilidades de ligação.

Uma outra questão que deve se abordada é a presença de transições de primeira ordem assimétricas, porque para que um cluster possa transitar entre as diferentes fases ele deve mudar a sua energia interna. Aqui somos obrigados a recorrer a probabilidades de transição diferentes de 1, mas é importante que elas se refiram apenas a parte interna dos clusters formados, não introduzindo interações entre diferentes clusters.

Para encerrar esta seção, algumas palavras sobre o porquê de algoritmos de clusters

serem mais eficientes que simulações usuais através de algoritmos locais. Nas proximidades de uma transição de segunda ordem, o comprimento de correlação ξ diverge ou, no caso de uma rede finita, torna-se da ordem da dimensão linear da rede. Assim, blocos inteiros de spins tornam-se correlacionados, e é necessário modificá-los de uma só vez, para que não geremos configurações muito correlacionadas. Esta é uma outra justificativa de porque é tão importante que as transições termodinâmicas e de percolação coincidam.

De que forma o mapeamento em um modelo de percolação leva em consideração estas correlações não locais? Ao mostrarmos a equivalência entre as funções de partição do Modelo de Ising e do modelo de percolação de ligações correlacionadas, notamos que era o fator 2^{2z} que introduzia estas correlações (ver equação 2.14). Isto acontece porque pode ser possível dividirmos um cluster em dois pedaços distintos apenas pela retirada de uma particular ligação, e com isto tornamos possível que spins distantes da ligação retirada possam assumir configurações de spin que antes não podiam, por pertencerem ao mesmo cluster. Desta forma, uma mudança no estado de uma variável local produziu efeito não-locais.

2.5 Formulação de Kandel-Domany

Na generalização de algoritmos de cluster para a simulação de modelos mais complexos, existem dois fatores que podem tornar o algoritmo obtido ineficiente.

O primeiro deles é o tamanho dos clusters gerados, uma vez que clusters muito grandes resultam em modificações triviais na rede. O segundo fator é que a solução direta deste problema, através da utilização de probabilidades de ligação menores, pode resultar em uma interação entre clusters vizinhos, levando à dinâmicas bastante lentas.

O algoritmo ótimo deve levar em consideração as verdadeiras correlações físicas entre os diferentes graus de liberdade. Em 1991, Kandel e Domany desenvolveram um esquema matemático que automatiza a obtenção dos valores corretos das probabilidades de ligação,

de modo que a condição de balanço detalhado seja satisfeita. Quando estamos lidando com modelos complexos, onde existem diversas probabilidades de ligação, este tipo de abordagem é bastante útil.

Apesar destas vantagens, o esquema não nos fornece uma receita pronta de como encontrar um algoritmo que funcione, já que a escolha de quais probabilidades de ligação iremos utilizar deve ser baseada em critérios físicos definidos *a priori*. Além disso, consideramos que os clusters formados irão efetuar apenas transições que conservem a sua energia interna, o que é uma limitação séria em transições de primeira ordem assintóticas, como a do Modelo de Blume-Capel.

A idéia básica do método pode ser entendida através do algoritmo de Swendsen-Wang para o modelo de Ising. Neste algoritmo, a energia interna do cluster não se modifica após uma transição do cluster, e a probabilidade de transição não depende do estado dos clusters vizinhos, ou seja, diferentes clusters não interagem. É como se, após a formação dos clusters, a energia do sistema tivesse sido modificada de forma tal que associamos uma energia infinita a qualquer estado onde nem todos os spins pertencentes ao mesmo cluster possuem o mesmo sinal de spin. Da mesma forma, como a probabilidade de transição não depende dos spins vizinhos ao cluster, podemos dizer que a energia de interação com a vizinhança foi alterada de forma tal a se anular.

O esquema geral parte de uma Hamiltoniana que pode ser escrita na forma

$$\mathcal{H} = \sum_l V_l \quad , \quad (2.40)$$

onde l pode ser qualquer vizinhança entre spins em um modelo de Ising, plaquetas em uma rede quadrada, ou qualquer outra partição da Hamiltoniana original que pode ser escrita na forma acima.

O próximo passo é atribuímos estocasticamente para cada V_l um valor inteiro i entre n valores possíveis, de uma forma que pode depender da configuração u do sistema. A probabilidade de atribuímos o valor i para um particular l pode ser representada como

$P_i^l(u)$, e é normalizada:

$$\sum_i P_i^l(u) = 1 \quad . \quad (2.41)$$

Uma vez atribuídos valores i para cada elemento l , construímos uma nova Hamiltoniana dada por

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\{i\}} = \sum_l \tilde{V}_i^l, \quad (2.42)$$

onde (para qualquer $\tilde{u}$):

$$\tilde{V}_i^l(\tilde{u}) = V_i^l(\tilde{u}) - \frac{1}{\beta} \ln[P_i^l(\tilde{u})] + C_i^l \quad , \quad (2.43)$$

onde C_i^l são parâmetros independentes da configuração, e β é o inverso da temperatura.

A seguir, simulamos o modelo de modo a atingirmos uma nova configuração u' , através de qualquer procedimento cuja probabilidade de transição $\tilde{T}_i(u \rightarrow u')$ satisfaça a condição de balanço detalhado com relação a nova Hamiltoniana:

$$e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}_{\{i\}}(u)} \tilde{T}_{\{i\}}(u \rightarrow u') = e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}_{\{i\}}(u')} \tilde{T}_{\{i\}}(u' \rightarrow u) \quad (2.44)$$

Completamos assim um ciclo do procedimento. Restauramos então a Hamiltoniana original, e recomeçamos o ciclo a partir da configuração u' .

A prova de que este esquema satisfaz a condição de balanço detalhado pode ser encontrada no trabalho original de Kandel e Domany [KD91].

Qual o significado de todo este procedimento? Para compreender isto melhor, vamos considerar o caso particular onde temos duas formas de modificarmos a interação entre dois spins vizinhos, sendo a primeira definida por

$$P_1^l(u) = \begin{cases} P_1 & \text{se } V^l(u) = E_1 \\ 0 & \text{de outra forma} \end{cases} \quad (2.45)$$

Se escolhermos as constantes C_i^l como

$$C_i^l = \frac{1}{\beta} \ln(p_i) - E_i \quad , \quad (2.46)$$

encontraremos a seguinte interação modificada:

$$\hat{V}_1^l(\tilde{u}) = \begin{cases} 0 & \text{se } V_l(\tilde{u}) = E_i \\ \infty & \text{de outra forma} \end{cases} \quad (2.47)$$

Conforme explicado anteriormente, a simulação é feita com relação à Hamiltoniana modificada $\tilde{\mathcal{H}}$. Para cada ligação l à qual associamos o valor $i = 1$, vemos da expressão acima que a sua energia se conservará, ou seja, foi "congelada". Dizemos então que esta operação de modificação produz clusters, da mesma forma que a probabilidade de ligação no modelo de Ising.

Uma segunda modificação na Hamiltoniana, $i = 2$, é definida como sendo a modificação que resulta em

$$\tilde{V}_d^l(\tilde{u}) = 0 \quad . \quad (2.48)$$

O índice d refere-se a uma operação de eliminação, que é como chamaremos a esta operação. A probabilidade associada a esta operação é dada por

$$P_d^l(u) = e^{\theta[V_l(u) + C_d^l]} \quad , \quad (2.49)$$

onde C_d^l deve ser escolhida de forma que $P_d^l(u) \leq 1$, para qualquer configuração u . Obtemos assim clusters que não interagem.

No modelo de Ising, a probabilidade de eliminação é dada por

$$P_d^l(u) = e^{(-K\sigma_i\sigma_j + C)} \quad (2.50)$$

A escolha $C = -K$ faz com que ligações entre spins antiparalelos sejam sempre deletadas, enquanto que ligações entre spins paralelos são deletadas com probabilidade $p = e^{-2K}$. A condição de normalização define as probabilidades de congelamento.

Neste exemplo simples, onde só existem duas possibilidades de modificação da Hamiltoniana, todo este esquema pode parecer um pouco artificial. A sua vantagem real aparece quando estamos tratando de modelos mais complexos, onde diversas modificações

diferentes na Hamiltoniana podem ser efetuadas, com diversas probabilidades de ligação. Além disso, podemos considerar operações em divisões mais complexas da rede, ao invés de apenas sobre ligações. Por exemplo, para estudar o modelo de Ising totalmente frustrado, Kandel, Ben-Av e Domany [KBAD92] introduziram operações definidas sobre plaquetas da rede, de forma a tornar o algoritmo capaz de lidar com ligações frustradas.

Outro importante aspecto é o de que nesta formulação é fácil compreender-se fenômenos descritos anteriormente, como a presença de interações entre os clusters, que nesta formulação ocorrem quando escolhemos probabilidades de eliminação que não correspondem a $\tilde{V}_d'(\tilde{u}) = 0$.

Na formulação de algoritmos para os modelos de Ashkin-Teller e Blume-Capel, esta formulação será um importante guia na elaboração dos algoritmos.

2.6 Algoritmo de Embedding

Um método bastante simples, e que costuma resultar em ótimos resultados é o conhecido por Algoritmo de Embedding, introduzido por Brower e Tamayo [BT92] em 1989, para o modelo ϕ^4 , e por Wolff, também em 1989, para o estudo de modelos $O(n)$.

A idéia básica do método é encontrarmos variáveis tipo Ising por trás de uma variável de spin mais geral, e simularmos esta variável de Ising através de algoritmos de cluster, da forma usual. Em outras palavras, o que fazemos é separar componentes de sinal e spin na esperança de que clusters formados por spins de mesmo sinal sejam suficientes para reproduzirmos as excitações do sistema.

Considere por exemplo uma Hamiltoniana de uma só componente, definida por

$$\mathcal{H}(\varphi) = -K \sum_{\langle xy \rangle} \varphi_x \varphi_y + \sum_x V(\varphi_x) \quad , \quad (2.51)$$

onde $K \geq 0$ e $V(\varphi) = V(-\varphi)$. Decompomos φ da seguinte forma:

$$\varphi_x = \varepsilon_x |\varphi_x| \quad , \quad (2.52)$$

onde ε_x corresponde ao sinal, e $|\varphi_x|$ à magnitude. A Hamiltoniana passa a ser dada então por

$$\mathcal{H}(\varphi) = - \sum_{\langle xy \rangle} K_{xy} |\varphi_x| |\varphi_y| \varepsilon_x \varepsilon_y + \sum_x V(|\varphi_x|) \quad . \quad (2.53)$$

Definindo $K_{xy}^* = K_{xy} |\varphi_x| |\varphi_y|$, obtemos um modelo de Ising com constante de acoplamento K_{xy}^* , e podemos simulá-lo através de um algoritmo de cluster usual. As magnitudes são simuladas através do algoritmo de Metropolis, o que garante que a condição de ergodicidade seja satisfeita.

A vantagem desta formulação é que ela pode ser utilizada em qualquer modelo onde possamos identificar variáveis tipo Ising, além de ser fácil de ser implementada computacionalmente. Muitas vezes, a simulação computacional de algoritmos mais complicados é totalmente equivalente a uma formulação através de um algoritmo de embedding.

Capítulo 3

Algoritmos de Cluster e Percolação no Modelo de Ashkin-Teller

O interesse no estudo do modelo de Ashkin-Teller através de algoritmos de cluster foi despertado pelo fato dele possuir, em duas dimensões, uma linha crítica ao longo da qual ocorre uma variação contínua dos expoentes críticos. Esta característica do modelo torna interessante o estudo de propriedades dinâmicas do algoritmo ao longo desta linha.

Com este objetivo, Wiseman e Domany desenvolveram em 1993 [WD93] um algoritmo de cluster capaz de simular a região do diagrama de fases onde a interação entre quatro spins do modelo é ferromagnética. Apresentaremos neste capítulo este algoritmo, e mostraremos que é possível encontrar um mapeamento entre a função de partição do modelo termodinâmico e um modelo de percolação. O mapeamento encontrado por nós resulta em um algoritmo de cluster igual ao proposto por Wiseman e Domany, funcionando como uma justificativa física para o algoritmo.

Desenvolvemos também um novo algoritmo de cluster capaz de simular a região do diagrama de fases onde a interação entre quatro spins é antiferromagnética, o que é bastante interessante para estudarmos a possibilidade de existência de uma fase de Baxter Assimétrica no modelo, conforme indicado por uma análise via árvore de Cayley. Em simulações numéricas esta fase é bastante difícil de ser detectada, por ser bastante estreita,

o que torna necessário dados bastante precisos. Os resultados numéricos obtidos através de algoritmos de cluster são apresentados na última seção do capítulo, e não confirmam a existência desta fase.

Mostramos que também quando a interação de quatro spins é antiferromagnética é possível efetuarmos um mapeamento em um modelo de percolação que resulta nos algoritmos de cluster desenvolvidos, completando assim a descrição de todo o diagrama de fases do modelo em termos de modelos de percolação.

3.1 O Modelo de Ashkin-Teller

O Modelo de Ashkin-Teller [AT43] pode ser entendido como dois modelos de Ising superpostos acoplados através de um termo de interação entre quatro spins. A sua Hamiltoniana pode ser escrita (em unidades de temperatura) como

$$\beta\mathcal{H} = -K_1 \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - K_2 \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j - L \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j \nu_i \nu_j \quad , \quad (3.1)$$

onde $\mu_i = \pm 1$ e $\nu_i = \pm 1$ são variáveis tipo Ising, $\beta = 1/k_B T$, e a somatória é sobre todos os pares de spins primeiro vizinhos na rede considerada. Esta Hamiltoniana possui diversas simetrias. Podemos por exemplo permutar qualquer dos acoplamentos (K_1, K_2, L) . Se a rede considerada for bipartida, podemos sempre inverter o sinal de μ , ν ou ambos em uma das subredes, o que faz com que o modelo seja invariante sob transformações

$$(K_1, K_2, L) \rightarrow (-K_1, K_2, -L) \quad (3.2)$$

$$(K_1, K_2, L) \rightarrow (K_1, -K_2, -L) \quad (3.3)$$

$$(K_1, K_2, L) \rightarrow (-K_1, -K_2, L) \quad (3.4)$$

Estaremos nos restringindo aqui ao caso particular $K_1 = K_2$, onde o modelo é conhecido também como Modelo $Z(4)$, e ao estudo de redes quadradas e cúbicas.

Embora este modelo não possa ser resolvido exatamente em uma rede quadrada, é possível alcançar um bom entendimento de seu diagrama de fases através de considerações gerais. A figura (3.1) mostra um esboço de seu diagrama de fases.

Figura 3.1: Esboço do diagrama de fases do Modelo de Ashkin-Teller em uma rede bidimensional bipartida.

É suficiente a representação do subespaço $K > 0$, já que o diagrama de fases é simétrico em relação a uma reflexão em torno do eixo $K = 0$, conforme expresso pela relação (3.4). Sob esta operação de reflexão, fases μ e ν ferromagnéticas irão se transformar em fases antiferromagnéticas, e vice-versa.

Quando $L = 0$ temos dois modelos de Ising desacoplados, que apresentarão transição crítica no ponto $K_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2})$, de acordo como a fórmula de Baxter [Bax73] para a temperatura de transição de um modelo de Potts com q estados em uma rede quadrada, $K_c = \ln(1 + \sqrt{q})$. Este ponto é representado pela letra A no diagrama de fases. Outros pontos onde o modelo reduz-se à um Modelo de Ising podem ser encontrados em duas

situações: para $K = 0$ teremos um modelo de Ising na variável $\mu\nu$, localizado em $K_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2})$ (ponto B), e também quando $L = \infty$, onde teremos um modelo de Ising com constante de interação $(K_1 + K_2)$.

Ao longo da linha $L = K$ o modelo é equivalente à um modelo de Potts com quatro estados, com interação $K_{Potts} = 4K$. Encontraremos então um ponto crítico ferromagnético em $K_c = \frac{1}{4} \ln 3$ (ponto P). Não existe resultado rigoroso a respeito da existência ou não de um ponto crítico para o Modelo de Potts de quatro estados antiferromagnético. Resultados numéricos [FS95] indicam que o modelo não é crítico, o que implica (relação (3.4)) que ao longo da linha $K = -L$ não existem pontos críticos.

Já a curva GF pode ser encontrada através de uma transformação de dualidade [DR79][Bax72], que transforma o modelo em um outro que possui o mesmo termo singular para a energia livre. Definindo pesos de Boltzmann na forma

$$\begin{aligned}\omega_0 &= e^{2K+L+K_0} \\ \omega_1 &= e^{-L+K_0} \\ \omega_2 &= e^{-2K+L+K_0} \quad ,\end{aligned}\tag{3.5}$$

onde K_0 é uma constante arbitrária que fixa o zero de energia *. Sob uma transformação de dualidade, o modelo de Ashkin-Teller com pesos de Boltzmann $(\omega_0, \omega_1, \omega_2)$ é mapeado em um novo modelo de Ashkin-Teller com pesos $(\tilde{\omega}_0, \tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2)$ dados por

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_0 &= \frac{1}{2}(\omega_0 + 2\omega_1 + \omega_2) \\ \tilde{\omega}_1 &= \frac{1}{2}(\omega_0 - \omega_2) \\ \tilde{\omega}_2 &= \frac{1}{2}(\omega_0 - 2\omega_1 + \omega_2) \quad .\end{aligned}\tag{3.6}$$

Quando $\omega_0 = 2\omega_1 + \omega_2$ a transformação é auto-dual. Em termos das constantes de

*Em (3.1) escolhemos $K_0 = 0$. Note que, mesmo escolhendo os pesos ω_i originais de forma que $K_0 = 0$, a transformação de dualidade (3.6) resultará em constantes K_0 diferentes de zero

acoplamento esta condição é expressa por

$$e^{-2L} = \sinh 2K \quad , \quad (3.7)$$

que corresponde à curva GF . Ao longo desta curva, o Modelo de Ashkin-Teller pode ser transformado em um modelo de oito vértices homogêneo [Bax71] [Bax72], que pode ser resolvido exatamente. Baxter mostrou que a curva (3.7) é crítica apenas para $K \leq \frac{1}{4} \ln 3$, e que seus expoentes críticos variam de forma contínua.

Para $K > \frac{1}{4} \ln 3$, a curva auto-dual GF divide-se em duas linhas críticas, uma delas seguindo em direção ao ponto de Ising B e a outra em direção ao ponto de Ising localizado em $L = \infty$. As suas localizações exatas não são conhecidas exatamente, assim como a classe de universalidade a qual pertencem.

O ponto D equivale a um modelo de Ising antiferromagnético na variável $\mu\nu$, com interação entre spins L . A linha crítica DE corresponde a transições entre esta fase antiferromagnética e a fase paramagnética, sendo a sua localização exata também desconhecida.

Todas estas linhas críticas dividem o diagrama de fases em diversas fases, que podem ser classificadas da seguinte forma:

- Fase de Baxter Simétrica, onde μ e ν ordenam-se de forma ferromagnética tal que $\langle \mu \rangle = \langle \nu \rangle \neq 0$ e $\langle \mu\nu \rangle \neq 0$.
- Fase $\langle \mu\nu \rangle$, onde o produto $\mu\nu$ está ordenado de forma ferromagnética, mas $\langle \mu \rangle = \langle \nu \rangle = 0$.
- Fase $\langle \mu\nu \rangle_{AF}$, onde o produto $\mu\nu$ está ordenado de forma antiferromagnética, mas $\langle \mu \rangle = \langle \nu \rangle = 0$.
- Fase Paramagnética, onde $\langle \mu\nu \rangle = \langle \mu \rangle = \langle \nu \rangle = 0$.

Este é o cenário para uma rede bidimensional bipartida, com as diversas fases e transições existentes. No entanto, em três dimensões a situação é bastante diferente [Bax71]. Argumentos de dualidade e conexões com o modelo de 8 vértices não são mais válidos. Além disto, o operador L , que em duas dimensões é um operador marginal, passa aqui a ser um operador relevante, capaz de modificar completamente a natureza dos pontos críticos. A figura (3.1) representa o diagrama de Fases do Modelo de Ashkin-Teller calculado no limite de coordenação infinita de uma árvore de Cayley, conforme trabalho de F. A. da Costa *et al.* [COS87][AC97].

Figura 3.2: Diagrama de fases do Modelo de Ashkin-Teller obtido através do limite de coordenação infinita de uma árvore de Cayley. $\theta = K^{-1}z$, onde z é o número de coordenação da rede, e $p = L/K$. Pontos P representam pontos multicríticos.

Em relação ao diagrama do modelo bidimensional, notamos agora que existem duas novas fases:

- Fase $\langle \mu \rangle$, onde μ está ordenada ferromagneticamente, enquanto $\langle \nu \rangle = \langle \mu\nu \rangle = 0$.
- Fase de Baxter Assimétrica, onde $\langle \mu \rangle \neq 0$, $\langle \nu \rangle \neq 0$, $\langle \mu\nu \rangle \neq 0$, com $\langle \mu \rangle \neq \langle \nu \rangle$.

A existência da fase de Baxter Assimétrica foi sugerida inicialmente por resultados de simulações de Monte Carlo [DBGK80], e encontrada posteriormente através de uma abordagem via árvore de Cayley [COS87]. Cálculos anteriores através da aproximação de campo médio, assim como expansões em séries [DBGK80] não haviam detectado a existência desta fase. Resultados de nossas simulações indicam que ela não existe, ao menos em uma rede cúbica.

