UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

MÉTODOS ESTOCÁSTICOS APLICADOS À TRANSIÇÃO DE FASE

José R. Novaes Chiappin

Tese apresentada ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Doutor em Ciências.

Orientador Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Banca Examinadora

Prof. Dr. Mário José de Oliveira (IFUSP)
Prof. Dr. Jürgen Fritz Stilck (UFF)
Prof. Dr. Paulo Murilo C. de Oliveria (UFF)
Prof. Dr. Sílvio Roberto de Azevedo Salinas (IFUSP)
Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)

São Paulo
2005

*Esta tese é dedicada à memória de meus pais e aos meus irmãos
Antonio Itamar e Glauco Cesar e a minha irmã Maria Aparecida
testemunhas de nosso esforço.*

Agradecimentos

- ao meu orientador são profundos pois muito do que se encontra nesta tese aprendi com ele, além de ser o responsável pelos meus primeiros trabalhos publicados em física.
- aos membros do grupo de Mecânica Estatística, parte do qual foi construído pelo prof. Salinas, são especiais por uma influência da qual nunca pude e nunca quis me livrar e da qual a busca por essa tese foi uma necessidade e o resultado.
- ao Ozório são muitos não só pela amizade que construímos ao partilhar-mos a mesma sala mas também por sua sistemática e incansável ajuda.
- ao Instituto de Física, em particular ao Departamento de Física Geral, são enormes por proporcionar minha formação básica e uma infra-estrutura de funcionamento de 24 horas que tornou essa tese possível pois boa parte dela foi feita nos sábados, domingos e durante a noite.
- ao meu Departamento e colegas pela convivência.
- à Marcia por proporcionar um ambiente de trabalho muito agradável com sua disposição e seu cuidado com a organização.
- ao prof. Lira e sua equipe, ao Sergio e Valdir por terem construído uma rede de computadores muito eficiente da qual fiz uso intensivo e muito me beneficei.
- ao Sr. João e ao Sílvia por terem proporcionado no turno da noite, durante todo esse tempo, a certeza de que teríamos sempre café quente e a disposição para pequenas e descontraídas conversas.
- à Dirce, Ivone e Silvana pelo apoio administrativo e ao Sr. Wilson e Dona Suely pela atenção e pelo café.
- ao pessoal da biblioteca e da secretária da pós-graduação que foram sempre muito atenciosos e prestativos além de pacientes.

RESUMO.

A presente pesquisa se refere à aplicação dos métodos estocásticos para estudar fenômenos críticos em modelos de sistemas classificados como desordenados, que apresentam transição de fase do tipo ordem-desordem. Essa pesquisa é definida tanto no quadro teórico da Mecânica Estatística dos fenômenos críticos e transição de fase de equilíbrio e fora de equilíbrio, com os recursos associados à análise de escala de tamanho finito quanto no quadro dos recursos aos processos estocásticos markovianos, descritos pela equação-mestra e associados a técnicas essencialmente numéricas como o método estocástico computacional de Monte Carlo.

Na primeira etapa desta pesquisa, os modelos estudados são da classe denominada de votante majoritário. Eles são indexados pelo número z de vizinhos mais próximos, com spin central, têm dois estados e são construídos em redes quadradas. A evolução dinâmica é dada pela regra da maioria junto com regra de desempate. Eles não satisfazem a propriedade do princípio do balanceamento detalhado, portanto, são classificados como descrevendo fenômenos fora de equilíbrio. Contudo, eles satisfazem a propriedade de simetria de inversão de sinal, o que os coloca teoricamente na classe de universalidade do modelo de Ising. Desta forma, a evolução dinâmica desses modelos é estudada com os recursos da equação-mestra ou equação de evolução. No entanto, essa abordagem teórica é feita apenas na aproximação de campo médio, a qual fornece, na solução estacionária, os valores clássicos para os parâmetros relevantes. Em contrapartida, os valores numéricos exatas para os valores do ponto crítico e dos expoentes críticos, que são não-clássicos, é dada por meio do recurso ao método de simulação computacional e à análise de escala de tamanho finito. Esses valores confirmam o resultado teórico quanto à classe de universalidade para cada modelo específico. Na sequência, estudam-se as propriedades dos modelos resultantes da combinação convexa dos modelos do votante majoritário. Os resultados são semelhantes aos anteriores. Um resultado extra permitido por essa combinação convexa é a construção de uma relação contínua entre o valor crítico do indutor da transição de fase e o número de vizinhos. Neste contexto foi apresentada uma solução para o problema do modelo mais simples desta classe de modelos. Com o modelo mais simples ilustram-se as condições universais de transição de fase, em particular o papel da dimensão do sistema.

Na segunda etapa da pesquisa, constrói-se, então, outra classe de modelos do votante

que, por analogia com o modelo de Ising, tem como estado fundamental a fase antiferromagnética: a classe dos modelos do votante minoritário. Essa classe de modelos possui as mesmas propriedades da classe de modelos do votante majoritário e por isso obtêm-se os mesmos resultados. A analogia com o modelo de Ising é levada um pouco mais longe com a construção de um análogo ao modelo de Ising $\pm J$: a construção da combinação convexa do votante majoritário com o minoritário. Para esse novo modelo constrói-se tanto o diagrama com as três fases, ferromagnética, paramagnética e antiferromagnética quando as concentrações críticas que as distinguem. Não se obtém uma possível fase de vidro de spin. Uma vez que os modelos do votante são originalmente tidos como sistemas desordenados, comparam-se, para um mesmo modelo, resultados obtidos pela aplicação de dois diferentes métodos de tratar os modelos de sistemas desordenados: o método temperado - "quenched" - e o método recozido - "annealed".

Na terceira etapa desta pesquisa e na mesma linha dos modelos estocásticos irreversíveis tratados anteriormente, estuda-se ainda outro modelo, classificado como jogo espacial, com uma dinâmica descrevendo a evolução de N indivíduos interagentes localizados nos sítios de uma rede quadrada. Simulações mostram que além de dois estados absorventes há também a presença de um estado ativo definido por uma densidade finita de cooperadores e não cooperadores e que esse modelo se encontra na classe de universalidade do modelo da percolação direcionada. Nesta mesma etapa, mas, agora, no contexto da Mecânica Estatística de Equilíbrio, aborda-se o modelo de Ising quântico unidimensional com campo transversal por meio da simulação de Monte Carlo. Com o uso do método estocástico e por meio da curva do colapso calculam-se os valores do ponto crítico e dos expoentes críticos desse modelo.

Abstract

This research refers to the application of the stochastic methods to the study of the critical phenomena in models of systems classified as disordered that undergo phase transition of the order-disorder kind. This research is defined as in the theoretical framework of the Statistical Mechanics of the equilibrium and non-equilibrium of the critical phenomena and phase transition, with the resources associated to the analysis of finite-size scale, as in the frame of the resources of markovian stochastic process described by the master equation associated with essentially numerical techniques such as stochastic computational method of Monte Carlo. In the first stage of this research, the studied models belong to the class of the majority voter. They are described by a lattice with spins in each site with two states. The dynamic of these models is described by the majority rule together with a rule for solving problems of indecision. These models do not obey the principle of microscopic reversibility therefore they are classified as describing phenomena of non-equilibrium. However, they satisfy the property of “up- down” symmetry which make them theoretically belong to the universality class of the Ising model. The mean field approach to the master equation is done and the exact value is pursued by the use of the method of the computational simulation with the use of the analysis of finite-size scale. The results obtained for the critical exponents support the hypothesis of universality class of these models. There are constructions of the convex combination of these models. A question is raised about the simplest model and a possible solution is presented. There is a search for another kind of majority voter, but with an antiferromagnetic ground state, which leads to the minority voter. It is also to be classified in the same universality class. A natural unfold of this research is making the convex combination of the minority and majority voter models by analogy with the Ising model $\pm J$ and ask for the phase diagram relating the critical value and the density. It is close to that of the Ising model $\pm J$. Some results are also obtained by comparing the quenched and annealed approach to a same majority voter model. Finally, there are two more applications of these methods for obtaining critical point and critical exponents. The first refers to a model with absorbing state which is classified in the universality class of direct percolation. The second refers to a quantum model with transverse field.

Lista de Figuras

1.1	Gráfico do parâmetro de ordem–magnetização–como característica da transição contínua para o tamanho L crescente.	21
1.2	Gráfico da suscetibilidade como característica da transição contínua.	22
2.1	As coordenadas das formas geométricas de ligações.	33
2.2	As quatro possíveis formas geométricas de ligação.	35
2.3	As seis possíveis formas geométricas de ligações.	39
2.4	Os dois modelos básicos (1100) e (0011)	40
2.5	Os dois modelos básicos (1100) e (0011)	44
2.6	M como função de $1/L$ para cada q	49
2.7	O método do cumulante $\rightarrow q_c = 0.0514$ para $U^* = 0.61$	50
2.8	O método da magnetização, M , <i>versus</i> q para diversos L e a continuidade como característica.	51
2.9	O método da suscetibilidade, χ_L , <i>versus</i> q e a divergência como característica.	51
2.10	Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.122 \pm 0.003$	52
2.11	Método de interpolação $\rightarrow q_c = 0.0514$	53
2.12	Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.742$	54
2.13	Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.737$ com os dados para $\chi_{\max}(L)$	55
2.14	A hipótese de escala para $\tilde{M}$ e $\tilde{\epsilon}$	56
2.15	A hipótese de escala para $\tilde{\chi}_L(q)$ <i>versus</i> $\tilde{\epsilon}$	56
2.16	A hipótese de escala para $\tilde{U}_L = U_L$ <i>versus</i> $\tilde{\epsilon}$	57
2.17	Gráfico de q_c <i>versus</i> densidade λ_{1100}	58
2.18	As quatro possíveis formas geométricas de ligações.	60
2.19	A forma geométrica de ligação é (1001) com $q_c = 0.0671$	64
2.20	O método da magnetização, M_L , <i>versus</i> q	65
2.21	Suscetibilidade, χ_L , <i>versus</i> q com a divergência característica.	66
2.22	O método de regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1264 \pm 0.009$	66
2.23	Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7036 \pm 0.0730$	67
2.24	O método de regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7343 \pm 0.0164$	67

2.25	A hipótese de escala para $\tilde{M}$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	68
2.26	A hipótese de escala para $\tilde{\chi}_L$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	69
2.27	A hipótese de escala para $\tilde{U}_L$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	69
2.28	As duas formas geométricas e simétricas de ligações (1010) e (0101).	71
2.29	As duas formas geométricas com simetria no eixo x, de ligações (1010) e (1001).	71
2.30	Gráfico da relação q_c <i>versus</i> λ_{1001}	72
2.31	Gráfico para a relação entre q_c <i>versus</i> λ_{1010}	73
2.32	Gráfico da superposição da relação q_c <i>versus</i> λ_{1001} para os dois conjuntos.	74
2.33	As seis possíveis formas geométricas de ligações.	75
2.34	As ligações (0011) e (1010).	76
2.35	q_c <i>versus</i> λ_{1010}	76
2.36	Superposição das relações entre q_c e as densidades λ 's.	77
3.1	As quatro possíveis formas geométricas de ligações	81
3.2	O método do cumulante e o valor crítico $q_c = 0.0754$	84
3.3	Gráfico da magnetização M_L <i>versus</i> q	85
3.4	Gráfico da suscetibilidade χ_L <i>versus</i> q	85
3.5	Gráfico de $\ln M$ <i>versus</i> $\ln L$ e regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1235 \pm 0.0058$	86
3.6	Gráfico de $\ln \chi$ <i>versus</i> $\ln L$ e regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7430 \pm 0.0161$	87
3.7	A hipótese de escala para $\tilde{M}(q)$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	87
3.8	A hipótese de escala para $\tilde{\chi}_L(q)$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	88
3.9	A hipótese de escala para U <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	88
3.10	Conjunto (1011) e (0111).	89
3.11	Conjunto (1101) e (0111).	90
3.12	Superposição dos gráficos q_c <i>versus</i> λ_{0111}	91
3.13	Método do cumulante $\rightarrow q_c = 0.0800$	92
3.14	O conjunto (1111), um spin central e quatro vizinhos.	92
3.15	Gráfico de $U(L)$ <i>versus</i> q	97
3.16	Gráfico da magnetização M_L <i>versus</i> q	98
3.17	Gráfico da suscetibilidade χ_L <i>versus</i> q	98
3.18	Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.123 \pm 0.0025$	99
3.19	Gráfico do máximo da suscetibilidade, $\chi_{\max}$, <i>versus</i> L	99
3.20	A hipótese de escala para a relação $\tilde{M}$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	100
3.21	A hipótese de escala para a relação $\tilde{\chi}_L$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	101
3.22	A hipótese de escala para a relação $\tilde{U}$ <i>versus</i> $\tilde{\varepsilon}$	101
3.23	As quatro formas geométricas possíveis com cinco vizinhos.	102
3.24	Relação entre q_c e z para modelos com spin central.	103

3.25	Relação entre magnetização, M , <i>versus</i> q para diversos z	104
3.26	Relação entre q_c e a densidade ρ_{1v}	107
3.27	As ligações geométricas (1100), (0011) e (0100).	108
3.28	Gráfico teórico da relação q_c <i>versus</i> ρ_2	112
3.29	Relação entre q_c e ρ_{2v}	115
3.30	Relação entre q_c e ρ_{2v}	115
3.31	Relação entre q_c <i>versus</i> λ_{1100}	116
3.32	Da relação entre q_c e λ_{1100} tem-se que $\lambda_{1100} = 0.99 \rightarrow q_c = 0.0075$	117
3.33	Da relação q_c e ρ_{2v} tem-se que $\rho_{2v} = 0.01 \rightarrow q_c = 0.000075$	119
4.1	Os dois modelos básicos (1100) e (0011).	126
4.2	Cumulante de quarta ordem $U_L(q)$: intersecção no valor crítico $q_c = 0.0514$	133
4.3	Magnetização, $M_L(q)$, <i>versus</i> q para valores de L	133
4.4	Suscetibilidade, $\chi_L(q)$, <i>versus</i> q para valores de L	134
4.5	Regressão linear: expoente crítico $\beta/\nu = 0.1210$	135
4.6	Regressão linear: expoente crítico $\gamma/\nu = 1.7632$	135
4.7	Regressão linear: expoente crítico $\gamma/\nu = 1.7753$	136
4.8	Função universal $L^{\beta/\nu} M(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	137
4.9	Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	137
4.10	Função universal $U(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	138
4.11	O conjunto (1111), um spin central e quatro vizinhos.	139
4.12	O método do cumulante $U_L(q)$: a intersecção no valor crítico $q_c = 0.0848$	143
4.13	A magnetização $M_L(q)$ <i>versus</i> q para alguns valores de L	144
4.14	A suscetibilidade χ_L <i>versus</i> q e tendência à divergência em $q_c = 0.0848$	144
4.15	Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1232$	145
4.16	Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.705$	146
4.17	Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.741$	146
4.18	Função universal $L^{\beta/\nu} M(q)$ <i>versus</i> $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	147
4.19	Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$ <i>versus</i> $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	148
4.20	Função universal $U(q)$ <i>versus</i> $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$	148
5.1	Estes são exemplos de plaquetas (I) não frustradas e de (II) frustradas.	151
5.2	O gráfico q <i>versus</i> λ_{vmin}	156
5.3	O gráfico q <i>versus</i> λ_{vmin}	157
5.4	O gráfico q <i>versus</i> λ_{vmin}	158
5.5	O método do cumulante obtemos $q_c = 0.0380$ para $\lambda_{vmaj} = 0.95$	159
5.6	A relação da magnetização, M_L , com q	160
5.7	A relação da suscetibilidade, χ_L com q	160
5.8	O gráfico log-log da magnetização $M_L(q_c)$, <i>versus</i> L	161

5.9	Gráfico log-log da suscetibilidade $\chi_{\max}$ versus L .	162
5.10	Gráfico log-log da suscetibilidade, $\chi_L(q_c)$, versus L .	162
5.11	Função Universal $\tilde{M}(q) = L^{\beta/\nu} M$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	163
5.12	Função universal $\tilde{\chi}(q) = L^{-\gamma/\nu} \chi$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	164
5.13	Função universal $U(q)$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	164
5.14	Domínios (F) e (AF) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $p \geq 0.5$.	166
5.15	Domínios (AF) e (F) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $0.00 \leq p \leq 0.5$.	166
5.16	Domínios (AF) e (F) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $0.00 \leq p \leq 1.00$.	167
5.17	O método do cumulante, U_L versus q , $\rightarrow \lambda_{vmin} = 0.0800 \pm 0.008$.	168
5.18	O gráfico da magnetização ($M(q=0)$) versus λ_{vmin} .	169
5.19	O gráfico da suscetibilidade ($\chi(q=0)$) versus λ_{vmin} .	169
5.20	O gráfico $\ln M(q=0, \lambda_{vmin} = \lambda_c)$ versus $\ln L$. Dois valores simulados e quatro valores interpolados $\rightarrow \lambda_c = 0.0806$.	170
5.21	O gráfico $\ln M(q=0, \lambda = \lambda_c)$ versus $\ln L$ da regressão linear.	171
5.22	O gráfico $\ln \chi(q=0, \lambda = \lambda_c)$ versus $\ln L$ da regressão linear.	171
5.23	Função universal $L^{\beta/\nu} M(q=0, \lambda_{vmin})$ versus $L^{1/\nu}(\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.	172
5.24	Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q=0, \lambda_{vmin})$ versus $L^{1/\nu}(\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.	173
5.25	Função universal U versus $L^{1/\nu}(\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.	174
5.26	O gráfico do cumulante de quarta ordem versus q .	175
5.27	O gráfico da magnetização M_L versus q .	176
5.28	O gráfico da suscetibilidade χ_L versus q .	176
5.29	O gráfico da $\ln \chi_{\max}$ versus $\ln L$.	177
5.30	O gráfico do $\ln \chi_q$ versus $\ln L$.	178
5.31	O gráfico do $\ln M_L$ versus $\ln L$.	178
5.32	O gráfico do colapso $L^{\beta/\nu} M_L$ versus $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	179
5.33	O gráfico do colapso $L^{-\gamma/\nu} \chi$ versus $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	180
5.34	O gráfico do colapso U versus $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	180
5.35	Gráfico U_L versus q com $U^* = 0.61$.	182
5.36	O gráfico da magnetização, M_L versus q .	183
5.37	O gráfico da suscetibilidade, χ_L versus q .	183
5.38	O gráfico de $\ln M_L$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente β/ν .	184
5.39	O gráfico da $\ln \chi_q$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente γ/ν .	185
5.40	O gráfico da $\ln \chi_{\max}$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente γ/ν .	185
5.41	O gráfico do colapso $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	186
5.42	O gráfico do colapso $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	187
5.43	O gráfico do colapso $\tilde{U} = U$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.	187
5.44	O valor de $q_c = 0.066$ para $\lambda_{1001} = 0.98$ pelo método “annealed”.	188
5.45	O mesmo ponto crítico anterior em destaque.	188

5.46	O gráfico do valor crítico $q_c = 0.058$ pelo método “quenched”.	189
5.47	A superposição dos dois gráficos para $\lambda_{1001} = 0.98$.	189
5.48	O gráfico da abordagem “quenched” de q_c versus λ_{1001} .	190
5.49	O gráfico da superposição dos dois gráficos: “quenched” e “annealed”.	191
6.1	Diagrama de fase no plano (r, c) obtido da simulação numérica em uma rede quadrada. As três fases são o estado de plena cooperação (C) para o qual $\rho = 1$, estado ativo (A) para o qual $0 < \rho < 1$, e estado de não-cooperação plena (D) para o qual $\rho = 0$. As linhas de transições C-A e A-D são linhas críticas embora a linha C-D é uma linha de transição descontínua. As três linhas encontra-se no ponto $r = c = 1$.	199
6.2	Densidade do cooperador ρ versus o parâmetro r para vários valores de c , obtidos das simulações numéricas. Da esquerda para a direita os valores de c são 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, e 0.9.	200
6.3	Gráfico de $\ln \rho$ versus $\ln \Delta r$ em que $\Delta = r_c - r$ para o caso $c = 0$. As três linhas correspondem, da esquerda para a direita, para valores tentativas de $r_c = 0.798, 0.800$, e 0.802 . O melhor ajuste linear dá $r_c = 0.800 \pm 0.001$ e o expoente crítico $\beta = 0.58 \pm 0.01$.	201
7.1	Cumulante de quarta ordem $U_L(\Gamma)$: intersecção no valor crítico $\Gamma_c = 1.000$ para o valor de $U_L(\Gamma_c) = 0.55$.	209
7.2	Magnetização M como função do parâmetro Γ para vários valores L da cadeia.	210
7.3	Suscetibilidade M como função do parâmetro Γ para vários valores L da cadeia.	211
7.4	Função universal $\tilde{M} = L^{1/8} M$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.	212
7.5	Função universal $\tilde{\chi} = L^{-3/4} \chi$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.	213
7.6	Função universal $\tilde{U} = U$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.	214

Sumário

1	INTRODUÇÃO.	1
1.1	Métodos e técnicas para estudar a natureza e obter o valor do ponto crítico e expoentes críticos.	20
1.1.1	Métodos para identificar a natureza da transição.	20
1.1.2	O método do cumulante de quarta ordem.	22
1.1.3	O método da magnetização: valor, natureza e expoente crítico. . . .	23
1.1.4	O método da suscetibilidade: valor, natureza e expoentes críticos. .	24
1.1.5	A função de escala e a curva colapso.	25
1.1.6	Roteiro da tese.	26
2	O MODELO DO VOTANTE MAJORITÁRIO - VMAJ.	29
2.1	Introdução: os objetivos e problemas.	29
2.2	O modelo do Votante Majoritário: descrição geral e especificação dos objetivos.	30
2.3	O modelo VMAJ1.	34
2.3.1	A descrição do modelo.	34
2.3.2	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	36
2.3.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	37
2.4	O modelo VMAJ2 e seus submodelos.	38
2.4.1	Descrição do modelo.	38
2.4.2	O modelo convexo VMAJ2.1 sem spin central: descrição do modelo. .	39
2.4.3	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	41
2.4.4	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados. .	43
2.4.5	O modelo convexo VMAJ2.1 com spin central: descrição do modelo. .	43
2.4.6	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	45
2.4.7	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados. .	48
2.4.8	O modelo convexo VMAJ2.2 sem spin central: descrição do modelo. .	59
2.4.9	A abordagem teórica: aproximação de campo médio.	60
2.4.10	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados. .	60

2.4.11	O modelo convexo VMAJ2.2 com spin central: descrição do modelo.	60
2.4.12	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	62
2.4.13	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	62
2.4.14	O modelo VMAJ2.2 puro: descrição do modelo.	63
2.4.15	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	63
2.4.16	A abordagem da simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	63
2.4.17	Os modelos VMAJ2.2.1 e VMAJ2.2 com spin central: descrição do modelo.	70
2.4.18	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	72
2.4.19	A abordagem computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	72
2.4.20	O modelo convexo VMAJ2.3: descrição do modelo.	74
2.4.21	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	75
2.4.22	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	75
3	O MODELO DO VOTANTE MAJORITÁRIO E O MODELO MAIS SIMPLES.	79
3.1	Introdução.	79
3.2	O modelo convexo VMAJ3: descrição do modelo.	80
3.2.1	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio	82
3.2.2	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	83
3.3	Os modelos VMAJ3.1 e VMAJ3.2: descrição dos modelos.	89
3.3.1	A abordagem teórica: aproximação de campo médio.	90
3.3.2	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados	90
3.4	O modelo VMAJ4 com spin central.	90
3.4.1	Descrição do modelo.	90
3.4.2	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	93
3.4.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	97
3.5	Os outros modelos homogêneos VMAJx.	102
3.6	Os modelos heterogêneos: a relação entre q_c e ρ_z	104
3.7	O problema do modelo mais simples.	108
3.7.1	O modelo convexo VMAJ2.1-VMAJ1.	108
3.7.2	A abordagem teórica: o enfoque de campo médio	109
3.7.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.	113
3.7.4	A relação entre q_c e λ	115
3.7.5	O modelo mais simples.	116
3.7.6	Propriedades do modelo mais simples.	119

3.8	Conclusões.	120
4	O MODELO DO VOTANTE MINORITÁRIO-VMIN.	123
4.1	Introdução.	123
4.2	O modelo do votante minoritário (VMIN) - A fase antiferromagnética.	124
4.3	O modelo minoritário VMIN2.1 sem spin central.	125
4.3.1	Descrição do modelo.	125
4.3.2	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	127
4.3.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.128	
4.4	O modelo minoritário VMIN2.1 com spin central.	129
4.4.1	Descrição do modelo.	129
4.4.2	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	130
4.4.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.132	
4.5	O modelo minoritário VMIN4 com spin central.	138
4.5.1	Descrição do modelo.	138
4.5.2	A abordagem teórica: aproximação de campo médio.	140
4.5.3	A simulação computacional: resultados numéricos e a análise dos dados.	143
5	O MODELO CONVEXO DO VOTANTE MAJORITÁRIO-MINORITÁRIO: VMAJ4VMIN4.	149
5.1	Introdução.	149
5.2	O modelo VMAJ4VMIN4.	150
5.2.1	Introdução.	150
5.2.2	A descrição do modelo VMAJ4VMIN4.	151
5.2.3	O modelo VMAJ4VMIN4 com spin central.	152
5.2.4	A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.	153
5.2.5	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.158	
5.2.6	O modelo VMAJ4VMIN4 e o valor crítico λ_c	167
5.3	Os tipos de desordem: “annealed” e “quenched”.	174
5.3.1	O modelo VMAJ98AN: a abordagem “annealed”.	174
5.3.2	O modelo VMAJ98Q: a abordagem “quenched”.	181
5.3.3	A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.181	
5.3.4	O modelo VMAJANQ: q_c versus λ_{1001}	189
5.4	Conclusões.	191

6	O PROBLEMA DA EMERGÊNCIA DA COOPERAÇÃO ENTRE INDIVÍDUOS INTERAGENTES.	193
6.1	Introdução.	193
6.2	O modelo.	195
6.3	Simulação numérica.	198
6.4	Conclusões.	202
7	MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO: MODELO QUÂNTICO.	203
7.1	Introdução.	203
7.2	Fórmulas básicas.	205
7.3	O método de Monte Carlo.	206
7.4	Algoritmo.	207
7.5	Resultados numéricos.	208
7.6	Conclusões.	214

Capítulo 1

INTRODUÇÃO.