Um argumento simples mostra a possível existência desta fase [COS87]. Considere uma rede de Bravais com coordenação z , e vamos assumir que no limite de temperatura zero as fases $\langle \mu \rangle$ e Baxter Simétrica estão presentes e são contínuas. Definindo $J = K\beta^{-1}$, a energia por sítio da rede na fase $\langle \mu \rangle$ é dada por $\frac{-Jz}{2}$, e a entropia por sítio é $k_B \ln 2$. Já a fase de Baxter simétrica terá energia por sítio $\frac{-Jz(p+2)}{2}$, onde $p = L/K$, e não terá entropia residual. Comparando a energia livre das duas fases concluímos que, para temperaturas suficientemente baixas, a fase $\langle \mu \rangle$ será estável na região do diagrama de fases definida por

$$\frac{k_B T}{J} \geq \frac{z(p+1)}{2 \ln 2} \quad (3.8)$$

Em temperaturas baixas podemos considerar $\mu_i = 1$ para qualquer i , e o sistema passa a ser descrito por uma Hamiltoniana efetiva

$$\mathcal{H}_{ef} = -J(p+1) \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j \quad (3.9)$$

Em relação à esta Hamiltoniana a fase $\langle \mu \rangle$ pode ser encarada como uma fase onde a rede ν ordena-se paramagneticamente. Como $\mathcal{H}_{ef}$ é uma Hamiltoniana tipo Ising, a fase μ estará presente quando

$$\frac{k_B T}{J} \geq \frac{k_B T_c}{J} (p+1) \quad , \quad (3.10)$$

onde T_c é a temperatura de um Modelo de Ising com interações entre spins J .

A possibilidade de existência da fase de Baxter assimétrica pode ser entendida da seguinte forma: se a região de estabilidade da fase $\langle \mu \rangle$, definida por (3.8), for maior

que a região onde ela está efetivamente presente (3.10), isto significa que ela deixa de ser estável em relação à uma outra fase, que é a fase de Baxter Assimétrica. Esta condição ocorrerá sempre que

$$\frac{K_B T_C}{zJ} \geq \frac{1}{2 \ln 2} \quad , \quad (3.11)$$

o que de fato ocorre em algumas redes cúbicas.

Outra questão ainda não bem entendida no modelo diz respeito à natureza da transição nas proximidades de $p = 0$, quando nos aproximamos pelo lado direito. A abordagem via campo médio indica que a transição que aí ocorre é de segunda ordem. No entanto, a análise em termos de expansões em séries efetuada por Ditzian *et al.* encontrou expoentes que variam continuamente ao longo desta linha. Isto está em desacordo com resultados obtidos através do grupo de renormalização, que não indicam a existência de um operador marginal que explicaria esta variação do expoente. Ditzian propõe então que a transição seja na verdade de 1ª ordem, com os valores obtidos para γ não passando do reflexo de um comportamento pseudo-spinodal.

3.2 Algoritmo de Cluster para o Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Ferromagnética.

Mostramos no capítulo anterior valores para o expoente crítico dinâmico z em alguns modelos, com o objetivo de exemplificar a diminuição deste expoente quando da utilização de algoritmos de cluster. No entanto, pouco compreendemos do porque deste expoente ser menor do que os obtidos com o algoritmo de Metropolis, ou porque ele simplesmente não se anula. Um dos poucos resultados exatos a este respeito é um limite inferior para o expoente crítico dinâmico do modelo de Swendsen-Wang, $z_{SW} \geq \alpha/\nu$, obtido por Li e Sokal [LS89].

O Modelo de Ashkin-Teller bidimensional é bastante apropriado para o estudo deste

limite inferior para o expoente dinâmico, já que sabemos que os expoentes críticos variam continuamente de expoentes tipo Ising no ponto A para expoentes característicos do modelo de Potts de quatro estados no ponto P (ver fig. (3.1)). Foi com este objetivo que Wiseman e Domany [WD93] propuseram um algoritmo de cluster para o modelo de Ashkin-Teller ferromagnético, utilizando o formalismo proposto por Kandel e Domany [KD91] (ver seção 2.5). Mostraremos aqui que o algoritmo encontrado resulta equivalente a um algoritmo de embedding, que foi o algoritmo efetivamente utilizado por Wiseman em suas simulações. Posteriormente, Salas e Sokal [SS96] efetuaram um estudo do modelo utilizando a versão completa do algoritmo, onde todos os clusters da rede são simulados de uma só vez, o que corresponde a um análogo do algoritmo de Swendsen-Wang quando aplicado ao Modelo de Ashkin-Teller.

Para obtermos o algoritmo, escrevemos a Hamiltoniana do Modelo de Ashkin-Teller na forma

$$\beta\mathcal{H} = \sum_i V_i \quad , \quad (3.12)$$

onde V_i é dado por

$$V_i = -[K\mu_i\mu_j + K\nu_i\nu_j + L\mu_i\mu_j\nu_i\nu_j] \quad . \quad (3.13)$$

Devemos agora identificar quais são as excitações relevantes no modelo, de modo a criar clusters que as representem. Assumiremos aqui que clusters de spins μ e ν alinhados representam estas excitações. No entanto, isto poderia não refletir toda a física do problema, já que por exemplo em uma transição envolvendo a fase $\langle \mu\nu \rangle$ é o comprimento de correlação associado à variável $\mu\nu$ que é relevante. Para evitar este tipo de problema, estaremos sempre considerando $L < K$. Isto não representa uma limitação do algoritmo, porque se $L > K$ podemos sempre introduzir uma mudança de variáveis $\tau = \mu\nu$, de modo a tornar a interação entre quatro spins a menor interação.

Como V_i depende de quatro spins independentes, ele pode assumir 16 estados, cada

um deles possuindo um entre quatro valores de energia possíveis, conforme representado na figura (3.2).

u_1	+	+	+	+	-	-	-	-	$E_1 = -2K-L$
	+	+	-	-	-	-	+	+	
u_2	+	+	+	+	-	-	-	-	$E_2 = +L$
	+	-	-	+	+	-	-	+	
u_3	+	-	-	+	+	-	-	+	$E_3 = +L$
	+	+	+	+	-	-	-	-	
u_4	+	-	-	+	+	-	-	+	$E_4 = +2K-L$
	-	+	+	-	+	-	-	+	

Figura 3.3: Possíveis configurações, com suas respectivas energias. Cada possível valor de energia é representado por E_i , e as quatro configurações correspondentes são representadas por u_i , $i = 1, \dots, 4$.

Em cada gráfico desta figura representamos uma vizinhança $\langle ij \rangle$ nas duas redes, com a rede μ por convenção “em cima” da rede ν . Por exemplo, em u_1 os valores de spin representados em cada um dos quadrados correspondem a uma vizinhança

$$\begin{array}{cc} \mu_i & \mu_j \\ \nu_i & \nu_j \end{array} \quad (3.14)$$

Definimos agora quatro operações que podem ser efetuadas em cada vizinhança l , de modo a criar as ligações desejadas. A primeira delas, P_1^l , cria ligações entre spins vizinhos simultaneamente nas redes μ e ν , se eles forem paralelos em cada uma das redes. Ela é definida como

$$P_1^I(u) = \begin{cases} p_1 & \text{se } V^I(u) = E_1 \\ 0 & \text{de outra forma} \end{cases} \quad (3.15)$$

A segunda operação cria ligações apenas entre spins paralelos na rede μ , situação que ocorre em configurações u_1 e u_2 . Na configuração u_1 ela será denominada q_2 e na configuração u_2 de p_2 . Esta operação é definida por

$$P_2^I(u) = \begin{cases} e^{V_I(u)+C_2} & \text{se } V^I(u) = E_1 \text{ ou } V^I(u) = E_2 \\ 0 & \text{se } V^I(u) = E_3 \text{ ou } V^I(u) = E_4 \end{cases} \quad (3.16)$$

A escolha de C_2 determinará os valores de p_2 e q_2 :

$$p_2 = e^{V_I(u_2)+C_2}, \quad q_2 = e^{V_I(u_1)+C_2} \quad (3.17)$$

A terceira operação é similar a segunda, mas agora ligamos spins paralelos na rede ν , nas configurações u_1 e u_3 . Ela é definida por

$$P_3^I(u) = \begin{cases} e^{V_I(u)+C_3} & \text{se } V^I(u) = E_1 \text{ ou } V^I(u) = E_3 \\ 0 & \text{se } V^I(u) = E_2 \text{ ou } V^I(u) = E_4 \end{cases} \quad (3.18)$$

De forma similar,

$$p_3 = e^{V_I(u_3)+C_3}, \quad q_3 = e^{V_I(u_1)+C_3} \quad (3.19)$$

A quarta operação elimina ligações em ambas as redes, sendo dada por

$$P_d^I(u) = e^{V_I(u)+C_d} \quad (3.20)$$

Estas quatro operações completam o esquema para a criação do algoritmo de cluster, e estão representadas na seguinte tabela:

(u_1)	p_1	q_2	q_3	$P_d(u_1)$
(u_2)	0	p_2	0	$P_d(u_2)$
(u_3)	0	0	p_3	$P_d(u_3)$
(u_4)	0	0	0	$P_d(u_4)$

Para determinarmos os valores das probabilidades devemos começar analisando o caso u_4 . Não definimos nenhuma operação de ligação para esta configuração, por ser a de maior energia, e não desejamos congelar configurações referentes a ela. A condição de normalização impõe então que $P_d(u_4) = 1$, o que por sua vez determina a constante de deleção $C_d = -E_4$. Teremos então todas as constantes de deleção definidas. Isto nos possibilita calcular p_2 e p_3 através da condição de normalização (2.41), ou seja,

$$\begin{aligned} p_2 &= 1 - P_d(u_2) \\ p_3 &= 1 - P_d(u_3) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Conhecendo p_2 e p_3 , determinamos C_2 e C_3 , e como consequência q_2 e q_3 . Finalmente, p_1 pode também ser determinada pela condição de normalização. As diversas probabilidades assumem então os seguintes valores:

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 - 2e^{-2K-2L} + e^{-4K} \\ q_2 &= (1 - e^{-2K+2L})e^{-2K-2L} \\ q_3 &= (1 - e^{-2K+2L})e^{-2K-2L} \\ p_2 &= (1 - e^{-2K+2L}) \\ p_3 &= (1 - e^{-2K+2L}) \\ P_d(u_1) &= e^{-4K} \\ P_d(u_2) &= e^{-2K+2L} \\ P_d(u_3) &= e^{-2K+2L} \\ P_d(u_4) &= 1 \end{aligned} \quad (3.22)$$

O esquema geral de Kandel e Domany não garante que todas as probabilidades satisfaçam à condição $0 < P_i(u) \leq 1$, sendo necessário verificá-la *a posteriori*. É fácil verificar que todas as probabilidades definidas em (3.22) satisfazem a esta condição.

As operações construídas até aqui definem clusters que não interagem. Resta ainda definir um procedimento de Monte Carlo que modifique o valor dos spins pertencentes à cada cluster. Um procedimento natural seria o de escolhermos um sinal para os spins pertencentes a cada cluster com probabilidade $p = 1/2$ entre os dois valores possíveis (± 1). Este procedimento seria efetuado para cada cluster pertencente a cada uma das redes, μ e ν , e seria o equivalente ao algoritmo de Swendsen-Wang para o Modelo de Ising.

Embora perfeitamente válido, este procedimento é de difícil implementação em um computador. Uma forma mais simples, e que foi de fato utilizada por Wiseman e Domany em seu trabalho original, consiste na versão onde formamos um só cluster na rede, o que seria o análogo ao algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising. Para entendermos este procedimento, basta considerarmos que após termos formado todos os clusters da rede com as probabilidades definidas anteriormente, sorteamos um sítio de uma das redes (que também foi escolhida de forma aleatória) e modificamos o sinal de seus spins com probabilidade $W_s = 1$.

Esta versão de um cluster é equivalente à versão de um cluster do algoritmo de embedding, que é muito mais simples.

O algoritmo de embedding consiste de, a partir da Hamiltoniana original,

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - K \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j - L \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j \nu_i \nu_j, \quad (3.23)$$

fixarmos os valores de spin de uma das redes. Por exemplo, se fixarmos os valores de μ , esta Hamiltoniana pode ser reescrita, a menos de uma constante, como

$$\beta\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} (K + L\mu_i \mu_j) \nu_i \nu_j. \quad (3.24)$$

Que é equivalente a uma Hamiltoniana de Ising onde a constante de acoplamento é dada por $(K + L\mu_i \mu_j)$, podendo variar em cada vizinhança $\nu_i \nu_j$, de acordo com o sinal dos spins $\mu_i \mu_j$. Esta Hamiltoniana pode ser simulada como qualquer dos procedimentos usuais para o Modelo de Ising, como um algoritmo de Swendsen-Wang ou de Wolff. Para

que este algoritmo seja ergódico, escolhemos de forma aleatória qual das duas redes será mantida fixa (o procedimento para quando fixamos a rede ν é completamente análogo).

Para provarmos que este procedimento é equivalente ao algoritmo completo proposto anteriormente, basta considerarmos que o algoritmo de embedding corresponde a este algoritmo quando configurações modificadas na rede mantida fixa possuem energias infinitas. Se considerarmos uma etapa do algoritmo completo e só modificarmos uma das redes, o que estamos fazendo na prática é considerar que configurações modificadas na outra rede têm energia infinita, o que mostra que as duas formulações são de fato equivalentes. Para não restar dúvidas, é sempre possível calcularmos explicitamente o valor das probabilidades nos dois algoritmos. Por exemplo, a probabilidade de não ligarmos dois spins $\nu_i \nu_j$ em uma configuração do tipo u_1 é dada, no algoritmo completo, por

$$P = q_2 + P_d(u_1) = e^{-2K-2L} \quad , \quad (3.25)$$

que é igual à do algoritmo de embedding para esta configuração, como pode ser visto a partir de (3.24).

Em seu trabalho original, Wiseman e Domany simularam uma versão do tipo Wolff para o algoritmo de embedding. Posteriormente, Salas e Sokal [SS96] efetuaram simulações onde todos os clusters pertencentes a uma das redes são modificados ao mesmo tempo, o que corresponde à uma versão de Swendsen-Wang para o algoritmo de embedding. A vantagem em relação à formulação tipo Wolff é que nesta versão é possível provar analiticamente a existência do limite inferior para o expoente crítico dinâmico z , $z \geq \alpha/\nu$.

3.3 Mapeamento do Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Ferromagnética em um Modelo de Percolação.

Ao proporem o seu algoritmo de cluster para a simulação do Modelo de Ising, o que Swendsen e Wang perceberam foi que o mapeamento do Modelo de Ising em um modelo de percolação descoberto por Fortuin e Kastelyn [KF69][FK72] podia indicar a existência de uma forma mais eficiente de efetuarmos simulações de Monte Carlo, baseada em clusters (o que aliás já havia sido observado por Hu [Hu84]).

Com o Modelo de Ashkin-Teller iremos proceder de forma inversa: a existência de um algoritmo de cluster deve indicar que é possível mapear o modelo em alguma espécie de modelo de percolação. A formulação de Kandel e Domany, e também a abordagem de Sokal mostram que a simulação através de algoritmos de cluster é um procedimento válido, não provando que este procedimento equivale a um mapeamento. Mostraremos nesta seção que de fato é possível encontrarmos um mapeamento do modelo em um modelo de percolação, e que através deste mapeamento encontramos um algoritmo equivalente ao proposto por Wiseman e Domany.

Para obtermos este mapeamento, vamos notar inicialmente que a operação 1 do algoritmo deve estar associada a deltas na forma $\delta_{\mu_i\mu_j}\delta_{\nu_i\nu_j}$, a operação 2 a deltas $\delta_{\mu_i\mu_j}$, a operação 3 a deltas $\delta_{\nu_i\nu_j}$ e a operação 4 a ausência de deltas. Devemos então encontrar estas estruturas de deltas na função de partição do modelo, que é dada por

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} \exp [K\mu_i\mu_j + L\nu_i\nu_j + L\mu_i\mu_j\nu_i\nu_j] \quad (3.26)$$

É possível reescrevermos a função de partição na forma

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{2K-3L} \exp [K\mu_i\mu_j - K - L\mu_i\mu_j + L] \cdot \exp [K\nu_i\nu_j - K - L\nu_i\nu_j + L] \cdot \exp [L(\mu_i\mu_j + 1)(\nu_i\nu_j + 1)] \quad (3.27)$$

Embora trate-se da mesma função de partição, a expressão (3.27) é mais conveniente, porque o termo de interação entre quatro spins só contribui agora quando os spins da rede μ e ν são iguais entre si ($\mu_i = \mu_j$; $\nu_i = \nu_j$, mas não necessariamente $\mu_i = \nu_i$). Na expressão (3.26) fica difícil saber entre quais spins devemos criar ligações, no termo $\mu_i \mu_j \nu_i \nu_j$ podemos criar ligações entre μ_i e ν_i , por exemplo, o que já não ocorre na expressão (3.27). Definindo agora

$$\begin{aligned} p_\mu &= 1 - e^{-2K+2L} \\ p_\nu &= 1 - e^{-2K+2L} \\ p_{\mu\nu} &= 1 - e^{-4L} \end{aligned} \quad (3.28)$$

podemos reescrever a função de partição como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{2K+L} \left[(1 - p_\mu) + p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \right] \cdot \left[(1 - p_\nu) + p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \right] \\ &\quad \cdot \left[(1 - p_{\mu\nu}) + p_{\mu\nu} \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \right] \end{aligned} \quad (3.29)$$

Introduzimos agora três novas variáveis, l , k e m , que representarão a existência ou não de ligações. Associamos l à probabilidade p_μ , k à p_ν e m à $p_{\mu\nu}$. A função de partição passa a ser escrita agora como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{2K+L} \left\{ \sum_{l=0}^1 \left[(1 - p_\mu) \delta_{l0} + p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{l1} \right] \right\} \cdot \left\{ \sum_{k=0}^1 \left[(1 - p_\nu) \delta_{k0} + p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{k1} \right] \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \sum_{m=0}^1 \left[(1 - p_{\mu\nu}) \delta_{m0} + p_{\mu\nu} \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{m1} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Reescrevendo mais uma vez,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \sum_{\{l, k, m=0\}}^1 e^{2K+L} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} \left[(1 - p_\mu) \delta_{l0} + p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{l1} \right] \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} \left[(1 - p_\nu) \delta_{k0} + p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{k1} \right] \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} \left[(1 - p_{\mu\nu}) \delta_{m0} + p_{\mu\nu} \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{m1} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde a somatória $\sum_{\{l,k,m\}}$ representa uma soma sobre as variáveis de ligação em todas as vizinhanças da rede.

Esta função de partição pode ser interpretada como uma função de partição conjunta entre o Modelo de Ashkin-Teller e um modelo de percolação. Se efetuarmos a soma sobre as variáveis l , k e m (que chamaremos de variáveis de ligação) voltamos ao modelo de Ashkin-Teller. Por outro lado, se somarmos sobre as variáveis μ e ν obtemos um modelo de percolação, onde existem três diferentes tipos de ligação, que são “colocadas” na rede com probabilidade p_μ (ligação l), p_ν (ligação k), e $p_{\mu\nu}$ (ligação m). Quando a variável de ligação assume valor zero, a ligação está “ausente”, enquanto que quando a variável assume valor um dizemos que ela está “ativada”. Para efetuarmos a soma sobre as variáveis de spin, vamos reescrever a função de partição como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\{\mu,\nu\}} \sum_{\{l,k,m=0\}} e^{2K+L} & \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=0} (1 - p_\mu) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=1} p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=0} (1 - p_\nu) \right\} \\ & \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=1} p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=0} (1 - p_{\mu\nu}) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=1} p_{\mu\nu} \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \right\} \quad (3.32) \end{aligned}$$

Ao somarmos sobre spins, devemos levar em conta a existência de vínculos representados por diferentes δ 's, já que a existência de ligação sempre implica na existência de um certo tipo de δ , o que por sua vez restringe o número de estados acessíveis ao sistema. Para contarmos o número de estados acessíveis, vamos introduzir o conceito de cluster neste modelo. Vamos inicialmente representar graficamente cada uma das diferentes probabilidades:

Figura 3.4: Representação gráfica das diferentes probabilidades.

Como a probabilidade p_μ está associada a um $\delta_{\mu_i\mu_j}$, a existência de ligação (linha tracejada na figura) implica em os dois sítios possuírem o mesmo sinal de spin. O mesmo é válido em relação à probabilidade p_ν , mas agora em relação à rede ν . Já a probabilidade $p_{\mu\nu}$ "carrega" $\delta_{\mu_i\mu_j}\delta_{\nu_i\nu_j}$, e por isto colocamos ligações nas duas redes. Note ainda que as probabilidades são independentes, mas todas elas estão definidas para todas as vizinhanças da rede. É possível então que para um mesmo par de vizinhos $\langle ij \rangle$ dois tipos diferentes de ligação estejam ativadas, como ocorre entre os sítios i e j na rede μ da figura (3.5), onde uma possível configuração de ligações está representada.

Figura 3.5: Possível configuração de ligações.

Como identificar os clusters? O fator relevante nesta identificação são os termos δ . Lembrando que cada ligação "carrega" um δ , vemos que dois sítios pertencentes à mesma rede conectados por um caminho de ligações (não importa de que tipo) terão necessariamente de possuir o mesmo sinal de spin, e portanto dizemos que eles pertencem ao mesmo cluster. O fato de podermos ter dois tipos de ligação para o mesmo par de sítios não representa problema, porque as duas contêm a mesma informação (o mesmo tipo de δ). Note ainda que, embora ligações do tipo m (probabilidade $p_{\mu\nu}$) apareçam sempre nas duas redes, isto não implica que os spins das duas redes necessitem possuir o mesmo sinal,

já que os vínculos estão sempre na mesma rede ($\delta_{\mu_i\mu_j}$ ou $\delta_{\nu_i\nu_j}$, mas nunca $\delta_{\mu_i\nu_i}$ ou $\delta_{\mu_i\nu_j}$). Com estas observações, a identificação de clusters na figura (3.5) seria a seguinte:

Figura 3.6: Contorno dos clusters formados a partir de uma dada configuração.

Efetuada agora a soma sobre configurações, encontramos

$$Z = \sum_{\{i,j,m=0\}}^1 e^{2K+L} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=0} (1-p_\mu) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=1} p_\mu \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=0} (1-p_\nu) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=1} p_\nu \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=0} (1-p_{\mu\nu}) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=1} p_{\mu\nu} \right\} 2^{N_c}, \quad (3.33)$$

onde $N_c = N_\mu + N_\nu$ é a soma do número de clusters nas redes μ e ν . No exemplo da figura (3.6) temos $N_c = 3 + 3 = 6$.

Chegamos assim ao nosso modelo de percolação para o caso ferromagnético, que consiste em atribuírmos os três tipos de ligação (com as suas respectivas probabilidades) a cada par $\langle ij \rangle$. Da mesma forma que no mapeamento do Modelo de Ising, o termo 2^{N_c} introduz correlações não locais no modelo.

A generalização para o caso onde a interação ferromagnética em cada uma das redes é diferente (teríamos duas constantes, K_1 e K_2 , ao invés de apenas K) é direta, basta utilizar o mesmo formalismo.

À primeira vista, o mapeamento encontrado não guarda nenhuma semelhança com o

algoritmo de cluster proposto por Wiseman e Domany. No entanto, é possível mostrar que o algoritmo de cluster por nós encontrado através do mapeamento é equivalente ao algoritmo de cluster de Wiseman e Domany.

Para ver isto, devemos perceber que as probabilidades encontradas por Wiseman e Domany são na realidade o resultado de operações com outras probabilidades, mais básicas, e que são fornecidas pelo nosso mapeamento. Por exemplo, a probabilidade de ligarmos simultaneamente as duas redes, p_1 , pode ser efetuada no mapeamento de duas formas diferentes, através da ligação $p_{\mu\nu}$ ou então das ligações p_μ e p_ν , e será dada por

$$P = (1 - e^{-4L}) [(1 - e^{-2K+2L}) + e^{-2K+2L}] \cdot [(1 - e^{-2K+2L}) + e^{-2K+2L}] + e^{-4L} (1 - e^{-2K+2L})^2 \quad (3.34)$$

Os termos entre colchetes correspondem à probabilidade de ativarmos (ou não) as probabilidades l e k (p_μ e p_ν). Somamos sobre todas as possibilidades porque a ligação m ($p_{\mu\nu}$) já está ativada, e portanto os spins já estão ligados em ambas as redes. O termo

$$e^{-4L} (1 - e^{-2K+2L})^2$$

corresponde à probabilidade de não ativarmos m ($p_{\mu\nu}$), mas ativarmos l (p_μ) e k (p_ν).

Efetuando a soma encontramos

$$P = 1 - 2e^{-2K-2L} + e^{-4K}, \quad (3.35)$$

que é igual à probabilidade p_1 do algoritmo de Wiseman e Domany. Já a probabilidade de ligarmos apenas uma das redes em uma configuração do tipo u_1 será dada por

$$Q = e^{-4L} (1 - e^{-2K+2L}) e^{-2K+2L}, \quad (3.36)$$

e vemos que esta probabilidade é igual a probabilidade q_2 do algoritmo de cluster. Concluimos assim que os dois algoritmos são de fato equivalentes.

3.4 Algoritmo de Cluster para o Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Antiferromagnética

A Hamiltoniana é dada agora por

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - K \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j + L \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j \nu_i \nu_j \quad , \quad (3.37)$$

onde $K > 0$ e $L > 0$. A primeira impressão é que o mesmo algoritmo utilizado no caso ferromagnético deve também ser válido aqui. No entanto, a situação é diferente.

Se considerarmos possíveis os mesmos tipos de ligações e usarmos o mesmo tipo de raciocínio utilizado na criação do algoritmo ferromagnético, concluiremos que as probabilidades permanecerão iguais, mas com o sinal dos termos proporcionais a L invertidos (como era de se esperar). Mas o algoritmo resultante não será válido. Por exemplo, a probabilidade p_1 será dada por

$$p_1 = 1 - 2e^{-2K+2L} + e^{-4K} \quad , \quad (3.38)$$

e se tomarmos $L = K$, por exemplo, teremos que $p_1 = -1 + e^{-4K}$, que é uma probabilidade negativa.

O fato do algoritmo para o caso onde a interação de quatro spin é ferromagnética não ser mais apropriado é de certa forma esperado, uma vez que o diagrama de fases é completamente diferente. Por exemplo, a existência da fase $\langle \mu\nu \rangle_{AF}$ deve tornar necessária a existência de ligações antiferromagnéticas em uma das redes, associada a ligações ferromagnéticas na outra rede, de modo a conseguirmos preservar configurações típicas desta fase.

Para compreendermos melhor o porquê deste algoritmo não funcionar, considere a seguinte tabela, análoga a do caso ferromagnético, onde apresentamos as possíveis configurações e suas respectivas energias.

u_1	+	+	+	+	-	-	-	-	$E_1 = -2K+L$
	+	+	-	-	-	-	+	+	
u_2	+	+	+	+	-	-	-	-	$E_2 = -L$
	+	-	-	+	+	-	-	+	
u_3	+	-	-	+	+	-	-	+	$E_3 = -L$
	+	+	+	+	-	-	-	-	
u_4	+	-	-	+	+	-	-	+	$E_4 = +2K+L$
	-	+	+	-	+	-	-	+	

Figura 3.7: Possíveis configurações, com suas respectivas energias.

A diferença básica em relação ao que ocorre no caso onde a interação entre quatro spins é ferromagnética é que aqui, para $L > K$, são as configurações u_2 e u_3 que correspondem ao mínimo de energia, e é necessário sermos capazes de preservá-las. Devemos então construir um novo algoritmo que inclua operações que congelem estas configurações, de acordo com a seguinte tabela:

(u_1)	p_1	0	0	q_1	q_1	$P_d(u_1)$
(u_2)	0	p_2	0	0	q_2	$P_d(u_2)$
(u_3)	0	0	p_2	q_2	0	$P_d(u_3)$
(u_4)	0	0	0	0	0	$P_d(u_4)$

Linhas contínuas representam ligações ferromagnéticas, enquanto ligações antiferromagnéticas são representadas por ligações tracejadas. Note que não estamos incluindo ligações simples antiferromagnéticas, uma vez que estas poderiam resultar num congela-

mento de configurações do tipo u_4 , que são as mais desfavoráveis energeticamente, e que por isto desejamos eliminar. Estamos também utilizando o mesmo valor de probabilidade q_1 para duas ligações simples diferentes, o que é justificado por considerações de simetria, já que a interação entre pares de spins é a mesma nas duas redes. O mesmo argumento é válido para q_2 . Para p_2 utilizamos o mesmo valor porque configurações u_2 e u_3 possuem a mesma energia.

A utilização do método de Wiseman e Domany para determinar as probabilidades do algoritmo representado na tabela anterior não é possível, já que as linhas referentes à energias u_2 e u_3 resultarão em equações idênticas, e ficaremos com três incógnitas para duas equações, e sem nenhuma dica de como resolver esta arbitrariedade na escolha de probabilidades.

Uma abordagem alternativa consiste em seguirmos a idéia utilizada para mapearmos o caso ferromagnético, e reescrevermos a Hamiltoniana na forma

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H} = & A \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j + 1) + B \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j - 1) + \\ & + B \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j - 1)(\nu_i \nu_j + 1) + C \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + C \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j \end{aligned} \quad (3.39)$$

A idéia é que agora cada uma das possíveis operações de ligação corresponde a um respectivo tipo de interação (por exemplo, p_1 corresponde à interação A). Reagrupando termos, e impondo que esta Hamiltoniana deve ser igual à Hamiltoniana original, encontramos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} A + 2B &= L \\ A + C &= -K \end{aligned} \quad (3.40)$$

Vemos que aqui também temos duas equações para três incógnitas. No entanto,

podemos nos orientar aqui por algumas considerações físicas. Vamos considerar dois casos particulares, $K = L$ e $L = 0$.

Quando $K = L$, a Hamiltoniana pode ser reescrita como

$$\beta\mathcal{H} = K \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j - 1)(\nu_i \nu_j - 1) \quad , \quad (3.41)$$

que é a Hamiltoniana do Modelo de Potts Antiferromagnético. As possíveis energias desta Hamiltoniana, em função do estado relativo dos spins em cada uma das subredes, estão representadas na seguinte tabela:

$\mu_i \mu_j$	$\nu_i \nu_j$	$\beta\mathcal{H}$
=	=	0
=	≠	0
≠	=	0
≠	≠	4K

Onde o sinal de igual significa que os dois spins considerados estão alinhados, e o sinal de diferente significa que os spins não estão alinhados. Vemos que só ocorrerão bonds duplos, todos com probabilidade $p = 1 - e^{-4K}$. Neste caso particular devemos ter então que $q_1 = q_2 = 0$, ou seja, os termos de ligação simples deverão ter interação do tipo $C = x(K - L)$. Vamos considerar alguns valores de x possíveis:

$x = -2$	$x = -1$	$x = 0$	$x = 1$
$C = -2K + 2L$	$C = -K + L$	$C = 0$	$C = K - L$
$A = K - 2L$	$A = -L$	$A = -K$	$A = -2K + L$
$B = (3L - K)/2$	$B = L$	$B = (L + K)/2$	$B = K$

Por outro lado, sabemos que quando $L = 0$ devemos ter um modelo de Ising com duas redes desacopladas, com presença apenas de ligações simples (não- duplas). A única escolha de x compatível com essa condição é $x = -1$. Ficamos então com a seguinte Hamiltoniana geral:

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{H} = & -L \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j + 1) + L \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j - 1) + \\ & + L \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j - 1)(\nu_i \nu_j + 1) + (-K + L) \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + (-K + L) \sum_{\langle ij \rangle} \nu_i \nu_j \end{aligned}$$

A função de partição é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} & \exp [L (\mu_i \mu_j + 1) (\nu_i \nu_j + 1) - 4L + 4L] \cdot \\ & \cdot \exp [-L (\mu_i \mu_j + 1) (\nu_i \nu_j - 1) - 4L + 4L] \cdot \\ & \cdot \exp [-L (\mu_i \mu_j - 1) (\nu_i \nu_j + 1) - 4L + 4L] \cdot \\ & \cdot \exp [(K - L) \mu_i \mu_j - K + L + K - L] \cdot \\ & \cdot \exp [(K - L) \nu_i \nu_j - K + L + K - L] \end{aligned} \quad (3.42)$$

Para $L < K$, vamos reescrever $\mathcal{Z}$ na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} & e^{10L+2K} \left[(1-p) + p \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \right] \cdot \left[(1-p) + p \delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \right] \cdot \\ & \cdot \left[(1-p) + p \delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) \right] \left[(1-p_\mu) + p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \right] \cdot \\ & \cdot \left[(1-p_\nu) + p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde

$$\begin{aligned} p &= 1 - e^{-4L} \\ p_\mu &= 1 - e^{-2K+2L} \\ p_\nu &= 1 - e^{-2K+2L} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Podemos agora calcular as probabilidades correspondentes a cada configuração de ligações possível, e que correspondem às operações da tabela que define o algoritmo. Por exemplo, a probabilidade de ligarmos spins nas duas redes simultaneamente é dada por

$$p_1 = p + (1-p)p_\mu p_\nu \quad (3.45)$$

Encontramos então, seguindo este tipo de raciocínio,

$$\begin{aligned}
p_1 &= 1 - 2e^{-2K-2L} + e^{-4K} \\
p_2 &= 1 - e^{-4L} \\
q_1 &= (1 - e^{-2K+2L})e^{-2K+2L} \\
q_2 &= e^{-4L}(1 - e^{-2K-2L}) \quad , \quad (3.46)
\end{aligned}$$

com o que completamos a formulação do algoritmo. Note que estas probabilidades só são válidas quando $L \leq K$. Para $L > K$, a constante de interação entre pares de spin representada em (3.39) passa a ser positiva, e devemos então considerar ligações simples antiferromagnéticas ao invés de ferromagnéticas. Se procedermos de forma análoga ao caso anterior, encontraremos uma função de partição dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{10L+2K} \left[(1-p) + p\delta_{\mu_i\mu_j}\delta_{\nu_i\nu_j} \right] \cdot \left[(1-p) + p\delta_{\mu_i\mu_j}(1-\delta_{\nu_i\nu_j}) \right] \\
&\cdot \left[(1-p) + p\delta_{\nu_i\nu_j}(1-\delta_{\mu_i\mu_j}) \right] \cdot \left[(1-p_\mu) + p_\mu(1-\delta_{\mu_i\mu_j}) \right] \\
&\cdot \left[(1-p_\nu) + p_\nu(1-\delta_{\nu_i\nu_j}) \right] \quad (3.47)
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
p &= 1 - e^{-4L} \\
p_\mu &= 1 - e^{-2L+2K} \\
p_\nu &= 1 - e^{-2L+2K} \quad . \quad (3.48)
\end{aligned}$$

Embora perfeitamente válida, esta escolha não é interessante, porque estaríamos então trabalhando com uma tabela onde aparecem ligações simples antiferromagnéticas, que podem favorecer a manutenção de configurações do tipo u_4 , o que não interessa. O

correto é considerarmos que a partir do ponto onde $L > K$ ligações simples simplesmente deixam de existir, e construir a seguinte tabela para o algoritmo:

(u_1)	p_1	0	0	$P_d(u_1)$
(u_2)	0	p_2	0	$P_d(u_2)$
(u_3)	0	0	p_3	$P_d(u_3)$
(u_4)	0	0	0	$P_d(u_4)$

Linhas cheias representam ligações ferromagnéticas, enquanto que linhas tracejadas representam ligações antiferromagnéticas. Para implementar este esquema, reescrevemos a Hamiltoniana na forma

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H} = & -K \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j + 1) + \left(\frac{L+K}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j - 1) + \\ & + \left(\frac{L+K}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j - 1)(\nu_i \nu_j + 1) \quad , \end{aligned} \quad (3.49)$$

de forma que cada tipo diferente de interação corresponda a uma das ligações presentes na tabela. A função de partição é dada por

$$\begin{aligned} Z = & \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} \exp [K(\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j + 1) - 4K + 4K] \cdot \\ & \cdot \exp \left[\left(-\frac{L+K}{2}\right) (\mu_i \mu_j + 1)(\nu_i \nu_j - 1) - 2L - 2K + 2L + 2K \right] \cdot \\ & \cdot \exp \left[\left(-\frac{L+K}{2}\right) (\mu_i \mu_j - 1)(\nu_i \nu_j + 1) - 2L - 2K + 2L + 2K \right] . \end{aligned} \quad (3.50)$$

Definindo agora as probabilidades

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 - e^{-4K} \\ p_2 &= 1 - e^{-2K-2L} \\ p_3 &= 1 - e^{-2K-2L} \quad , \end{aligned} \quad (3.51)$$

é possível reescrever a função de partição na forma

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{8K+4L} \left[(1-p_1) + p_1 \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \right] \cdot \left[(1-p_2) + p_2 \delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \right] \cdot \left[(1-p_3) + p_3 \delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) \right]. \quad (3.52)$$

Completamos assim a definição do algoritmo de cluster para o caso $L > K$.

Finalmente, aqui também é possível definirmos um algoritmo de embedding, e o interessante é que ele não será equivalente ao algoritmo encontrado por meio do mapeamento, como ocorria no caso ferromagnético.

Após fixarmos os valores de spin de uma das redes, por exemplo μ , a Hamiltoniana passa a ser dada por

$$\beta \mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} (K - L \mu_i \mu_j) \nu_i \nu_j \quad (3.53)$$

equivalente à uma Hamiltoniana de Ising com constante de acoplamento ferromagnética dada por $(K - L \mu_i \mu_j)$. Note no entanto que as probabilidades assim obtidas não são equivalentes as probabilidades obtidas no algoritmo "completo". Por exemplo, a probabilidade de ligarmos spins ν em uma configuração do tipo u_1 é dada por

$$p = p_1 + q_1 = 1 - e^{-2K-2L}, \quad (3.54)$$

diferente da probabilidade obtida através do algoritmo de embedding, $p = 1 - e^{-2K+2L}$. Isto acontece porque o algoritmo de "embedding" pode tirar proveito de saber que a configuração da outra rede está fixa na hora de ativar uma dada ligação. Por exemplo, para $p = -1$ e $T = 0$ configurações do tipo u_1 , u_2 e u_3 possuem a mesma energia, e o algoritmo de embedding "sabe" que se um par de spins da rede fixa estiver paralelo, então qualquer configuração da rede móvel possuirá a mesma energia. Já o algoritmo "completo" precisa congelar configurações nas duas redes, para evitar que seja atingida uma configuração do tipo u_4 .

3.5 Mapeamento do Modelo de Ashkin-Teller com Interação de Quatro Spins Antiferromagnética em um modelo de percolação.

Vamos mostrar aqui que o algoritmo de cluster encontrado para o caso antiferromagnético também corresponde a um modelo de percolação.

Na verdade, a forma que utilizamos para encontrar o algoritmo praticamente já define como devemos escrever o mapeamento. No caso $L < K$, escrevemos a função de partição na forma

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{10L+2K} & \left[(1-p) + p\delta_{\mu_i\mu_j}\delta_{\nu_i\nu_j} \right] \cdot \left[(1-p) + p\delta_{\mu_i\mu_j}(1-\delta_{\nu_i\nu_j}) \right] \cdot \\ & \cdot \left[(1-p) + p\delta_{\nu_i\nu_j}(1-\delta_{\mu_i\mu_j}) \right] \left[(1-p_\mu) + p_\mu\delta_{\mu_i\mu_j} \right] \cdot \\ & \cdot \left[(1-p_\nu) + p_\nu\delta_{\nu_i\nu_j} \right] . \end{aligned} \quad (3.55)$$

Para completarmos o mapeamento, basta associarmos à cada diferente tipo de ligação uma nova variável, e em seguida somarmos sobre as variáveis de spin respeitando aos vínculos produzidos pelos δ 's presentes em cada ligação. Vamos começar associando variáveis de ligação da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \delta_{\mu_i\mu_j}\delta_{\nu_i\nu_j} & \rightarrow l \\ \delta_{\mu_i\mu_j}(1-\delta_{\nu_i\nu_j}) & \rightarrow k \\ \delta_{\nu_i\nu_j}(1-\delta_{\mu_i\mu_j}) & \rightarrow m \\ \delta_{\mu_i\mu_j} & \rightarrow r \\ \delta_{\nu_i\nu_j} & \rightarrow s \end{aligned}$$

Podemos então reescrever a função de partição na forma

$$\begin{aligned}
Z = & \sum_{\{\mu, \nu\}} \sum_{\{l, m, k, r, s=0\}}^1 \prod_{\langle ij \rangle} e^{10L+2K} \left[(1-p)\delta_{l0} + p\delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{l1} \right] \cdot \\
& \cdot \left[(1-p)\delta_{k0} + p\delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \delta_{k1} \right] \cdot \left[(1-p)\delta_{m0} + p\delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) \delta_{m1} \right] \\
& \cdot \left[(1-p_\mu)\delta_{r0} + p_\mu \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{r1} \right] \cdot \left[(1-p_\nu)\delta_{s0} + p_\nu \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{s1} \right] \quad (3.56)
\end{aligned}$$

Esta é a função de partição conjunta entre o modelo termodinâmico e o modelo de percolação. Para somarmos sobre as variáveis de spins, precisamos definir como identificar os clusters. Dois spins de uma dada rede pertencerão ao mesmo cluster se existir um caminho contínuo de ligações entre eles. Note que, diferentemente do caso ferromagnético, os clusters agora são formados por dois tipos de ligações, ferromagnéticas e antiferromagnéticas, o que faz com que os spins pertencentes ao cluster não possuam necessariamente o mesmo sinal. De qualquer forma, para um dado cluster continuam sendo possíveis apenas duas configurações de spins, e após somarmos sobre as configurações de spin encontramos

$$\begin{aligned}
Z = & \sum_{\{l, m, k, r, s=0\}}^1 e^{10L+2K} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=0} (1-p) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=1} p \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=0} (1-p) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=1} p \right\} \cdot \\
& \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=0} (1-p) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=1} p \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: r=0} (1-p_\mu) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: r=1} p_\mu \right\} \cdot \\
& \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: s=0} (1-p_\nu) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: s=1} p_\nu \right\} 2^{N_c} \quad (3.57)
\end{aligned}$$

onde N_c é o número total de clusters nas duas redes. A interpretação da função de partição acima é a de que, para cada vizinhança $\langle ij \rangle$ de cada uma das redes, atribuímos uma variável de ligação zero ou um para cada um dos cinco tipos possíveis de ligação. Correlações não locais serão introduzidas pelo fator 2^{N_c} . Note ainda que existem configurações de ligações com peso estatístico zero, quando ativarmos por exemplo ligações

do tipo l e k na mesma vizinhança, devido à ortogonalidade dos zeros presentes em cada uma das ligações.

O procedimento para mapearmos o caso $L > K$ é o mesmo, sendo agora necessárias apenas três variáveis de ligação, por só existirem três diferentes tipos de ligação. Após introduzirmos estas variáveis de ligação e somarmos sobre as variáveis de spin encontraremos a seguinte expressão para a função de partição:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\{l,k,m=0\}}^1 e^{6K+4L} & \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=0} (1-p_1) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: m=1} p_1 \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=0} (1-p_2) \right\} \\ & \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: k=1} p_2 \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=0} (1-p_3) \right\} \cdot \left\{ \prod_{\langle ij \rangle: l=1} p_3 \right\} 2^{N_c} . \end{aligned} \quad (3.58)$$

Novamente correlações não locais serão introduzidas pelo fator 2^{N_c} , e aqui também ocorrerão configurações com peso estatístico zero.

3.6 Resultados Numéricos

Dispondo agora de algoritmos de cluster capazes de simular todo o diagrama de fases do modelo, é interessante estudar a existência ou não da fase de Baxter Assimétrica, conforme sugerido por simulações de Monte Carlo efetuadas por Ditzian *et al.* [DBGK80], e posteriormente encontrada através de uma abordagem via árvore de Cayley [COS87].