A presente tese tem por objetivo propor e resolver problemas relacionados com fenômenos críticos e transição de fase. Esses problemas referem-se às propriedades de modelos de sistemas classificados como desordenados, com transição de fase do tipo ordem-desordem. A natureza geral desses problemas de fenômenos críticos e transição de fase encontra-se tanto no contexto da Termodinâmica quanto no da Mecânica Estatística de Equilíbrio. No entanto, muitos destes recursos podem ser aplicados para transições de fase em modelos de não-equilíbrio, como é o caso da maioria dos modelos dessa tese. O objetivo da Termodinâmica é construir quantidades físicas apropriadas, tais como pressão, temperatura, variáveis de estados, descrevendo as propriedades macroscópicas da matéria, por meio de macroestados e estabelecer relações entre essas quantidades, ou seja, formular equações de estados e as leis da Termodinâmica. Contudo, essas quantidades macroscópicas de estados são resultantes dos valores médios de propriedades microscópicas, tais como coordenadas e momentos das partículas que constituem a matéria. O objetivo da Mecânica Estatística de Equilíbrio é o de explicar ou derivar as propriedades macroscópicas da matéria a partir das leis governando o comportamento das partículas individuais. As propriedades microscópicas são expressas por meio de macroestados em termos de variáveis termodinâmicas denominadas de energia, temperatura, pressão, potencial químico, entropia, potencial termodinâmico, Uma das maneiras de tratar essas propriedades macroscópicas é explicá-las diretamente por meio da Termodinâmica. Ela pode ser construída em termos axiomáticos a partir dos potenciais termodinâmicos com os princípios de maximização ou de minimização submetidos às restrições dadas pelas leis da conservação da energia, da segunda lei e da terceira lei da Termodinâmica. No contexto da Mecânica Estatística de Equilíbrio a descrição microscópica dos estados das partículas, representada pelos microestados, é dada pela aplicação das leis da Mecânica Clássica ou da Mecânica Quântica ao estudo das interações entre essas partículas. Essas são descritas por modelos. A explicação do comportamento microscópico das partículas é, então, construída a partir da formulação da “teoria dos ensembles”. Por meio dessa teoria, as quan-

tidades macroscópicas, como temperatura, pressão, energia, volume que caracterizam os estados macroscópicos da matéria, são definidas como valores médios de quantidades microscópicas, coordenadas e momentos, (q_ν, p_ν) determinando os microestados do sistema de partículas constituindo a matéria. O espaço apropriado para descrever, de maneira microscópica, esse sistema de partículas é o espaço de fase. Cada ponto neste espaço corresponde a um estado microscópico que é um microestado do sistema. A evolução temporal do sistema corresponde a uma curva $(q_\nu(t), p_\nu(t))$ nesse espaço de fase. Essa curva é a trajetória no espaço de fase. Tal trajetória é definida pelas leis da Mecânica Clássica expressas por meio das equações canônicas do movimento:

$$\dot{q}_\nu = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\nu} \quad \dot{p}_\nu = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu}, \quad (1.1)$$

em que a hamiltoniana $\mathcal{H}(q_\nu(t), p_\nu(t))$ corresponde, no caso conservativo, à energia total do sistema. Do mesmo modo outros observáveis $g(q_\nu(t), p_\nu(t))$ podem ser associados aos pontos descrevendo a trajetória determinada pelas equações canônicas. Em um sistema fechado, que pode ser definido pelas variáveis de macroestados V, N , a hamiltoniana não depende do tempo e é uma quantidade, E , que se conserva. Com esse recurso e subdividindo-se o espaço de fase em células de volume elementar $d^{3N}q d^{3N}p$, pode-se então associar a um dado macroestados (E, V, N) um grande número $\Omega(E, V, N)$ de diferentes microestados. Neste contexto pode-se definir o conceito de entropia, S , e a relação fundamental entre os estados macroscópicos termodinâmicos descritos pela entropia e a física microscópica descrita pelo número de microestados Ω . Essa relação é

$$S = k \ln \Omega(E, V, N). \quad (1.2)$$

Em que k é a constante de Boltzmann. Contudo, o elemento operacional desta relação depende do cálculo do número de microestados. Nesse contexto se insere a “teoria dos ensembles”. Nesta se desenvolvem métodos efetivos para realizar esse cálculo direta ou indiretamente. Por meio deste método todas as quantidades termodinâmicas, $E, T, P, \dots$, aparecem então como uma média de “ensemble” de uma quantidade microscópica, $g(q_\nu, p_\nu)$, definida em termos dos pontos do espaço de fase. No domínio do espaço de fase de todos estados microscópicos possíveis, o primeiro aspecto a observar é que o caso de um sistema fechado impõe que todos os seus microestados consistentes encontrem-se sobre uma superfície de energia E que define o sistema fechado. Daqui segue-se a pressuposição fundamental da Mecânica Estatística sobre a equiprobabilidade dos microestados em uma superfície de energia para um sistema fechado. Desta forma, pode-se agora falar de um espaço de probabilidade para o espaço dos microestados. Trata-se do espaço dos estados com probabilidades associadas a eles ou com densidades de probabilidades $\rho(q_\nu, p_\nu)$ por estarem envolvidos volumes em lugar de pontos no espaço. Qualquer observável ou quan-

tidade $g(q_\nu, p_\nu)$ do sistema é considerada, no espaço de probabilidade, como valor médio $\langle g \rangle$ de um macroestado tal que cada de seus microestados contribui com sua ponderação dada pela densidade. De maneira formal

$$\langle g \rangle = \int d^{3N} q d^{3N} p [g(q, p) \rho(q, p)]. \quad (1.3)$$

A média do observável acima é chamada de “média de ensemble” com a densidade sendo a ponderação do “ensemble”. Por sua vez este “ensemble” de microestados com essas características é denominado de “ensemble microcanônico”. Deve haver, portanto, uma relação entre a média do “ensemble” dos observáveis, $\langle g \rangle$, e o valor dos mesmos observáveis, dependente do tempo, calculado agora sobre a trajetória $(q_\nu(t), p_\nu(t))$, como solução das equações de Hamilton. Segue-se, portanto, que estas últimas quantidades devem ser calculadas como médias temporais

$$\bar{g} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T g(q(t), p(t)) dt. \quad (1.4)$$

Boltzmann fez uma hipótese denominada hipótese ergódica segundo a qual a média temporal $\bar{g}$ é igual à média de “ensemble” $\langle g \rangle$. Isto significa que a trajetória do observável para o sistema fechado, que é determinada pelas equações de Hamilton, perpassa cada ponto da energia de superfície o mesmo número de vezes. No entanto, considera-se que há pontos ainda controversos sobre a tentativa de dar uma fundamentação estritamente mecânica à teoria dos “ensembles”. Nesta tentativa de elaborar métodos com propósito de calcular as quantidades macroscópicas termodinâmicas a partir dos microestados, vê-se que a abordagem dada pelo “ensemble microcanônico” que é construído para sistemas fechados, em que a energia, E , é constante e complementada pelas variáveis de macroestados V e N e tem a relação $S = k \ln \Omega(E, V, N)$ como a conexão fundamental entre as variáveis dos macroestados, a termodinâmica, e a física do microestado. O problema com esta representação é a dificuldade colocada pela contagem dos microestados, tornando este recurso interessante apenas para casos bastante simples. A tentativa de resolver esse problema da contagem levou à alternativa de construir outro tipo de “ensemble” onde fosse mais fácil resolver o problema da contagem. Este novo “ensemble” é construído sobre a hipótese de que a quantidade macroscópica constante não é mais a energia, E , mas a temperatura T . Isto é feito pelo recurso à pressuposição do sistema submetido a banhos térmicos proporcionados por reservatórios que mantenham a temperatura constante T . Neste caso, o sistema, definido pelas variáveis T, V, N , é tal que seus diferentes microestados indexados por i apresentam diferentes energias E_i com certas probabilidades. O problema a ser resolvido aqui consiste, então, em achar a probabilidade p_i de encontrar o sistema em um determinado microestado correspondente à energia E_i . Utilizando-se a representação do “ensemble microcanônico”, pode-se resolver esse problema com a solução

$$p_i \propto \frac{\exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}, \quad (1.5)$$

em que a soma corresponde a todos os microestados. Denomina-se $Z = \sum_i \exp(-E_i/kT)$ a função de partição canônica do sistema. Pode-se desenvolver a versão contínua para essas relações bastando para isso substituir a soma pela integral, ou seja, $\sum_i$ por $\int d^{3N}q d^{3N}p$. Obtém-se, então,

$$\rho(q_\nu, p_\nu) = \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}(q_\nu, p_\nu)]}{Z}. \quad (1.6)$$

Neste novo “ensemble”, denominado de canônico, todas as propriedades macroscópicas descritas pelas quantidades termodinâmicas podem ser obtidas a partir da hamiltoniana descrevendo os microestados do sistema. A relação com a termodinâmica é feita agora por meio do potencial termodinâmico energia livre de Helmholtz,

$$F(T, V, N) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(T, V, N). \quad (1.7)$$

Neste contexto, se $g(x)$ é uma quantidade física e x representa uma configuração microscópica possível, então o valor médio de uma função dessa quantidade $A(g(x))$ é dado por

$$\langle A(g(x)) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int dx \exp\left[-\frac{\mathcal{H}(x)}{kT}\right] A(g(x)). \quad (1.8)$$

Com isso ficam bem caracterizadas a estrutura e os componentes da Mecânica Estatística de Equilíbrio e a própria natureza estatística dessa Mecânica que é o cálculo de valores médios. Outros tipos de “ensembles” são possíveis e mais adequados para outros tipos de invariâncias, no entanto não é esse o interesse desta pesquisa, e sim o de mostrar, com o “ensemble” microcanônico e canônico, como a Mecânica Estatística constrói a conexão entre as descrições microscópicas e a descrição macroscópica dos sistemas físicos. No contexto da “teoria dos ensembles”, o “ensemble canônico” é bastante apropriado para caracterizar o principal problema da Mecânica Estatística de Equilíbrio como sendo aquele de explicar o comportamento dos fenômenos críticos e das transições de fase. O primeiro passo sobre este assunto é a definição de ponto de transição de fase no contexto deste “ensemble”. Ponto de transição de fase é definido como sendo um ponto de não-analiticidade da função de partição. Como se expressa Thompson (Thompson, 1972) sobre esse ponto:

any nonanalytic point of the canonical free energy

$$-\beta f(v, T) = \lim_{\substack{N, V \rightarrow \infty \\ v = \frac{V}{N} \text{ fixed}}} N^{-1} \ln Z(V, N, T) \dots, \quad (1.9)$$

occurring for real positive T , v , ... is called a phase transition point ¹.

¹(Thompson, 1972), pg. 80.

Por ponto não-analítico entende-se que a função não pode ser expandida em uma série de Taylor em torno desse ponto. Mas para ter transição de fase, matematicamente falando, é preciso primeiro tomar o limite termodinâmico, ou seja, $N, V \rightarrow \infty$ com a densidade $v = N/V$ fixada, portanto considerando apenas sistemas no limite termodinâmico. Para N e V finitos, a função partição é uma função completamente analítica de T .

Para os propósitos dessa tese, o modelo adequado para representar as partículas é o modelo de gás de rede. Este modelo consiste em ter em cada um dos seus N sítios uma variável estocástica com dois estados $\sigma_i = \pm 1$ e regras que definem qual o estado de cada sítio, dependendo da interação ou relação com os vizinhos mais próximos. Há 2^N estados microscópicos possíveis que constitui o espaço de probabilidade. Com a hamiltoniana $\mathcal{H}(\{\sigma\})$, função das x configurações, tem-se a descrição dos estados acessíveis do modelo entre os estados possíveis. A hamiltoniana do sistema introduz uma restrição no espaço dos estados possíveis. O modelo de Ising é o sistema mais simples que apresenta uma transição de fase e serve de paradigma para a maioria dos outros modelos e investigações na Mecânica Estatística de Equilíbrio. Esse modelo é descrito por uma rede com spins σ_i no sítio i com dois estados ± 1 . Uma configuração $\{\sigma\}$ é especificada por N variáveis de spin σ_i . Em uma configuração $\{\sigma\}$ a energia de interação ou a hamiltoniana é dada por

$$E\{\sigma\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (1.10)$$

em que o símbolo $\langle i, j \rangle$ significa vizinhos mais próximos, o símbolo J é a constante de acoplamento e h é o campo magnético externo.

Há três maneiras de abordar o problema da transição de fase neste modelo: a abordagem de campo médio, a solução exata para $h = 0$ com $d = 2$, e a abordagem dinâmica. Essas três abordagens revelam aspectos importantes dos fenômenos críticos e transição de fase. Contudo, a abordagem dinâmica traz a idéia de esta área ultrapassar os próprios contornos da Mecânica Estatística de Equilíbrio. A abordagem de campo médio do modelo de Ising revela a existência de uma temperatura crítica, T_c , e descreve o comportamento da magnetização e da suscetibilidade nas proximidades deste ponto, por meio de leis de potências com expoentes denominados de clássicos. A solução deste modelo para $h = 0$ com $d = 2$ feita por meio dos recursos da matriz de transferência a qual descreve o comportamento correto da magnetização e da suscetibilidade para qualquer temperatura, em particular, permitindo calcular os valores exatos para a temperatura crítica e descrever o comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico. Os expoentes críticos das leis de potência, contudo, são diferentes dos anteriores e foram denominados de expoentes não-clássicos. As transições de fase do equilíbrio são denominadas de transições de fase estáticas. Os valores acima são denominados de expoentes críticos estáticos. O modelo de Ising é um modelo estático, e, portanto, um modelo para descrever as propriedades de equilíbrio. A versão dinâmica do modelo de Ising, denominada de modelo de Ising cinético,

foi proposta por Glauber (Glauber, 1963), que definiu uma dinâmica efetiva para spins de Ising. A pressuposição básica do modelo de Glauber é que há uma probabilidade de transição por unidade de tempo, $w_j(\sigma_j)$ de aplicar o método do “single spin-flip”, ou seja, de substituir o estado da variável estocástica σ_j do sítio j , escolhido aleatoriamente por $-\sigma_j$, segundo a probabilidade $w_j(\sigma_j)$. Com esta propriedade se constrói a equação do movimento para a distribuição de probabilidade na forma de uma equação-mestra de ganhos e perdas (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001):

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{j=1}^N \{w_j(\sigma^j)P(\sigma^j, t) - w_j(\sigma)P(\sigma, t)\}, \quad (1.11)$$

em que a configuração σ^j é obtida da configuração σ pela troca de σ_j por $-\sigma_j$. Desta equação pode-se mostrar, por exemplo, que a equação para a evolução da média $\langle \sigma_j \rangle$ é dada por (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001)

$$\frac{d\langle \sigma_j \rangle}{dt} = -2\langle \sigma_j w_j(\sigma) \rangle. \quad (1.12)$$

As propriedades do modelo de Glauber são determinadas, uma vez que probabilidade de transição, w_j , é especificada. Contudo, a conexão entre esta última equação e o modelo de Ising vem da imposição de que a solução estacionária desta equação satisfaz o princípio do balanceamento detalhado, ou seja, que

$$w_j(\sigma^j)P_{eq}(\sigma^j) = w_j(\sigma)P_{eq}(\sigma), \quad (1.13)$$

em que P_{eq} denota a distribuição de probabilidade do “ensemble canônico” associado com a hamiltoniana de Ising acima ($h = 0$):

$$P_{eq} = \exp\{K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j\}. \quad (1.14)$$

em que $K = \beta J$. Glauber mostrou (Glauber, 1963) que, ao se pressupor que a taxa de transição $w_j(\sigma)$ satisfaz o princípio do balanceamento detalhado, tem-se para sua forma

$$w_j(\sigma) = \frac{\alpha}{2} [1 - \sigma_j \tanh(K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})]. \quad (1.15)$$

Neste contexto, pode-se evidenciar (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001) que o algoritmo, processo estocástico markoviano com a probabilidade de transição acima, para a simulação do modelo de Glauber, pode ser interpretado como um método de Monte Carlo para a simulação do modelo de Ising em equilíbrio. A única diferença é que a dinâmica de Glauber se encontra no lugar da dinâmica de Metropolis. A solução do modelo de Glauber, modelo cinético de Ising, fornece as mesmas propriedades estacionárias do modelo de Ising. Em particular, os expoentes críticos estáticos do modelo de Glauber coincidem com os do

modelo de Ising para redes de várias dimensões. O ponto importante a observar aqui é quanto ao significado da exigência que a taxa de probabilidade de transição $w_j(\sigma_j)$ ou que as regras microscópicas definindo a dinâmica do sistema, obedecem ao princípio do balanceamento detalhado. O primeiro significado é que essa exigência garante que o sistema evolua, para tempos suficientemente longos, para o equilíbrio além da estacionariedade. O segundo significado é que graças a essa exigência torna-se possível a construção de uma hamiltoniana do sistema associada às regras microscópicas. Portanto, o princípio do balanceamento detalhado é a condição para passar das regras microscópicas, no caso descrito por $w_j(\sigma_j)$, a qual define a dinâmica do sistema e faz com que este sistema evolua para tempos suficientemente longos em direção ao estado estacionário, para a construção da hamiltoniana do sistema que define a condição de equilíbrio. A condição de equilíbrio é expressa por uma distribuição de probabilidade dos estados dependente do valor da energia e da temperatura. A relação entre as regras microscópicas definindo a dinâmica do sistema e a construção da hamiltoniana definindo as condições de equilíbrio é o princípio do balanceamento detalhado. Como foi mostrado, o exemplo bem-sucedido deste empreendimento é o modelo dinâmico, dinâmica de Glauber, do modelo de Ising. Além desta tentativa de construir uma dinâmica para o modelo de Ising, que levou ao entendimento do uso de processos estocásticos markovianos para a abordagem de sistemas em equilíbrio e fora do equilíbrio outra fonte do uso dos processos estocásticos markovianos em Mecânica Estatística de equilíbrio foram as próprias dificuldades encontradas na tentativa de resolver o problema básico da Mecânica Estatística de Equilíbrio, que consiste em calcular a função de partição e as quantidades termodinâmicas como valores médios dos estados microscópicos. Essas dificuldades levaram ao uso de métodos estocásticos numéricos ou métodos de Monte Carlo que consistem em processos estocásticos markovianos, mas um pouco diferentes dos métodos de Monte Carlo usuais. Esses métodos estocásticos numéricos (de Oliveira, 1996) são usados para calcular somas do tipo

$$\langle f \rangle = \sum_s f(s)P(s), \quad (1.16)$$

em que $f(s)$ é uma função dada, correspondendo ao nosso $g(q_\nu(t), p_\nu(t))$ mencionado anteriormente e $P(s)$ é uma distribuição de probabilidade *a priori*. No contexto da Mecânica Estatística de Equilíbrio discutido anteriormente pode-se ver a relevância desse método para calcular seus valores médios das quantidades físicas. A probabilidade $P(s)$ no “ensemble” canônico é, então, dada pela distribuição de Gibbs. Esse método, com a probabilidade de Gibbs, é utilizado para gerar os estados mais prováveis entre todos os estados acessíveis do sistema. Desenvolveu-se assim o método de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis que consiste em um processo estocástico markoviano reversível com a taxa de transição definida pelo algoritmo de Metropolis que faz uso da distribuição de Gibbs.

Como diz Oliveira(de Oliveira, 1996):

The Monte Carlo method (by importance sampling) comprises the sampling of M states $s_1, s_2, s_3 \dots, s_M$, each one being generated with probability $P(s)$, and the calculation of the arithmetic mean

$$\bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(s) \quad (1.17)$$

which will be, then, an estimative for $\langle f \rangle$. The essential point of the method resides in conceiving an algorithm that generates states with a given *a priori* probability (from random numbers generated uniformly in a given interval).