Se esta fase de fato existir, ela será de difícil detecção, por ser bastante estreita, além da diferença entre a magnetização nas redes ser pequena, podendo acontecer que magnetizações diferentes nas duas redes representem apenas um efeito de tamanho finito. A determinação da existência desta fase é portanto tarefa computacional bastante difícil, o que justifica a utilização de algoritmos de cluster na simulação, através dos quais esperamos obter resultados precisos.

Os resultados computacionais de Ditzian indicam a possibilidade de existência desta fase em uma temperatura $T = 4/3$, para uma região compreendida entre $p = -0.78$ e $p =$

-0.75. Nesta região, devemos utilizar o algoritmo proposto para o caso onde a interação de quatro spins é antiferromagnética, ou então o algoritmo de embedding. Conforme explicado anteriormente (ver pág. 80), estes dois algoritmos não são equivalentes, como ocorre no caso onde a interação de quatro spins é ferromagnética, e devemos decidir qual deles utilizar.

A nossa escolha foi pelo algoritmo de embedding, pelos motivos explicados anteriormente (pág. 80): acreditamos que o fato de uma das redes estar fixa traz vantagens na hora de transitarmos entre os diferentes estados possíveis, eliminando possíveis efeitos de histerese e permitindo uma descorrelação mais rápida entre as configurações geradas.

A figura (3.8) mostra os resultados obtidos para a magnetização em uma rede cúbica de dimensão linear $L = 10$, quando varremos o diagrama de fases variando p , em uma temperatura $T = 4/3$ fixa.

Figura 3.8: Maior e menor magnetização, em uma rede de dimensão linear $L = 10$.

Devido a efeitos de tamanho finito, é sempre possível uma troca de papel entre as redes, com a rede que apresentava maior magnetização assumindo valores de magnetização

típicos da rede de menor magnetização. Para evitar estes efeitos, estaremos sempre medindo a maior e a menor magnetização, ao invés da magnetização em cada uma das redes. A região entre $p = -0.9$ e $p = -0.8$ corresponde à fase $\langle \mu \rangle$, onde uma rede está magnetizada e a outra não. Em torno de $p = -0.8$ ocorre uma transição, e as duas fases passam a apresentar magnetização diferente de zero. Note no entanto que as duas magnetizações não tornam-se iguais imediatamente, permanecendo diferentes durante uma certa região de variação de p . A questão é saber se este é realmente uma característica de uma nova fase, a fase de Baxter Assimétrica, ou se é apenas um efeito de tamanho finito. Neste último caso, ao aumentarmos o tamanho da rede simulada as duas curvas tenderiam a se encontrar. A figura (3.9) mostra o que acontece com as curvas de magnetização ao aumentarmos o tamanho da rede.

Figura 3.9: Maior e menor magnetização, para diversos tamanhos de rede.

Vemos que de fato os valores para a magnetização se aproximam, mas não é possível concluir se estes valores irão se encontrar ou não. Para chegarmos a uma conclusão, é necessário efetuarmos uma análise de tamanho finito para os valores de magnetização

obtidos.

A figura (3.10) representa ajustes de tamanho finito para a rede de menor magnetização quando $p = -0.7$, considerando-se uma lei de escala $m_L = m_\infty + aL^{-b}$, e testando diversos valores possíveis para o expoente b . Redes de tamanho $L = 10$ e $L = 12$ não foram levadas em consideração no ajuste, que foi efetuado com redes de tamanho $L = 14$ até $L = 22$. A estatística utilizada é de 6×10^5 passos de Monte Carlo, depois de esperarmos 10.000 passos para a termalização do sistema.

Figura 3.10: Diferentes ajustes para o cálculo de m_∞ , para a menor magnetização. O eixo vertical representa valores de m_L , enquanto que o eixo horizontal L^{-b} .

Vemos que o melhor ajuste corresponde a $b = 1.5$, sendo que para valores de b menores

a curva apresenta uma certa concavidade em relação ao ajuste linear, concavidade esta que inverte-se para valores de b maiores do que 1.5. A figura (3.11) representa o mesmo tipo de ajuste, agora para a rede de maior magnetização.

Figura 3.11: Diferentes ajustes para o cálculo de m_∞ , para a maior magnetização. O eixo vertical representa valores de m_L , enquanto que o eixo horizontal L^{-b} .

Do mesmo modo que ocorria para a menor magnetização, $b = 1.5$ nitidamente corresponde ao melhor ajuste. O mesmo tipo de análise foi efetuado para diferentes valores de p , a fim de determinarmos a magnetização da rede infinita, e determinarmos se a maior e a menor magnetização coincidem neste limite. Para todos os valores de p analisados o melhor ajuste foi obtido com $b = 1.5$. Os resultados estão na tabela a seguir, que mostra

valores da maior e menor magnetização obtidos através de um ajuste de tamanho finito, bem como o coeficiente angular da reta obtida.

p	mmax		mmin	
	mg	tg	mg	tg
-0.71	0.8271(3)	-0.956(2)	0.8272(1)	0.957(8)
-0.72	0.8146(1)	-1.122(9)	0.8143(2)	1.125(11)
-0.73	0.80100(5)	-1.308(4)	0.80100(10)	1.322(9)
-0.74	0.7876(2)	-1.62(1)	0.7872(2)	1.601(9)
-0.75	0.7728(3)	-2.05(3)	0.7730(8)	1.98(2)
-0.76	0.7594(7)	-3.03(5)	0.7577(1)	2.692(7)
-0.77	0.755(2)	-6.8(2)	0.7402(3)	4.68(2)

Examinando a tabela, concluímos que existem valores de p ($p = -0.76$ e $p = -0.77$) para os quais a magnetização nas duas redes pode de fato não coincidir, mesmo quando tomamos o limite de uma rede infinita. A fase de Baxter Assimétrica estaria presente então até o valor $p = -0.76$. Se a fase de fato existir, o outro limite da região de existência desta fase será dado pela transição entre esta fase e a fase $\langle \mu \rangle$, onde apenas uma rede está magnetizada.

Determinarmos a temperatura de transição entre estas duas fases através da divergência que ocorre na susceptibilidade magnética das redes de maior e menor magnetização, representadas nas figuras (3.12) e (3.13). A estatística utilizada é a mesma que a utilizada para a determinação da magnetização, exceto nas regiões de máximo da susceptibilidade, onde estatísticas de até 10^7 passos de Monte Carlo foram utilizadas para uma determinação precisa de p_L , o valor de p que corresponde ao máximo da susceptibilidade, em uma rede de dimensão linear L .

Figura 3.12: Curvas de susceptibilidade para a rede de maior magnetização.

Figura 3.13: Curvas de susceptibilidade para a rede de menor magnetização.

Para determinarmos a temperatura de transição de uma rede infinita precisamos supor aqui também um comportamento de escala na forma $p_L^* = p_\infty^* + xL^{-y}$, onde p_L^* é valor de p que corresponde ao máximo da susceptibilidade em uma rede de dimensão linear L , e o expoente y depende da natureza da transição. Efetuando uma análise análoga a utilizada para a magnetização, encontramos que aqui também o expoente que produz um melhor ajuste é dado por $y = 1.5$. Os valores de p_∞^* são dados então por $p_\infty^* = -0.7769(1)$, para a rede de maior magnetização, e $p_\infty^* = -0.7763(1)$, para a rede de menor magnetização. Os ajustes obtidos estão representados nas figuras (3.14) e (3.15).

Figura 3.14: Ajuste para determinação de p_∞^* para a rede de maior magnetização.

Figura 3.15: Ajuste para determinação de p_{∞}^* para a rede de menor magnetização.

Qual é a ordem da transição? Todos os ajustes de tamanho finito efetuados até aqui apresentaram comportamento proporcional a $L^{-1.5}$. Este expoente não corresponde a nenhuma combinação óbvia de expoentes de modelos tridimensionais, sendo por outro lado igual a $\sqrt{V}$. Se esta for a origem deste expoente, então esta é uma transição de 1ª ordem, onde o deslocamento do parâmetro que controla a transição é dado agora por $\sqrt{V}$, em contraste com a dependência com volume da rede prevista para o Modelo de Blume-Capel pela teoria de Borgs [BK90], ou com uma dependência com $V^{1/2}$, prevista para transições de primeira ordem assimétricas.

A caracterização da transição como sendo de 1ª ordem pode ser ainda confirmada de outras maneiras. Por exemplo, o máximo da susceptibilidade em função do tamanho de rede tem um comportamento que depende claramente com o volume da rede, conforme mostra as figuras (3.16) e (3.17).

Figura 3.16: Máximo da susceptibilidade em função do tamanho da rede, para a rede de maior magnetização.

Figura 3.17: Máximo da susceptibilidade em função do tamanho da rede, para a rede de menor magnetização.

As figuras (3.18) e (3.19) mostram o colapso de dados obtido a partir das curvas de susceptibilidade, considerando-se que a transição é de 1^a ordem.

Figura 3.18: Colapso de dados para a susceptibilidade, rede de maior magnetização.

Baseados nas análises apresentadas até aqui, nossa conclusão é a de que a fase de Baxter Assimétrica não existe em uma rede cúbica, ao menos para a temperatura para a qual antes se acreditava que ela pudesse existir. A fase $\langle \mu \rangle$ transita diretamente para a fase de Baxter Simétrica através de uma transição de 1^a ordem, conforme previsto pela abordagem de campo médio.

Embora a análise de dados para a magnetização (pág. 88) pareça indicar que a fase pode existir para valores de $p = -0.76$ e $p = -0.77$, as outras análises efetuadas aqui não estão de acordo com esta possibilidade. Por exemplo, os valores de p_{∞}^* (o valor de

Figura 3.19: Colapso de dados para a susceptibilidade, rede de menor magnetização.

p para o qual a susceptibilidade de uma rede infinita diverge) para as redes de maior e menor magnetização não coincidem, o que indica que nossa análise está subestimando os erros estatísticos envolvidos, o que explica porque os valores da magnetização resultam diferentes para $p = -0.76$ e $p = -0.77$. A provável fonte destes erros está no fato de não considerarmos um erro intrínscio ao expoente b (ou y). Com isto, estamos assumindo que este valor é conhecido com exatidão, de acordo com nossa hipótese de que o sistema tem um comportamento de escala que depende de $\sqrt{V}$, mas o que pode estar ocorrendo é que correções devido ao tamanho finito do sistema estejam modificando este valor. Se supormos por exemplo que $y = 2.0$ encontraremos valores iguais para o máximo das susceptibilidades dados por $p = -0.7765(1)$, o que mostra que realmente os valores distintos encontrados anteriormente para p^* são uma consequência da análise de erros

efetuada não levar em consideração todas as fontes de erro envolvidas.

Outra confirmação deste argumento é o fato do colapso de dados para a rede de maior magnetização não estar tão preciso quanto o colapso de dados para a rede de menor magnetização, o que indica que o valor de p_{∞}^* não está preciso o suficiente.

As curvas de susceptibilidade obtidas apresentam também apenas um máximo, o que está em desacordo com a existência da fase de Baxter Assimétrica, porque então deveríamos encontrar dois máximos, quando entramos na fase e quando saímos dela.

Capítulo 4

Mapeamento do Modelo de Blume-Capel em um Modelo de Percolação

Nos mapeamentos estudados até aqui, estivemos lidando sempre com variáveis tipo Ising (± 1), onde as transições que ocorrem são constituídas por mudanças no ordenamento do sinal dos spins. Desta forma, os clusters que representam as excitações do modelo são clusters de sinal, o que explica porque algoritmos de embedding são tão eficientes nestes casos.

No modelo de Blume-Capel a situação é diferente, porque além dos estados de Ising ± 1 temos também um terceiro estado de spin, $S = 0$, que torna o modelo assimétrico. Além de uma linha crítica de transição tipo Ising, existirá também uma linha de transição de 1^ª ordem, onde ocorrem transições entre spins $\pm 1 \leftrightarrow 0$, encontrando-se as duas curvas em um ponto tricrítico.

Descreveremos aqui um algoritmo de cluster desenvolvido por nós que é capaz de simular o modelo, e que resulta na formação de clusters constituídos também por spins zero, por paradoxal que isto possa parecer, já que spins zero não interagem com os seus vizinhos. A inclusão deste novo tipo de spin modifica completamente o cenário dos clusters formados: ao contrário de algoritmos anteriores, encontraremos aqui dois tipos diferentes

de clusters, que podem assumir diferentes estados de spin. Veremos que um deles está ligado a transições críticas tipo Ising no modelo, enquanto que o outro é responsável pelas transições que ocorrem ao longo da linha de 1ª ordem. Esperamos então no ponto tricrítico uma transição entre os tipos de cluster característicos de cada uma das transições, o que abre a possibilidade de caracterizarmos propriedades físicas tricríticas em termos das propriedades dos clusters formados.

Por tudo isto, o mapeamento do modelo em um modelo de percolação que resulte na formação de clusters equivalentes ao do algoritmo desenvolvido desempenha aqui um papel fundamental, porque teremos mostrado então que a construção dos clusters não é apenas um recurso computacional para efetuarmos a simulação, e sim uma construção que reflete diretamente propriedades da função de partição.

Mostramos neste capítulo que, embora bastante complexo, este mapeamento de fato existe, e nos conduz ao algoritmo de cluster desenvolvido anteriormente. Podemos então relacionar propriedades de clusters formados na simulação com propriedades físicas do modelo.

4.1 O Modelo de Blume-Capel

A Hamiltoniana do modelo é definida como

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1, 0, \quad (4.1)$$

onde a primeira somatória é sobre spins primeiro vizinhos na rede, Δ representa um campo cristalino ou um potencial químico (dependendo da interpretação que damos às variáveis de spin), e H é um campo magnético. O modelo foi proposto por Blume [Blu66] e Capel [Cap66] para explicar transições de 1ª ordem que ocorrem em dióxido de Urânio, e que são controladas por efeitos magneto-mecânicos.

Um dos aspectos mais interessantes do modelo é a ocorrência de um ponto tricrítico,

onde três fases que coexistem ao longo de uma linha tripla tornam-se indistinguíveis. O diagrama de fases do modelo é representado esquematicamente na figura (4.1).

Figura 4.1: Representação esquemática do Modelo de Blume-Capel.

Na superfície L_+ duas fases ferromagnéticas coexistem, com orientação de spin opostas. Esta superfície é delimitada por uma linha de pontos críticos tipo Ising L_λ e uma linha tripla (tracejada na figura) de 1ª ordem, onde estas duas fases ferromagnéticas e mais uma fase paramagnética coexistem. Estas duas curvas, assim como as linhas críticas L_+ e L_- encontram-se no ponto P , que é o ponto tricrítico.

A localização do ponto tricrítico foi alvo de estudos em diversos trabalhos. Podemos citar como os mais precisos os resultados de Landau e Swendsen [LS86], que utilizaram uma técnica de grupo de renormalização via Monte Carlo, e os resultados de Beale [Bea86], através de uma análise de tamanho finito a partir da matriz de transferência do modelo.

Mais recentemente, Wilding e Nielaba [WN96] efetuaram uma análise do ponto tricrítico utilizando-se de um ansatz para a forma de escala da distribuição de probabilidades no ponto tricrítico. Na tabela abaixo apresentamos os valores encontrados por estes autores. Por simetria, sabemos que o ponto tricrítico estará no plano $H = 0$.

	Δ_t	T_t
Landau e Swendsen	1.965(15)	0.609(3)
Beale	1.965(5)	0.610(5)
Wilding e Nielaba	1.9665(3)	0.608(1)

Beale nos fornece também a localização de diversos pontos de transição:

Δ	T	transição
0.00	1.695	2^a
0.50	1.567	2^a
1.00	1.398	2^a
1.50	1.150	2^a
1.87	0.800	2^a
1.92	0.700	2^a
1.95	0.650	2^a
1.962	0.620	2^a
1.965	0.610	tríc.
1.969	0.600	1^a
1.990	0.550	1^a
1.992	0.500	1^a
2.000	0.000	1^a

Ao longo da linha L_A sabemos que os expoentes críticos serão do tipo Ising. Já no ponto tricrítico o caráter da transição se modifica, devido a interferências entre flutuações de densidade e magnéticas, e devemos esperar expoentes distintos, conhecidos como expoentes tricríticos. Sabemos também que em três dimensões os valores destes expoentes serão clássicos, a menos de correções logarítmicas.

Na seção (1.4) introduzimos os campos de escala h , λ e g , através dos quais podemos apreciar o comportamento de escala do sistema nas vizinhanças do ponto tricrítico, e os expoentes dos autovalores associados a eles y_1 , y_2 e y_3 , cujos valores são conhecidos através de uma conjectura devida a Neinhuis *et al.* [NBR79], que relaciona um modelo de gás de rede tipo Potts (do qual o Modelo de Blume-Capel é um caso particular) com expoentes do modelo de 8 vértices, conhecidos exatamente. Em duas dimensões, estes expoentes assumem os seguintes valores:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{77}{40} = 1.925 \\ y_2 &= \frac{9}{5} = 1.80 \\ y_3 &= \frac{4}{5} = 0.8 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Os expoentes tricríticos associados a estes expoentes podem ser obtidos através da forma de escala para a distribuição de probabilidades [WN96], e são dados por (o subscrito t refere-se à expoentes tricríticos):

$$\begin{aligned} \alpha_t &= 2 - d/y_2 \\ \beta_t &= (d - y_1)/y_2 \\ \gamma_t &= (2y_1 - d)/y_2 \\ \nu_t &= 1/y_2 \\ \eta_t &= 2 - 2y_1 + d \\ \phi_t &= y_3/y_2 \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde Φ é o expoente de crossover, que controla a mudança entre os regimes crítico e tricrítico.

*Na análise do grupo de renormalização, consideramos que o reescalonamento dos campos de escala é dado por $g_i' \simeq \lambda_i g_i$, onde $\lambda_i = b^{\lambda_i}$, e denominamos λ como autovalor da transformação, e y como expoente do autovalor.

4.2 Algoritmo de Cluster para o Modelo de Blume-Capel

Vamos reescrever inicialmente a Hamiltoniana do modelo em unidades de temperatura, e na ausência de campo magnético:

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2, \quad S_i = \pm 1, 0, \quad (4.4)$$

onde agora cada constante de interação é medida em unidades de temperatura.

A forma mais simples de efetuarmos uma simulação de cluster para esta Hamiltoniana é através de um algoritmo de embedding. Decompomos a variável S em módulo e sinal, da seguinte forma:

$$S_i = \rho_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1, \rho_i = 1, 0. \quad (4.5)$$

A Hamiltoniana passa a ser dada então por

$$\beta\mathcal{H} = \left[- \sum_{\langle ij \rangle} K \rho_i \rho_j \sigma_i \sigma_j \right] + \left[\sum_i \Delta \rho_i \right] = \left[- \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} \sigma_i \sigma_j \right] + \left[\sum_i \Delta \rho_i \right], \quad (4.6)$$

onde

$$K_{ij} = K \rho_i \rho_j = \begin{cases} K & \text{se } S_i \text{ e } S_j \text{ são diferentes de zero.} \\ 0 & \text{em outro caso} \end{cases} \quad (4.7)$$

Esta nova Hamiltoniana pode ser simulada através de um algoritmo de cluster que cria clusters de sinal na variável σ , da mesma forma que na Hamiltoniana de Ising usual. O termo proporcional a Δ permanecerá constante, pois a etapa de criação de clusters não alterará os valores da variável ρ . Para que a simulação seja ergódica, após cada etapa de criação de clusters efetuamos uma etapa de Metropolis, para ser possível modificarmos ρ .

Este algoritmo de embedding é bastante eficiente na simulação da linha crítica do modelo, uma vez que constrói clusters do tipo Ising, e toda a linha crítica pertence a classe de universalidade deste modelo. Mas isto não é suficiente, porque como mencionamos anteriormente a linha de transição de 1ª ordem é formada por transições que modificam

o módulo do spin, que correspondente a variável ρ , que permanece intocada na etapa de formação de clusters. Além disto, o ponto tricrítico é caracterizado por flutuações de densidade e magnetização, e clusters que representem excitações apenas de magnetização não conterão toda a física do problema.

A questão então é formular um algoritmo capaz de modificar também o módulo dos spins pertencentes ao cluster. Este algoritmo foi desenvolvido por nós [BC96], e pode ser descrito da seguinte forma :

- Sorteamos o spin inicial do cluster, chamado de spin 'semente'.
- Sorteamos entre os dois valores de spin diferentes do valor da semente, com $p = 1/2$ para cada um deles, o valor para o qual vamos tentar mudar a semente (por exemplo, se o spin da semente tiver valor $+1$, sorteamos entre -1 e 0).
- Se a transição sorteada for do tipo $\pm 1 \rightarrow \mp 1$, utilizamos o algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising. Spins primeiros vizinhos da semente e que possuem o mesmo valor da semente são ligados com probabilidade $p_w = 1 - \exp(-2K)$. Cada novo spin adicionado ao cluster tem seus vizinhos de mesmo sinal ligados com p_w , e seguimos com este processo até que não existam mais novos spins a serem ligados. Os spins pertencentes ao cluster invertem de sinal, com probabilidade 1.
- Se a transição é do tipo $\pm 1 \leftrightarrow 0$, chamamos de 'spin proibido' o spin que não aparece na transição. Por exemplo, numa transição $+1 \rightarrow 0$ o spin proibido é -1 . Ligamos então spins primeiros vizinhos da semente que não sejam proibidos com probabilidade $p = 1 - \exp(-K)$. Este procedimento continua até que não existam mais novos spins a serem considerados.

Spins ligados formam o cluster, que é transformado adicionando-se o valor do spin proibido aos spins pertencentes a ele. Assim, um cluster constituído de spins $+1, 0$

transforma-se da seguinte forma: $+1 \rightarrow 0$, $0 \rightarrow -1$. A probabilidade de aceitarmos esta transformação é igual a 1, se a energia interna do cluster (não consideramos interações com a sua vizinhança) diminuir. Se a energia interna do cluster aumentar, a probabilidade de aceitarmos a nova configuração é $\exp(-\beta\Delta\mathcal{H})$, onde $\Delta\mathcal{H}$ é a diferença de energia interna ao cluster.