Contudo, o ponto de partida para o desenvolvimento da teoria dos processos estocásticos foi a abordagem do problema do movimento Browniano. Essa teoria desenvolveu-se em torno da equação de Langevin e das cadeias de Markov e serve para estudar a evolução temporal de fenômenos que são aleatórios (de Oliveira, 1996). Pode-se inferir das análises anteriores para os processos estocásticos reversíveis, que no caso de modelos de não-equilíbrio, para os quais as regras microscópicas não podem ser associadas a uma hamiltoniana, os métodos estocásticos fazem uso dessas regras microscópicas ou probabilidades de transição para conduzir o sistema para estados estacionários com respeito aos quais não se conhece a distribuição de probabilidade das configurações. Portanto, o cálculo dos observáveis deve ser considerado, do mesmo modo que foi feito anteriormente para a Mecânica Estatística de Equilíbrio, como valores médios das grandezas físicas cujas medidas são feitas para cada das configurações do estado estacionário. A garantia de que a evolução do sistema alcançou esse estado depende de alguns critérios.

O tema desta tese consiste na aplicação desses métodos estocásticos para estudar fenômenos críticos e transições de fase tanto para modelos de equilíbrio quanto de não-equilíbrio. No entanto, essa aplicação depende da intermediação ainda de outros recursos desenvolvidos no âmbito da Mecânica Estatística de Equilíbrio mas cuja aplicação também vai para além dessas fronteiras e se ajustam bastante bem a aplicações em fenômenos fora de equilíbrio. Esses recursos, como universalidade e hipóteses de escala, contam com justificações encontradas e sustentadas nas análises de grupo de renormalização².

Tanto estudos teóricos quanto experimentais das transições de fase entre os estados estacionários de equilíbrio conduziram à formulação de dois conceitos fundamentais para a compreensão do comportamento crítico, o da hipótese de escala (Stanley, 1999), se iniciando com o trabalho de Widom (Widom, 1965), e o conceito de classe de universalidade, introduzido inicialmente por Kadanoff (Kadanoff, 1967). Com o conceito de hipótese de escala³ encontraram-se e sustentaram-se teoricamente relações universais denominadas de

²(Thompson, 1988), pg.180; (Wilson, 1979).

³(Thompson, 1988), pg.180; (Kadanoff, 1967), (Stanley, 1999); (Salinas, 1996).

leis de escala⁴ entre os expoentes críticos descrevendo o comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico, assim como encontrou-se o colapso dos dados, que consiste na construção de curvas invariantes por transformação de escala. Com o conceito de classe de universalidade, o comportamento crítico do sistema é classificado segundo um conjunto de propriedades universais que envolvem as simetrias, as quais podem ser encontradas na hamiltoniana, a dimensionalidade do sistema, definida pela dimensionalidade da interação, e a dimensionalidade do parâmetro de ordem. A relevância deste conceito está no fato de que se pode a partir dele classificar a imensa variedade dos sistemas naturais agrupando-os em um número pequeno de classes. Como diz Stanley:

Empirically, one finds that all systems in nature belong to one of a comparatively small number of such universality classes. Two specific microscopic interaction Hamiltonians⁵ appear almost sufficient to encompass the universality classes necessary for static critical phenomena⁶.

A relação entre esses conceitos de hipótese de escala, expoentes críticos e classe de universalidade fornece um critério operacional que é o critério dos expoentes críticos para discriminar as classes de universalidades dos diversos sistemas. Como afirma Stanley:

Two systems with the same values of critical-point exponents and scaling functions are said to belong to the same universality class⁷.

ou como afirma Landau, parafraseando Fisher,

Those systems which have the same set of critical exponents are said to belong the same universality class⁸

As leis de escala foram desenvolvidas, de maneira mais clara, a partir das tentativas de explicar os fenômenos críticos. Gibbs construiu a Termodinâmica no estilo e forma da Mecânica Analítica de Lagrange, por meio de potenciais termodinâmicos, os quais, entre outras propriedades, apresentam a propriedade de serem funções homogêneas de grau um.

Com a crescente investigação para explicar e compatibilizar os fenômenos de transição de fase com os fundamentos da Termodinâmica, percebeu-se que, por meio dos trabalhos de Widom (Widom, 1965), a função potencial termodinâmico por exemplo, a da energia livre de Gibbs, deveria ser escrita como

$$G(T, H) = G_r(T, H) + G_s(T, H), \quad (1.18)$$

⁴ (Stanley, 1971); (Thompson, 1988); pg.180181; (Salinas, 1996); (Callen, 1985); pg.272-273.

⁵ Essas duas classes a que Stanley se refere são a do modelo de Potts Q -estados e a do modelo n -vetores, caracterizado por spins capazes de variar sobre estados contínuos.

⁶ (Stanley, 1999), pg.S361.

⁷ (Stanley, 1999), pg. S359.

⁸ (Landau, 2000), pg.19.

em que $G_r(T, H)$ é uma função potencial termodinâmico regular, enquanto a outra, $G_s(T, H)$, é uma função termodinâmica singular. Como essa última função domina o comportamento do sistema nas vizinhanças do ponto crítico é apropriada reescrevê-la em termos de uma variável reduzida $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ que se anula no ponto crítico. Do comportamento dessa função potencial termodinâmico singular que descreve os fenômenos críticos segue uma outra lei de escala que a define, agora, como uma função homogênea generalizada (Salinas, 1996; Stanley, 1971; Wilson, 1979) das variáveis envolvidas. A hipótese de escala pode ser formulada, então, afirmando-se primeiramente que a parte singular da função potencial termodinâmico, no caso aquela da energia livre de Gibbs, $G_s(t, H)$, para todo λ positivo, obedece à equação funcional,

$$G_s(\lambda^a \epsilon, \lambda^b H) = \lambda G_s(\epsilon, H), \quad (1.19)$$

ou seja, que ela é uma função homogênea generalizada. Como o parâmetro ou escala λ é arbitrário tem-se, então, a liberdade de estipular, em princípio com objetivos simplificadores, que $\lambda^a \epsilon = 1$ (Salinas, 1996), o que faz com que $\lambda = \epsilon^{-1/a}$.

Desta forma, é possível escrever a transformação de escala que governa a função potencial de Gibbs singular como

$$\epsilon^{-1/a} G_s(\epsilon, H) = G_s(1, \frac{H}{\epsilon^{b/a}}). \quad (1.20)$$

A função potencial termodinâmico contém toda a informação termodinâmica do sistema. Por meio das primeiras e segundas derivadas podem-se obter, então, outras variáveis termodinâmicas, as equações de estado, assim como toda uma série de outras relações que, por sua vez, estão relacionadas com os parâmetros e constantes relevantes obtidas, na outra ponta da termodinâmica (não teórica), ou seja, por investigações experimentais e empíricas. Dentre essas constantes, destacam-se a magnetização, a suscetibilidade, o calor específico, a constante de expansão térmica e a compressibilidade isotérmica. Neste contexto pode-se definir o fenômeno de transição de fase a partir do comportamento dessas grandezas termodinâmicas. Por meio das relações da Termodinâmica e da hipótese de escala acima pode-se deduzir uma família de igualdades denominadas de leis de escala envolvendo em geral três expoentes.

A segunda etapa da hipótese de escala é dar origem, por meio de restrições, ao comportamento da função potencial termodinâmica próximo do ponto crítico, o que consiste em proporcionar leis de potências descrevendo o comportamento das quantidades termodinâmicas nas proximidades do ponto crítico, e, finalmente, conduzir à noção de colapso dos dados por meio da construção de curvas, funções escala, das quantidades termodinâmicas que são invariantes por transformação de escala. Por exemplo, diferenciando-se a função homogênea generalizada, 1.19, relativamente a H obtem-se

o comportamento da equação de estado da magnetização nas proximidades do ponto crítico (Stanley, 1999; Salinas, 1996).

$$M(\lambda^a \epsilon, \lambda^b H) = \lambda^{1-b} M(\epsilon, H), \quad (1.21)$$

para $\lambda = H^{-1/b}$ obtém-se

$$M_H = M(\epsilon_H, 1) = F(\epsilon_H), \quad (1.22)$$

em que

$$\epsilon_H = \frac{\epsilon}{H^{a/b}} \quad M_H = \frac{M}{H^{(1-b)/b}}, \quad (1.23)$$

cujos termos denominam-se de magnetização reescalada e temperatura reescalada ou reduzida, e cuja função $F(\epsilon_H)$ é a função escala. O gráfico construído com estas duas quantidades termodinâmicas proporciona um colapso de curvas em uma única função. Como já foi mencionado, os expoentes críticos servem como critérios operacionais para identificar a classe de universalidade dos sistemas naturais. No entanto, há outro critério que é dado pelo grupo de simetrias encontrados na hamiltoniana para sistemas em equilíbrio ou nas dinâmicas definindo a evolução do sistema. Ambos os critérios podem ser também utilizados para o caso de processos estocásticos markovianos irreversíveis. Um ponto a observar é que os expoentes críticos são independentes do sistema específico. No entanto, eles podem não ser os mesmos para diferentes sistemas naturais mas, quando os fenômenos críticos exibidos por esses sistemas naturais, apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos, então, neste caso, eles formam uma classe de universalidade. No contexto desta tese duas classes dentre as classes de universalidade são relevantes: a classe de universalidade de Ising e a classe de universalidade da percolação direcionada (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001) ou de estados absorventes. Cada uma dessas duas classes tem um critério fundamental desenvolvido teoricamente que a define. A classe de universalidade do modelo de Ising é determinada pelo critério de natureza teórica estabelecido por Grinstein (Grinstein et al., 1985): os modelos que satisfazem ou não o princípio da reversibilidade microscópica e que possuem a propriedade denominada de simetria de inversão dos spins, $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ são classificados como pertencentes à classe de universalidade do modelo de Ising. Segundo o argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985)

Continuous transitions into stationary ferromagnetic states of PCA which do not have associated Hamiltonians (i.e., are “irreversible”) but which do have the “up-down” symmetry familiar from Ising models, are argued to fall, for both statics and dynamics, in the same universality classes as kinetic Ising models⁹.

⁹(Grinstein et al., 1985) pg.2527.

A outra classe de universalidade importante é aquela denominada de percolação direcionada. Essa classe de universalidade é caracterizada pelo argumento de Janssen (Janssen, 1981) e Grassberger (Grassberger, 1982) os quais afirmam que, se um modelo de uma única componente exibe uma transição de fase contínua por um único estado absorvente, este modelo pertence à classe de universalidade da percolação direcionada (Brunstein, 1999). Essas duas classes de universalidade constituem um dos recursos pelos quais o comportamento da maioria dos modelos tratados nesta tese - modelos de rede com dinâmicas que não satisfazem o princípio do balanceamento detalhado, portanto, modelos de não-equilíbrio - pode ser explicado, pois são também compreendidos pelos dois argumentos acima mencionados. Assim um dos objetivos desta tese é o de fazer simulações computacionais por meio de métodos estocásticos de vários modelos tanto da classe dos modelos do votante majoritário e do minoritário quanto da classe de modelos com estados absorventes com o propósito de encontrar evidências sustentando os argumentos acima. O outro objetivo é de aplicar a conceituação de Yeomans de que

Classes de universalidades são freqüentemente classificadas pelo modelo mais simples pertencente a elas,¹⁰

para encontrar o que viria a ser o modelo mais simples para a classe dos modelos do votante majoritário.

Como já foi mencionado, os argumentos acima são conjecturas teóricas e, portanto, eles dependem de evidências para serem sustentados. Há vários métodos para abordar os fenômenos críticos e extrair deles os parâmetros críticos como o do valor crítico do indutor da transição de fase e dos expoentes críticos das leis de comportamento do sistema em torno do ponto crítico. Contudo, pode-se reduzi-los a dois: o método denominado de método convencional, que é aquele de expansão em séries, o método de expansão- ϵ , e de técnicas de grupo de renormalização (Barber, 1983), e o segundo método é aquele da simulação computacional, que consiste em fazer uso de uma seqüência de números aleatórios, denominado de métodos estocásticos numéricos, para simular, de maneira artificial, uma situação experimental. Com esses métodos recolhemos, por exemplo, evidências, que consistem no cálculo dos valores dos pontos críticos e dos expoentes críticos, para sustentar que os modelos tratados satisfazem os argumentos ou conjecturas que os classificam em uma ou outra classe de universalidade. Por essa razão, o interesse aqui focaliza-se sobre o método de simulação computacional, em particular sobre o método de Monte Carlo com processos estocásticos markovianos. Este método consiste de dois componentes fundamentais:

1. a geração das medidas e os cálculos das grandezas relevantes do sistema.

¹⁰Yeomans, pg.29.

2. a análise desses dados, denominada de método de escala de tamanho finito.

Contudo, a adoção desses métodos não é sem dificuldades, pois todas as medidas e os cálculos das grandezas relevantes, que são produzidos por meio de simulações computacionais, são obtidos a partir de sistemas de tamanhos finitos. No entanto, toda a análise teórica desenvolvida sobre fenômenos críticos e transições de fase foi feita no limite termodinâmico, portanto, para sistemas infinitos. Um papel fundamental é desempenhado, então, por teorias que fazem a conexão entre esses dois domínios. Este processo, por meio do qual geramos e calculamos as grandezas relevantes, é descrito por meio de uma equação de evolução

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'), \quad (1.24)$$

em que a matriz de probabilidade de transição, $W(\sigma|\sigma')$, pode ser reescrita em termos de um conjunto de regras microscópicas ou locais caracterizando a dinâmica do sistema. Essas regras definem a mudança de uma configuração para outra, segundo, por exemplo, o método “single-spin flip” que será adotado nessa tese.

Um processo estocástico markoviano pode ser reversível ou irreversível. Ambos são descritos pela mesma equação de evolução. No entanto, se a dinâmica do processo descrito pela matriz de probabilidade de transição não satisfaz o princípio do balanceamento detalhado, então trata-se de um processo estocástico irreversível ou de não-equilíbrio. Isto significa que não se pode associar uma hamiltoniana a esse processo, e, portanto, não se pode falar aqui de equilíbrio, ainda que se possa falar de estacionariedade. A dinâmica é governada por um conjunto de regras locais ou microscópicas que depois de um tempo bastante longo levam o sistema para um estado estacionário. Caso contrário, se essas regras satisfazem o princípio do balanceamento detalhado, então, pode-se construir uma hamiltoniana associada ao sistema e, por aqui, pode-se falar de estado de equilíbrio além do estado estacionário e para este fenômeno temos os recursos da Mecânica Estatística de Equilíbrio. Não se pode dizer o mesmo dos processos estocásticos markovianos cuja dinâmica não satisfaz o princípio do balanceamento detalhado, portanto, classificando-se como fenômenos de não-equilíbrio. Para este caso não há nenhuma Mecânica Estatística de não-Equilíbrio (Tomé, 1996), ainda assim pode-se contar com uma série de resultados teóricos relevantes, entre os quais aqueles referentes à classe de universalidade. Por exemplo, observou-se que as transições de fases cinéticas ou seja em modelos de não-equilíbrio apresentam comportamento universal descrito por um conjunto de expoentes críticos¹¹. Mas há mesmo muitos resultados referentes aos fenômenos críticos e transições de fase juntamente com a teoria de escala de tamanho finito, sustentados pela teoria do grupo de renormalização (Thompson, 1988). Em particular, o resultado que faz com que o modelo de Ising apresente aqueles expoentes críticos que o caracterizam é a simetria “up-down”,

¹¹(Tomé, 1996), pg.7.

que se encontra em sua hamiltoniana, atribuindo-lhe portanto uma classe de universalidade. Essa mesma simetria pode ser encontrada na dinâmica associada a esse modelo: a dinâmica de Glauber. Desta forma, também pode ocorrer, como ocorre que modelos com dinâmicas ou regras locais ainda que não satisfaçam o balanceamento detalhado, ao possuírem simetrias, por exemplo, a simetria “up-down”, como é o caso dos modelos da classe do votante majoritário, passam a ser classificados, pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), na classe de universalidade do modelo de Ising. Por meio do método de simulação computacional procura-se então calcular os expoentes críticos e encontrar a classe de universalidade compatível com o modelo em questão. Esse é um dos principais tópicos desta tese para o caso do modelo do votante majoritário, minoritário e do modelo com estados absorventes. Neste contexto, de gerar medidas e calcular o valor das grandezas físicas para esses modelos por meio do método de simulação computacional, é absolutamente relevante discutir o desenvolvimento do método de escala de tamanho finito. Pois, esse é o método que permite estabelecer a ponte entre os resultados obtidos a partir dos sistemas finitos, como aqueles proporcionados pelos métodos de simulação computacional, com os resultados teóricos que são fundamentados no limite termodinâmico, portanto para sistemas infinitos. Como diz Binder, do mesmo modo que Landau¹²,

finite-size scaling techniques have become a very powerful tool for analysing critical phenomena by computer simulations.¹³

O método de escala de tamanho finito, *Finite Size Scaling*, é um procedimento desenvolvido, inicialmente, por Fisher (Fisher, 1967). O método de escala de tamanho finito está baseado em um conjunto de hipóteses dentre as quais uma se destaca como a hipótese central. Ela descreve o comportamento do sistema em torno do ponto crítico através de uma única variável, a variável de escala, denominada de $\xi(x)$ associada ao comprimento de correlação do sistema. A hipótese central pode ser formulada como: nas vizinhanças do ponto crítico o comportamento de um sistema finito de dimensão L é determinado pela variável de escala

$$y = \frac{L}{\xi(x)}, \quad (1.25)$$

em que $\xi(x)$ é o comprimento de correlação do sistema dependente. Considera-se que esse comprimento, é função de um parâmetro, um parâmetro indutor, um controle externo, x , para se adotar um idioma neutro, que diverge para o valor crítico x_c , para sistemas infinitos. A afirmação de Barber que sustenta essa hipótese central, no caso em que $x = T$, diz que

¹² “the understanding of finite size scaling which is a basic tool in the analysis of simulational data near phase transitions” ... (Landau, 2000) pg. 19.

¹³ (Binder, 1997), pg.528.

The key assertion of the finite-size scaling hypothesis is that in the vicinity of the bulk critical temperature T_c the behaviour of a system with at least one large but finite dimension is determined by a scaled variable $y = L/\xi(T)$ where $\xi(T)$ is the bulk correlation length and is a characteristic length scale of the system ¹⁴.

Segundo Binder (Binder, 1976) é exatamente sobre esta hipótese central que é desenvolvida a teoria da escala de tamanho finito. Como ele mesmo diz,

One agrees that near a critical point there is only one important characteristic length, the correlation length ξ of order parameter fluctuations: then it is plausible that finite size effects are controlled by a comparison of lengths, the linear dimension L and this correlation length ξ ¹⁵.

Como mencionado no texto acima, a variável $\xi(x)$ é o comprimento de correlação do sistema. Esse comprimento de correlação é dependente do parâmetro indutor da transição, x , que, como se admite, para a maioria dos casos é T , ou, como nesta tese, o parâmetro p de probabilidade. Se forem considerados, como ilustração, os sistemas magnéticos, então, será possível interpretar o comprimento de correlação como fornecendo o tamanho típico (o tamanho médio de todos os aglomerados) de aglomerados de spins correlacionados. Têm-se duas situações: em primeiro lugar, esse parâmetro ou variável de escala diverge para sistemas infinitos, ou seja, $\xi(x) \rightarrow \infty$, tendo valor finito para sistemas finitos, fornecendo, como visto, o tamanho característico para aquele tamanho e temperatura do sistema, enquanto, em segundo lugar, para sistemas finitos, essa variável só pode atingir no máximo a dimensão linear, L , do sistema. Como afirma a hipótese acima, é a divergência dessa variável de escala, ξ , a responsável pelo comportamento crítico do sistema, e, portanto, pela singularidade das funções ou grandezas físicas na dependência de $x^* = (x - x_c)/x_c$ que é o parâmetro indutor de transição reduzido.

No desdobramento da afirmação de Binder, pode-se mencionar que há evidências tanto experimentais quanto teóricas para se afirmar uma segunda hipótese que pode ser formulada da seguinte maneira: para sistemas infinitos, nas proximidades do valor crítico do parâmetro x , x_c , a variação de algumas quantidades físicas, Q , com o parâmetro reduzido, $x^* = (x - x_c)/x_c$, é governada por uma lei de potência, na forma

$$Q \sim |x^*|^\lambda, \quad (1.26)$$

em que, essa expressão pode também significar a própria definição do expoente crítico (Thompson, 1988),

$$\lim_{x^* \rightarrow 0} \left[\frac{\ln(Q)}{\ln(x^*)} \right] = \lambda. \quad (1.27)$$

¹⁴ (Barber, 1983), pg.158-159.

¹⁵ (Binder, 1976).

Com esta definição, se $Q = Q_a |x^*|^\lambda$, em que Q_a é uma constante, então, segue-se 1.27. Entre as várias quantidades físicas, também o comprimento de correlação, ξ , segue a lei de potência. Pode-se, portanto, expressar da seguinte forma

$$\xi \propto |x_c - x|^{-\nu}, \quad (1.28)$$

em que ν é um expoente crítico.

Na teoria da escala de tamanho finito, essa mesma quantidade, Q , comporta-se, em sistemas finitos, de acordo com a lei

$$Q_L(x) \propto L^{-z} \tilde{Q}\left(\frac{L}{\xi}\right). \quad (1.29)$$

A função $\tilde{Q}(x)$ é uma função de escala suave, sem singularidade e descreve uma curva arredondada e deslocada do ponto crítico (Binder, 1976). Por exemplo, as quantidades físicas magnetização, M_L , e suscetibilidade, χ_L , calculadas para sistemas de tamanhos finitos tem a formas correspondentes apresentadas nas figuras 1.1 e 1.2 na próxima seção.

De acordo com a hipótese central nas proximidades do ponto crítico, portanto, no caso em que

$$\lim \frac{L}{\xi} \rightarrow 0, \quad (1.30)$$

tem-se, então, que o comportamento de $\tilde{Q}(w)$ é tal que

$$\tilde{Q}\left(\frac{L}{\xi}\right) \sim \left(\frac{L}{\xi}\right)^z. \quad (1.31)$$

Pois com isso tem-se a expressão da exigência do comportamento do sistema como uma lei de potência dado que se espera que no limite termodinâmico a dependência em L deve sumir, o sistema é (virtualmente) infinito. Portanto, com as relações 1.29, 1.31 e 1.26 obtém-se, por conseguinte, o comportamento da quantidade $Q_L(x)$ no caso do sistema no limite termodinâmico ou sistema infinito, ou seja,

$$Q_L(x) \propto \xi^{-z} \propto |x - x_c|^{-\nu z}. \quad (1.32)$$

Comparando 1.32 com 1.26 tem-se, então, que

$$z = \frac{\lambda}{\nu}. \quad (1.33)$$

Com esta relação pode-se reescrever 1.29 na forma

$$Q_L(x) = L^{-\lambda/\nu} \tilde{Q}\left(\frac{L}{\xi}\right). \quad (1.34)$$

Para sistemas finitos, mas com $x = x_c$, o comprimento de correlação não pode passar de L , portanto, $\xi \sim L$, e

$$Q_L(x_c) \sim L^{-\lambda/\nu}. \quad (1.35)$$

No contexto da termodinâmica e da Mecânica Estatística aplicada a um sistema magnético, tomado como ilustração da teoria dos fenômenos, o objetivo de estudar o fenômeno de transição de fase faz uso das variações que ocorrem nas propriedades físicas descritas pelas quantidades físicas como função da temperatura, por exemplo, o parâmetro de ordem M , que é a magnetização espontânea, da suscetibilidade χ , que é a suscetibilidade magnética, e do cumulante de quarta ordem. Esse objetivo é abordado em três etapas. Na primeira etapa, procura-se calcular o valor crítico do parâmetro indutor da transição. O recurso central usado é o cumulante de quarta ordem¹⁶ definido pela expressão,

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (1.36)$$

Na segunda, procura-se identificar a natureza da transição de fase. Aqui os recursos são os comportamentos característicos da grandeza magnetização, M_L , e suscetibilidade, χ_L , com o tamanho do sistema L . Na terceira etapa, segue-se a hipótese de escala, e, por aqui, pretende-se identificar a classe de universalidade do modelo do sistema. Isto é feito por meio da aplicação da análise de escala de tamanho finito, ou a abordagem de escala, que segundo Stanley (Stanley, 1999) consiste de duas categorias de predições, em suas próprias palavras,

The scaling hypothesis has two categories of predictions, both of which have been remarkably well verified by a wealth of experimental data on diverse systems. The first category is a set of relations, called scaling laws, that serve to relate the various critical-point exponents....[mais abaixo]. The second category is a sort of **data collapse**, which is perhaps best explained in terms of our simple example of a uniaxial ferromagnet....¹⁷

Desta forma, segundo esse roteiro, a terceira etapa divide-se em duas partes. Na primeira parte, procura-se obter os valores dos expoentes críticos mencionados acima com os quais pode-se identificar a classe de universalidade. O recurso que constitui a primeira categoria da hipótese de escala são as leis de escala mencionadas acima, que significam tanto as leis de potências quanto as relações entre os expoentes críticos. Por meio das leis de potências e dos dados da simulação computacional obtêm-se os expoentes críticos. Com os expoentes críticos identifica-se a classe de universalidade do modelo em questão. Na segunda parte, da terceira etapa, procura-se analisar a consistência desses resultados envolvendo tanto o valor crítico do parâmetro indutor da transição quanto os valores dos expoentes críticos com o recurso do colapso dos dados. Nessa parte, utiliza-se a segunda categoria da hipótese de escala, que está relacionada com a construção de uma função de escala para

¹⁶(Plischke, 1994), pg.289; (de Oliveira, 1996), pg.1322; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312; (Binder, 1997), pg.523.

¹⁷ver pg. S358 (Stanley, 1999).

as grandezas relevantes caracterizada pela propriedade de ser invariante ao tamanho do sistema, como afirmado por Stanley,

The scaling hypothesis predicts that all the curves of this family can be “collapsed” onto a single curve provided one plots not M versus ε but rather a **scaled** M (M divided by H to some power) vs a **scaled** ε (ε divided by H to some different power)¹⁸.

Essas relações podem ser descritas¹⁹, como,

$$M_L(q) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (1.37)$$

$$\chi_L(q) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (1.38)$$

$$U_L(q) = \tilde{U}(L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (1.39)$$

em que $\varepsilon = (q - q_c)/q_c$. Por sua vez essas relações de escala mostram que as grandezas mencionadas comportam-se, no ponto crítico q_c , ou exibem um comportamento descrito por leis de potência²⁰, pois $\tilde{M}(0)$, $\tilde{\chi}(0)$, e $\tilde{U}(0)$ tornam-se constantes, fornecendo, para a magnetização, M , a lei de potência,

$$M(q = q_c) \propto L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(0), \quad (1.40)$$

enquanto para a suscetibilidade magnética,

$$\chi(q = q_c) \propto L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(0). \quad (1.41)$$

Restringe-se aqui apenas a essas grandezas, pois elas são recorrentes. Destas leis de potências podem-se obter os expoentes críticos por meio dos dados da simulação computacional e de um gráfico log-log relacionando

$$\ln M(q = q_c) = -\frac{\beta}{\nu} \ln L + \ln \tilde{M}(0), \quad (1.42)$$

e

$$\ln \chi(q = q_c) = \frac{\gamma}{\nu} \ln L + \ln \tilde{\chi}(0), \quad (1.43)$$

que desempenham papel fundamental como critérios para resolver o problema de qual é a classe de universalidade dos modelos em questão.

Trabalhos tanto experimentais quanto teóricos revelaram valores numéricos para esses expoentes críticos para modelos específicos dando origem a classes de universalidades

¹⁸ ver pg. S358-S359 (Stanley, 1999).

¹⁹ (Stanley, 1999), pg.S358; (Landau, 2000), pg.77-78; (de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder and Heermann, 1988), pg.105-109; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

²⁰ (Binder, 1997), pg.523-525; (Landau, 2000), pg.78.

como aquelas do modelo de Ising e da percolação direcionada mencionadas anteriormente. Esses valores numéricos proporcionaram também evidências para as leis de escalas. No que diz respeito aos problemas estudados nesta tese eles estão relacionados com os modelos da classe dos votantes majoritário e minoritário assim como modelos com estados absorventes e modelo de equilíbrio como é o caso do modelo de Ising com campo transversal. Os modelos da classe dos votantes majoritário e minoritário são governados por dinâmicas que não satisfazem o princípio do balanceamento detalhado, portanto, eles são classificados como de não-equilíbrio. Mas, por possuírem a propriedade da simetria “up-down” classificam-se, pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), como pertencentes à classe de universalidade de Ising. O problema com os modelos da classe do votante majoritário, com fase ferromagnética, é o de construir uma curva contínua relacionando as concentrações com o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase. O desdobramento deste problema foi o de construir um modelo desta classe com a fase antiferromagnética. A solução foi a construção do modelo do votante minoritário. Apresentou-se então o problema da combinação convexa entre esses dois modelos, votantes majoritário e minoritário. Neste contexto, colocou-se o problema da analogia com o modelo de Ising $\pm J$. O outro tipo de modelo abordado que é aquele com estado absorvente, tem uma dinâmica que não satisfaz o princípio do balanceamento detalhado, mas por ser um modelo com estado absorvente classifica-se pelo argumento de Janssen (Janssen, 1981) e Grassberger (Grassberger, 1982) na classe de universalidade do modelo de percolação direcionada. O problema neste caso é encontrar o diagrama de fase que vai definir as regiões de cooperação.

A primeira abordagem para o estudo de todos esses modelos é a abordagem teórica. Nessa abordagem estes modelos foram estudados por meio da equação da evolução na aproximação de campo médio. Com essa abordagem verificaram-se quantitativamente tanto os resultados clássicos para os expoentes críticos quanto as quebras de simetrias esperadas para tais modelos com a presença de dois estados fundamentais como solução para o estado estacionário da equação de evolução. A segunda abordagem é aquela do método de simulação computacional. Fez-se uso do método de Monte Carlo com os recursos de processos estocásticos markovianos com dinâmicas de não-equilíbrio para gerar dados e medir as grandezas físicas. Para a análise dos dados proporcionados por este método de simulação computacional e sua comparação com os recursos da Mecânica Estatística no limite termodinâmico procedeu-se ao uso da análise de escala de tamanho finito por meio do qual pôde-se calcular para cada um dos modelos estudados o valor do ponto crítico, os expoentes críticos, a função colapso e por aqui decidir suas classes de universalidade.

O roteiro da aplicação de todos esses recursos tanto teóricos quanto computacionais para abordar os problemas mencionados relativamente a cada um dos modelos estudados segue-se como descrito na sequência.

De maneira geral o roteiro deve perseguir os seguintes objetivos: o primeiro procedimento com referência ao estudo da transição de fase em modelos de sistemas naturais é aquele de identificar inicialmente a natureza da transição como de primeira ordem ou contínua; o segundo é o de encontrar o valor do ponto crítico ou o valor do parâmetro indutor da transição; o terceiro é o de obter os expoentes críticos e com isso identificar a classe de universalidade dos modelos estudados. Simultaneamente, apresenta-se e estuda-se o comportamento das grandezas relevantes do sistema em torno do ponto crítico, que é descrito pelas leis de potência discutidas anteriormente; o quarto recurso é construir as funções colapso por meio de mudanças de escala. Com as curvas de colapso testa-se a consistência dos parâmetros críticos obtidos e desta forma reforçam-se as evidências quanto à qualidade dos resultados. Faz-se uso aqui da abordagem da função homogênea generalizada para obter essas curvas como foi discutido anteriormente. Para realizar esses passos fez-se uso dos instrumentos obtidos das discussões teóricas desenvolvidas acima e abaixo discriminados.

1.1 Métodos e técnicas para estudar a natureza e obter o valor do ponto crítico e expoentes críticos.

O primeiro passo no estudo dos fenômenos críticos e transição de fase é investigar a natureza da transição de fase apresentada pelo modelo. Identificada a natureza da transição de fase a próxima etapa tem por objetivo calcular o valor crítico do ponto da transição e os valores dos expoentes críticos das leis de potência. As técnicas de escala de tamanho finito juntamente com os dados produzidos pela simulação computacional, que descrevem o comportamento do sistema em torno do ponto crítico desempenham papel central nesta etapa.

1.1.1 Métodos para identificar a natureza da transição.

A transição de fase pode ser classificada em dois tipos: transição de primeira ordem e a transição de segunda ordem ou contínua. Em um sistema infinito a transição de primeira ordem é caracterizada por uma descontinuidade nas primeiras derivadas do potencial termodinâmico no parâmetro indutor da transição; enquanto na transição de segunda ordem as primeiras derivadas são contínuas, mas apresentam singularidades nas segundas derivadas no potencial termodinâmico. Em termos do parâmetro de ordem, definido como qualquer quantidade equivalente a zero em um lado da transição de fase e não-zero do outro lado, a transição de fase de segunda ordem é caracterizada pelo fato de que o parâmetro de ordem é contínuo no valor crítico do parâmetro indutor, e, por isso, ela

é também denominada transição de fase contínua²¹. Contudo, para o contexto desta tese o interesse é apenas da transição contínua. No que diz respeito à identificação da natureza da transição de segunda ordem, faz-se uso da definição acima, portanto, de dois métodos. O primeiro método, que pode ser considerado como uma assinatura, para identificar a natureza da transição de fase, é o gráfico do parâmetro de ordem *versus* o parâmetro indutor da transição. Essa gráfico deve mostrar continuidade no parâmetro de ordem, que no caso de sistemas ferromagnéticos, como nesta tese, é a quantidade física magnetização, como pode ser visto no gráfico abaixo para diferentes tamanhos do sistema. Pode-se imaginar que a curva limite, ou seja, a curva para o sistema infinito, portanto, aproximada com $L \rightarrow \infty$ é uma curva que entra continuamente no eixo horizontal mas de maneira perpendicular na interseção como ilustrado em seguida:

Figura 1.1: Gráfico do parâmetro de ordem–magnetização–como característica da transição contínua para o tamanho L crescente.

O segundo método explora a descontinuidade da segunda derivada do potencial termodinâmico, no caso da quantidade física suscetibilidade dada pelo gráfico abaixo. No entanto, no caso de sistemas finitos, a curva da suscetibilidade se apresenta como curvas arredondadas que com o tamanho L crescente se aproximam desta descontinuidade. A suscetibilidade, calculada para sistemas de tamanhos finitos, tem a forma ilustrada na figura, mostrada por (Privman, 1998), seguinte:

²¹(Barkema and Newman, 1999), pg.83;(Binder, 1997), pg.528; (Landau, 2000), pg. 14.

Figura 1.2: Gráfico da suscetibilidade como característica da transição contínua.

1.1.2 O método do cumulante de quarta ordem.

Um dos métodos mais importantes para identificar o valor da temperatura de transição de fase, ou do valor crítico do indutor da transição, que no nosso caso é $q = 1 - p$, ou ainda da variável de controle, é o método para calcular o cumulante de Binder ou método do cumulante de quarta ordem U_L ²² definido em 1.36 como

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (1.44)$$

O procedimento consiste em construir o gráfico do cumulante de Binder (U_L) para uma rede de tamanho L *versus* a temperatura e repetir esse gráfico para vários tamanhos de L . O valor da temperatura crítica T_c será dado pelo ponto de intersecção destas curvas U_L *versus* T para vários L . Esse procedimento servirá para se identificar os valores críticos do parâmetro de controle, temperatura ou outro campo. A racionalidade desse método encontra-se, descrita por Binder (Binder and Heermann, 1988),

For $T > T_c$ and $L \gg \xi$, one can show that U_L decreases towards zero as $U_L \propto L^{-d}$. For $T < T_c$ and $L \gg \xi$, one can show from ... [Distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem, $P_L(m)$] ... that U_L tends to $U_\infty = 2/3$. For $L \ll \xi$, on the other hand, U_L varies only weakly with temperature and linear dimension, it stays close to the (universal but non trivial) $\ll$ fixed-point $\gg$ value U^* ²³

²² (Binder and Heermann, 1988), pg.107; (Binder, 1997), pg.523, (de Oliveira, 1996), pg.1322.

²³ (Binder and Heermann, 1988), pg.46

Isto significa que se $L' > L$ então $U_{L'} > U_L$, no caso em que $T < T_c$, e $U_{L'} < U_L$ no caso em que $T > T_c$, pois nesse caso $U(L) \propto L^{-d}$. Binder comenta, primeiro, que a precisão deste método de intersecção do cumulante é bastante boa, exceto para dimensões lineares pequenas em que, devido a correções de escala de tamanho finito, pode-se ter uma área espalhada na intersecção e, segundo, que tem sido bastante bem sucedido em suas aplicações, quando comparado com outros métodos como expansão em série e grupo de renormalização de Monte Carlo. Mas, ele alerta também para o que poderia ser uma fonte de problemas: a qualidade dos números pseudoaleatórios. Nesse mesmo trabalho, mas em uma parte denominada *de guia para trabalho prático com o método de Monte Carlo* Binder (Binder and Heermann, 1988) é mais direto sobre o uso do método do cumulante de quarta ordem para encontrar o ponto crítico. Ele diz,

To determine the transition point we choose pairs of linear system sizes (L, L') .

The critical point is the fixed point where we have $U_L = U_{L'}$. At the transition point the cumulants for two different systems sizes must intersect. To put it differently, if we plot the ration $U_L/U_{L'}$ versus the temperature, then for all pairs we should find a unique crossing at one particular temperature. This is the transition point²⁴.

1.1.3 O método da magnetização: valor, natureza e expoente crítico.

O mesmo método mencionado acima para identificar a natureza da transição de fase serve também para identificar o valor crítico e ainda que sem a precisão do método do cumulante de Binder e também para calcular os expoentes críticos. Esse método faz uso da relação $M_L(q)$ versus q , ilustrada pela figura 1.1, e também da relação $M_L(q)$ versus $1/L$, para diversos valores de L . A racionalidade para o uso destes recursos é que o ponto crítico, q_c , divide o conjunto dos valores da magnetização $M_L(q)$, quando $L \rightarrow \infty$, em dois subconjuntos: se $q > q_c$ então a magnetização, $M_L(q)$ comporta-se com $1/L$ de tal modo que desaparece, $M_L(q) = 0$, estado desordenado, para $L \rightarrow \infty$. Neste caso tem-se a dependencia de M_L do tamanho do sistema para esse domínio. Enquanto, se $q < q_c$, a magnetização aproxima-se de um valor diferente de zero, $M_L^*(q)$, estado ordenado, para $L \rightarrow \infty$ e mostra-se independente do tamanho do sistema.

Com o conhecimento do valor do ponto de transição, T_c , ou q_c no nosso caso, e, também com o uso da relação de escala de tamanho finito, pode-se então obter uma estimativa da relação entre os expoentes críticos, β/ν , por meio de uma regressão linear ou ajuste dos

²⁴(Binder and Heermann, 1988), pg.107.

pontos descritos por $M_L(q_c)$ e L obtida da relação 1.37 ou

$$M_L(q) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (1.45)$$

em que $\tilde{M}$ é a função escala que depende, por exemplo, das condições de contorno e $\varepsilon = (q - q_c)/q_c$. No ponto de transição de fase, $\varepsilon = 0$, obtem-se a relação 1.40

$$M_L(q_c) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(0). \quad (1.46)$$

Finalmente, tomando o logaritmo de ambos os lados da equação pode-se identificar a inclinação da relação linear entre $\log M_L(T_c)$ e $\log L$ como sendo a relação entre os expoentes críticos, β/ν .

1.1.4 O método da suscetibilidade: valor, natureza e expoentes críticos.

Do mesmo modo o método da suscetibilidade discutido acima para identificar a natureza da transição de fase serve calcular a razão entre os expoentes críticos γ/ν . O uso deste método advém da relação de escala de tamanho finito da suscetibilidade, em torno e no ponto crítico. Como visto, essa relação, 1.38 pode ser descrita como

$$\chi_L(q) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (1.47)$$

em que $\varepsilon = (q - q_c)/q_c$. Com essa relação de escala da suscetibilidade, segue-se automaticamente um método para obter a razão entre os expoentes críticos, que é aquele da regressão linear nos valores máximos da suscetibilidade para cada tamanho L do sistema. A regressão linear para $\ln \chi_{max}$ *versus* $\ln L$ tem na inclinação dessa reta o valor da razão γ/ν . Outro método para identificar essa razão entre os expoentes críticos faz uso da mesma relação de escala acima, mas, partindo, agora, do fato de que se conhece o valor crítico da variável, q_c , que induz a transição de fase. Ele consiste em tomar a regressão linear entre os pontos descritos pelo $\ln \chi(q_c)$ no ponto crítico, para cada L , *versus* $\ln L$. Este método também segue diretamente da relação de escala de tamanho finito obtida acima. Fazendo-se $q = q_c$ na relação de escala, obtém-se 1.41,

$$\chi_L(q_c) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(0). \quad (1.48)$$

Com esta fórmula pode-se deduzir que a razão entre os expoentes críticos γ/ν é a inclinação da regressão linear ou do ajuste da linha aos pontos (χ_L, L) descritos pela suscetibilidade e tamanho L .

1.1.5 A função de escala e a curva colapso.

Uma vez determinado o ponto de transição de fase, portanto, o valor crítico da variável de controle como, por exemplo, a temperatura, ou o grau (parâmetro) de incerteza ou de dúvida $q = 1 - p$ com que se aceita a regra da maioria, conforme adotado nos modelos considerados nessa tese, e, também, os expoentes críticos, inicia-se efetivamente, segundo Binder²⁵, a *análise de escala de tamanho finito*. Como ele mesmo diz,

Now that we have determined the phase transition point for the model we can go to the *finite-size scaling analysis*²⁶.

Assim, com os valores corretos para q_c , β , γ , ν , os dados para os sistemas de diferentes tamanhos L devem colapsar em uma única curva (função escala). Isto significa que, uma vez conhecidos os expoentes críticos eventualmente o valor crítico do parâmetro indutor da transição, todos os dados sobre, por exemplo, a magnetização, obtidos para os diferentes tamanhos do sistema, podem ser levados a colapsar sobre uma única função de escala. Essa transformação de escala, como já foi visto anteriormente, é dada por

$$x \equiv \frac{(q - q_c)}{q_c} L^{1/\nu}, \quad (1.49)$$

para o eixo das abscissas. Enquanto tem-se

$$y \equiv M(q, L) L^{\beta/\nu}, \quad (1.50)$$

para o eixo das ordenadas. Esse primeiro tipo de colapso dos dados do sistema, por meio da transformação de escala, pode ser encarado como um excelente teste para a correta avaliação dos valores dos expoentes críticos. Do mesmo modo, pode-se fazer uso do valor crítico indutor da transição, dos expoentes críticos e, juntamente com os dados da suscetibilidade, obtidos para os diferentes tamanhos do sistema, construir, por meio de uma transformação de escala, uma outra única função universal de escala, associada com a suscetibilidade, sobre a qual todos esses dados se ajustam ou sobre a qual eles colapsam. Relembrando que a transformação de escala é dada por

$$x \equiv \frac{(q - q_c)}{q_c} L^{1/\nu}, \quad (1.51)$$

para o eixo das abscissas. Enquanto que temos

$$y \equiv \chi(q, L) L^{-\gamma/\nu}, \quad (1.52)$$

para o eixo das ordenadas. E, finalmente, no contexto dessa tese, outra transformação de escala é também bastante importante: a do cumulante de quarta ordem. Com os

²⁵(Binder and Heermann, 1988), pg.108.

²⁶(Binder and Heermann, 1988) pg.108.

dados acima juntamente com aqueles dados do cumulante de quarta ordem constrói-se uma função universal de escala associada com o cumulante, sobre a qual todos esses dados se ajustam corretamente ou colapsam. A transformação de escala é dada por

$$x \equiv \frac{(q - q_c)}{q_c} L^{1/\nu}, \quad (1.53)$$

para o eixo das abscissas. Enquanto tem-se

$$y \equiv U, \quad (1.54)$$

para o eixo das ordenadas. Descrito tanto o quadro teórico quanto da simulação computacional no qual se insere a proposta desta tese e estabelecido o roteiro geral utilizado na abordagem dos problemas, finalmente, propõe-se o seguinte roteiro por capítulos correspondentes nesta tese à aplicação dos métodos estocásticos aos fenômenos críticos e de transição de fase.

1.1.6 Roteiro da tese.

No capítulo dois estuda-se o comportamento de transição de fase dos modelos da classe do votante majoritário para diversos casos especificados pelo número de coordenação z . Esses modelos são descritos como modelos de gás de rede para redes quadradas com N sítios, com variáveis estocásticas descrevendo dois estados $\sigma_i = \pm 1$ associadas a cada sítio e tendo regras definidas como regras majoritárias mais regras de desempate, especificando como cada spin adquire seu estado a partir dos estados dos sítios vizinhos. Como o modelo apresenta simetria “up-down” segue-se, por argumento teórico, que apesar de não satisfazer o princípio do balanceamento detalhado, e, portanto, classificar-se portador de transições de fase fora de equilíbrio, ele se encontra na classe de universalidade do modelo de Ising. Com os recursos da equação de evolução e da equação mestra, da análise de escala de tamanho finito obtidos dos métodos da Mecânica Estatística de Equilíbrio e do método de simulação computacional de Monte Carlo estuda-se o comportamento desses modelos nas proximidades do ponto crítico. Calculam-se as relações entre os valores críticos do parâmetro indutor e o número de coordenação da rede, os expoentes críticos e constroem-se as funções colapso. Por este meio são encontradas evidências que suportam o argumento teórico acima.

No capítulo três constroem-se modelos que são combinações convexas de modelos do votante majoritário e com isso pode-se preencher as lacunas da relação entre os valores críticos do parâmetro indutor e o número de coordenação. Aplicando os mesmos procedimentos anteriores mostra-se que esses modelos apresentam os mesmos resultados dos modelos anteriores. Neste contexto propõe-se e resolve-se o problema do modelo mais simples e com este modelo procura-se ilustrar as características da classe de universalidade, em particular, a dimensionalidade do sistema.

No quarto capítulo desenvolve-se a segunda etapa dessa pesquisa, a qual consiste em construir uma outra classe de modelos do votante que, por analogia com o modelo de Ising, tem como estado fundamental a fase antiferromagnética: a classe dos modelos do votante minoritário. Para esses modelos foram repetidos os estudos aplicados ao votante majoritário e obtidos os mesmos resultados.