A figura (4.2) mostra uma possível transição entre clusters.

Figura 4.2: Transição possível entre clusters.

Observe que este é um algoritmo do tipo Wolff, onde em cada etapa formamos apenas um cluster. Para que o algoritmo seja válido, devemos provar que ele obedece a condição de balanço detalhado:

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \sigma')}{W(\sigma' \rightarrow \sigma)} = e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} \quad (4.8)$$

Transições $\pm 1 \rightarrow \mp 1$ são completamente equivalentes a transições que ocorrem no modelo de Ising, já que neste caso spins zero não desempenham nenhum papel especial. A prova de balanço detalhado pode então ser realizada da mesma forma. Esta etapa do algoritmo é equivalente também ao algoritmo de embedding.

Mais complicada é a prova de balanço detalhado para transições onde dois tipos de spins diferentes pertencem ao cluster. Para efetua-la, vamos seguir a mesma estratégia

utilizada para o algoritmo de Wolff quando aplicado ao Modelo de Ising, e reescrever a probabilidade de transição entre duas configurações na forma

$$W(\sigma \rightarrow \sigma') = W_C W_{\partial C} W_v, \quad (4.9)$$

onde W_C é a probabilidade de ligarmos spins do cluster, $W_{\partial C}$ é a probabilidade de não ligarmos o cluster com a sua vizinhança, e W_v é a probabilidade de modificarmos o valor dos spins pertencentes ao cluster.

Vamos analisar agora a condição de balanço detalhado (4.8). A probabilidade W_C de ligarmos o cluster será igual nas transições direta e inversa, porque a probabilidade de ligarmos spins será sempre a mesma, e existe o mesmo número de ligações nas configurações σ e σ' .

Para fixar a notação, vamos considerar que na transição direta o spin proibido é um spin $-$. A razão entre as probabilidades de não ligarmos o cluster com a sua vizinhança nas transições direta e inversa será dada por

$$\frac{W_{\partial C}}{W_{\partial C'}} = \frac{e^{-K(l_{++}+l_{+-}+l_{0+}+l_{00})}}{e^{-K(l'_{--}+l'_{-0}+l'_{0-}+l'_{00})}} \quad (4.10)$$

onde $l_{\mu\nu}$ é o número total de vizinhanças entre spins μ internos ao cluster e spins ν primeiros vizinhos externos ao cluster na transição direta, e $l'_{\mu\nu}$ tem o mesmo significado na transição inversa. Utilizando agora que

$$\begin{aligned} l_{+0} &= l'_{00} \\ l_{00} &= l'_{-0} \\ l_{0+} &= l'_{-+} \\ l_{+-} &= l'_{0-} \end{aligned} \quad (4.11)$$

encontramos

$$\frac{W_{\partial C}}{W_{\partial C'}} = \frac{e^{-K(l_{++}-l_{+-})}}{e^{-K(l'_{--}-l'_{-+})}} \quad (4.12)$$

Se considerarmos agora a diferença de energia entre as configurações inicial e final, veremos que a diferença de energia entre o cluster e a sua vizinhança é dada exatamente pela expressão acima. Já a diferença de energia interna é levada em consideração pela razão entre as probabilidades de transformarmos os valores dos spins pertencentes ao cluster, W_v/W'_v . Concluimos assim que esta etapa do algoritmo realmente satisfaz a condição de balanço detalhado.

Note que esta prova não pode ser estendida para um algoritmo do tipo Swendsen-Wang, da forma realizada na seção (2.1). Isto porque podemos ter agora dois clusters vizinhos de diferentes tipos (um cluster de Wolff e um cluster que contenha spins zero) que se transformem simultaneamente, e a configuração obtida desta forma não será simétrica em relação à configuração inicial, e desta forma o algoritmo não obedece à condição de balanço detalhado. Isto parece ser uma restrição séria, porque se não podemos criar um algoritmo tipo Swendsen-Wang então o mapeamento em um modelo de percolação não deve existir. Mostraremos na próxima seção que este não é o caso, não só é possível encontrarmos um algoritmo tipo Swendsen-Wang, como também um mapeamento. O que acontece é que o algoritmo que resulta do mapeamento é um pouco mais geral que o proposto aqui, que corresponde a uma particular escolha de sua dinâmica.

O algoritmo também é ergódico, porque é sempre possível construirmos um cluster com um só spin, o que nos possibilitará alcançar todas as configurações possíveis. Não é necessário então acrescentarmos uma etapa com o algoritmo de Metropolis, como ocorria com o algoritmo de embedding.

4.3 Mapeamento em um Modelo de Percolação

O algoritmo encontrado na seção anterior possui todas as propriedades desejadas: é capaz de criar cluster relevantes tanto para transições de segunda ordem quanto para de primeira, e como consequência deve refletir de forma apropriada as propriedades do ponto

tricrítico.

Mas ele possui algumas peculiaridades, que podem nos levar a acreditar que ele não passa de um recurso computacional curioso. Para começar, spins $+$ e $-$ não são equivalentes em clusters que incluem spins zero, é difícil entender porque é necessário excluirmos um dos sinais de spin do cluster formado. Pior do que isto, como explicar que spins zero formem ligações, se eles não interagem com os seus vizinhos? E como explicar a existência de duas probabilidades de ligação diferentes, quando a Hamiltoniana só possui um termo de interação?

A resposta para todas estas questões devem estar contidas em um mapeamento do modelo em um modelo de percolação que resulte nos clusters formados pelo algoritmo. No entanto, encontrar este mapeamento também é uma questão delicada, porque a Hamiltoniana do modelo parece bastante intratável para ser representada em termos de expansões em grafos, como na abordagem de Hu (ver seção 2.3), o que resultaria em um mapeamento [†].

Para procurarmos solucionar estes problemas, vamos reescrever a Hamiltoniana em termos de duas novas variáveis tipo Ising μ e ν , definidas por

$$\begin{aligned}\mu_i &= +S_i^2 + S_i - 1 \\ \nu_i &= -S_i^2 + S_i + 1\end{aligned}\tag{4.13}$$

Temos então a seguinte tabela:

μ	ν	S
$+$	$+$	$+$
$-$	$+$	0
$-$	$-$	$-$

[†]Na verdade, Hu [Hu91] propôs um mapeamento para o modelo através de um gás de rede tipo Potts, mas o algoritmo resultante não é capaz de representar flutuações de densidade, não representando então todas as características físicas do Modelo, e não sendo apropriado para o estudo do ponto tricrítico.

Note que o estado $\mu = +, \nu = -$ não existe. Ao escrevermos a função de partição para o modelo teremos de levar em conta este vínculo para o número de estados possíveis, e as probabilidades de ligação do algoritmo deverão ser definidas de forma tal a ser possível obedecermos a esta condição.

A motivação de termos introduzido estas variáveis é que um cluster constituído originalmente por spins $S = +$ e $S = 0$ é constituído agora por um cluster de spins $+$ na variável ν , enquanto um cluster de spins $S = -$ e $S = 0$ constitui-se agora de um cluster de spins $-$ na variável ν . Da definição de μ e ν concluímos que $S_i = \frac{\mu_i + \nu_i}{2}$, e efetuando esta substituição na Hamiltoniana encontramos

$$\beta\mathcal{H} = -\frac{K}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + \nu_i \nu_j + \mu_i \nu_j + \mu_j \nu_i) + \frac{\Delta}{4} \sum_i (\mu_i + \nu_i)^2 \quad (4.14)$$

Vamos considerar por enquanto a Hamiltoniana na ausência de campo cristalino Δ . Temos as seguintes configurações de energia possíveis:

u_1	$\begin{array}{cc} + & + \\ + & + \end{array}$	$E_1 = -K$
u_2	$\begin{array}{cc} - & - \\ + & + \end{array}$	$E_2 = 0$
u_3	$\begin{array}{cc} - & - \\ + & - \end{array}$	$E_3 = 0$
u_4	$\begin{array}{cc} - & - \\ - & + \end{array}$	$E_4 = 0$
u_5	$\begin{array}{cc} + & - \\ + & - \end{array}$	$E_5 = K$

Figura 4.3: Possíveis configurações, com as suas respectivas energias.

Como de hábito, em cada gráfico representamos uma vizinhança $\langle ij \rangle$ nas duas redes, com a rede μ por convenção "em cima" da rede ν . Por exemplo, em u_2 os valores de spin representados correspondem a uma vizinhança

$$\begin{array}{cc} \mu_i & \mu_j \\ \nu_i & \nu_j \end{array} \quad (4.15)$$

Nossa esperança é a de que seja possível mapearmos o modelo de Blume-Capel utilizando estas novas variáveis. Mas o primeiro passo é mostrar como encontrar um algoritmo de cluster em relação a estas variáveis, e verificar se este algoritmo corresponde ao encontrado para a Hamiltoniana de Blume-Capel original. Visando a estes objetivos, vamos definir as seguintes probabilidades de estabelecermos ligações:

$$\begin{array}{cccc} \text{X} & \text{—} & \text{wavy} & \text{zigzag} \\ p & q & r & s \end{array} \quad (4.16)$$

Linha ondulada corresponde a ligação entre spins diferentes, enquanto que linha cheia corresponde a ligação entre spins iguais. Cada gráfico representa uma vizinhança $\langle ij \rangle$ nas redes μ e ν . Por exemplo:

$$\begin{array}{cc} \mu_i & \mu_j \\ \text{X} & \\ \nu_i & \nu_j \end{array}$$

A escolha destas operações de ligação é arbitrária, poderíamos ter escolhido outras, mas nada garante que estas resultariam em um algoritmo válido para o Modelo de Blume-Capel. Por exemplo, a escolha mais direta teria sido escolhermos ligações simples associadas à cada um dos termos de interação. Mas esta escolha fracassaria, porque poderíamos então gerar configurações de ligações onde a escolha de configurações de spins que satisfaçam à condição de vínculo não seria possível. A escolha apresentada foi efetuada de forma tal a sempre ser possível obedecer a condição de vínculo presente nestas

novas variáveis, e de forma a obtermos o algoritmo de cluster proposto anteriormente. Na verdade, sabemos onde devemos chegar, estamos utilizando o algoritmo de cluster proposto anteriormente como referência.

Vamos encontrar agora o valor destas diversas probabilidades, utilizando o método de Kandel e Domany [KD91]. Com este fim, construímos a seguinte tabela, com as possíveis ligações em cada configuração:

(u_1)	pq	$p(1-q)$	$q(1-p)$	0	0	$P_d(u_1)$
(u_2)	0	0	q	0	0	$P_d(u_2)$
(u_3)	0	0	0	r	0	$P_d(u_3)$
(u_4)	0	0	0	0	s	$P_d(u_4)$
(u_5)	0	0	0	0	0	$P_d(u_5) = 1$

Por $P_d(u_i)$ representamos a probabilidade de não efetuarmos nenhuma operação de ligação em uma dada configuração u_i . Escolhemos $P_d(u_5) = 1$ porque não queremos congelar este tipo de configuração, que é a de maior energia.

As probabilidades de eliminação $P_d(u_i)$ obedecerão à condição

$$P_d(u_i) = e^{E_i - C_d} \quad , \quad (4.17)$$

onde E_i é a energia da particular configuração u_i , e C_d é uma constante independente da particular configuração u_i . Como já escolhemos $P_d(u_5) = 1$, temos que $C_d = K$, e todas as outras probabilidades de eliminação já estão definidas. Temos que

$$\begin{aligned} P_d(u_1) &= e^{-2K} \\ P_d(u_2) &= e^{-K} \\ P_d(u_3) &= e^{-K} \\ P_d(u_4) &= e^{-K} \end{aligned} \quad , \quad (4.18)$$

O valor das demais probabilidades resultam da condição de normalização. Desta forma,

$$\begin{aligned} p &= 1 - e^{-K} \\ q &= 1 - e^{-K} \\ r &= 1 - e^{-K} \\ s &= 1 - e^{-K} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Encontramos assim um algoritmo que obedece a condição de balanço detalhado nas novas variáveis, μ e ν . Resta verificarmos se este algoritmo é equivalente ao algoritmo desenvolvido anteriormente para a variável S , e se é possível obedecermos à condição de vínculo destas variáveis.

À primeira vista isto parece não acontecer, porque no algoritmo original existiam duas probabilidades diferentes de criarmos clusters: $p = 1 - e^{-2K}$ para clusters tipo Wolff, que são constituídos de apenas um sinal de spin que será invertido após a transição; e $p = 1 - e^{-K}$, para clusters mistos, formados por dois tipos diferentes de spins, sendo que o terceiro tipo possível é proibido de fazer parte do cluster. Estas duas características do algoritmo parecem não ocorrer aqui, porque não há sinal de spins proibidos e também só temos uma probabilidade de ligação, $p = 1 - e^{-K}$.

O que acontece é que a probabilidade de ligação que cria clusters tipo Wolff resulta de uma combinação das possíveis formas de ligarmos o cluster. Para ver isto, vamos considerar a seguinte transição tipo Wolff:

Figura 4.4: Transição tipo Wolff na variável S .

Nas novas variáveis μ e ν esta transição é representada por

$$\begin{array}{ccc} \mu_i + & + & \mu_j \\ \nu_i + & + & \nu_j \end{array} \longrightarrow \begin{array}{ccc} \mu_i - & - & \mu_j \\ \nu_i - & - & \nu_j \end{array}$$

Figura 4.5: Transição tipo Wolff nas variáveis μ e ν .

Podemos efetuar esta transição ligando de três formas possíveis,

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \diagup & \diagdown \\ \hline \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline \diagdown & \diagup \\ \hline \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline \hline \\ \hline \end{array} \quad (4.20)$$

A probabilidade de efetuarmos esta transição é dada então por

$$\mathcal{P} = pq + p(1 - q) + q(1 - p) = 1 - e^{-2K}, \quad (4.21)$$

que é a probabilidade de ligação para criarmos spins tipo Wolff no algoritmo original.

Vamos considerar agora uma transição que mude o módulo dos spins, por exemplo:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline s_i & s_j \\ \hline + & + \\ \hline \end{array} \longrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline s_i & s_j \\ \hline 0 & 0 \\ \hline \end{array}$$

Figura 4.6: Transição que muda módulo dos spins na variável S .

$$\begin{array}{ccc} \mu_i + & + & \mu_j \\ \nu_i + & + & \nu_j \end{array} \longrightarrow \begin{array}{ccc} \mu_i - & - & \mu_j \\ \nu_i + & + & \nu_j \end{array}$$

Figura 4.7: Transição que muda módulo dos spins nas variáveis μ e ν .

A forma de efetuarmos transições entre estas configurações é através de ligações tipo

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad (4.22)$$

Em u_1 esta probabilidade é dada por $P(u_1) = (1 - e^{-K})e^{-K}$, enquanto que em u_2 ela é dada por $P(u_2) = (1 - e^{-K})$. Note a presença do termo adicional e^{-K} na probabilidade de ligação em u_1 , em relação a probabilidade utilizada no algoritmo para a variável S . Ele está presente aqui de forma a compensarmos a diferença de energia entre um cluster de spins com módulo 1 e um cluster de spin 0. No algoritmo na variável original S esta diferença de energia é levada em consideração quando consideramos a probabilidade do cluster ter seus spins modificados (probabilidade de transição W_u). No algoritmo nas novas variáveis esta diferença de energia é considerada em cada ligação, mas o efeito global é o mesmo. Se uma ligação do tipo p for ativada os spins do cluster não poderão mudar de módulo, o que corresponderia ao caso em que a probabilidade de transição para o cluster na variável S impede que ele se modifique.

Uma última questão que falta ser esclarecida é a que diz respeito aos spins proibidos. Na formulação nas novas variáveis este conceito não existe, mas acaba ocorrendo de forma indireta. O que acontece por exemplo se criarmos o seguinte tipo de cluster, que na formulação original era impossível, devido a presença de spins proibidos? Este cluster só

s_i	s_j	s_k
+	0	-

Figura 4.8: Cluster possível na nova formulação.

pode ter sido ligado da seguinte forma, nas variáveis μ e ν :

$$\begin{array}{ccc} + & & - \\ \swarrow & & \searrow \\ + & + & - \end{array} \quad (4.23)$$

O que está acontecendo é que devido ao vínculo só existe uma configuração de spins compatível com esta configuração de ligações: ela mesma. Concluimos então que ao incluirmos três tipos diferentes de spins no mesmo cluster o cluster necessariamente não se modifica. Ou seja, este cluster não vai ser responsável pelas transições que vierem a ocorrer. A introdução de spins proibidos na formulação original é na verdade uma maneira de evitar-se este tipo de situação, já que a criação de um cluster que não se modifica é ineficiente em termos computacionais. Mas o importante é que os spins pertencentes a clusters responsáveis por transições na rede terão sido ligados com a mesma probabilidade, estes clusters serão idênticos nas duas formulações do algoritmo. Com relação ao vínculo, esta é também a pior situação que pode ocorrer, uma onde só existe uma configuração de spins compatível com a de ligações.

Conseguimos então formular um algoritmo do tipo Swendsen-Wang para a o modelo, algo que em termo das variáveis S parecia impossível. A diferença entre este algoritmo e o formulado anteriormente na variável S é a possibilidade de incluirmos spins antes proibidos, sendo que para isto pagamos o preço de termos apenas uma configuração de spins compatível com esta configuração de ligações.

Qual o efeito de incluirmos o campo cristalino Δ ? Teremos então que a energia de um spin irá se modificar ao efetuarmos transições $\pm 1 \leftrightarrow 0$. Isto é provocado por um termo adicional na Hamiltoniana,

$$\frac{\Delta}{2} \left(\frac{\mu_i^2}{2} + \frac{\nu_i^2}{2} + \mu_i \nu_i \right) \quad . \quad (4.24)$$

Como μ e ν são variáveis de Ising, os dois primeiros termos são constantes e não precisamos nos preocupar com eles. O último termo corresponde a interações antiferromagnéticas entre spins μ_i e ν_i , de forma tal que quando estes dois spins tiverem sinais opostos (spin 0 na variável S) podemos ligá-los com probabilidade $p = 1 - e^{-\Delta}$. Para que uma transição entre módulo de spins seja possível, é necessário então que nenhum spin zero pertencente ao cluster seja ligado, e a probabilidade disto ocorrer é $e^{-\Delta N_n}$, onde

N_0 é o número de spins zero no cluster. No algoritmo original, este termo era levado em consideração na probabilidade de aceitarmos uma modificação no valor dos spins pertencentes ao cluster, W_v , o que é completamente equivalente.

Tendo encontrado um algoritmo tipo Swendsen-Wang para o modelo, tudo indica que um mapeamento a partir da função de partição deve também ser possível. Na ausência de campo cristalino, a função de partição é dada por

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}}^* \prod_{\langle ij \rangle} \exp \left[\frac{K}{4} \mu_i \mu_j + \frac{K}{4} \nu_i \nu_j + \frac{K}{4} \mu_i \nu_j + \frac{K}{4} \mu_j \nu_i \right] \quad (4.25)$$

O asterisco sobre a somatória indica a restrição causada pelo vínculo: apenas configurações que obedecem ao vínculo serão consideradas na somatória. Podemos reescrever esta expressão como

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}}^* \prod_{\langle ij \rangle} \exp \left[\frac{K}{4} \mu_i \mu_j + \frac{K}{4} \nu_i \nu_j \right] \cdot \exp \left[\frac{K}{4} \mu_i \nu_j + \frac{K}{4} \mu_j \nu_i \right] \quad (4.26)$$

ou ainda

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}}^* AB \quad (4.27)$$

onde

$$A = \left[e^{K/2} \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} + \delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) + \delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) + e^{-K/2} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \right] \quad (4.28)$$

e

$$B = \left[e^{K/2} \delta_{\mu_i \nu_j} \delta_{\mu_j \nu_i} + \delta_{\mu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_j \nu_i}) + \delta_{\mu_j \nu_i} (1 - \delta_{\mu_i \nu_j}) + e^{-K/2} (1 - \delta_{\mu_i \nu_j}) (1 - \delta_{\mu_j \nu_i}) \right] \quad (4.29)$$

Após algumas manipulações das funções delta, podemos reescrever A e B da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A &= e^{K/2} \left[(1 - e^{-K}) \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} + (e^{-K/2} - e^{-K}) \delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \right. \\ &\quad \left. + (e^{-K/2} - e^{-K}) \delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) + e^{-K} \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned}
B = & e^{K/2} \left[(1 - e^{-K}) \delta_{\mu_i \nu_j} \delta_{\mu_j \nu_i} + (e^{-K/2} - e^{-K}) \delta_{\mu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_j \nu_i}) \right. \\
& \left. + (e^{-K/2} - e^{-K}) \delta_{\mu_j \nu_i} (1 - \delta_{\mu_i \nu_j}) + e^{-K} \right] \quad (4.31)
\end{aligned}$$

Vamos introduzir agora a seguinte notação simbólica para os deltas de kroenecker:

$$\begin{aligned}
\times & \quad \delta_{\mu_i \nu_j} \delta_{\mu_j \nu_i} \\
\text{---} & \quad \delta_{\mu_i \mu_j} \delta_{\nu_i \nu_j} \\
\not\sim & \quad \delta_{\mu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_j \nu_i}) \\
\not\sim & \quad \delta_{\mu_j \nu_i} (1 - \delta_{\mu_i \nu_j}) \\
\text{---} \sim & \quad \delta_{\nu_i \nu_j} (1 - \delta_{\mu_i \mu_j}) \\
\sim \text{---} & \quad \delta_{\mu_i \mu_j} (1 - \delta_{\nu_i \nu_j}) \quad (4.32)
\end{aligned}$$

Podemos então reescrever $\mathcal{A}$ na forma simbólica

$$\mathcal{A} = e^{K/2} \left[(1 - e^{-K}) \text{---} + e^{-K} + e^{-K/2} (1 - e^{-K/2}) \sim \text{---} + e^{-K/2} (1 - e^{-K/2}) \sim \text{---} \right] \quad (4.33)$$

ou

$$\mathcal{A} = e^K \left[\underbrace{(1 - e^{-K}) \text{---} + e^{-K}}_{A1} \cdot \underbrace{\left[e^{-K/2} + (1 - e^{-K/2}) \left(\text{---} + \text{wavy} \right) \right]}_{A2} \right] \quad (4.34)$$

De forma análoga, podemos reescrever $\mathcal{B}$ na seguinte forma:

$$\mathcal{B} = e^K \left[\underbrace{(1 - e^{-K}) \text{X} + e^{-K}}_{B1} \cdot \underbrace{\left[e^{-K/2} + (1 - e^{-K/2}) \left(\text{wavy} + \text{Z} \right) \right]}_{B2} \right] \quad (4.35)$$

Os termos $A1$ e $B1$ já estão em forma conveniente. Utilizando as relações (4.32) notamos que, devido a presença do vínculo,

$$\text{---} + \text{wavy} = \text{wavy} + \text{Z} \quad , \quad (4.36)$$

e portanto $A2 = B2$. Vamos reescrevê-lo de forma conveniente:

$$A2 = e^{K/2} \left[e^{-K/2} + (1 - e^{-K/2}) \text{wavy} \right] \cdot \left[e^{-K/2} + (1 - e^{-K/2}) \text{Z} \right] \quad (4.37)$$

Juntando todos os termos, a função de partição é dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{3K} \left[(1 - e^{-K}) \text{---} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{X} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K/2}) \text{wavy} + e^{-K/2} \right]^2 \cdot \left[(1 - e^{-K/2}) \text{Z} + e^{-K/2} \right]^2 \quad (4.38)$$

Expandindo os termos quadráticos, encontramos

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{3K} \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{---} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{X} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{Z} + e^{-K} \right] \quad (4.39)$$

Vamos introduzir agora o campo cristalino. A função de partição será multiplicada então por um termo na forma

$$e^{-\frac{\Delta}{4} \sum_i (\mu_i + \nu_i)^2} = \prod_i \exp \left[\frac{-\Delta}{4} (\mu_i^2 + \nu_i^2 + 2\mu_i \nu_i) \right] = e^{-\frac{\Delta N}{2}} \prod_i \exp \left[\frac{-\Delta}{2} \mu_i \nu_i \right] \quad , \quad (4.40)$$

onde N é o número de sítios da rede. Podemos reescrever esta expressão como

$$e^{-\frac{(N-1)\Delta}{2}} \prod_i \left[(1 - e^{-\Delta})(1 - \delta_{\mu_i \nu_i}) + e^{-\Delta} \right] \quad (4.41)$$

ou

$$e^{-\frac{(N-1)\Delta}{2}} \prod_i \left[(1 - e^{-\Delta}) \overset{\sim}{\sim} + e^{-\Delta} \right] \quad , \quad (4.42)$$

onde introduzimos a notação $\overset{\sim}{\sim} = (1 - \delta_{\mu_i \nu_i})$ para representar ligação entre spins μ_i e ν_i de sinais opostos.