No quinto capítulo a analogia com o modelo de Ising é levada um pouco mais longe, gerando, com essa última classe de modelos, os meios de construir uma combinação convexa dos modelos do votante majoritário e minoritário, e desta forma, construir um análogo ao modelo de Ising $\pm J$. Essa analogia não fica sem evidências, pois, puderam-se reproduzir os resultados e diagramas do modelo de Ising $\pm J$, obtendo-se tanto o diagrama de fase com três fases, a saber, ferromagnética, paramagnética e antiferromagnética quanto as concentrações críticas distinguindo essas regiões no diagrama de fase. Contudo, não foi encontrada por simulação computacional a presença de fase de vidro de spin como aparentemente esperado pela analogia. A questão é se se trata de refinamento da simulação computacional ou se essa combinação convexa reproduz as condições necessárias para o aparecimento da fase de vidro de spin: desordem das ligações e frustração. Em outro aspecto dessa pesquisa, considerando-se que o contexto original dos modelos do votante os define como sistemas desordenados, passou-se, então, à comparação, para um mesmo modelo, da aplicação dos dois métodos diferentes de tratar os modelos de sistemas desordenados: o método temperado - "quenched" - e o método recozido - "annealed". A comparação resultou em dois gráficos descrevendo a relação entre os valores críticos do parâmetro indutor da transição com a concentração proveniente do modelo convexo do votante majoritário.

No sexto capítulo, exploram-se uma vez mais modelos estocásticos que se classificam como irreversíveis. Estuda-se um modelo classificado como jogo espacial, descrevendo a evolução de N indivíduos interagentes localizados nos sítios de uma rede quadrada. Os indivíduos interagem, em um jogo de duas ações, apenas com indivíduos pertencente à uma pequena vizinhança. Essas duas ações consistem em cooperar (C) ou não cooperar (D). Em cada jogada, os indivíduos revisam suas escolhas de acordo com regras específicas ou, para usar um termo apropriado, estratégias. A evolução do jogo é considerada ser um processo de Markov, no qual as estratégias são probabilísticas, dependentes apenas da última jogada, e as ações são atualizadas segundo o método "single-spin", portanto, de maneira contínua. A principal regra do jogo é que o jogador não muda sua ação quando ele e seu oponente têm mantido a mesma ação, (CC) ou (DD), na jogada anterior. Essa regra leva à existência de dois estados congelados ou estados absorventes, um dos quais é caracterizado por ter apenas cooperadores, enquanto o outro, por ter apenas não-cooperadores. Simulações mostram que além desses dois estados absorventes há também um estado ativo no qual a rede tem uma densidade finita de cooperadores e não cooperadores. As sim-

ulações mostram também que o estado ativo está presente em duas dimensões, mas não em uma dimensão, e que esse modelo se encontra na classe de universalidade do modelo da percolação direcionada, segundo as análises do expoente crítico associado com a lei de potência descrevendo o comportamento do parâmetro de ordem.

No sétimo e último capítulo estuda-se no contexto da Mecânica Estatística de Equilíbrio um modelo de Ising quântico unidimensional com campo transversal por meio da simulação de Monte Carlo. Esse método foi usado para calcular o valor crítico do parâmetro indutor, o campo transversal, e os expoentes críticos do comportamento da magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem nas proximidades do ponto crítico com a construção de suas curvas colapso.

Capítulo 2

O MODELO DO VOTANTE MAJORITÁRIO - VMAJ.

2.1 Introdução: os objetivos e problemas.

O objetivo deste capítulo é aplicar os recursos teóricos da mecânica estatística de equilíbrio e fora de equilíbrio que envolvem entre outros o método de escala de tamanho finito, dos processos estocásticos e de simulação computacional para estudar a classe de modelos do modelo do votante majoritário com e sem spin central. Esse modelo é classificado como um sistema desordenado com transição de fase do tipo ordem-desordem que não satisfaz as condições da reversibilidade microscópica ou balanceamento detalhado e, portanto, classificado como um sistema fora de equilíbrio. O objetivo é analisar essa classe de modelos para resolver cinco problemas: o primeiro é calcular o valor crítico da transição de fase ordem-desordem e identificar a natureza da sua transição de fase; o segundo problema é identificar a classe de universalidade; o terceiro é construir uma relação entre os valores críticos do parâmetro indutor da transição, q_c , com o número de coordenação, z , do modelo. O quarto é encontrar o modelo mais simples, com o critério do menor valor crítico, dessa classe e, por aqui, discutir algumas das características da classe de universalidade, em particular, a dimensionalidade do sistema. Esses problemas são tratados em primeiro lugar do ponto de vista de uma abordagem teórica e em segundo da abordagem da simulação computacional. A abordagem teórica é feita a partir equação de evolução do sistema e tratada apenas na aproximação de campo médio, enquanto a abordagem da simulação computacional proporciona valores numéricos exatos para os modelos. Na abordagem da simulação computacional os dois primeiros problemas serão tratados conjuntamente e para eles recorrer-se-á ao método de escala de tamanho

finito¹, para a análise dos dados resultantes da simulação. Esse método conduz a certas relações de escala para as grandezas relevantes, centrais para essa análise: magnetização, suscetibilidade e o cumulante de quarta ordem. Essas relações de escala dão origem, no ponto crítico, a leis de potência cujos expoentes, denominados de expoentes críticos, são utilizados para determinar a classe de universalidade dos modelos e que foram discutidos no capítulo anterior.

2.2 O modelo do Votante Majoritário: descrição geral e especificação dos objetivos.

O Modelo do Votante Majoritário² é um modelo definido em um reticulado por meio de variáveis estocásticas σ_i , cada uma delas associadas com um sítio do reticulado. Considera-se aqui um modelo simples no qual

- tem-se uma rede quadrada de dimensão L por L com N sítios, associados aos quais têm-se variáveis estocásticas $\sigma_{i,j}$.
- as variáveis estocásticas têm, por sua vez, associados a elas apenas dois estados, designados por $\sigma_{i,j} = \pm 1$ para cada sítio do reticulado. Assim para uma rede de N spins têm-se 2^N configurações possíveis.
- uma vizinhança formada de z vizinhos e por diferentes formas de ligações geométricas entre o spin central e os z spins vizinhos.
- a dinâmica ou um conjunto de regras. No caso, a regra da maioria por meio da qual define-se o estado que um spin, $\sigma_{i,j}$, assume em função dos estados dos seus vizinhos. Esta regra afirma que o estado escolhido assume o valor correspondente ao da maioria dos vizinhos mais próximos.
- uma regra de desempate.

Esse último item destaca um elemento central dessa classe de modelos: a regra de desempate. Regras de desempate são adicionadas para completar a regra da maioria e eliminar situações de indecisão proporcionadas pela regra da maioria. Ela é uma das origens da riqueza dessa classe de modelos. Por exemplo, quando se fala em Modelo do Votante Majoritário não se discrimina a regra do desempate pois considera-se a regra $p = 0.5$ para o desempate como parte natural da regra da maioria. A razão para isso: a

¹(Binder, 1997),pg.523; (Landau, 2000), pg.77-78; (Stanley, 1999), pg.S360; (Widom, 1965), pg.3899-3901; (Fisher, 1967), pg.709; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.312; (de Oliveira, 1996), pg. 1322.

²(de Oliveira, 1992); (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

propriedade da simetria de inversão de sinal do spin σ_i . Cada modelo difere do outro em termos

- do número de vizinhos.
- da forma geométrica da ligação.
- da regra de desempate.
- da dinâmica que define como as configurações são alteradas.

Neste capítulo, a dinâmica vai ser considerada

1. definida pela regra da maioria.
2. “single spin flip” ou mudança da configuração a partir da escolha aleatória de um único spin. Ela é denominada de assíncrona ou de tempo contínuo. Ela consiste em substituir o spin σ_i por $-\sigma_i$, de acordo com uma certa probabilidade p .

O resultado da aplicação dessas regras é a geração de uma sequência de configurações em que cada uma delas depende apenas da anterior, portanto, formando um processo estocástico markoviano. Esse processo contrasta com aquele do autômato celular probabilístico, no qual os estados são revisados sincronicamente ou os estados de todos os indivíduos são revisados simultaneamente. A classe de modelos do votante majoritário possui certas propriedades muito importantes:

1. a primeira propriedade é que ela não satisfaz a condição do balanceamento detalhado e, portanto, a reversibilidade microscópica, e desta forma descreve um sistema que se classifica como fora do equilíbrio, portanto, não governado por uma hamiltoniana.
2. a segunda propriedade é que ela satisfaz a propriedade da simetria de inversão temporal³ ou como afirma Grinstein (Grinstein et al., 1985) simetria “up-down”, pela qual ao trocar-se todas as variáveis estocásticas $\sigma_{i,j}$ por $-\sigma_{i,j}$ a taxa de transição permanece invariante (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).
3. a terceira propriedade decorre da propriedade anterior, o modelo encontra-se, devido à propriedade da simetria “up-down”, na classe de universalidade de Ising segundo o argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985).

Não é difícil ver essa propriedade para os modelos que seguem a taxa de inversão dada acima, para uma determinada vizinhança. Basta fazer a troca de todos os σ_i por $-\sigma_i$ ou seja $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$. Uma abordagem a um exemplar dessa classe de modelos foi feito

³(Goldenfeld, 1992) pg.40-42.

por Oliveira (de Oliveira, 1992), que tratou do Modelo do Votante Majoritário, VMAJ4 sem spin central, com quatro vizinhos, obtendo o valor do ponto crítico e os expoentes críticos que o enquadram na classe de universalidade de Ising. Como foi ressaltado acima, este modelo tem também uma regra de desempate. Mas, encontra-se embutida na taxa de transição acima e corresponde a $p = 0.5$ para o caso em que $a = 0$, no caso da simulação. Esse desempate, pode ser visto das considerações acima, dá $w = 0.5$ para $a = 0$. Conjectura-se que a incorporação natural desta particular taxa de desempate à regra da maioria é devido ao fato de ela preservar a simetria “up-down”. Para qualquer outro valor não ocorreria essa simetria, e, portanto, não se poderia falar de transição de fase, de modo semelhante ao modelo de Ising com campo magnético externo. Denomina-se aqui um tal modelo, com regra de desempate do tipo $p = 0.5$, como Modelo do Votante Majoritário sem spin central⁴. Nos modelos a serem tratados neste capítulo substitui-se essa regra do desempate, $p = 0.5$, por outra regra, denominada aqui de regra do desempate do spin central. Ela consiste em assumir, em caso de empate, com probabilidade p , o estado atual σ_i e com probabilidade $q = 1 - p$, o estado $-\sigma_i$. Como pretende-se mostrar abaixo, essa regra adicionada à regra da maioria, formando propriamente o que se denomina de Modelo do Votante Majoritário com spin central, satisfaz também a propriedade de simetria por inversão temporal ou simetria “up-down”. Encontra-se nessa regra de desempate uma das fontes para uma riqueza de modelos, gerando toda uma família de modelos de votantes majoritários. Resumindo, o capítulo se desenvolve em torno do modelo do votante majoritário e de seus submodelos procurando-se com isso resolver o primeiro problema, que é aquele de determinar seus pontos críticos, a natureza das transições de fase, os expoentes críticos, e, portanto, sua classe de universalidade, e, então resolver o segundo objetivo, que é aquele de escolher o modelo mais simples, e, a partir dele, o terceiro objetivo, que é discutir algumas propriedades características da classe de universalidade, em particular a dimensionalidade. Esse segundo objetivo é conduzido pela afirmação de Yeomans (Yeomans, 1994), de acordo com a qual

Classes de universalidade são freqüentemente classificadas pelo modelo mais simples pertencente a elas.⁵

Desta forma, procura-se escolher o que seria o modelo mais simples de uma variedade de modelos do Votante Majoritário com spin central. A solução desse problema ajudará a entender duas propriedades importantes dos fenômenos críticos: a importância da dimensionalidade do sistema para a transição de fase e o significado, para a transição de fase, da invariância da densidade $\rho = N/V$ do sistema no limite termodinâmico, ou seja,

⁴ Ainda que não se menciona esse aspecto ele parece ser a característica para esses modelos como aquele tratado por (de Oliveira, 1992).

⁵ (Yeomans, 1994), pg. 29.

$N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$. Com o objetivo de fixar a nomenclatura apresenta-se a representação gráfica e analítica da estrutura básica do modelo como se segue:

- a nomenclatura adotada para identificar a geometria dos modelos considera uma quádrupla de parâmetros (a, b, c, d) para os modelos de até quatro vizinhos.
- cada um desses parâmetros assume os valores 0 ou 1, os quais significam respectivamente ausência ou presença do vizinho, ou da ligação. Considerando que o spin central está associado ao par (i, j) , em que i representa a coluna enquanto j a linha, então define-se o parâmetro a como associado ao par $(i, j - 1)$, ou seja, ao vizinho do lado de baixo spin central; o parâmetro b está associado ao vizinho identificado pelo par $(i, j + 1)$ ou ao vizinho do lado de cima; enquanto o parâmetro c está associado ao vizinho identificado por $(i - 1, j)$, ou seja, o vizinho situado do lado esquerdo do spin central; e, finalmente, o parâmetro d está associado ao vizinho identificado por $(i + 1, j)$, ou seja, ao vizinho situado do lado direito do spin central.

Esta nomenclatura algébrica é acompanhada pela representação gráfica apresentada abaixo, que identifica a coordenada (i, j) com o spin central e as demais coordenadas $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$, $(i, j + 1)$ com os vizinhos mais próximos:

Figura 2.1: As coordenadas das formas geométricas de ligações.

Neste contexto, pode-se construir uma série de modelos. Nesta série de modelos,

- a primeira classe de modelo é constituída de um único vizinho escolhido entre os quatro vizinhos mais próximos descritos abaixo. Há quatro modos possíveis de escolher um vizinho entre os quatro. Desta forma, haveria a princípio quatro modelos nesta classe de modelos de um único vizinho.

- a segunda classe de modelo é aquela com dois vizinhos mais próximos. No entanto, é fácil perceber que há seis possibilidades de escolhermos dois vizinhos entre quatro vizinhos mais próximos. Essas seis possibilidades descrevem as diferentes formas das ligações geométricas entre os vizinhos formados com apenas dois vizinhos mais próximos.
- e assim sucessivamente com três vizinhos e então com quatro vizinhos.

Contudo, para modelos com mais de quatro vizinhos mais próximos devemos fixar regras adicionais de formação dos modelos. Essas regras não são únicas. No caso tratado aqui, considera-se que a regra de formação de vizinhanças para mais de quatro vizinhos consiste nos quatro vizinhos mais próximos e, então, repete-se o mesmo raciocínio ou a mesma regra anterior para os seguintes quatro vizinhos. Com essas regras podem-se formar os modelos com cinco vizinhos, seis, sete, oito, ... etc. No entanto, é importante mencionar desde já, entre as outras regras de construção que podem ser elaboradas, um tipo particular, que constitui um dos núcleos desse trabalho: aquelas regras construindo modelos formados tanto de diferentes formas de ligação geométrica quanto de diferentes números de coordenação. Os modelos puros funcionam como se fossem bases com as quais se constroem os modelos convexas, que são combinações convexas desses modelos puros.

2.3 O modelo VMAJ1.

2.3.1 A descrição do modelo.

O modelo VMAJ1 consiste

- de uma rede quadrada L por L com N spins.
- de um spin central com um único vizinho escolhido entre os quatro mais próximos.
- das quatro possíveis formas de ligação geométrica envolvendo o spin central e um único vizinho, formando modelos puros, $(i, j - 1)$ ou (1000) , $(i, j + 1)$ ou (0100) , $(i - 1, j)$ ou (0010) , $(i + 1, j)$ ou (0001) formando quatro modelos possíveis, VMAJ1.1, VMAJ1.2, VMAJ1.3 e VMAJ1.4.
- de todas as combinações convexas dessas formas de ligação geométrica. Define-se a densidade λ como a participação dessa célula, formada de um spin e um dos tipos de vizinhos acima, no modelo. Assim λ_{1000} é a densidade do spin com um vizinho horizontal para a esquerda, enquanto λ_{0100} é a densidade do spin com um vizinho horizontal para a direita ... etc. O modelo mais geral é formado da combinação convexa com $(\lambda_{1000}, \lambda_{0100}, \lambda_{0010}, \lambda_{0001})$, e tal que $\sum_{i=1}^4 \lambda_i = 1$.

- da dinâmica definida pela regra majoritária dada em termos de um conjunto de regras de transição. Ela é como se segue:

escolhe-se aleatoriamente o spin (i, j) e, depois, um outro spin entre os quatro vizinhos que constituem sua vizinhança,

esse spin (i, j) , spin central, terá seu estado mudado de acordo com as regras aplicadas à sua vizinhança.

As quatro formas geométricas possíveis de ligações são representadas graficamente da seguinte maneira:

Figura 2.2: As quatro possíveis formas geométricas de ligação.

A taxa de transição é dada pelas regras abaixo, que servem para a escolha do estado do spin central,

$$\lambda_{1000}.w[(\sigma_{i-1,j}) = 1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p$$

$$\lambda_{1000}.w[(\sigma_{i-1,j}) = 1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q$$

$$\lambda_{1000}.w[(\sigma_{i-1,j}) = -1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p$$

$$\lambda_{1000}.w[(\sigma_{i-1,j}) = -1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q$$

$$\lambda_{0100}.w[(\sigma_{i+1,j}) = 1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p$$

$$\lambda_{0100}.w[(\sigma_{i+1,j}) = 1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q$$

$$\lambda_{0100}.w[(\sigma_{i+1,j}) = -1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p$$

$$\lambda_{0100}.w[(\sigma_{i+1,j}) = -1 \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q$$

$$\lambda_{0010}.w[(\sigma_{i,j-1}) = 1, \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p$$

$$\lambda_{0010}.w[(\sigma_{i,j-1}) = 1, \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q$$

$$\lambda_{0010}.w[(\sigma_{i,j-1}) = -1, \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p$$

$$\lambda_{0010}.w[(\sigma_{i,j-1}) = -1, \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q$$

$$\begin{aligned}
\lambda_{0001}.w[(\sigma_{i,j+1}) = 1, \rightarrow(\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
\lambda_{0001}.w[(\sigma_{i,j+1}) = 1, \rightarrow(\sigma_{i,j} = -1)] &= q \\
\lambda_{0001}.w[(\sigma_{i,j+1}) = -1, \rightarrow(\sigma_{i,j} = -1)] &= p \\
\lambda_{0001}.w[(\sigma_{i,j+1}) = -1, \rightarrow(\sigma_{i,j} = 1)] &= q
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Pode-se ver a propriedade da simetria de inversão de sinal diretamente desta taxa de transição, bastando para isso substituir todos os σ' s por $-\sigma'$ s e verificar a sua invariância. Com isso tem-se, teoricamente, pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), que o modelo pertence à classe de universalidade do modelo de Ising.

2.3.2 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica desse modelo é feita diretamente a partir da definição da equação de evolução (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001), ou seja,

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma') \tag{2.2}$$

Reescrevendo a equação de evolução, para um único spin, σ_i , ou seja, para $P_{l+1}(\sigma_i)$, com as regras de transição acima, obtém-se, para o caso em que $\sigma_i = 1$, $P_{l+1}(1)$, a seguinte relação algébrica,

$$\begin{aligned}
P_{l+1}(1) &= \lambda_{1000}[pP_l(1) + qP_l(-1)] + \lambda_{0100}[pP_l(1) + qP_l(-1)] \\
&+ \lambda_{0010}[pP_l(1) + qP_l(-1)] + \lambda_{0001}[pP_l(1) + qP_l(-1)]
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Com a relação $P(1) + P(-1) = 1$, e com a hipótese da isotropia, na equação acima, obtém-se,

$$\begin{aligned}
P_{l+1}(1) &= \lambda_{1000}[pP_l(1) + q(1 - P_l)] + \lambda_{0100}[pP_l(1) + q(1 - P_l(1))] \\
&+ \lambda_{0010}[pP_l(1) + q(1 - P_l(1))] + \lambda_{0001}[pP_l(1) + q(1 - P_l(1))].
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Depois de algumas manipulações algébricas, chega-se a

$$P_{l+1}(1) = ((p - q)P_l(1) + q)(\lambda_{1000} + \lambda_{0100} + \lambda_{0010} + \lambda_{0001}). \tag{2.5}$$

Como $(\lambda_{1000} + \lambda_{0100} + \lambda_{0010} + \lambda_{0001}) = 1$, com a definição que $m_l = P_l(1) - P_l(-1)$ e substituindo acima, segue-se

$$\frac{m_{l+1} + 1}{2} = \frac{(p - q)(1 + m_l)}{2} + q. \tag{2.6}$$

Com mais algumas manipulações algébricas, tem-se que

$$\frac{m_{l+1} + 1}{2} = \frac{1}{2} + (1 - 2q)m_l. \tag{2.7}$$

Sendo $\gamma = 2p - 1$ e adicionando $-m_l$ em ambos lados, finalmente chega-se, no contínuo, a uma equação de evolução para o parâmetro de ordem,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \gamma)m. \quad (2.8)$$

No estado estacionário, $\frac{dm}{dt} = 0$ temos duas soluções: $m = 0$ e $m \neq 0$ para o caso em que $\gamma = 1$, ou seja $p = 1$ que implica $q = 0$. Isto significa que não há transição de fase contínua. De outra forma, a solução dessa equação é dada por

$$m = A \exp[-(1 - \gamma)t], \quad (2.9)$$

de onde pode-se ver que a magnetização se anula, $m \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$, no caso em que $\gamma \neq 1$, portanto, em que $p \neq 1$ ou $q \neq 0$. O tempo de relaxação é dado por $\tau = 1/(1 - \gamma)$. Esse tempo diverge quando $\gamma \rightarrow 1$, ou seja, quando $q \rightarrow 0$. Trata-se portanto, de um comportamento semelhante àquele descrito por um modelo de Glauber unidimensional (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001). Assim, do ponto de vista teórico, não há transição de segunda ordem, ou transição de fase contínua, para qualquer q , exceto uma transição de primeira ordem em $q_c = 0$.

2.3.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional desse modelo não aponta transição ou, de outro modo, apresenta uma transição de primeira ordem para o valor de $q_c = 0$. A avaliação analítica dos dados obtidos da simulação computacional é feita com os recursos descritos anteriormente, por exemplo, a grandeza cumulante de quarta ordem⁶, dada por

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2} \quad (2.10)$$

conforme a equação 1.39. Essa grandeza permite identificar e calcular o valor crítico, q_c , da variável indutora da transição de fase. Por meio desse recurso o valor crítico do parâmetro indutor é dado por $q_c = 0.0$. Desta forma, pode-se dizer que o modelo do votante majoritário VMAJ1 não apresenta transição de fase contínua para $q \neq 0$ ou apresenta uma transição de fase do tipo denominada primeira ordem ou descontínua para $q = 0$. Como se poderá ver, no decorrer desta tese, todos os demais modelos, exceto o modelo com dois vizinhos VMAJ2 sem spin central, que será comentado em breve, tem transição para um valor de $q_c \neq 0$. A natureza dessa transição é denominada de segunda ordem ou contínua, pois o parâmetro de ordem vai, continuamente, a zero quando $q \rightarrow q_c$

⁶Uma explicação bastante sintética desta grandeza encontra-se em (Plischke, 1994), pg. 289; e (Binder, 1998).

para $q < q_c$. Da mesma forma será possível observar, a partir dos modelos abaixo, em particular VMAJ2 com spin central, que a presença de uma transição de fase dependerá da dimensionalidade da interação entre os vizinhos e que essa dimensionalidade deverá ser tal que $d > 1$. Mas, mesmo com a dimensionalidade $d = 2$, pode-se não ter transição de fase, como é o caso do modelo VMAJ2 sem spin central, portanto, com a regra de desempate $p = 0.5$. Assim este modelo VMAJ2 sem spin central não apresenta transição de fase. Nesta linha, pretende-se ilustrar com clareza, mesmo em destaque, que a dimensão em questão para a universalidade é aquela da interação, e não da rede ou espacial. A linguagem mais precisa para afirmar essa propriedade universal é que a dimensionalidade é sempre da interação e não da rede. O modelo abaixo VMAJ2.1 com e sem spin central é exemplar em identificar com clareza e precisão essa propriedade universal da transição de fase.