A função de partição completa, desprezando-se constantes, é dada então por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} \left[(1 - e^{-K}) \text{---} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{X} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy} + e^{-K} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy} + e^{-K} \right] \cdot \prod_i \left[(1 - e^{-\Delta}) \overset{\sim}{\sim} + e^{-\Delta} \right] \quad . \quad (4.43)$$

Introduzindo agora variáveis de ligação, utilizando a convenção

variável q

variável p

variável r

variável s

variável t

e considerando que cada uma destas variáveis pode assumir os valores 0 (ligação ausente) ou 1 (ligação ativada), e estão definidas para cada vizinhança $\langle ij \rangle$ da rede, escrevemos a função de partição na forma

$$Z = \sum_{\{\mu, \nu\}} \prod_{\langle ij \rangle} \left\{ \sum_{q=0}^1 \left[(1 - e^{-K}) \text{---} \delta_{q1} + e^{-K} \delta_{q0} \right] \right\} \left\{ \sum_{p=0}^1 \left[(1 - e^{-K}) \times \delta_{p1} + e^{-K} \delta_{p0} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \sum_{r=0}^1 \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy} \delta_{r1} + e^{-K} \delta_{r0} \right] \right\} \left\{ \sum_{s=0}^1 \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy/slash} \delta_{s1} + e^{-K} \delta_{s0} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \prod_i \sum_{t=0}^1 \left[(1 - e^{-\Delta}) \text{spring} \delta_{t1} + e^{-\Delta} \delta_{t0} \right] \right\} \quad (4.44)$$

que pode ser reescrita como

$$\tilde{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \sum_{\{q, p, r, s, t\}} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} \left[(1 - e^{-K}) \text{---} \delta_{q1} + e^{-K} \delta_{q0} \right] \cdot \left[(1 - e^{-K}) \times \delta_{p1} + e^{-K} \delta_{p0} \right] \right. \\ \cdot \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy} \delta_{r1} + e^{-K} \delta_{r0} \right] \cdot \left. \left[(1 - e^{-K}) \text{wavy/slash} \delta_{s1} + e^{-K} \delta_{s0} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \prod_i \left[(1 - e^{-\Delta}) \text{spring} \delta_{t1} + e^{-\Delta} \delta_{t0} \right] \right\} \quad (4.45)$$

onde $\sum_{\{g,p,r,s,t\}}$ é a somatória sobre todas as configurações de ligação possíveis.

Vamos considerar agora que cada possível configuração de ligações da rede constitui um grafo G' . Podemos então representar a expressão acima na forma

$$\begin{aligned}
 Z = \sum_{\{\mu,\nu\}} \sum_{G' \subseteq G} & \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=1} (1 - e^{-K}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=0} e^{-K} \right] \cdot \\
 & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=1} (1 - e^{-K}) \times \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=0} e^{-K} \right] \cdot \\
 & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=1} (1 - e^{-K}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=0} e^{-K} \right] \cdot \\
 & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: t=1} (1 - e^{-K}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: t=0} e^{-K} \right] \cdot \\
 & \cdot \left[\prod_{i:t=1} (1 - e^{-\Delta}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{i:t=0} e^{-\Delta} \right] \quad (4.46)
 \end{aligned}$$

Esta é uma função de partição conjunta entre o Modelo de Blume-Capel e um modelo de percolação. Para encontrarmos o modelo de percolação, devemos efetuar a somatória sobre as variáveis de spin μ e ν .

Um primeiro passo para efetuarmos esta somatória é a identificação de clusters como conjuntos de spins conectados por um caminho contínuo de ligações. No entanto, a situação aqui é bem mais complexa do que as tratadas anteriormente, nos modelos de Ising e Ashkin-Teller. A presença de ligações r e s torna possível que diferentes sinais de spin pertençam ao mesmo cluster, através de ligações com spins $S = 0$, que forma uma espécie de ponte entre os diferentes sinais de spin. Além disso, o número de estados compatíveis com uma dada configuração de ligações depende do número de spins diferentes pertencentes a um mesmo cluster, e da natureza das ligações que o constituem. Um cluster pode também pertencer a ambas as redes, μ e ν , ou então a só uma delas (ligação q , ou ausência de ligações).

O cluster mais geral possível possui os três tipos diferentes de spin (na variável S), com spins zero formando uma ponte entre os diferentes sinais. Nestes clusters mais gerais, existe uma relação unívoca entre a configuração de ligações e a configuração de spins, ou seja, existe apenas uma configuração de spins compatível com a configuração de ligações. Um exemplo deste tipo de cluster é dado na figura abaixo:

$$\begin{array}{c}
 \mu \quad + \text{---} + \quad \text{---} - \quad \text{---} - \\
 \nu \quad + \text{---} + \quad \text{---} + \quad \text{---} -
 \end{array} \quad (4.47)$$

É interessante introduzirmos aqui o conceito de ilha de spins. Como explicamos acima, spins de diferentes sinais só podem pertencer a um mesmo cluster quando são conectados através de pontes de spin zero, e estas pontes são sempre constituídas por ligações r ou s . Vamos chamar de ilha a cada um dos blocos de spins de mesmo sinal que pertencem a um cluster, e que estão conectados uns aos outros através de pontes de spin zero. No exemplo da figura (4.47), temos duas ilhas, uma formada por spins $+$ e outra por spins $-$, conectadas por um spin zero. Note que uma permutação $r \leftrightarrow s$ implica em uma inversão do sinal de todos os spins da ilha conectada por aquela ligação. Por exemplo, efetuando uma permutação $r \leftrightarrow s$ na figura anterior teríamos a seguinte configuração de spins possível:

$$\begin{array}{c}
 \mu \quad + \text{---} + \quad \text{---} - \quad \text{---} + \text{---} + \\
 \nu \quad + \text{---} + \quad \text{---} + \quad \text{---} + \text{---} +
 \end{array} \quad (4.48)$$

Já quando o cluster é formado por dois tipos diferentes de spin, existem duas configurações de spin compatíveis com a configuração de ligações, por exemplo,

$$\begin{array}{c}
 \mu \quad + \text{---} + \quad \text{---} - \\
 \nu \quad + \text{---} + \quad \text{---} +
 \end{array} \quad (4.49)$$

ou

$$\begin{array}{c} \mu \\ \nu \end{array} \quad \begin{array}{c} - \quad - \\ + \quad + \end{array} \quad \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} \quad \begin{array}{c} - \\ - \end{array} \quad (4.50)$$

Finalmente, devemos considerar o caso onde o cluster é constituído por apenas um tipo de spin. Não teremos então a presença de ligações r ou s no cluster, mas devemos considerar ainda dois casos distintos, se ligações do tipo p estão ou não presentes. Se estiverem presentes, teremos duas configurações de spin possíveis, $S = +$ ou $S = -$. Por outro lado, se estiverem ausentes então $S = 0$ também será possível, e teremos três estados de spin compatíveis com a configuração de ligações.

Vamos iniciar agora a soma sobre as configurações de spins, considerando a Hamiltoniana mais geral onde existe um termo de campo magnético presente na forma $B \sum_i S_i = \frac{B}{2} \sum_i (\mu_i + \nu_i)$, que aparecerá na função de partição na forma $\prod_i \exp \left[\frac{B}{2} (\mu_i + \nu_i) \right]$. Considerando inicialmente o caso onde o cluster é constituído por apenas um tipo de spin, temos duas contribuições distintas, conforme explicado acima. Quando ligações do tipo p estão presentes, a contribuição estatística desta configuração é dada por

$$(e^{Bn} + e^{-Bn}) \quad (4.51)$$

Quando ela está ausente spins zero são também possíveis, e a contribuição é

$$(1 + e^{Bn} + e^{-Bn}) \quad (4.52)$$

Nas expressões acima, n é o número de spins em cada uma das ilhas. Como o cluster é formado por apenas um tipo de spin, a ilha aqui equivale ao cluster inteiro, nos casos onde o cluster não é constituído por spins zero.

Nossa estratégia para efetuarmos a soma sobre configurações será sempre a de procurarmos escrever o peso estatístico da configuração na forma de um cosseno hiperbólico ($\cosh$), como nas expressões acima.

Vamos analisar agora o caso onde o cluster é constituído por dois tipos diferentes de spin (em relação à variável S). Existem então duas configurações de spin compatíveis com cada configuração de ligações, representadas por exemplo nas figuras (4.49) e (4.50). No entanto, elas não correspondem a uma inversão do sinal dos spins, e não encontramos uma contribuição tipo cosh.

Foi para solucionar este tipo de situação que introduzimos o conceito de ilhas. Conforme explicado anteriormente, ao efetuarmos uma permutação $\tau \leftrightarrow s$ invertemos o sinal da ilha conectada ao cluster através desta ligação. Se efetuarmos então uma soma parcial sobre as configurações de ligação, de forma a somar configurações que diferem por uma permutação $\tau \leftrightarrow s$, obteremos a contribuição tipo cosh desejada. A contribuição deste tipo de cluster para a somatória será dada então por

$$\left[\prod_{\text{ilhas}} (e^{Bn} + e^{-Bn}) \right] + \left[\prod_{\text{ilhas}0} (e^{Bn_0} + e^{-Bn_0}) \right] \quad . \quad (4.53)$$

A primeira produtória é sobre todas as ilhas de sinal formadas no cluster. A contribuição deste primeiro termo corresponderia à configuração representada na figura (4.49), se somarmos também a configuração resultante da permutação $\tau \leftrightarrow s$ possível. No caso representado nesta figura só temos uma ilha de spin, se outras ilhas estivessem presentes a somatória sobre todas as permutações possíveis resultaria em um produto de cossenos hiperbólicos, conforme representado acima.

A segunda produtória é sobre todas as ilhas de spin zero que ocorrem em (4.49), sendo que n_0 é o número de spins zero em cada uma destas ilhas de zeros. Esta contribuição ocorre devido à existência de uma outra configuração de spins compatível com esta configuração de ligações, e que está representada em (4.50). Nesta outra configuração, spins que originalmente eram zero possuem agora um sinal, interagindo então com o campo magnético. Somando aqui também sobre configurações que diferem por uma permutação

$r \leftrightarrow s$ obtemos a contribuição na forma de cosh. Se uma ligação do tipo t estiver presente, este termo referente ao número de spins zero não aparecerá, porque os spins zero estarão fixos.

Finalmente, quando três tipos diferentes de spins pertencem ao mesmo cluster só existe uma configuração de spins compatível com a configuração de ligações, mas somando aqui também sobre todas as permutações $r \leftrightarrow s$ possíveis encontraremos a contribuição tipo cosh desejada, e a contribuição deste tipo de cluster é dada então por

$$\prod_{\text{ilhas}} (e^{B_n} + e^{-B_n}) \quad (4.54)$$

Juntando todas as diferentes formas de contribuição, a função de partição do modelo de percolação é dada por

$$\begin{aligned} Z = \sum_{G' \subseteq G}^{\text{per}} & \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=1} (1 - e^{-K}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: p=1} (1 - e^{-K}) \text{X} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: p=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=1} (1 - e^{-K}) \text{wavy} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=1} (1 - e^{-K}) \text{zigzag} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_{i: t=1} (1 - e^{-\Delta}) \text{zigzag} \right] \cdot \left[\prod_{i: t=0} e^{-\Delta} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_A (e^{B_n} + e^{-B_n}) \right] \cdot \left[\prod_C (1 + e^{B_n} + e^{-B_n}) \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_D (e^{B_n} + e^{-B_n}) + \prod_E (e^{B_{n0}} + e^{-B_{n0}}) \right] \quad (4.55) \end{aligned}$$

O índice sobre a somatória indica que configurações que diferem apenas por permutações $\tau \leftrightarrow s$ devem ser somadas apenas uma vez.

A produtória A é sobre todas as ilhas de spin pertencentes aos seguintes tipos de cluster:

- qualquer cluster com ligações p presentes.
- qualquer cluster com ligações t presentes, mas que possua também spins diferentes de zero.
- clusters formados por três diferentes tipos de spin na variável S .

A produtória C é sobre clusters com um só tipo de spin S , e que são constituídos unicamente por ligações q .

A produtória D é sobre ilhas de spin formadas em clusters com dois tipos diferentes de spin, e a produtória E sobre ilhas de spins zero presentes neste tipo de cluster. Estes clusters serão constituídos por ligações q , r e s .

Vamos definir agora o termo que estabelece ligações como

$$\begin{aligned} \Pi(G', p) = & \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=1} (1 - e^{-K}) \text{---} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: q=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \left[\prod_{\langle ij \rangle: p=1} (1 - e^{-K}) \text{X} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: p=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=1} (1 - e^{-K}) \text{wavy} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: r=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=1} (1 - e^{-K}) \text{zigzag} \right] \cdot \left[\prod_{\langle ij \rangle: s=0} e^{-K} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\prod_{i,t=1} (1 - e^{-\Delta}) \text{zigzag} \right] \cdot \left[\prod_{i,t=0} e^{-\Delta} \right] \end{aligned} \quad (4.56)$$

A função de partição passa a ser dada então por

$$Z = \sum_{G' \subseteq G} \Pi(G', p) \left[\prod_A (e^{Bn} + e^{-Bn}) \right] \cdot \left[\prod_C (1 + e^{Bn} + e^{-Bn}) \right] \cdot \left[\prod_D (e^{Bn} + e^{-Bn}) + \prod_E (e^{Bn_0} + e^{-Bn_0}) \right] \quad (4.57)$$

Esta é a função de partição do modelo de percolação. Se desejássemos recuperar a função de partição original, deveríamos definir agora variáveis de spin que obedecessem ao vínculo original, e que satisfizessem as diversas configurações de ligações possíveis. Somaríamos então sobre as variáveis de ligação, recuperando então o Modelo de Blume-Capel. Note no entanto que algumas configurações de ligação são incompatíveis com configurações de spin, devido a presença do vínculo. Este é o caso de configurações de ligações do tipo *prp* ou *psp*, que possuirão então peso estatístico zero.

Podemos agora calcular algumas quantidades físicas de interesse em termos de propriedades dos cluster formados no modelo de percolação. A magnetização é dada por

$$M(G, p) = \lim_{B \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z \quad , \quad (4.58)$$

ou

$$M = \lim_{B \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{G' \subseteq G} \Pi(G', p) \frac{\partial}{\partial B} \left\{ \left[\prod_A (e^{Bn} + e^{-Bn}) \right] \cdot \left[\prod_C (1 + e^{Bn} + e^{-Bn}) \right] \cdot \left[\prod_D (e^{Bn} + e^{-Bn}) + \prod_E (e^{Bn_0} + e^{-Bn_0}) \right] \right\} \quad (4.59)$$

Vamos calcular o efeito da derivada em cada uma das produtórias. Ao derivarmos em relação a B a produtória A encontraremos uma contribuição do tipo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial B} \left(\prod_A 2 \cosh[Bn] \right) &= (2 \sinh Bn_1)n_1(2 \cosh Bn_2) \cdots (2 \cosh Bn_n) + \\ &+ (2 \cosh Bn_1)(2 \sinh Bn_2)n_2 \cdots (2 \cosh Bn_n) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \dots + \\
& + (2 \cosh Bn_1)(2 \cosh Bn_2) \dots (2 \sinh Bn_c)n_c \quad , \quad (4.60)
\end{aligned}$$

onde consideramos que existem c ilhas formadas por clusters do tipo A , designadas por $n_1, n_2, \dots, n_c$. Resultados similares são encontrados ao calcularmos o efeito da derivada nas demais produtórias.

Vamos analisar agora o efeito de tomarmos o limite $B \rightarrow 0$ em $\frac{\partial}{\partial B} \prod_A (2 \cosh Bn)$. Como $\lim_{B \rightarrow 0} 2 \sinh Bn = 0$, a menos de quando $n \rightarrow \infty$, vemos que só restarão termos onde n é o número de spins de uma ilha que percola. Desta forma,

$$\lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial B} \prod_A (2 \cosh Bn) = N_A \quad , \quad (4.61)$$

onde N_A é o número total de spins que pertencem a ilhas de clusters tipo A que percolam.

Através do mesmo tipo de raciocínio, definimos N_C , N_D e N_E como sendo o número total de spins pertencentes à uma ilha que percola em um cluster do tipo C , D ou E , respectivamente. A magnetização será dada então por

$$\begin{aligned}
M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{NZ} \sum_{G' \subseteq G}^{per} \Pi(G', p) \{ & N_A 2^{n_A-1} 3^{n_C} [2^{n_A} + 2^{n_C}] + \\
& + N_C 2^{n_C} 3^{n_A-1} [2^{n_A} + 2^{n_C}] + 2^{n_A} 3^{n_C} [2^{n_A-1} N_D + 2^{n_C-1} N_E] \} \quad (4.62)
\end{aligned}$$

A expressão acima foi calculada considerando-se que clusters característicos à cada uma das produtórias podem percolar ao mesmo tempo. No entanto, esta não parece ser uma hipótese correta, porque clusters pertencentes à produtória A responsáveis por transições possuem ligações p , sendo formados com probabilidade de ligação $P_1 = 1 - e^{-2K}$. Já os clusters formados em outras produtórias não possuem este tipo de ligação, sendo formados com probabilidade $P_2 = (1 - e^{-K})e^{-K}$, menor do que P_1 . É de se esperar então que clusters pertencentes a produtória A sejam os primeiros a percolar, e mesmo quando

P_2 for grande o suficiente para que clusters associados a ela percolem, clusters do tipo A já terão dominado a rede, não sobrando espaço para que outros percolem.

Com base nestes argumentos, podemos considerar então que os únicos clusters a percolar são clusters tipo A, e a expressão para a magnetização reduz-se a

$$M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\mathcal{Z}} \sum_{G' \subseteq G}^{\text{per}} \Pi(G', p) N_A 2^{n_a-1} 3^{n_c} [2^{n_d} + 2^{n_e}] \quad (4.63)$$

Redefinindo agora

$$\Pi^*(G', p) = \Pi(G', p) 2^{n_a-1} 3^{n_c} [2^{n_d} + 2^{n_e}] \quad , \quad (4.64)$$

e considerando que no limite $\lim_{N \rightarrow \infty} n_a - 1 \sim n_a$, podemos escrever a magnetização como

$$M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{G' \subseteq G}^{\text{per}} \Pi^*(G', p) \frac{N_A}{N} \quad , \quad (4.65)$$

de onde concluímos que a magnetização é a probabilidade de um sítio da rede pertencer a uma ilha que percola.

Podemos calcular também a susceptibilidade magnética, definida por

$$\chi(G, p) = \lim_{B \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \ln \mathcal{Z} \quad . \quad (4.66)$$

Encontraremos então que a susceptibilidade magnética tem forma semelhante a encontrada no Modelo de Ising, sendo dada por

$$\begin{aligned} \chi(G, p) = & \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{-1} \sum_{G' \subseteq G} \Pi(G', p) \sum_c^f \frac{n_c^2(G')}{N} \\ & + \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{-2} \sum_{G' \subseteq G} \sum_{G'' \subseteq G} \Pi(G', p) \Pi(G'', p) \frac{[N_A(G') - N_A(G'')]^2}{2N} \quad , \quad (4.67) \end{aligned}$$

onde $\sum_c^f$ é uma soma sobre todas as ilhas que não percolam, incluindo ilhas de clusters formadas em outras produtórias que não a produtória A. O primeiro termo desta expressão é o tamanho médio dos clusters formados, e da mesma forma que no Modelo de Ising

podemos argumentar que a contribuição do segundo termo da expressão acima permanecerá finita. Desta forma, a susceptibilidade será dada pelo tamanho médio das ilhas de spin formadas pelo algoritmo.

A função de correlação entre spins é dada por

$$\langle \sigma_a \sigma_b \rangle = Z^{-1} \sum_{\{\mu\nu\}} \Pi(G', p) \left[\prod_A (e^{B_n} + e^{-B_n}) \right] \cdot \left[\prod_G (1 + e^{B_n} + e^{-B_n}) \right] \cdot \left[\prod_D (e^{B_n} + e^{-B_n}) + \prod_E (e^{B_{n_0}} + e^{-B_{n_0}}) \right] \sigma_a \sigma_b \quad (4.68)$$

Definimos agora clusters e ilhas da mesma forma que anteriormente. Teremos então que se σ_a e σ_b pertencem à mesma ilha, $\sigma_a \sigma_b = 1$. Se pertencem a ilhas diferentes, $\sigma_a \sigma_b = \pm 1$ com igual probabilidade, e a contribuição deste grafo G' para a soma sobre configurações é zero. Encontramos assim que

$$\langle \sigma_a \sigma_b \rangle_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} Z^{-1} \left[\sum_{G' \subseteq G} \Pi^*(G', p) \delta(a, b) \right] \quad , \quad (4.69)$$

onde

$$\delta(a, b) = \begin{cases} 1 & \text{se } a \text{ e } b \text{ estiverem na mesma ilha} \\ 0 & \text{se } a \text{ e } b \text{ estiverem em ilhas distintas} \end{cases} \quad (4.70)$$

O lado direito desta equação é a função de conectividade entre pares do modelo de percolação, quando tomamos como referência as ilhas de spin formadas dentro dos diversos clusters. Isto mostra que o expoente ν_p relativo ao comprimento de correlação quando $p \rightarrow p_c$ será igual ao expoente ν do Modelo de Blume-Capel.

Em todas as análises de quantidades físicas efetuadas até aqui, vimos que a característica dos clusters formados que está relacionada a propriedades termodinâmicas do modelo é o tamanho das ilhas que constituem os clusters, e não os clusters propriamente ditos. É como se o modelo de percolação relevante estivesse contido no modelo geométrico a que nos conduz a função de partição do modelo.

Vimos também que os clusters que dominam a transição de percolação são clusters do tipo A. Embora existam três espécies de clusters deste tipo, apenas o cluster que

possui ligações p presentes será o responsável pela transição, já que é o único cujo valores de spin modificam-se. Estes clusters terão sido formados com probabilidade de ligação $P = 1 - e^{-2K}$, e serão equivalentes aos clusters formados no modelo de Ising, o que reflete o fato de toda a linha crítica do Modelo de Blume-Capel pertencer a mesma classe de universalidade do Modelo de Ising.

Resta explicar em termos geométricos o surgimento de um ponto tricrítico, e da linha de primeira ordem que dele se origina. O que acontece é que, embora qualquer transição de percolação seja sempre controlada por clusters tipo Ising, clusters que efetuem transições entre o módulo dos seus spins constituintes serão ajudados por um fator extra, as ligações tipo t . Por fixarem spins zero na rede, é de se esperar que exista um certo valor de t onde clusters formados por spins zero passem a competir com clusters tipo Ising, porque mesmo sendo criados com probabilidade menor estes clusters terão mais sítios na rede passíveis de serem ligados. O ponto onde estes dois tipos de clusters competem em igualdade de condições é o ponto tricrítico. Se continuarmos aumentando a probabilidade t (aumentando Δ), clusters que modificam o módulo dos seus spins dominarão, e teremos a linha de primeira ordem.

Mostramos assim que é possível mapear-se o modelo de Blume-Capel em um modelo de percolação, onde quantidades físicas relevantes estão conectadas a propriedades das ilhas que constituem os clusters formados. Esta é a principal vantagem da formulação aqui apresentada, e nos leva a acreditar que clusters formados por este algoritmo representam a maneira mais eficiente de simularmos o modelo, além de nos fornecer interpretações geométricas para as diferentes regiões do diagrama de fases do modelo.

Como em outros modelos, este mapeamento está longe de ser o único possível. Podemos sempre aumentar o termo de interação ferromagnética, compensando através da inclusão de um novo termo de interação antiferromagnética. Novamente, estaríamos perdendo assim a conexão direta entre propriedades do modelo de percolação e propriedades ter-

modinâmicas, o que além de pouco interessante teoricamente resulta em algoritmos de simulação ineficientes. Poderíamos imaginar que a introdução do conceito de ilhas resolveria aqui também os problemas, separando ilhas de spins com um sinal de ilhas com sinais de spin opostos. Mas a situação é diferente, porque aqui as diferentes ilhas não podem variar o sinal de seus spins de forma independente.

4.4 Uma Abordagem Alternativa

Nesta seção mostramos ainda uma outra forma de efetuarmos o mapeamento, que possui a vantagem de não apresentar vínculos entre as variáveis de spin. No entanto, pagamos um preço por isto: embora o mapeamento parta de uma função de partição equivalente a do Modelo de Blume-Capel, não é possível relacionarmos as variáveis de spin nos dois modelos através de uma transformação de variáveis. Isto torna difícil o entendimento do que o algoritmo resultante está realmente efetuando, e a interpretação geométrica dos clusters formados fica prejudicada.

A idéia, como no mapeamento anterior, é definirmos variáveis de Ising μ e ν , e a partir delas encontrarmos a variável inicial S através da transformação $S_i = \frac{\mu_i + \nu_i}{2}$. Como existirão dois estados (μ, ν) correspondentes a $S = 0$, corrigimos esta multiplicidade através da inclusão na função de partição do termo

$$\exp \left[-\frac{1}{2} (1 - \mu_i \nu_i) \ln 2 \right] \quad . \quad (4.71)$$

A função de partição é dada então por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} \exp \left\{ K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \right\} \\ &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \exp \left\{ \frac{K}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + \nu_i \nu_j + \mu_i \nu_j + \nu_i \mu_j) - \frac{1}{2} \sum_i (1 - \mu_i \nu_i) \ln 2 \right\}, \quad (4.72) \end{aligned}$$

que corresponde a uma Hamiltoniana efetiva na forma

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{-J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i + \nu_i)(\mu_j + \nu_j) + \frac{1}{2\beta} \sum_i (1 - \mu_i \nu_i) \ln 2 \quad (4.73)$$

Podemos incluir ainda o campo cristalino na função de partição, que passa a ser dada (a menos de fatores constantes) por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mu, \nu\}} \exp \left[\frac{K}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (\mu_i \mu_j + \nu_i \nu_j + \mu_i \nu_j + \nu_i \mu_j) + \frac{1}{2} \sum_i (\ln 2 - \Delta) \mu_i \nu_i \right] \quad (4.74)$$

Como aqui não existem vínculos presentes entre as variáveis, é muito fácil mapearmos este modelo em um modelo de percolação: basta analisarmos cada termo de interação de forma análoga a efetuada no Modelo de Ising.

Note que Δ é medido em unidades de temperatura, existindo então uma competição entre temperatura e campo cristalino, de forma a fixarmos ou não spins zero. Isto porque o sinal do termo de interação pode ser positivo ou negativo, o que corresponde a ligações ferromagnéticas ou antiferromagnéticas, sendo que esta última fixa spins zero.

Em princípio, este algoritmo pode efetuar qualquer transição entre spins, além de cada cluster poder ser constituído por qualquer tipo de spin. No entanto, esta liberdade foi alcançada através da inclusão de um termo adicional na Hamiltoniana, o que pode ser desastroso do ponto de vista computacional. O efeito é o mesmo que o descrito pela formulação de Kandel-Domany, só que aqui a interação não é entre clusters, e sim com um campo adicional. Podemos desta forma criar clusters que não guardem nenhuma relação com as excitações do modelo, o que será corrigido pelo termo adicional, que corresponderá a uma probabilidade de transformarmos o valor dos spins pertencentes a este cluster. O que pode acontecer é que a maioria das transições sejam rejeitadas, e o algoritmo não resulte em qualquer modificação da rede. Isto de fato foi observado ao longo da linha de primeira ordem, onde este algoritmo apresenta histerese ainda maior que o algoritmo de Metropolis.

Capítulo 5

Generalizações para o Modelo BEG

Mostramos neste capítulo que é possível generalizar o algoritmo proposto anteriormente para o Modelo de Blume-Capel, de modo que ele possa ser aplicado também ao Modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) [BEG71]. Após provarmos que este algoritmo satisfaz à condição de balanço detalhado, discutimos a região do diagrama de fases do modelo onde ele pode ser aplicado, mostrando quais as suas limitações e o porque delas ocorrerem. Apresentamos também resultados de simulações numéricas de transições de 1^a ordem no modelo, concluindo que aqui também o algoritmo é bastante eficiente na eliminação de estados metaestáveis, o que possibilita a obtenção de dados bastantes precisos a respeito de estados de equilíbrio do modelo.

5.1 O Modelo de Blume-Emery-Griffiths

Um objetivo natural para a extensão dos métodos introduzidos até aqui é o Modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) [BEG71], definido pela Hamiltoniana

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \phi \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2, \quad S_i = \pm 1, 0 \quad (5.1)$$

O caso particular $\phi = 0$ corresponde ao Modelo de Blume-Capel. No seu caso mais geral, este modelo possui diversas aplicações[HB91], como a análise de supercondutividade e separação de fases em misturas de He^3 e He^4 , o estudo de ligas semicondutoras, flúidos

de muitas componentes etc. Todas estas aplicações devem-se ao fato de que este é o modelo mais geral para o estudo de sistemas onde estão envolvidas dois tipos de flutuações, do tipo Ising ($S = \pm 1$) e de densidade ($S = 1, 0$).

O diagrama de fases deste modelo é muito mais complexo que o do Modelo de Blume-Capel, apresentando diversas fases e estruturas diferentes, dependendo do valor assumido pelas constantes de interação. Através de uma abordagem de campo médio podemos obter os diagramas de fases apresentados na figura (5.1), conforme trabalho de Hoston e Berker ([HB91], ver também [TK85]).

Diagramas de fases para razões ϕ/K iguais a (a)5, (b)3, (c)0, (d)-0.15, (e)-0.5, (f)-1, (g)-1.5, (h)-3, (i)-3.5. 'f' representa fase ferromagnética, 'd' fase paramagnética, 'a' fase antiferromagnética e 'f'' fase ferrimagnética. Linhas contínuas são transições de 2^o ordem, linhas pontilhadas são transições de 1^o ordem. O eixo horizontal representa o campo cristalino (em unidades de Δ/zK) e o vertical a temperatura ($1/zK$), onde z é o número de coordenação da rede.

É suficiente representarmos a região do diagrama de fases correspondente a $K > 0$, por estarmos considerando uma rede bipartida, de modo que interações bilineares anti-ferromagnéticas ($K < 0$) podem ser mapeadas em interações ferromagnéticas, através da inversão dos sinais de uma das subredes.

Existem quatro parâmetros de ordem no modelo:

$$\begin{aligned} M_A &= \langle S_i \rangle_A \\ M_B &= \langle S_i \rangle_B \\ Q_A &= \langle S_i^2 \rangle_A \\ Q_B &= \langle S_i^2 \rangle_B \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde dividimos a rede em duas subredes, A e B .

A fase ferrimagnética é caracterizada por magnetização diferente de zero e quebra de simetria entre as subredes:

$$0 \neq M_A \neq M_B \neq 0 \quad Q_A \neq Q_B \quad (5.3)$$

Já a fase antiquadrupolar possui quebra de simetria entre subredes, mas magnetização zero:

$$M_A = M_B = 0 \quad Q_A \neq Q_B \quad (5.4)$$

Uma configuração típica da fase antiquadrupolar seria a seguinte:

$$\begin{array}{cccc} + & 0 & - & 0 \\ 0 & + & 0 & - \\ + & 0 & + & 0 \\ 0 & + & 0 & - \end{array}$$

5.2 Algoritmo de Cluster para o Modelo BEG

É possível generalizarmos o algoritmo proposto anteriormente para o Modelo de Blume-Capel da seguinte forma:

- Sorteamos o spin inicial do cluster, chamado de spin 'semente'.
- Sorteamos entre os dois valores de spin diferentes do valor da semente, com $p = 1/2$ para cada um deles, o valor para o qual vamos tentar mudar a semente (por exemplo, se o spin da semente tiver valor $+1$, sorteamos entre -1 e 0).
- Se a transição sorteada for do tipo $\pm 1 \rightarrow \mp 1$, utilizamos o algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising. Spins primeiros vizinhos da semente e que possuem o mesmo valor da semente são ligados com probabilidade $p_w = 1 - \exp(-2K)$. Cada novo spin adicionado ao cluster tem seus vizinhos de mesmo sinal ligados com p_w , e seguimos com este processo até que não existam mais novos spins a serem ligados. Os spins pertencentes ao cluster invertem de sinal, com probabilidade $W_s = 1$.
- Se a transição é do tipo $\pm 1 \leftrightarrow 0$, chamamos de 'spin proibido' o spin que não aparece na transição. Por exemplo, numa transição $+1 \rightarrow 0$ o spin proibido é -1 . Ligamos então spins primeiros vizinhos da semente que não sejam proibidos com probabilidades $p_{eq} = 1 - \exp(-K - \phi/3)$ e $p_{dif} = 1 - \exp(-K + \phi/3)$. p_{eq} refere-se a probabilidade de ligarmos spins iguais, enquanto que p_{dif} é a probabilidade de ligarmos spins diferentes. Este procedimento continua até que não existam mais novos spins a serem considerados.

Spins que foram ligados formam o cluster, que é transformado adicionando-se o valor do spin proibido aos spins pertencentes a ele. Assim, um cluster constituído de spins $+1, 0$ transforma-se da seguinte forma: $+1 \rightarrow 0, 0 \rightarrow -1$. A probabilidade de aceitarmos esta transformação é igual a 1, se a energia interna do cluster (não

consideramos a sua vizinhança) diminuir. Se a energia interna do cluster aumentar, a probabilidade de aceitarmos a nova configuração é $\exp(-\beta\Delta\mathcal{H})$, onde $\Delta\mathcal{H}$ é a diferença de energia interna ao cluster.

Este algoritmo diferencia-se do algoritmo apresentado para o Modelo de Blume-Capel pela presença de duas probabilidades de ligação diferentes, quando estamos em uma transição entre o módulo dos spins. Isto é uma consequência da inclusão de um termo de interação biquadrático na Hamiltoniana (quando $\phi = 0$ as duas probabilidades de ligação tornam-se iguais). Para entender de onde surge esta diferença, vamos considerar a prova de que este algoritmo satisfaz à condição de balanço detalhado.

Para efetuarmos esta prova, vamos reescrever inicialmente a Hamiltoniana na seguinte forma (equivalente à Hamiltoniana original, a menos de um termo constante):

$$\beta\mathcal{H} = -(K - \frac{\phi}{3}) \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{\phi}{3} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 S_j^2 + S_i S_j) - \frac{2\phi}{3} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 - 1)(S_j^2 - 1) + (\Delta - \frac{2\phi z}{3}) \sum_i S_i^2, \quad (5.5)$$

onde z é o número de coordenação da rede. A motivação para escrevermos a Hamiltoniana desta forma pode ser entendida se percebermos que o primeiro e o último termos desta Hamiltoniana correspondem (a menos da constante de interação) a termos que já existem no modelo de Blume-Capel, para o qual sabemos como formular um algoritmo de cluster. O segundo e o terceiro termos são novos, mas já estão em uma forma bastante favorável: o primeiro só contribui quando temos vizinhanças entre spins $++$ (ou $--$), e o terceiro contribui para vizinhanças 00 . Além disto, a contribuição energética dos dois termos é a mesma.

Para que o algoritmo obedeça a condição de balanço detalhado, ele deve satisfazer à relação

$$\frac{e^{\beta \mathcal{H}(\sigma)}}{e^{\beta \mathcal{H}(\tilde{\sigma})}} = \frac{W_{\tilde{\sigma} \rightarrow \sigma}}{W_{\sigma \rightarrow \tilde{\sigma}}} \quad (5.6)$$

Da mesma forma que acontecia no Modelo de Blume-Capel, spins zero não desempenham nenhum papel especial em transições $\pm 1 \leftrightarrow \mp 1$, e a prova de que este tipo de transição satisfaz a condição de balanço detalhado é idêntica a do Modelo de Ising. Já a transição entre o módulo dos spins é mais complicada. Vamos considerar um cluster constituído por spins $(+1, 0)$ que se transforma em um cluster $(0, -1)$. Com relação à Hamiltoniana modificada (5.5), a razão entre os pesos de Boltzmann das configurações inicial e final é dado por

$$\frac{e^{\beta \mathcal{H}(\sigma)}}{e^{\beta \mathcal{H}(\tilde{\sigma})}} = \frac{e^{-(K - \frac{\phi}{3})(l^{++} - l^{+-}) - \frac{2\phi}{3}(l^{++} + l^{00})} B}{e^{-(K - \frac{\phi}{3})(\tilde{l}^{--} - \tilde{l}^{-+}) - \frac{2\phi}{3}(\tilde{l}^{--} + \tilde{l}^{00})} \tilde{B}} \quad (5.7)$$

onde B é a contribuição para a energia da parte interna ao cluster, e $l_{\mu\nu}$ é o número total de vizinhanças entre spins μ internos ao cluster e spins ν primeiros vizinhos externos ao cluster, na transição direta. $\tilde{l}_{\mu\nu}$ tem o mesmo significado, na transição inversa.

Desta expressão fica claro porque reescrevemos a Hamiltoniana na forma (5.5). O termo $\exp\{-(K - \frac{\phi}{3})(l^{++} - l^{+-})\}$ tem a mesma forma que teria no modelo de Blume-Capel, e a contribuição específica ao modelo BEG só aparece através da vizinhança entre spins iguais. Se utilizarmos agora que

$$\begin{aligned} l^{+-} &= l - l^{++} - l^{+0} - l^{0+} - l^{00} - l^{0-} \\ \tilde{l}^{-+} &= \tilde{l} - \tilde{l}^{--} - \tilde{l}^{-0} - \tilde{l}^{0-} - \tilde{l}^{00} - \tilde{l}^{0+} \\ l^{0-} &= \tilde{l}^{--} \\ \tilde{l}^{0+} &= l^{++} \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde l é o número de vizinhanças entre o cluster e a sua parte externa, obtemos

$$\frac{e^{\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{e^{\beta\mathcal{H}(\tilde{\sigma})}} = \frac{\exp \left[-\left(K - \frac{\phi}{3}\right)(l^{++} + l^{+0} + l^{0+} + l^{00}) - \frac{2\phi}{3}(l^{++} + l^{00}) \right] B}{\exp \left[-\left(K - \frac{\phi}{3}\right)(\tilde{l}^{--} + \tilde{l}^{-0} + \tilde{l}^{0-} + \tilde{l}^{00}) - \frac{2\phi}{3}(\tilde{l}^{--} + \tilde{l}^{00}) \right] \tilde{B}} \quad (5.9)$$

ou

$$\frac{e^{\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{e^{\beta\mathcal{H}(\tilde{\sigma})}} = \frac{\exp \left[-\left(K + \frac{\phi}{3}\right)(l^{++} + l^{00}) - \left(K - \frac{\phi}{3}\right)(l^{+0} + l^{0+}) \right] B}{\exp \left[-\left(K + \frac{\phi}{3}\right)(\tilde{l}^{--} + \tilde{l}^{00}) - \left(K - \frac{\phi}{3}\right)(\tilde{l}^{-0} + \tilde{l}^{0-}) \right] \tilde{B}} \quad (5.10)$$

Por outro lado, podemos escrever a probabilidade de transição entre uma configuração σ e uma σ' na forma

$$W_{\sigma \rightarrow \sigma'} = W_C W_{\partial C} W_v \quad (5.11)$$

onde, como de hábito, W_C é a probabilidade de ligarmos o cluster, $W_{\partial C}$ é a probabilidade de não ligarmos o cluster com a sua vizinhança e W_v é a probabilidade de transformarmos o valor dos spins pertencentes ao cluster. As probabilidades de ligação p_{eq} e p_{dif} foram definidas de forma tal que a contribuição de $W_{\partial C}$ corresponda justamente à diferença de energia no contorno do cluster representada em (5.7), sendo este o motivo de ser necessário definirmos duas probabilidades de ligação diferentes. A diferença de energia interna ao cluster B será compensada por W_v , e a probabilidade de ligarmos o cluster nas configurações σ e σ' são iguais, cancelando-se. Note que, apesar da existência de duas probabilidades de ligação diferentes, elas não se misturarão ao modificarmos o valor dos spins pertencentes ao cluster, o que garante que as probabilidades de ligarmos o cluster na ida e na volta sejam iguais. Considere por exemplo a transição

$$\begin{array}{ccc} \sigma & & \tilde{\sigma} \\ \begin{array}{ccc} + & - & + \\ | & & \\ + & - & 0 \end{array} & \longrightarrow & \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ | & | \\ 0 & - \end{array} \end{array}$$

Como o número de ligações entre spins iguais é diferente nas duas configurações, a probabilidade de ligarmos o cluster nas configurações σ e σ' também é diferente. Mas isto não estraga a prova de balanço detalhado, pois a configuração σ é topologicamente equivalente a configuração $\tilde{\sigma}$, no sentido que em ambas as configurações podemos ligar os spins das seguintes formas:

E portanto a probabilidade de formarmos um cluster ligando os quatro spins é igual em σ e $\tilde{\sigma}$, cancelando-se então a razão entre W_σ e $\tilde{W}_\sigma$. Completamos assim a prova de que o algoritmo satisfaz à condição de balanço detalhado.