2.4 O modelo VMAJ2 e seus submodelos.

2.4.1 Descrição do modelo.

O modelo VMAJ2 consiste de

- uma rede quadrada L por L com N spins em que cada spin é descrito por uma variável estocástica $\sigma_{i,j}$.
- a célula é descrita por um spin $\sigma_{i,j}$ com dois vizinhos mais próximos escolhidos entre os quatro mais próximos, $\sigma_{i-1,j}$, $\sigma_{i+1,j}$, $\sigma_{i,j-1}$, $\sigma_{i,j+1}$. As possíveis formas de ligação geométrica entre estes dois vizinhos são uma ligação vertical $(1100), (\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$ outra horizontal $(0011), (\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$ e quatro na forma da letra L , (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, $(0110), (\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$, $(0101), (\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$ compondo seis formas de configuração geométrica de ligação destes dois vizinhos. Essas seis formas consistem no que se denomina de modelos homogêneos ou puros, ou ainda modelos-base de dois vizinhos.
- todas as possíveis combinações convexas entre esses modelos homogêneos ou puros, formadas de $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011}, \lambda_{1010}, \lambda_{0110}, \lambda_{1001}, \lambda_{0101})$.
- Essa classe de modelo VMAJ2 pode, então, ser decomposta, por sua vez, em três subclasses: VMAJ2.1, VMAJ2.2, VMAJ2.3: A subclasse VMAJ2.1 consta das formas geométricas de ligação (1100) e (0011) , enquanto a subclasse VMAJ2.2 consiste das formas geométricas de ligação (1001) , (1010) , (0101) , (0110) e a subclasse VMAJ2.3 consiste das seis formas geométricas de ligação, (1100) , (0011) , (1001) , (1010) , (0101) , (0110) . Ela é então formada da distribuição convexa descrita por

seis pares $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011}, \lambda_{1001}, \lambda_{1010}, \lambda_{0110}, \lambda_{0101})$, em que $\sum_{i=1}^6 \lambda_i = 1$ correspondentes a seis formas geométricas puras. O Modelo VMAJ2.1 sem spin central é constituído dos modelos-base VMAJ2.1H (1100) e VMAJ2.1V (0011).

- a dinâmica é dada pela regra da maioria.
- a regra da maioria é completada com uma regra de desempate que pode ser aqui de dois tipos:

a regra de desempate que consiste em escolher um dos dois estados com probabilidade $p = 0.5$.

a regra de desempate que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p e o estado oposto com probabilidade $q = 1 - p$.

A descrição analítica tem seu correspondente na representação gráfica abaixo para as seis formas geométricas de ligações:

Figura 2.3: As seis possíveis formas geométricas de ligações.

2.4.2 O modelo convexo VMAJ2.1 sem spin central: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.1 é dado por

- rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- spin central, $\sigma_{i,j}$, e dois vizinhos, $z = 2$, mais próximos com as ligações geométricas específicas (1100) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$ e (0011) ou $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$.
- todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tal que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$.

- assume-se também que o modelo padrão dessa subclasse é formado de uma combinação convexa com a distribuição ($\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5$).
- a dinâmica do modelo VMAJ2.1 é governada pela regra majoritária que define o valor do estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo um spin central de uma vizinhança, a partir dos estados de seus vizinhos.
- a regra do desempate é aquela segundo a qual escolhe-se um dos dois estados com probabilidade $p = 0.5$. É esta condição que define o modelo como modelo sem spin central. Assim o estado do spin central não depende do seu estado anterior como vai ser o caso, explicado na sequência, na definição do modelo com spin central.

A representação gráfica dos componentes desse modelo é descrita pela figura abaixo:

Figura 2.4: Os dois modelos básicos (1100) e (0011)

A taxa de transição desse modelo, conjunto da regra da maioria com a regra do desempate, é descrita por

$$w_{i,j}(\sigma_{i,j}) = \frac{\lambda_{1100}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j})] + \frac{\lambda_{0011}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1})]. \quad (2.11)$$

A função $S(a)$ (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001) é a função sinal definida segundo as seguintes regras: $S(a) = +1$ para $a > 0$, $S(a) = -1$ para $a < 0$ e $S(a) = 0$ para $a = 0$. E, $S(\sigma_{i,j} + \sigma_{i,j-1}) = \sigma_{i,j} + \sigma_{i,j-1}$. Com essa taxa de transição é fácil ver que o modelo VMAJ2.1 sem spin central satisfaz a propriedade da simetria por inversão de spin ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$), o que o coloca na classe de universalidade de Ising (Grinstein et al., 1985). Pode-se notar, pela análise das taxas de transição acima, que para qualquer outro valor de p , semelhante àquele da presença de um campo externo no modelo de Ising, o modelo não possui a simetria por inversão. Essa taxa de inversão significa que a cada intervalo de tempo, escolhe-se um sítio de forma aleatória, no caso $\sigma_{i,j}$, e, então, escolhe-se que tipo de vizinhança do sítio deverá ser avaliada, no caso, escolhe-se com probabilidade λ_{1100} a vizinhança formada dos sítios $\sigma_{i+1,j}$ e $\sigma_{i-1,j}$, os quais são os vizinhos mais próximos na vertical, e, conseqüentemente, com probabilidade $\lambda_{0011} = (1 - \lambda_{1100})$ escolhe-se a vizinhança formada dos sítios $\sigma_{i,j+1}$ e

$\sigma_{i,j-1}$, que são os vizinhos mais próximos na horizontal, de modo que o sítio escolhido $\sigma_{i,j}$ assume, pela regra da maioria, o valor associado àquele da maioria dos estados dos sítios da vizinhança e isso com uma probabilidade $\gamma = 2p - 1$ e o valor contrário, portanto da minoria, com probabilidade $\gamma = 1 - 2q$ tal que $p + q = 1$. De maneira explícita a taxa de transição para esse modelo VMAJ2.1 sem spin central pode ser descrita como:

$$\begin{aligned}
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= q \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Com essas regras fica ainda mais fácil ver como a taxa de transição satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal do spin σ_i . A invariância da regra à substituição dos $\sigma' s$ por $-\sigma'$ é de avaliação direta.

2.4.3 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

O desenvolvimento teórico para o modelo VMAJ2.1 sem spin central pode ser feito, na aproximação de campo médio⁷ a partir da equação de evolução. Pode-se usar diretamente a equação da evolução da média⁸,

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = -2 \langle \sigma_i w_i(\sigma) \rangle. \tag{2.13}$$

⁷(Dotsenko, 2001); (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

⁸(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001), pg.150

Fazendo uso dos recursos mencionados acima, tem-se que,

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -2\left\langle\sigma_{i,j}\left\{\frac{\lambda}{2}\left[\frac{1}{2} - \gamma\sigma_{i,j}S_h(a)\right] + \frac{(1-\lambda)}{2}\left[\frac{1}{2} - \gamma\sigma_{i,j}S_v(a)\right]\right\}\right\rangle, \quad (2.14)$$

em que S_h é a função sinal para a ligação horizontal, enquanto S_v é a função sinal para a ligação vertical. Sendo que

$$S_v\left(\sum_{\delta}\sigma_{i+\delta,j}\right) = \frac{\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j}}{2}, \quad (2.15)$$

e que

$$S_h\left(\sum_{\delta}\sigma_{i,j+\delta}\right) = \frac{\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}}{2}. \quad (2.16)$$

Pode-se desenvolver a equação da evolução da média até a seguinte forma algébrica,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle &= -\lambda\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\lambda\left[\frac{\langle\sigma_{i+1,j}\rangle + \langle\sigma_{i-1,j}\rangle}{2}\right] \\ &\quad - (1-\lambda)\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma(1-\lambda)\left[\frac{\langle\sigma_{i,j+1}\rangle + \langle\sigma_{i,j-1}\rangle}{2}\right]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Nesta etapa, faz-se a seguinte hipótese simplificadora, a hipótese da homogeneidade espacial, portanto que,

$$\begin{aligned} \langle\sigma_{i+1,j}\rangle &= \langle\sigma_{i-1,j}\rangle \\ \langle\sigma_{i,j+1}\rangle &= \langle\sigma_{i,j-1}\rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Com isto a equação de evolução temporal da média se reduz a

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -\lambda\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\lambda\langle\sigma_{i+1,j}\rangle - (1-\lambda)\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma(1-\lambda)\langle\sigma_{i,j+1}\rangle. \quad (2.19)$$

Fazendo agora a hipótese adicional da homogeneidade espacial, portanto,

$$\langle\sigma_{i+1,j}\rangle = \langle\sigma_{i,j+1}\rangle = \langle\sigma_{i,j}\rangle. \quad (2.20)$$

Obtém-se, finalmente,

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\langle\sigma_{i,j}\rangle, \quad (2.21)$$

a qual pode ser colocada, pela identificação $\langle\sigma_{i,j}\rangle = m$, na forma,

$$\frac{dm}{dt} = -(1-\gamma)m. \quad (2.22)$$

A abordagem de campo médio desse modelo, VMAJ2.1 sem spin central, dá a mesma equação de evolução da magnetização que o modelo anterior com $z = 1$, VMAJ1. No estado estacionário, $\frac{dm}{dt} = 0$, tem-se aqui também duas soluções $m = 0$ e $m \neq 0$ se $\gamma = 1$ ou seja $p = 1$ o que implica $q = 0$. Isto significa que não há transição de fase contínua.

Analisando de outra forma, a solução dessa equação⁹ é dada por, por meio de uma simples integração,

$$m = A \exp -(1 - \gamma)t. \quad (2.23)$$

Pode-se ver que $m \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$ no caso em que $\gamma \neq 1$, ou seja, que $q \neq 0$. Este caso constitui uma fase desordenada ou paramagnética. O tempo de relaxação é dado por $\tau = (1 - \gamma)^{-1}$, e, m decai exponencialmente para essa condição acima. Por outro lado, o tempo de relaxação, τ , diverge para $\gamma \rightarrow 1$, ou seja quando $q \rightarrow 0$. Como se sabe, ao se aproximar do ponto crítico, o tempo de relaxação cresce sem limites, divergindo neste ponto, portanto, segue-se que o valor crítico ocorre para $q_c = 0$. Assim, não há transição de fase de segunda ordem ou contínua, exceto uma transição de primeira ordem em $q = 0$.

2.4.4 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A abordagem da simulação computacional revelou que não há transição de fase de segunda ordem para qualquer q confirmando os resultados teóricos feitos na aproximação de campo médio.

2.4.5 O modelo convexo VMAJ2.1 com spin central: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.1 com spin central consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, mais próximos com as ligações geométricas específicas (1100) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$ e (0011) ou $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$.
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tal que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$.
- da pressuposição que o modelo padrão dessa subclasse é formado de uma combinação convexa com a distribuição $(\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5)$.
- de uma dinâmica dada pela regra majoritária que define o valor do estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo um spin central de uma vizinhança, a partir dos estados de seus vizinhos.

⁹(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001), pg.156.

- de uma regra de desempate que é a regra do spin central a qual consiste em assumir, no caso de empate com probabilidade p , o estado atual σ_i e, portanto, com probabilidade $q=1-p - \sigma_i$. Essa regra substitui a anterior, que consistia em escolher em caso de empate um dos dois estados possíveis, $\sigma_{i,j} = \pm 1$, com probabilidade $p = 0.5$. Com a regra do spin central mantém-se a propriedade da simetria do “up-down” e a propriedade decorrente dessa, pelo argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985), que é pertencer à classe de universalidade do modelo de Ising.

A representação gráfica dos componentes desse modelo é descrita pela figura abaixo.

Figura 2.5: Os dois modelos básicos (1100) e (0011)

A dinâmica é dada pela regra da maioria com a regra do desempate que são descritas abaixo no caso de $P_{l+1}(1)$,

$$\begin{aligned}
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1), &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Pode-se conferir de maneira direta que essas regras satisfazem a propriedade de simetria “up-down” ou inversão de sinal dos σ_i e, por consequência, segundo o argumento de Grinstein, pertencem à classe de universalidade do modelo de Ising.

2.4.6 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica desse modelo é feita a partir diretamente da definição da equação de evolução, ou seja,

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma') \quad (2.25)$$

Reescrevendo a equação da evolução com essas regras de transição, obtém-se a seguinte relação algébrica:

$$P_{l+1}(1) = \lambda_{1100}[pP_l(11) + pP_l(1-11) + pP_l(11-1) + qP_l(-11-1) + \quad (2.26)$$

$$qP_l(-1-11) + qP_l(-1-1)] + \lambda_{0011}[pP_l(11) + pP_l(1-11) + pP_l(11-1) + qP_l(-11-1) + qP_l(-1-11) + qP_l(-1-1)]. \quad (2.27)$$

Em que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$ e $P(\sigma_o\sigma_1\sigma_2)$ para o caso em que se considera o spin central σ_o com os dois vizinhos σ_1 e σ_2 . Fazendo-se agora a suposição da homogeneidade espacial, e realizando algumas operações algébricas, obtém-se, da equação acima,

$$P_{l+1}(1) = pP_l(11) + pP_l(1-11) + pP_l(11-1) + qP_l(-11-1) + qP_l(-1-11) + qP_l(-1-1). \quad (2.28)$$

Utilizando-se agora do método da aproximação de campo médio, ou seja, fazendo que $P(\sigma_o\sigma_1\sigma_2) = P(\sigma_o)P(\sigma_1)P(\sigma_2)$, segue-se que

$$P_{l+1}(1) = pP_l(1)P_l(1) + pP_l(1)P_l(1)P_l(-1) + pP_l(1)P_l(-1)P_l(1) + qP_l(-1)P_l(-1)P_l(1) + qP_l(-1)P_l(-1)P_l(1) + qP_l(-1)P_l(-1). \quad (2.29)$$

Como se consideram variáveis estocásticas com dois estados, tem-se que

$$P_l(1) + P_l(-1) = 1. \quad (2.30)$$

Inserindo esta relação na equação anterior, obtém-se

$$P_{l+1}(1) = pP_l^2(1) + 2pP_l^2(1)[1 - P_l(1)] + 2q[1 - P_l(1)]^2 P_l(1) + q[1 - P_l(1)]^2. \quad (2.31)$$

Depois de alguma manipulação algébrica, obtém-se a seguinte equação algébrica

$$P_{l+1}(1) = [1 + 2p - 4q]P_l^2(1) + 2(q - p)P_l^3(1) + q. \quad (2.32)$$

Substituindo $q = p - 1$ e organizando os termos, tem-se

$$P_{l+1}(1) = -3[1 - 2p]P_l^2(1) + 2(1 - 2p)P_l^3(1) + q. \quad (2.33)$$

Fazendo $m_l = P_l(1) - P_l(-1)$ pode-se reescrever $P_l(1) = (1 + m_l)/2$ e, então, substituindo na equação acima, e após algum desenvolvimento algébrico, chega-se à seguinte relação,

$$m_{l+1} = \frac{3}{2}\gamma m_l - \frac{\gamma}{2}m_l^3. \quad (2.34)$$

Adicionando em ambos lados $-m_l$, tem-se

$$m_{l+1} - m_l = -(1 - \frac{3}{2}\gamma)m_l - \frac{\gamma}{2}m_l^3, \quad (2.35)$$

que se escreve, no contínuo,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \frac{3}{2}\gamma)m - \frac{\gamma}{2}m^3. \quad (2.36)$$

Definindo $\varepsilon = (1 - \frac{3\gamma}{2})$, reescreve-se a equação acima,

$$\frac{dm}{dt} = -\varepsilon m - \frac{\gamma}{2}m^3. \quad (2.37)$$

Há duas soluções para esta equação, no caso em que $\varepsilon \neq 0$ e considerando que $\gamma > 0$ ou que $p > 0.5$. Ela pode ser feita de vários modos.

Fazendo $\frac{dm}{dt} = 0$, estado estacionário, obtém-se

$$0 = -m(\varepsilon + \frac{\gamma}{2}m^2). \quad (2.38)$$

E desta equação infere-se que

$$\begin{aligned} m_1 &= 0 \\ m_{2,3} &= \pm \sqrt{-\frac{2\varepsilon}{\gamma}}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

No caso em que $\varepsilon > 0$ ou $q > 1/6$, a solução é $m_1 = 0$. Isto é, correspondente ao estado paramagnético. No caso em que $\varepsilon < 0$ ou que $q < 1/6$ a solução é

$$m_* = \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}}, \quad (2.40)$$

portanto, $m_{2,3} = \pm m^*$. Estas duas soluções correspondem ao estado ferromagnético ou ordenado.

O outro modo de resolver essa equação é pela multiplicação em ambos os lados por m e por integração direta com o resultado de

$$m^2 = \frac{2\varepsilon m_o^2}{(m_o^2\gamma + 2\varepsilon)\exp(2\varepsilon t) - \gamma m_o^2}, \quad (2.41)$$

em que m_o é a condição inicial. A análise é semelhante àquela da teoria cinética de Landau¹⁰, em que se mostra a ocorrência de soluções distintas quando $t \rightarrow \infty$, dependendo

¹⁰(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001), pg.141 e pg.165.

do sinal do coeficiente do termo $-m$, ou seja, de $\varepsilon = (1 - \frac{3\gamma}{2})$. No primeiro caso, se $\varepsilon > 0$, ou $\frac{3\gamma}{2} < 1$, portanto, $p < 5/6$ ou ainda $q > 1/6$ então $m \rightarrow 0$. A esta condição está associado o estado desordenado ou paramagnético. Neste caso, a equação anterior pode ser reescrita como

$$m = A \exp[-(1 - \frac{3\gamma}{2})t], \quad (2.42)$$

em que A é uma constante. Essa equação descreve explicitamente o comportamento de $m \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. No segundo caso, se $\varepsilon < 0$, ou que $(1 - \frac{3\gamma}{2}) < 0$, ou seja, $p > 5/6$, quando $t \rightarrow \infty$, então pode-se ver das equações acima que $m \rightarrow \pm m^*$ em que

$$m^* = \sqrt{\frac{2|1 - \frac{3\gamma}{2}|}{\gamma}} = \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}}. \quad (2.43)$$

Resultado que, portanto, corresponde à fase ordenada ou ferromagnética. O valor crítico do parâmetro indutor da transição implicitamente dado acima é obtido fazendo-se

$$\varepsilon = 1 - \frac{3\gamma}{2} = 0. \quad (2.44)$$

Como $\gamma = 2p - 1$ chega-se, assim, ao resultado que $p_c = 0.8333$ ou $q_c = 0.1666$.

Desenvolvendo um pouco mais essa relação $m^* = \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}}$ para a fase ordenada, ela pode ser reescrita, então, de forma explícita como,

$$m^* = \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}} = \sqrt{\frac{2(1 - \frac{3\gamma}{2})}{\gamma}} = \sqrt{3\left(\frac{1 - 6q}{1 - 2q}\right)}. \quad (2.45)$$

Daqui segue-se imediatamente que $1 - 6q_c = 0$, portanto, que $q_c = 1/6 = 0.1666$ ou que $p_c = 1 - q_c = 0.8333$. Como nas proximidades do ponto crítico o comportamento do parâmetro ordem é descrito por uma lei de potência $m \sim (q - q_c)^\beta$, tem-se então, da comparação com a equação acima que o expoente crítico é dado por $\beta = 1/2$. Esse resultado coincide com o valor clássico do expoente crítico. Como trata-se de uma abordagem de campo médio o resultado era o esperado. Assim, da análise acima, quando $q > q_c$, o estado estacionário, $t \rightarrow \infty$, será desordenado, ou seja, $m = 0$ e m cai exponencialmente como

$$m = m_o \exp\left[-\left(1 - \frac{3\gamma}{2}\right)t\right], \quad (2.46)$$

portanto, com um tempo de relaxação,

$$\tau = \frac{1}{|(1 - \frac{3\gamma}{2})|} = \frac{1}{3|(q - q_c)|}, \quad (2.47)$$

comportando-se com $\tau \sim (|q - q_c|)^{-1}$. Enquanto para $q < q_c$, $q \rightarrow q_c$ e $t \rightarrow \infty$ o estado estacionário será ordenado, ou seja, $m \rightarrow \pm m^*$ com um decaimento na forma exponencial, que pode ser obtida fazendo-se

$$m^2 = \frac{-2\varepsilon m_o^2}{\gamma m_o^2 [1 - \frac{(m_o^2 \gamma + 2\varepsilon)}{\gamma m_o^2} \exp(-2|\varepsilon|t)]}, \quad (2.48)$$

com isto e que $1 - x = 1 - \frac{(m_o^2 \gamma + 2\varepsilon)}{\gamma m_o^2} \exp(-2|\varepsilon|t)$ em que x é muito pequeno, então, por meio da expansão de Taylor pode-se escrever

$$m = \pm \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}} \left(1 + \frac{x}{2}\right) = m^* \left(1 + \frac{x}{2}\right), \quad (2.49)$$

e, depois por substituição e alguma manipulação algébrica, tem-se o seguinte decaimento na forma exponencial para m ,

$$m = \pm m^* + C \exp(-6|q - q_c|t). \quad (2.50)$$

Assim, $\tau = \frac{1}{6|q - q_c|}$ ou que $\tau \sim |q - q_c|^{-1}$.

Esses dois valores da magnetização, $m_{2,3} = \pm m^*$, remetem ao fenômeno de transição de fase, de segunda ordem, que tem como mecanismo uma quebra espontânea de simetria. Essa transição de fase com quebra espontânea de simetria poderia ser mostrado por meio de um histograma da probabilidade de distribuição dos estados segundo a magnetização. Ele deve apresentar dois picos em torno de dois valores da magnetização do estado estacionário $\pm m^*$. Este tipo de transição de fase pode ser mostrada pelas aproximações de campo médio ¹¹ para o modelo de Ising na mecânica estatística de equilíbrio. Um ponto a ser notado aqui é que o valor crítico obtido, teoricamente, é de $q_c = 1/6 = 0.1666$, enquanto o valor crítico obtido pela simulação computacional é de $q_c = 0.0514$, como será mostrado pela abordagem computacional desenvolvida e analisada a seguir. Desta forma, esses valores parecem satisfazer as considerações de Stanley (Stanley, 1999) sobre a relação entre os valores obtidos pela aproximação de campo médio e os valores exatos.