O algoritmo aqui generalizado foi proposto originalmente para o algoritmo de Blume-Capel, com a intenção de tornar possível transições de 1^a ordem entre uma fase ferromagnética e uma fase paramagnética. Este tipo de transição ocorre também no Modelo BEG, nos gráficos $a - f$ representados na figura (5.1). Nos diagramas $g - i$ duas novas fases existem, a antiquadrupolar e a antiferrimagnética, o que torna necessário a elaboração de outros tipos de cluster, capazes de representar estas fases.

Note no entanto que o algoritmo proposto acima não é válido para qualquer valor dos parâmetros de interação do modelo, mas apenas na região $-3 \leq \phi/K \leq 3$, que é a região onde as probabilidades de ligação estão bem definidas. O limite inferior desta região de validade pode ser bem entendido, porque para $\phi/K < -1$ a existência de novas fases faz com que os clusters criados por este algoritmo não sejam os mais apropriados. Já a razão porque não podemos utilizá-lo na região $\phi/K > 3$ não está tão clara. Um certo entendimento pode ser alcançado se considerarmos o limite $\phi/K \rightarrow \infty$. Neste caso limite o Modelo BEG pode ser mapeado em um modelo de Ising com um campo magnético dependente da temperatura [Gri67], e neste modelo spins $+$ e $-$ desempenharão o mesmo

papel, podendo ambos pertencer ao mesmo cluster. O fato do nosso algoritmo não ser válido na região $\phi/K > 3$ sugere que bastante antes deste limite já é necessária a criação de clusters que englobem os dois sinais de spin.

A formulação de algoritmos que resultem em clusters constituídos por diferentes sinais de spin, necessários para a correta descrição da fase antiquadrupolar e também no limite $\phi/K = \infty$, ainda é uma questão em aberto.

5.3 Resultados Numéricos

Com o objetivo de testarmos a eficiência do algoritmo na eliminação de estados metaestáveis, efetuamos simulações do modelo para $\phi/K = -0.5$, correspondente ao diagrama (e) da figura (5.1), e temperatura $\tau \equiv K^{-1} = 0.05$, variando o campo cristalino Δ de forma a cruzarmos a linha de transição de 1^a ordem.

Na figura (5.1) representamos o módulo da magnetização em função do campo cristalino Δ , ao atravessarmos a linha de 1^a ordem.

Figura 5.1: Módulo da magnetização em função do campo cristalino Δ .

Quadrados e triângulos representam resultados obtidos através do algoritmo de Metropolis, quando o campo cristalino aumenta (quadrados) ou diminui (triângulos). Círculo e xis representam resultados obtidos com o algoritmo de cluster, para campo cristalino crescente (círculo) e decrescente (xis). A rede simulada é quadrada, com dimensão linear $L = 40$, e foram utilizados 50.000 passos de Monte Carlo para efetuarmos médias, após termos utilizado 10.000 passos para equilibrar o sistema.

Quando utilizamos o algoritmo de Metropolis, notamos a presença de efeitos de histerese bastante pronunciados, e que são eliminados quando do uso do algoritmo de cluster por nós proposto. O inset da figura mostra como este desaparecimento dos efeitos de histerese é obtido. Medimos aqui a magnetização em função do tempo de Monte Carlo, para $\Delta = 1.0000215$. Vemos que a transição entre as diferentes fases é realizada quase que instantaneamente, ocorrendo aqui onze vezes, em vinte passos de Monte Carlo.

No limite de baixas temperaturas é fácil entender porque este tunelamento entre as fases ferromagnética e paramagnética ocorre tão frequentemente. Neste limite, praticamente todos os spins da fase ferromagnética são $+$ (ou $-$). Suponha então que criamos um cluster nesta fase, e tentamos transformar os seus spins em zero. Como para $T \approx 0$ a probabilidade de ligação é dada por $p \approx 1$, o cluster será constituído por praticamente todos os spins da rede. A probabilidade de transformarmos os spins em zero será dada por

$$W_z = \exp \left\{ N \left[-\frac{(K + \phi)z}{2} + \Delta \right] \right\} \quad (5.12)$$

Esta probabilidade será igual a 1 para

$$2\Delta = (K + \phi)z \quad , \quad (5.13)$$

que é a equação para a coexistência entre as fases ferromagnética e paramagnética para $T = 0$. Desta forma, $W_z \approx 1$ nas proximidades deste ponto, e a rede inteira pode facilmente tunelar entre as diferentes fases.

Eliminados efeitos de histerese, fica fácil obtermos dados precisos para o comportamento de equilíbrio do sistema. A figura (5.2) mostra os resultados obtidos para a susceptibilidade magnética $\chi' = \beta L^2 (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2)$, assim como o colapso de dados obtido. Foi utilizada a mesma estatística da figura (5.1), exceto para as redes $L = 50$ e $L = 60$, onde utilizamos 500.000 passos de Monte Carlo.

Figura 5.2: Susceptibilidade magnética χ' em função do campo cristalino, e colapso de dados obtido.

A tabela abaixo mostra os valores Δ_L^* para os quais a susceptibilidade é máxima, bem como o resultado para Δ_∞^* , obtido por extrapolação dos dados através da lei de escala $\Delta_L^* = \Delta_\infty^* + aL^{-2}$, utilizando-se redes de tamanho $L = 30$ até $L = 60$. O ajuste resultante está representado na figura (5.3).

L	Δ_L^*
24	1.000060(3)
30	1.0000385(10)
40	1.0000215(8)
50	1.0000135(5)
60	1.00000955(20)
∞	0.9999997(2)

Figura 5.3: Extrapolação dos dados obtidos para Δ_L^* , utilizando a lei de escala $\Delta_L^* = \Delta_\infty^* + aL^{-2}$.

Como no Modelo de Blume-Capel, obtivemos uma lei de escala para o comportamento finito do sistema com uma dependência com o volume da rede. Este resultado está de acordo com a teoria de Borgs e Kotecky [BK90], já que estamos em uma transição de 1ª ordem assimétrica onde duas fases ferromagnéticas coexistem com uma paramagnética.

Conclusões

Procuramos ao longo desta tese discutir as relações existentes entre algoritmos de cluster e mapeamentos em modelos de percolação, partindo do pressuposto que a existência de um algoritmo de cluster eficiente deve estar sempre associada à possibilidade de um mapeamento em um modelo de percolação.

Devemos antes de tudo esclarecer o que entendemos por algoritmo eficiente. Definir um algoritmo de cluster que obedeça a condição de balanço detalhado é tarefa simples, existem infinitas formas de realizá-la, porque podemos sempre jogar na probabilidade de modificarmos os spins pertencentes ao cluster todos os termos de energia que não se encaixaram no modelo de percolação propriamente dito. Mas então o que acontece é que na maioria das vezes a probabilidade de modificar o cluster é pequena, e a abordagem através deste tipo de algoritmo não faz muito sentido.

O fato notável é o de que o algoritmo mais eficiente corresponde sempre ao mapeamento através do qual podemos escrever propriedades termodinâmicas diretamente em termos de propriedades de percolação. Assim, do mesmo modo que no modelo de Ising a magnetização pode ser interpretada como a probabilidade de um sítio da rede pertencer a um cluster que percola, a mesma relação foi encontrada para o modelo de Blume-Capel, ao longo de sua linha crítica. É possível também explicar em termos simples porque toda a linha crítica do modelo pertence a mesma classe de universalidade do modelo de Ising, sendo isto consequência do fato dos clusters que dominam esta transição serem os mesmos responsáveis pela transição que ocorre no modelo de Ising.

Infelizmente, não fomos ainda capazes de medir em nossas simulações propriedades físicas diretamente a partir de seus análogos em termos de percolação, porque em todas as simulações utilizamos algoritmos tipo Wolff, que constroem apenas um cluster na rede. A simulação através de um algoritmo do tipo Swendsen-Wang, que reflete completamente as propriedades do mapeamento é mais difícil do ponto de vista computacional, porque precisamos guardar informações referentes a cada um dos clusters formados (como por exemplo o número de spins zero que o constitui), além de identificar a qual espécie de cluster ele pertence. Além disto, o mapeamento encontrado por nós mostra que para simularmos desta forma é necessário permitir que os três diferentes tipos de spin pertençam a um mesmo cluster, e neste tipo de situação existirá apenas uma configuração de spins compatível com a configuração de ligações, e como consequência a rede quase não se modifica, tornando a simulação bastante lenta.

O fato de efetuarmos simulações utilizando um único cluster torna difícil a leitura de propriedades físicas através de propriedades de percolação, simplesmente porque não estamos simulando o modelo de percolação completo. Por exemplo, para medir a magnetização devemos ser capazes de identificar, para cada configuração de ligações, qual a probabilidade de um sítio da rede pertencer a um cluster que percola. Mas isto não é possível se criarmos apenas um cluster, porque então não saberemos dizer com certeza se de fato existe um cluster que percola na rede.

Bastante promissor para a solução deste problema é um método introduzido por Leung e Henley [LH91], que conseguiram formular o problema de percolação em termos de propriedades de clusters de Wolff, e que pretendemos utilizar no futuro. Outra perspectiva promissora para a utilização do mapeamento mencionado é o desenvolvimento de desigualdades como a FKG, bastante úteis do ponto de vista matemático.

Mostramos neste trabalho que a simulação de transições de 1ª ordem através de algoritmos de cluster é bastante vantajosa, desde que tenhamos identificado corretamente

qual espécie de cluster representa a transição. Conseguimos então eliminar completamente efeitos de histerese, encontrando facilmente as propriedades de equilíbrio do sistema. A vantagem da abordagem através de algoritmos de cluster, com relação a outros métodos discutidos no Capítulo 1, é a de que não precisamos introduzir nenhuma modificação na Hamiltoniana, simulando o sistema de forma direta e simples. Foi possível então analisar o comportamento de tamanho finito que ocorre em diferentes transições de 1ª ordem assimétricas, e nossos resultados corroboram as previsões da teoria de Borgs.

O Modelo de Ashkin-Teller foi estudado como forma de nos ajudar no mapeamento do modelo de Blume-Capel, mas os resultados obtidos para o seu mapeamento são também bastante interessantes. De forma semelhante ao que ocorre no modelo de Blume-Capel, onde os clusters relevantes para a percolação (as ilhas) estão de certa forma imersos em um modelo de percolação mais geral, aqui também descobrimos que os clusters de percolação relevantes são na verdade constituídos por unidades mais elementares, que se combinam para formar os clusters que percolam. Desta forma, o algoritmo proposto anteriormente por Wiseman e Domany é na verdade o resultado de operações mais básicas. É interessante estudarmos agora em termos de quais destas operações as propriedades físicas do modelo são expressas.

Com relação ao modelo BEG, fomos capazes de generalizar o algoritmo proposto para o modelo de Blume-Capel na região do diagrama de fases onde a transição envolvida é da mesma espécie da que ocorria no modelo de Blume-Capel. Fora desta região ainda não fomos capazes de elaborar algoritmos de cluster eficientes. Embora tenhamos uma idéia de quais devem ser as modificações que devemos efetuar nos clusters para descrevermos as novas fases, não está claro como podemos implementá-las. De qualquer forma, parece interessante buscarmos aqui também um mapeamento em um modelo de percolação, já que esta Hamiltoniana também pode ser escrita de forma bastante semelhante à do modelo de Ashkin-Teller. Como aqui novas fases estão presentes, é de se esperar que encontremos um

número ainda maior de clusters relevantes, e o mapeamento deve ser bastante complexo.

Bibliografia

- [AC97] J. M. Araujo and F. A. Costa, *Phase Diagrams of the Ashkin-Teller Model on the Cayley Tree*, Braz. J. Phys. **27** (1997), 89.
- [ACCN88] M. Aizenman, J. T. Chayes, L. Chayes, and C. M. Newman, *Discontinuity of the Magnetization in One-Dimensional $1/|x - y|^2$ Ising and Potts Models*, J. Stat. Phys. **50** (1988), 1.
- [AT43] J. Ashkin and E. Teller, *Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components*, Phys. Rev. **64** (1943), 178.
- [Bar79] M. N. Barber, *Finite-Size Scaling, Phase Transitions and Critical Phenomena* (C. Domb and J. L. Lebowitz, eds.), vol. 8, Academic, New York, 1979.
- [Bax71] R. J. Baxter, *Eight-Vertex Model in Lattice Statics*, Phys. Rev. Lett. **26** (1971), 832.
- [Bax72] R. J. Baxter, *Partition Function of the Eight-Vertex Lattice Model*, Ann. Phys. **70** (1972), 193.
- [Bax73] R. J. Baxter, *Potts Model at the Critical Temperature*, J. Phys. C **6** (1973), L445.
- [BC96] M. B. Bouabci and C. E. I. Carneiro, *Eliminating Metastability in First-Order Phase Transitions*, Phys. Rev. B **54** (1996), 359.

- [Bea86] P. D. Beale, *Finite-Size Study of the Two-Dimensional Blume-Capel Model*, Phys. Rev. B **33** (1986), 1717.
- [BEG71] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, *Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in $He^3 - He^4$ Mixtures*, Phys. Rev. A **4** (1971), 1071.
- [BH92] K. Binder and D. W. Hermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Solid-State Sciences, vol. 80, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [Bin79] K. Binder, *Introduction: Theory and Technical Aspects of Monte Carlo Simulations*, Monte Carlo Methods, vol. 7, Springer-Verlag, Berlin, 1979, p. 1.
- [Bin81] K. Binder, *Finite Size Scaling: Analysis of Ising Model Block Distribution Functions*, Z. Phys. **43** (1981), 119.
- [BJ92] C. Borgs and W. Janke, *New Method to Determine First-Order Transition Points from Finite-Size Data*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 1738.
- [BK90] C. Borgs and R. Kotecky, *A Rigorous Theory of Finite-Size Scaling at First-Order Phase Transitions*, J. Stat. Phys. **61** (1990), 79.
- [BK92] C. Borgs and R. Kotecky, *Finite-Size Effects at Asymmetric First-Order Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 1734.
- [BL84] K. Binder and D. P. Landau, *Finite-Size Scaling at First-Order Phase Transitions*, Phys. Rev. B **30** (1984), 1477.
- [Blu66] M. Blume, *Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2* , Phys. Rev. **141** (1966), 517.
- [BN91] B. Berger and T. Neuhaus, *Multicanonical Algorithms for First-Order Phase Transitions*, Phys. Lett. B **267** (1991), 249.

- [BN92] B. Berger and T. Neuhaus, *Multicanonical Ensemble: A New Approach to Simulate First-Order Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 9.
- [BN97] G. T. Barkema and M. E. J. Newman, *New Monte Carlo Algorithms for Classical Spin Systems*, Monte Carlo Methods in Chemical Physics, Wiley, New York, 1997.
- [BRK94] C. Borgs, P. E. L. Rakow, and S. Kappler, *The Crossover from First to Second-Order Finite-Size Scaling: a Numerical Study*, J. Phys. **4** (1994), 1927.
- [BS84] K. Binder and D. Stauffer, *A Simple Introduction to Monte Carlo Simulation and Some Specialized Topics*, Applications of the Monte Carlo Methods in Statistical Physics, vol. 36, Springer-Verlag, Berlin, 1984, p. 1.
- [BS87] G. Batrouni and B. Svetitsky, *Accelerated Dynamics in Simulations of First-Order Phase Transitions*, Phys. Rev. B **36** (1987), 5647.
- [BT92] R. Brower and P. Tamayo, Physica A **193** (1992), 314.
- [BW92] A. D. Bruce and N. B. Wilding, *Scaling Fields and Universality of the Liquid-Gas Critical point*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 193.
- [Cap66] H. W. Capel, *On the Possibility of First-Order Phase-Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field*, Physica **32** (1966), 966.
- [CFN⁺94] V. Cataudella, G. Franzese, M. Nicodemi, A. Scala, and A. Coniglio, *Critical Clusters and Efficient Dynamics of Frustrated Spin Models*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 1541.
- [CLB86] M. S. S. Challa, D. P. Landau, and K. Binder, *Finite-Size Effects at Temperature-Driven First-Order Transitions*, Phys. Rev. B **34** (1986), 1841.

- [COS87] F. A. Costa, M. J. Oliveira, and S. R. Salinas, *Asymmetric Baxter Phase in the Symmetric Ashkin-Teller Model*, Phys. Rev. B **36** (1987), 7163.
- [DBGK80] R. V. Ditzian, J. R. Banavar, G. S. Grest, and L. P. Kadanoff, *Phase Diagram for the Ashkin-Teller Model in Three Dimensions*, Phys. Rev. B **22** (1980), 2542.
- [Doo53] J. L. Doob, *Stochastic Process*, Wiley and Sons, New York, 1953.
- [DR79] E. Domany and E. K. Riedel, *Two-Dimensional Anisotropic N-Vector Models*, Phys. Rev. B **19** (1979), 5817.
- [FK72] C. M. Fortuin and P. W. Kastelyn, *On the Random-Cluster Model*, Physica **57** (1972), 536.
- [FKG71] C. M. Fortuin, P. W. Kastelyn, and J. Ginibre, *Correlation Inequalities on Some Partially Ordered sets*, Commun. Math. Phys. **22** (1971), 89.
- [FS89] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 1195.
- [FS95] S. J. Ferreira and A. D. Sokal, *Antiferromagnetic Potts Models on the Square Lattice*, Phys. Rev. B **51** (1995), 6727.
- [Gri67] R. B. Griffiths, *First-Order Phase Transitions in Spin-One Ising Systems*, Physica **33** (1967), 689.
- [HB91] W. Hoston and N. Berker, *Multicritical Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling*, Phys. Rev. Lett. **67** (1991), 1027.
- [HH77] P. C. Hohenberg and B. J. Halperin, *Theory of Dynamical Critical Phenomena*, Rev. Mod. Phys. **49** (1977), 435.

- [Hu84] C-K Hu, *Percolations, Clusters, and Phase Transitions in Spin Models*, Phys. Rev. B **29** (1984), 5103.
- [Hu91] C.-K. Hu, *Percolations, Clusters, and Properties of a Dillute Potts Model*, Phys. Rev. B **44** (1991), 170.
- [Hua87] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Willey and Sons, 1987.
- [KBAD92] D. Kandel, R. Ben-Av, and E. Domany, *Cluster Monte Carlo Dynamics for the Fully Frustrated Ising Model*, Phys. Rev. B **45** (1992), 4700.
- [KD91] D. Kandel and E. Domany, *General Cluster Monte Carlo Dynamics*, Phys. Rev. B **43** (1991), 8539.
- [KF69] P. W. Kastelyn and C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Japan Suppl. **26** (1969), 11.
- [LH91] P. W. Leung and C. L. Henley, *Percolation Properties of the Wolff Clusters in Planar Triangular Spin Models*, Phys. Rev. B **43** (1991), 752.
- [LK90] J. Lee and J. M. Kosterlitz, *New Numerical Method to Study Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **65** (1990), 137.
- [LS81] D. P. Landau and R. H. Swendsen, *Tricritical Universality in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **46** (1981), 1437.
- [LS84] I. D. Lawrie and S. Sarbach, *Theory of Tricritical Points*, Phase Transitions and Critical Phenomena (J. L. Lebowitz C. Domb, ed.), vol. 8, Academic London, 1984.
- [LS86] D. P. Landau and R. H. Swendsen, *Monte Carlo Renormalization-Group Study of Tricritical Behavior in Two Dimensions*, Phys. Rev. B **33** (1986), 7700.

- [LS89] X. Li and A. D. Sokal, *Rigorous Lower Bound on the Dynamic critical Exponents of the Swendsen-Wang Algorithms*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 827.
- [Ma76] S. Ma, *Renormalization Group by Monte Carlo Methods*, Phys. Rev. Lett. **37** (1976), 461.
- [MKB73] H. Muller-Krumbhaar and K. Binder, *Dynamic Properties of the Monte Carlo Method in Statistical Mechanics*, J. Stat. Phys. **8** (1973), 1.
- [MP92] E. Marinari and G. Parisi, *Simulated Tempering: a New Monte Carlo Scheme*, Europhys. Lett. **19** (1992), 451.
- [NBR79] B. Neinhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel, and M. Schick, *First and Second Order Phase Transitions in Potts Models: renormalization-Group Solution*, Phys. Rev. Lett. **43** (1979), 737.
- [Nie88] F. Niedermayer, *General Cluster Updating Method for Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 2026.
- [Rie72] E. K. Riedel, *Scaling Approach to Tricritical Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **28** (1972), 675.
- [RT90] T. S. Ray and P. Tamayo, *Properties of Metastable Ising Models Evolving Under the Swendsen-Wang Dynamics*, J. Stat. Phys. **60** (1990), 851.
- [RW90] T. S. Ray and J.-S. Wang, *Metastability and Nucleation in Ising Models with Swendsen-Wang Dynamics*, Physica A **167** (1990), 580.
- [SS96] J. Salas and A. Sokal, *Dynamic Critical Behavior of a Swendsen-Wang-Type Algorithm for the Ashkin-Teller Model*, J. Stat. Phys. **85** (1996), 297.

- [SW87] R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 86.
- [Swe79] R. H. Swendsen, *Monte Carlo Renormalization Group*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979), 859.
- [TK85] M. Tanaka and T. Kawabe, *Spin-One Ising Model Including Biquadratic Interaction with Positive Coupling Constant*, J. Phys. Soc. Jpn. **54** (1985), 2194.
- [Wan89] J.-S. Wang, *Clusters in the Three-Dimensional Ising Model with a Magnetic Field*, Physica A **161** (1989), 249.
- [WD93] Shai Wiseman and Eytan Domany, *Cluster Method for the Ashkin-Teller Model*, Phys. Rev. E **48** (1993), 4080.
- [WN96] N. B. Wilding and P. Nielaba, *Tricritical Universality in a Two-Dimensional Spin Fluid*, Phys. Rev. E **53** (1996), 926.
- [Wol89] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 361.