2.4.7 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional, conduzida mediante essas regras, do modelo VMAJ2.1 com spin central, permite resolver os problemas mencionados acima. O primeiro deles é o de identificar o valor crítico do parâmetro indutor q_c , enquanto o segundo é o problema da natureza dessa transição de fase. A primeira etapa, pretende identificar o valor crítico do seu parâmetro indutor, q_c . Ela faz uso de um método que envolve a relação entre a quantidade magnetização, M_L , e o tamanho do sistema, L , indexado pelo parâmetro indutor da transição, q . Esta relação descreve o comportamento da magnetização como sendo independente do tamanho da rede para $q < q_c$, enquanto para $q > q_c$ a magnetização, dependente do tamanho do sistema, deve ir a zero para L crescendo para o infinito. A aplicação desse método é feita através da construção de um gráfico, que apresenta o resultado do comportamento da magnetização, M , com o inverso do comprimento. Esse método ajuda a obter o valor do ponto crítico como pode ser visto na sequência

¹¹(Dotsenko, 2001), pg.6 e 7. Dotsenko apresenta essa descrição de uma maneira clara e elegante.

Figura 2.6: M como função de $1/L$ para cada q .

Um segundo método, mais eficiente, é o método do cumulante de quarta ordem. Esse método permite identificar o ponto crítico como o ponto no qual as diversas curvas – classificadas pela associação com o tamanho L do sistema – da quantidade cumulante de quarta ordem como função do parâmetro indutor da transição interceptam-se em um único ponto. Assim, ele é especialmente adequado para calcular o valor crítico do parâmetro indutor. Os dados são obtidos por meio da simulação com o uso da seguinte fórmula para o cumulante de quarta ordem¹², dada como em 1.36 por $U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}$, em que $m = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \sigma_i$. Com essa relação e os dados obtidos pela simulação computacional pode-se montar o gráfico relacionando o cumulante de quarta ordem, U_L , com o valor do indutor da transição, q , para os diversos tamanhos da rede. Da intersecção dessas diversas funções $U_L(q)$ com o tamanho do sistema obtém-se o valor de $q_c = 0.0514$. Pode-se ainda usar o fato de que a intersecção deve ocorrer para $U^* = 0.61$, caso os modelos testados encontrem-se na classe de universalidade de Ising pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), uma vez que esse valor é um invariante para essa classe de universalidade como mostrou Binder¹³. No entanto, pode-se fazer essa avaliação sem pressupor esse resultado e então utilizá-lo para proporcionar evidências para tal resultado teórico. O gráfico seguinte mostra as intersecções e os valores mencionados.

Por outro lado, identifica-se a natureza da transição de fase com os próximos dois métodos, o método da curva da magnetização, M_L versus q , o parâmetro indutor da transição, para diferentes tamanhos, L , do sistema e também o método da curva da

¹² (Binder and Heermann, 1988) pg.46 e pg.107; (Landau, 2000), pg.16-19 e pg.78; (de Oliveira, 1996) pg.1322; (Plischke, 1994), pg.289; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312.

¹³ (Grinstein et al., 1985); (Binder and Young, 1986).

Figura 2.7: O método do cumulante $\rightarrow q_c = 0.0514$ para $U^* = 0.61$.

suscetibilidade, χ_L versus q . Esses dois métodos foram descritos e ilustrados no capítulo anterior, que pode-se resumir da seguinte forma. O método da curva da magnetização mostra um comportamento característico para o caso de uma transição de fase de segunda ordem. Essa relação gera o gráfico para magnetização relativamente aos diferentes tamanhos do sistema, M_L , como função do parâmetro indutor da transição, q . Esse gráfico mostra um comportamento padrão¹⁴ no que diz respeito à presença de uma transição de segunda ordem ou contínua, identificando um ponto crítico q_c , que divide o domínio em dois subdomínios: um subdomínio para $q < q_c$, em que a magnetização, M_L , não depende do tamanho, L , do sistema, e outro para $q > q_c$, em que para L crescendo a magnetização, M_L , tende a zero. Ele mostra, principalmente, que se trata de uma transição de fase contínua. Tal comportamento pode ser visto no gráfico seguinte,

¹⁴(Barkema and Newman, 1999), pg.83; (Landau, 2000) pg.14-19; (Binder, 1997), pg.532-525; Capítulo 1, Figura 1.1;

Figura 2.8: O método da magnetização, M , *versus* q para diversos L e a continuidade como característica.

O outro método de identificar a natureza de uma transição de fase de segunda ordem é o método da curva da suscetibilidade¹⁵. O comportamento dessa curva mostra um padrão característico para a transição de fase de segunda ordem ou contínua, que consiste na suscetibilidade, χ_L , apresentar um comportamento mostrando tendência para a divergência nas proximidades do ponto crítico, q_c , para tamanhos, L , crescentes do sistema como foi descrito no capítulo. Este comportamento pode ser observado na figura abaixo,

Figura 2.9: O método da suscetibilidade, χ_L , *versus* q e a divergência como característica.

A segunda etapa da estratégia consiste em determinar os valores dos expoentes críticos do modelo em questão. Essa etapa está mais diretamente relacionada com o objetivo de

¹⁵(Privman, 1998); (Binder and Heermann, 1988), pg.105-107; (Barkema and Newman, 1999); Capítulo 2, Figura 1.2.

identificar a classe de universalidade a que pertence esse modelo. Com os mesmos dados, mas, agora, utilizando os recursos do método de escala de tamanho finito obtêm-se os meios, que são as leis de potência das grandezas magnetização e suscetibilidade, para determinar os valores para os expoentes críticos¹⁶. Os expoentes críticos são parâmetros relacionados ao comportamento das quantidades termodinâmicas nas proximidades do ponto de transição de fase. Esse comportamento é descrito por leis de potência cujos expoentes são os expoentes críticos. O primeiro expoente a ser obtido é o β/ν . O expoente β aparece na lei de potência descrevendo o comportamento da magnetização nas proximidades do ponto crítico q_c . Esse expoente é obtido da equação 1.40, ou lei de potência, $M_L(q_c) \propto L^{-\beta/\nu}$ por meio de gráfico log-log, dos dados da simulação e de 1.37. Com os dados obtidos para cada rede L , constrói-se o gráfico $\ln M_L(q = q_c)$ *versus* $\ln L$, uma vez que se têm os valores da magnetização exatamente no valor crítico $q_c = 0.0514$ para cada L , em termos de $\ln L$. Na sequência, empregam-se os recursos da regressão linear cuja inclinação da reta é o valor da relação β/ν , como é facilmente visto ao tomar-se o logaritmo da expressão acima. O resultado desse processo é dado pelo gráfico abaixo

Figura 2.10: Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.122 \pm 0.003$.

Como visto, o valor obtido do expoente crítico é $\beta/\nu = 0.122 \pm 0.003$, que é muito próximo do valor do expoente crítico $\beta/\nu = 0.125$ do modelo de Ising. No entanto, se pelo uso da simulação computacional não se obtiver o exato valor do ponto crítico da transição de fase¹⁷, então, poderá ainda ser feito uso da técnica da interpolação para

¹⁶(Landau, 2000), (Binder and Heermann, 1988), (de Oliveira, 1996), pg.1322; (Stanley, 1999), (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312.

¹⁷Assume-se que se conhece a classe de universalidade do modelo. Mas, mesmo que isto não seja pressuposto, podem-se testar posteriormente esses valores dos expoentes críticos recorrendo-se à função

obtê-lo. Para isso, consideram-se os valores do parâmetro q , imediatamente em torno do valor crítico. Obtém-se o valor da magnetização, $M_L(q)$, e, então, pode-se construir o valor médio desses valores como uma primeira aproximação para q_c . Em seguida, pode-se simular novamente o modelo tendo como um dos seus dados esse valor, e, então, avaliar sua adequabilidade por meio dos métodos disponíveis e mencionados anteriormente. Uma ilustração deste procedimento é dada pelo gráfico a seguir,

Figura 2.11: Método de interpolação $\rightarrow q_c = 0.0514$.

Com os mesmos dados, mas, agora, estudando o comportamento da quantidade suscetibilidade com relação ao valor crítico q_c , o expoente crítico γ/ν é determinado a partir do gráfico log-log e da lei de potência descrita por 1.41, ou seja, $\chi_L(q_c) \propto L^{\gamma/\nu}$, que é obtida pelo método de escala de tamanho finito¹⁸ como dado pela relação 1.37. Seguindo os mesmos passos acima, constrói-se o gráfico log-log, $\ln \chi$ em termos de $\ln L$ e, então, procede-se a uma regressão linear cuja inclinação dá o valor da relação $\gamma/\nu = 1.742$. Como pode-se ver, pelo gráfico seguinte, o valor obtido por esse método é bastante próximo ao valor de $\gamma/\nu = 1.750$, que é o valor do expoente crítico para o modelo de Ising bidimensional:

colapso.

¹⁸(Binder, 1997), pg.522-525; (Stanley, 1999); (de Oliveira, 1996), pg. 1322; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

Figura 2.12: Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.742$.

Desta forma, com os recursos acima, os dados obtidos sobre os expoentes críticos, considerados como critério de classe de universalidade, indicam que o modelo VMAJ2.1 encontra-se na classe de universalidade do modelo de Ising. Com isso aumentam-se as evidências computacionais para o argumento teórico de Grinstein(Grinstein et al., 1985) de que modelos com simetria “up-down” estão na classe de universalidade do modelo de Ising.

O método de escala de tamanho finito fornece ainda outro procedimento para contribuir com novas evidências para identificar a classe de universalidade. Mas, neste caso, não é preciso do valor crítico, q_c . Pois, esse procedimento usa da relação entre a suscetibilidade, χ e o tamanho, L , do sistema, contudo, trabalha com o valor máximo da suscetibilidade (Binder, 1997) em lugar do valor da suscetibilidade no ponto crítico. Desta forma pelo uso do gráfico log-log, $\ln(\chi_{\max})$ versus $\ln(L)$, obtém-se também a relação acima entre os expoentes críticos. Essa relação é dada pelo gráfico seguinte e segue o método descrito anteriormente.

Figura 2.13: Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.737$ com os dados para $\chi_{\max}(L)$.

Com estes resultados pode-se classificar o modelo VMAJ2.1 como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Na terceira etapa pode-se tratar da segunda parte do problema da hipótese de escala, que é aquele da consistência e, portanto, de mais evidências de apoio aos valores críticos extraídos por meio dos métodos mencionados. Faz-se uso da segunda parte da hipótese de escala¹⁹, que afirma a possibilidade de se construir uma função universal para cada uma das quantidades magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem.

A forma gráfica dessa função universal apresenta-se como um colapso²⁰ de todos os dados para os diversos tamanhos, L , do sistema, desde que feita uma mudança de escala em cada uma das quantidades, magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem, e na noção reduzida do parâmetro indutor da transição $\varepsilon = (q - q_c)/q_c$. A função universal da magnetização²¹ descrita pela relação 1.37 ou, $M_L(q) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu} \varepsilon)$, gera o gráfico $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$, quando colocada em relação ao parâmetro indutor da transição reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$. Este proporciona o colapso de todos os dados correspondentes aos diversos tamanhos do sistema em uma única função, e, portanto, capaz de representar uma evidência da consistência dos valores obtidos para o ponto crítico e os expoentes críticos, como pode-se ver no gráfico seguinte.

¹⁹ (Stanley, 1999), pg.S358.

²⁰ (Stanley, 1999),pg. S358; (Landau, 2000), pg.77; (de Oliveira, 1996), pg. 1322; (Binder and Heermann, 1988), pg.108; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312.

²¹ (Stanley, 1999), pg. S358; (Landau, 2000) pg.77-78; (de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder and Heermann, 1988), pg.108; (Fisher, 1967), pg.709, (Widom, 1965); (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312.

Figura 2.14: A hipótese de escala para $\tilde{M}$ e $\tilde{\varepsilon}$.

Do mesmo modo que se constrói a função-escala para a magnetização, faz-se também para a suscetibilidade²² escalada, $\tilde{\chi}_L(q) = L^{-\gamma/\nu} \chi$, *versus*, $\tilde{\varepsilon}$ escalada, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$ dado pela equação 1.38 ou, $\chi_L(q) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \tilde{\varepsilon})$. O gráfico resultante dessa relação, para os dados obtidos anteriormente juntamente com o valor do ponto crítico e expoentes críticos, produz um colapso bastante adequado para todos os tamanhos do sistema

Figura 2.15: A hipótese de escala para $\tilde{\chi}_L(q)$ *versus* $\tilde{\varepsilon}$.

Finalmente, à semelhança do procedimento adotado, emprega-se uma função de escala que descreve o comportamento da quantidade cumulante de quarta ordem²³ como dada

²² (Binder, 1997); (Landau, 2000); (Landau, 1976)

²³ (Binder, 1997); (Landau, 2000); (Stanley, 1999), (Plischke, 1994), pg. 289; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

pela equação 1.39, ou de maneira explícita, $U_L = \tilde{U}(L^{1/\nu}\varepsilon)$.

O gráfico a ela associado, construído com os dados obtidos pela simulação computacional, e os expoentes críticos extraídos desses dados geram o seguinte colapso

Figura 2.16: A hipótese de escala para $\tilde{U}_L = U_L$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

O trabalho anterior feito para trazer evidências computacionais, com o cálculo dos expoentes críticos, quanto à hipótese dessa classe de modelo encontrar-se na classe de universalidade do modelo de Ising, refere-se apenas ao modelo VMAJ2.1 padrão ($\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5$) para as configurações geométricas (1100) e (0011). Contudo, pode-se construir um espectro contínuo de modelos gerados pela distribuição convexa ($\lambda_{1100}, \lambda_{0011}$), em que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$, dessas duas formas de ligação geométricas básicas (1100) e (0011). Todo esse espectro de modelos construídos pela combinação convexa tem a propriedade da simetria por inversão do spin, e, portanto, pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985) também estão na classe de universalidade de Ising. O resultado obtido da simulação computacional para a relação entre o valor crítico do parâmetro indutor da transição, q_c , e a densidade λ_{1100} ou λ_{0011} da configuração geométrica para todo um contínuo, gerado pela combinação convexa, de modelos VMAJ2.1 é ilustrado na sequência,

como

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (2.51)$$

Figura 2.17: Gráfico de q_c versus densidade λ_{1100} .

Pode-se observar que o gráfico tem a forma de uma curva geométrica côncava com simetria, um valor crítico, q_c , máximo para a densidade padrão ($\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5$) e valores críticos mínimos $q_c = 0$ para ($\lambda_{1100} = 0, \lambda_{0011} = 1$) e ($\lambda_{1100} = 1, \lambda_{0011} = 0$). Essa forma geométrica pode ser explicada como a mais adequada para dar conta de certos aspectos do modelo:

- a relação atinge o menor valor $q_c = 0.0$ para o caso em que ocorrem as formas puras de cada uma das ligações, ou seja, para ($\lambda_{1100} = 1, \lambda_{0011} = 0$) ou para ($\lambda_{1100} = 0, \lambda_{0011} = 1$).
- a relação atinge um valor crítico máximo em ($\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5$).
- há uma simetria entre os dois componentes, λ_{1100} e λ_{0011} .

No entanto, essas condições não excluem, entre três possíveis curvas, uma convexa, uma côncava e uma linha reta. Esse resultado é análogo àquele que pode ser obtido do modelo de uma liga formada de dois tipos de átomos A e B com N_A A -átomos e N_B B -átomos, portanto com densidades $\lambda_A = N_A/N$ e $\lambda_B = N_B/N$. Essa liga pode ser representada por meio do modelo de Ising, em que os átomos são distribuídos em duas subredes denominadas de redes a e b tais que o vizinho mais próximo de um átomo na rede a é sempre um átomo da rede b . Há quatro tipos de interações J_{AA} , J_{AB} , J_{BA} , e J_{BB} . No contexto dos fenômenos de transição de fase ordem-desordem tem-se que para

$T < T_c$, em que T_c é a temperatura de transição, os átomos são ordenados nas duas redes separadas a e b enquanto para $T > T_c$ os átomos estão estatisticamente distribuídos nas duas redes. A abordagem na aproximação de campo médio, na formulação de Bragg-Williams, ao problema de calcular a temperatura de transição de fase fornece uma relação entre a T_c e a densidade λ_A ou λ_B . Essa relação tem a mesma forma parabólica que aquela acima com uma relação do tipo $T_c \propto \lambda_A(\lambda_A - 1)^{24}$. O objetivo é fazer uma abordagem de pares ao modelo VMAJ2.1 e não do campo médio, como foi feito anteriormente para obter esse mesmo resultado do modelo da liga tipo AB , e explorar as analogias entre os dois modelos, um de equilíbrio e o outro fora de equilíbrio.

2.4.8 O modelo convexo VMAJ2.2 sem spin central: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.2 consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- de uma célula básica que é formada do spin central, $\sigma_{i,j}$, e dois vizinhos, $z = 2$, com as formas geométricas das ligações dadas por (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0101) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (0110) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$.
- de todas as suas combinações convexas entre aquelas formadas de $(\lambda_{1010}, \lambda_{0110}, \lambda_{1001}, \lambda_{0101})$.
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tais que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$.
- da pressuposição de que o modelo padrão dessa subclasse é formado de uma combinação convexa com a distribuição $(\lambda_{1001} = 0.25, \lambda_{0101} = 0.25, \lambda_{0110} = 0.25, \lambda_{1010} = 0.25)$.
- da dinâmica dada pela regra da maioria.
- da regra de desempate dada por $p = 0.5$ de aceitar ou não um ou o outro estado.

A dinâmica é expressa pela taxa de transição descrita abaixo por

$$w_{i,j}(\sigma) = \frac{\lambda_{1001}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i+1,j})] + \frac{\lambda_{0101}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i+1,j})] + \frac{\lambda_{1010}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1})] + \frac{\lambda_{0110}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j+1})]. \quad (2.52)$$

Essas formas de ligação geométrica são representadas no gráfico que se segue:

²⁴Ver o desenvolvimento e a solução deste modelo de Ising da liga com átomos tipos AB , que fornece a relação mencionada acima com o gráfico na forma parabólica em Greiner (Greiner et al., 1995) pg.453-456.

Figura 2.18: As quatro possíveis formas geométricas de ligações.

Também pode-se comprovar de maneira direta que essa regra satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal. Seguindo-se como consequência a propriedade de o modelo pertencer à classe de universalidade de Ising, como sustenta o argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985).

2.4.9 A abordagem teórica: aproximação de campo médio.

A abordagem teórica de campo médio é igual àquela para o modelo VMAJ2.1 sem spin central. Valem, portanto, os mesmos resultados, ou seja, que não há transição de fase de segunda ordem para qualquer valor de q , exceto para $q_c = 0$.

2.4.10 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional para esse modelo não revelou transição de fase exceto para $q_c = 0$ para quaisquer combinações convexas de seus componentes (λ_{1010} , λ_{0101} , λ_{0110} , λ_{1001}), confirmando os resultados da abordagem de campo médio.

2.4.11 O modelo convexo VMAJ2.2 com spin central: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.2 com spin central consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .

- de uma célula básica que é formada do spin central, $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, com as formas geométricas das ligações dadas por (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0101) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (0110) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$.
- de todas as suas combinações convexas formadas de $(\lambda_{1010}, \lambda_{0110}, \lambda_{1001}, \lambda_{0101})$.
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tais que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$.
- da pressuposição de que o modelo padrão dessa subclasse é formado de uma combinação convexa com a distribuição $(\lambda_{1001} = 0.25, \lambda_{0101} = 0.25, \lambda_{0110} = 0.25, \lambda_{1010} = 0.25)$.
- da dinâmica dada pela regra da maioria.
- de uma regra de desempate dada pela regra do spin central, que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p e o oposto com probabilidade $q = 1 - p$.

Neste modelo estas duas regras são expressas por meio da taxa de inversão. A regra do desempate do spin central está em substituição à regra do desempate $p = 0.5$. Considerando apenas o caso $P_{l+1}(1)$, essas regras que compõem a taxa de inversão são como se segue:

$$\begin{aligned}
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1001} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0101} \cdot w[(\sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j-1} = 1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1010}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j-1} = -1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0110}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1), & \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q.
\end{aligned} \tag{2.53}$$

No entanto, em ambos os casos, tanto no modelo VMAJ2.2 sem spin central quanto no modelo VMAJ2.2 com spin central, essas regras satisfazem à propriedade da simetria “up-down”. Para ver isso acima basta substituir σ por $-\sigma$ para todos os spins. Portanto, eles devem pertencer à classe de universalidade do modelo de Ising (Grinstein et al., 1985).

2.4.12 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica deste modelo, VMAJ2.2 com spin central, por meio do desenvolvimento da equação de evolução com as regras acima, na aproximação de campo médio e sob a hipótese da homogeneidade espacial, produz a mesma equação de evolução para a magnetização que o modelo VMAJ2.1 com spin central,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \frac{3}{2}\gamma)m - \frac{1}{2}\gamma m^3, \tag{2.54}$$

e, portanto, a mesma previsão para o valor crítico do parâmetro indutor, ou seja, $q_c = 1/6$. E, pelas mesmas razões, têm-se, na aproximação de campo médio com a hipótese da homogeneidade espacial, os mesmos resultados para todos os modelos VMAJ2.

2.4.13 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional deste modelo VMAJ2.2 com spin central padrão juntamente com os métodos e técnicas descritos acima revelam que o valor crítico da transição de fase é $q_c = 0.057$. Assim, esse modelo não é um candidato ao modelo mais simples, segundo o critério do menor valor crítico, no entanto, ele oferece a oportunidade

de observar alguns pontos interessantes. O primeiro ponto é que o valor crítico da transição, obtido por meio de simulação computacional, do modelo padrão VMAJ2.2, isto é, $\lambda_{1010} = \lambda_{0110} = \lambda_{0101} = \lambda_{1001} = 0.25$, é dado por $q_c = 0.057$, que é maior, portanto, do que aquele do modelo VMAJ2.1 que o inviabiliza como candidato ao modelo mais simples. Mas, como a diferença com $q_c = 0.0514$ do modelo VMAJ2.1 é da ordem de 0.006 e como tem-se utilizado de 2×10^6 passos de Monte Carlo ou loop para avaliar essas quantidades, não se pode afirmar de modo conclusivo essa hierarquia.

2.4.14 O modelo VMAJ2.2 puro: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.2 puro com spin central consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- de uma célula básica que é formada do spin central, $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, com apenas uma das formas geométricas das ligações dadas por (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0101) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (0110) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$. Esses modelos puros são construídos colocando-se, respectivamente, $\lambda_{1010} = 1$ e os demais valores para $\lambda_{i=2,3,4} = 0$; $\lambda_{1001} = 1$ e $\lambda_{i=1,3,4} = 0$; $\lambda_{0101} = 1$ e $\lambda_{i=1,2,4}$; λ_{0110} e $\lambda_{i=1,2,3} = 0$.
- da dinâmica dada pela regra da maioria.
- de uma regra de desempate dada pela regra do spin central que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p e o oposto com probabilidade $q = 1 - p$.

2.4.15 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica na aproximação de campo médio ao modelo VMAJ2 puro é a mesma do modelo VMAJ2.1 com spin central, produzindo as mesmas equações, portanto, idêntico comportamento.

2.4.16 A abordagem da simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Seguem-se, novamente, as três etapas para trabalhar com esses modelos. A primeira etapa procura determinar a natureza da transição de fase como uma transição de segunda ordem ou contínua e o valor do ponto crítico. A natureza da transição é dada por meio

da análise dos gráficos da magnetização e suscetibilidade *versus* o parâmetro indutor da transição de fase. Com o cumulante de quarta ordem dado pela equação²⁵

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (2.55)$$

e a simulação computacional obtém-se o valor $q_c = 0.0671$ para o ponto crítico. Isto pode ser visto no gráfico abaixo:

Figura 2.19: A forma geométrica de ligação é (1001) com $q_c = 0.0671$.

Esse valor quantitativo do ponto crítico é sustentado qualitativamente pela análise do comportamento de outras grandezas que descrevem o sistema. Esse mesmo comportamento serve para identificar a natureza da transição de fase. O comportamento característico da magnetização, M_L , *versus* q , para uma transição de fase de segunda ordem ou contínua mostra que para $q \geq q_c$, M_L vai continuamente a 0 para L crescente, enquanto para $q_c \geq q$ é independente do tamanho do sistema. Este comportamento é ilustrado no gráfico seguinte.

²⁵ (Binder and Heermann, 1988) pg.46 e pg.107; (Landau, 2000), pg. 16-19 e pg.78; (de Oliveira, 1996) pg.1322; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg.311-312.

Figura 2.20: O método da magnetização, M_L , versus q .

De modo semelhante temos outro comportamento característico para a quantidade suscetibilidade $\chi_L(q)$ quanto a uma transição de fase de segunda ordem ou contínua. A suscetibilidade, dependente do parâmetro indutor, $\chi(q)$, mostra, nesta transição de fase, um comportamento com tendência a divergência, para $q \rightarrow q_c$. Tal comportamento pode ser visto no gráfico seguinte,

Figura 2.21: Suscetibilidade, χ_L , versus q com a divergência característica.

Nesta etapa o objetivo é a identificação da classe de universalidade. Os elementos para esse fim são os expoentes críticos. Esses são obtidos, por sua vez, a partir das leis de potência. O primeiro destes expoentes críticos é o β/ν , que é dado pela relação entre os valores da magnetização no ponto crítico $M_L(q_c)$ e o tamanho do sistema, L , como fornecido pela lei de potência 1.40, ou $M_L(q = q_c) \propto L^{-\beta/\nu}$ proveniente da equação 1.37 dada no ponto crítico. Os dados da simulação, a lei de potência e a regressão linear dão o valor de $\beta/\nu = 0.1264 \pm 0.009$, que é bastante próximo ao do modelo de Ising dado por $\beta/\nu = 0.125$. Isto é ilustrado pelo gráfico seguinte:

Figura 2.22: O método de regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1264 \pm 0.009$

O outro expoente crítico é obtido com a utilização da lei de potência para a suscetibilidade 1.41 ou, de maneira explícita, $\chi_L(q = q_c) \propto L^{\gamma/\nu}$, sustentado pela relação de escala 1.38 no ponto crítico. Com o gráfico log-log, os dados da simulação, que são os valores da suscetibilidade calculada no ponto crítico, relativo ao tamanho L , e a regressão linear, o valor do expoente crítico é dado por $\gamma/\nu = 1.7036 \pm 0.0730$. Esse resultado segue-se abaixo.

Figura 2.23: Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7036 \pm 0.0730$.

Com o método da suscetibilidade máxima, que não usa o valor crítico q_c , e do método da regressão linear calcula-se o mesmo expoente crítico anterior, ou seja, $\gamma/\nu = 1.7343 \pm 0.0164$. Esse valor é bastante próximo ao valor exato do de Ising $\gamma/\nu = 1.750$. Esse resultado é ilustrado no gráfico abaixo.

Figura 2.24: O método de regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7343 \pm 0.0164$

Com esses dois valores para os expoentes críticos calculados anteriormente, γ/ν e β/ν , têm-se boas evidências de que tal modelo pertence à classe de universalidade de Ising.

Segue-se agora com a terceira etapa, na qual pode-se fazer uma avaliação da consistência dos dados, valor do ponto crítico, $q_c = 0.0671$, com a dos valores dos expoentes críticos medidos como $\gamma/\nu = 1.7343 \pm 0.0164$ e $\beta/\nu = 0.1264 \pm 0.009$. Nisto consiste a segunda parte da hipótese de escala. Para tal propósito faz-se uso dos recursos do método de escala finita, com a função escala, e se procede ao colapso dos dados. A função universal da magnetização 1.37 leva à grandeza escalada da magnetização, $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M(q)$, e à grandeza escalada $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. A relação entre essas duas grandezas é dada pelo gráfico abaixo, que ilustra o significado da consistência dos valores mencionados acima:

Figura 2.25: A hipótese de escala para $\tilde{M}$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

Essa consistência é reiterada pelo colapso dos dados fornecido pela função de escala para a suscetibilidade 1.38, que leva à grandeza suscetibilidade escalada, $\tilde{\chi} = L^{\gamma/\nu} \chi$, e ao parâmetro indutor reduzido escalada, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Essa relação permite construir o gráfico abaixo que, mostra a consistência dos dados obtidos pela simulação computacional:

Figura 2.26: A hipótese de escala para $\tilde{\chi}_L$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

Completando o uso dos recursos do método de escala finita para estabelecer a consistência dos valores mencionados, faz-se uso da função escala para o cumulante dada por 1.39, que permite construir a grandeza cumulante escalada, $\tilde{U} = U$ e a grandeza $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico abaixo obtido por meio destas duas grandezas escaladas mostra o colapso dos dados da simulação para os diversos tamanhos do sistema:

Figura 2.27: A hipótese de escala para $\tilde{U}_L$ versus $\tilde{\varepsilon}$

2.4.17 Os modelos VMAJ2.2.1 e VMAJ2.2 com spin central: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.2.1 e VMAJ2.2 com spin central consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- da célula básica que é formada do spin central, $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, com as formas geométricas das ligações dadas por (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0101) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (0110) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$.
- de todas as combinações convexas do par (1010) e (0101) , ou do par (1001) e (0110) para formar o modelo denominado de VMAJ2.2.1.
- de todas as combinações convexas do par (1010) e (1001) , ou do par de ligações não simétricas para formar o modelo VMAJ2.2.2.
- da pressuposição de que o modelo padrão do modelo VMAJ2.2.1 é formado da combinação convexa com a distribuição $(\lambda_{1010} = 0.5, \lambda_{0101} = 0.5)$ e que o modelo padrão do modelo VMAJ2.2.2 é formado da combinação convexa com a distribuição $(\lambda_{1010} = 0.5, \lambda_{1001} = 0.5)$.
- da dinâmica dada pela regra da maioria.
- da regra de desempate dada pela regra do spin central que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p e o oposto com probabilidade $q = 1 - p$.

O modelo VMAJ2.2.1 é mostrado na figura seguinte,

Figura 2.28: As duas formas geométricas e simétricas de ligações (1010) e (0101).

A taxa de inversão desse modelo, para o caso da regra de desempate $p = 0.5$, portanto sem spin central, é descrita por

$$w_{i,j}(\sigma) = \frac{\lambda_{0101}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i+1,j})] + \frac{\lambda_{1010}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1})]. \quad (2.56)$$

O modelo VMAJ2.2.2. é mostrado no gráfico abaixo:

Figura 2.29: As duas formas geométricas com simetria no eixo x, de ligações (1010) e (1001).

A taxa de transição descrevendo o conjunto formado pelo par acima, mas sem spin central, portanto com a regra de desempate $p = 0.5$, é dada por

$$w_{i,j}(\sigma) = \frac{\lambda_{1001}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j+1})] + \frac{\lambda_{1010}}{2} [1 - \gamma \sigma_{i,j} S(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1})]. \quad (2.57)$$

A simulação computacional é feita para o modelo VMAJ2.2.2 com spin central, portanto, com a substituição da regra de desempate anterior pela regra de desempate do spin central.

2.4.18 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem de campo médio para a equação de evolução tanto do modelo VMAJ2.2.1 quanto do modelo VMAJ2.2.2 com spin central fornece os mesmos resultados que a abordagem para o modelo VMAJ2.1, pois essa abordagem não considera a topologia das ligações. Desta forma tem-se previsto teoricamente uma transição de fase de segunda ordem e um valor crítico de $q_c = 0.1666$.

2.4.19 A abordagem computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional é feita para o modelo VMAJ2.2.1 padrão, com spin central. Ela permite produzir uma relação entre o valor do parâmetro indutor crítico, q_c , e a densidade dos pares, λ_{1010} , cuja forma é, como mostrada pela figura abaixo, simétrica e convexa:

Figura 2.30: Gráfico da relação q_c versus λ_{1001} .

A simulação computacional do modelo VMAJ2.2.2 padrão leva a concluir, pelos meios já mencionados, que se trata de uma transição de segunda ordem e os valores críticos q_c para diversos valores das densidades. Isso permite novamente obter-se uma relação entre uma das densidades destas ligações geométricas, no caso λ_{1010} , e os valores críticos do parâmetro indutor q_c a ela associado. Com esses valores pode-se construir um gráfico do valor crítico do parâmetro indutor de transição, q_c , versus a densidade da composição dos pares, λ_{1010} , compondo a rede. Esse gráfico revela também ter a forma de uma curva convexa e simétrica, mas, agora, com um menor valor crítico de transição, o valor dado por $q_c = 0.062$, que ocorre para o modelo padrão, ou seja, para a densidade $\lambda_{1010} = \lambda_{1001} =$

0.50. Enquanto o maior valor crítico, $q_c = 0.0671$, ocorre para a densidade $\lambda_{1010} = 1.0$, e, por conseguinte, $\lambda_{1001} = 0.0$, ou para o caso em que $\lambda_{1010} = 0.0$ e, portanto, $\lambda_{1001} = 1.0$, que são os mesmos do modelo anterior:

Figura 2.31: Gráfico para a relação entre q_c versus λ_{1010} .

Como já foi visto o valor crítico da transição associado à distribuição padrão, modelo VMAJ2.2 padrão, $\lambda = 0.25$, é $q_c = 0.058 \pm 0.003$, o menor valor para essa combinação convexa de gráficos envolvendo as duas formas de ligação. Como também já foi visto, o maior valor crítico ocorre para a situação de uma rede com apenas uma destas formas de ligação, ou seja, para o caso puro, VMAJ2.2 puro, outrora mencionado, ou λ_{1010} ou λ_{1001} , que é obtido no caso em que $\lambda_{1010} = 0$. Nesse caso o valor crítico obtido tem o valor numérico de $q_c = 0.0671$. O modelo VMAJ2.2.1 com a distribuição $\lambda_{1010} = \lambda_{1001} = 0.50$ apresenta o mesmo valor do ponto crítico que o modelo padrão VMAJ2.2, ($\lambda_{1001} = 0.25, \lambda_{1010} = 0.25, \lambda_{0110} = 0.25, \lambda_{1010} = 0.25$), que é o menor valor crítico para essa classe de modelos VMAJ2.2, ou seja $q_c = 0.058$. É recomendável, contudo, procurar refinar mais as simulações computacionais para estabelecer com maior precisão as evidências de diferenças entre esses valores máximo e mínimo dos modelos comparados. Nesta etapa da simulação não houve ainda bastante rigor quanto à questão dos erros, mas obtiveram-se valores, do ponto crítico, com precisão suficiente para se fazerem conjecturas sobre a curva e as simetrias envolvidas, e, portanto, avançou-se nesses modelos e seus valores como hipóteses a serem mais bem testadas no futuro. A simulação computacional para o conjunto destes dois modelos VMAJ2.2.1 e VMAJ2.2.2, revelou, como esperado, uma curva simétrica convexa, com o menor valor crítico de transição em $q_c = 0.058$ ocorrendo para $\lambda_{1001} = \lambda_{0110} = 0.50$. O valor crítico máximo se dá, também, para os casos puros tanto em $\lambda_{1001} = 1.0$ e $\lambda_{0110} = 0.00$, quanto em $\lambda_{1001} = 0.00$ e $\lambda_{0110} = 1.00$, e tem o valor

numérico de $q_c = 0.0671$. A simulação computacional mostra que o conjunto construído de formas de ligação com as propriedades de simetria tem valores menores para os valores críticos do parâmetro indutor, como os mostrados pelos gráficos anteriores. Para efeito de comparação, podem-se observar os dois gráficos superpostos na figura abaixo:

Figura 2.32: Gráfico da superposição da relação q_c versus λ_{1001} para os dois conjuntos.

Esse mesmo tipo de análise computacional e teórica pode ser repetido para os outros tipos de formas geométricas de ligação envolvidos no modelo VMAJ2.2. Deste conjunto de possibilidades de combinações convexas formadas de dois pares, portanto de seis possibilidades, e da análise identificam-se, como mencionado, dois grandes conjuntos: o conjunto formado dos pares VMAJ2.2(1010) e VMAJ2.2(0101) e VMAJ2.2(1001) e VMAJ2.2(0110) e o conjunto dos pares VMAJ2.2(1010) e VMAJ2.2(1001), VMAJ2.2(1010) e VMAJ2.2(0110), VMAJ2.2(1001) e VMAJ2.2(0101) e, finalmente, VMAJ2.2(0101) e VMAJ2.2(0110).

2.4.20 O modelo convexo VMAJ2.3: descrição do modelo.

O modelo VMAJ2.3 com spin central consiste

- de uma rede de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- da célula básica formada do spin central $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, com as formas geométricas das ligações dadas por (1001) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (1010) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0101) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$, (0110) ou $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (1100) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$, (0011) ou $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$.
- de todas as combinações convexas dessas ligações (1010) (1001), (0110), (0101), (1100), (0011).

- da pressuposição de que o modelo padrão do modelo VMAJ2.3 é formado da combinação convexa com a distribuição ($\lambda_{1010} = 1/6$, $\lambda_{0101} = 1/6$, $\lambda_{0110} = 1/6$, $\lambda_{1001} = 1/6$, $\lambda_{1100} = 1/6$, $\lambda_{0011} = 1/6$).
- da dinâmica dada pela regra da maioria.
- da regra do desempate dada que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p .

O modelo é constituído pelas seguintes formas geométricas ilustradas abaixo:

Figura 2.33: As seis possíveis formas geométricas de ligações.

2.4.21 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica de campo médio aqui é a mesma do modelo VMAJ2.1 com as mesmas equações, e, portanto, com idêntico comportamento.

2.4.22 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional e os métodos descritos anteriormente do modelo padrão fornecem o valor crítico de $q_c = 0.054$ com erro de ± 0.003 . Esse valor é inferior a $q_c = 0.058 \pm 0.001$ do modelo padrão de VMAJ2.2, mas superior ao valor crítico, $q_c = 0.051$, do modelo padrão de VMAJ2.1. Neste modelo VMAJ2.3 do qual VMAJ2.3 padrão é um submodelo as combinações convexas originais, considerando as anteriores, reduzem-se àquelas do tipo (0011) e (1010) com $\lambda_{0011} + \lambda_{1010} = 1$, como mostra a figura seguinte:

Figura 2.34: As ligações (0011) e (1010).

Como o valor crítico da transição de fase para o modelo puro, $\lambda_{0011} = 1$, formado apenas da ligação geométrica 0011 é $q_c = 0.000$; enquanto, para o modelo puro, $\lambda_{1010} = 1$, formado apenas da ligação geométrica 1010, esse valor é de $q_c = 0.0671$, o modelo formado pela combinação convexa dessas duas ligações deve gerar uma linha crítica, q_c *versus* λ_{1010} , entre esses dois valores extremos. Pode-se observar na figura abaixo essa linha crítica

Figura 2.35: q_c *versus* λ_{1010} .

No entanto, como a classe VMAJ2.3 contém as duas classes anteriores VMAJ2.1 e VMAJ2.2, ela expressa o conjunto inteiro da classe de modelos VMAJ2. Desta forma, é interessante nesta etapa proceder a uma ilustração e comparação geral de todas as relações características entre o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase, q_c , e as densidades, λ 's, dos diversos tipos de configurações geométricas envolvidas, ainda

que se considerem casos de apenas dois componentes de configurações geométricas, os quais também já foram ilustrados e tratados isoladamente nas seções e figuras anteriores. A superposição de todos os gráficos pode ser apreciada no gráfico abaixo e proporcionar uma comparação entre seus valores,

Figura 2.36: Superposição das relações entre q_c e as densidades λ 's.

Capítulo 3

O MODELO DO VOTANTE MAJORITÁRIO E O MODELO MAIS SIMPLES.

3.1 Introdução.

O primeiro objetivo deste capítulo é um desdobramento do anterior, portanto, resolver o problema de identificar e classificar os modelos do votante majoritário. Neste capítulo o foco é sobre os modelos VMAJ3, que pode apresentar peculiaridade de não precisar de uma regra de desempate, VMAJ4 e o modelo VMAJ5. O segundo objetivo é o de resolver o problema de encontrar uma relação entre o valor crítico do parâmetro indutor da transição, q_c , e o número de coordenação, z , para esses modelos do votante majoritário. O terceiro objetivo é o de identificar, com o critério do menor valor crítico, o que seria o modelo mais simples dessa classe de modelos do votante considerando tanto os modelos do capítulo anterior quanto os deste. O quarto objetivo é o de estudar algumas propriedades da classe de universalidade do votante majoritário, em particular, a propriedade da dimensionalidade do sistema. E, finalmente, o quinto objetivo é o de realizar a abordagem “quenched” para um particular modelo do votante majoritário e estabelecer uma comparação com a abordagem “annealed” para o mesmo modelo. Com respeito aos três primeiros problemas a abordagem se desenvolve em duas etapas. A primeira etapa trata de modelos homogêneos do votante. Isto significa que se considera apenas modelos que consistem de combinações convexas de modelos com o mesmo número de coordenação z . Na segunda etapa, abordam-se modelos heterogêneos, portanto, formados da combinação de modelos com números diferentes de coordenação.

3.2 O modelo convexo VMAJ3: descrição do modelo.

Nesta primeira etapa aborda-se o modelo convexo VMAJ3, que consiste de combinações convexas entre formas geométricas de ligações com o mesmo número, z , de coordenação. O modelo VMAJ3 é constituído:

- de uma rede L por L com N spins descritos pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e três vizinhos, $z = 3$, mais próximos dos quatro vizinhos mais próximos. Esses vizinhos podem formar quatro possíveis ligações geométricas específicas, a saber: (1110) representada pela trinca $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1})$, (0111) associada com $(\sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$, (1011) associada com $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$ e, finalmente, (1101) com a trinca $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j+1})$.
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1110}, \lambda_{0111}, \lambda_{1011}, \lambda_{1101})$ tais que $\lambda_{1110} + \lambda_{0111} + \lambda_{1011} + \lambda_{1101} = 1$.
- do modelo padrão. Modelo formado da combinação convexa com $(\lambda_{1110} = 0.25, \lambda_{0111} = 0.25, \lambda_{1011} = 0.25, \lambda_{1101} = 0.25)$.
- da dinâmica dada pela regra da maioria sem regra de desempate, pois considera-se que todos os spins têm o mesmo peso.
- da dinâmica dada pela regra da maioria com regras de desempate, formando outros novos modelos.

A representação gráfica dos componentes desse modelo é descrita pela figura seguinte:

Figura 3.1: As quatro possíveis formas geométricas de ligações

Objetivo aqui é tratar do modelo padrão do modelo VMAJ3 sem regra de desempate. A taxa de inversão é descrita pelas regras abaixo, contudo, explicitadas para dois desses componentes da combinação convexa do tipo simétrico (0111) e (1011). Elas são como se seguem:

$$\begin{aligned}
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= 1, \quad \sigma_{i,j-1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= 1, \quad \sigma_{i,j-1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= 1, \quad \sigma_{i,j-1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= 1, \quad \sigma_{i,j-1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= -1, \quad \sigma_{i,j-1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= -1, \quad \sigma_{i,j-1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= -1, \quad \sigma_{i,j-1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p \\
 \lambda_{1110}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} &= -1, \quad \sigma_{i,j-1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= 1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= 1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = q \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= 1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= 1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= -1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= -1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= -1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] = p \\
 \lambda_{1011}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i,j-1} &= -1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

O teste em que essa regra satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal do spin σ_i é direto e obtém-se pela substituição do sinal dos σ_i 's e pela avaliação da

invariância da regra. Daqui segue-se o resultado teórico de que este modelo encontra-se, pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), na classe de universalidade de Ising. Por meio da solução dos problemas acima mencionados procura-se sustentar essa aplicação do argumento de Grinstein ao modelo padrão VMAJ3.

3.2.1 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio

A análise teórica dos modelos acima é feita a partir do desenvolvimento da equação de evolução como foi feito para os dois modelos anteriores VMAJ2.1 e VMAJ2.2. Essa equação como já foi descrita anteriormente é como se segue,

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'). \quad (3.2)$$

Fazendo uso da taxa de transição acima a equação da evolução pode-se escrever, para o caso de $P_{l+1}(1)$, da seguinte maneira:

$$P_{l+1}(1) = pP_l(111) + 3pP_l(11-1) + 3qP_l(-1-11) + qP_l(-1-1-1). \quad (3.3)$$

Fazendo uso da aproximação de campo médio, a qual consiste em assumir que

$$P(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) = P(\sigma_1)P(\sigma_2)P(\sigma_3), \quad (3.4)$$

e substituindo acima, obtém-se

$$P_{l+1}(1) = pP_l^3(1) + 3pP_l^2(1)P_l(-1) + 3qP_l^2(-1)P_l(1) + qP_l^3(-1). \quad (3.5)$$

Com a relação estabelecendo que $P_l(1) + P_l(-1) = 1$, pela sua substituição na equação acima e depois de algum “algebrismo” chega-se à seguinte equação:

$$P_{l+1} = 2(q-p)P_l^3(1) + 3(p-q)P_l^2(1) + q. \quad (3.6)$$

Novamente, substituindo $P_l = (1 + m_l)/2$ nesta última equação, obtém-se com alguma manipulação algébrica

$$m_{l+1} = \frac{3}{2}\gamma m_l - \frac{1}{2}\gamma m_l^3. \quad (3.7)$$

Adicionando-se de ambos os lados $-m_l$ tem-se, então,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \frac{3}{2}\gamma)m - \frac{\gamma}{2}m^3. \quad (3.8)$$

Fazendo $\varepsilon = (1 - \frac{3}{2}\gamma)$ a equação acima pode ser reescrita como

$$\frac{dm}{dt} = -\varepsilon m - \frac{\gamma}{2}m^3. \quad (3.9)$$

Essas são as mesmas equações dos modelos VMAJ2.1 e VMAJ2.2 com spin central. Há duas soluções para esta equação, no caso em que $\varepsilon \neq 0$ e em que $\gamma > 0$ ou que $p > 0.5$. Ela pode ser feita de vários modos.

Por exemplo, fazendo $\frac{dm}{dt} = 0$, estado estacionário, obtém-se

$$0 = -m(\varepsilon + \frac{\gamma}{2}m^2). \quad (3.10)$$

E desta equação infere-se que

$$\begin{aligned} m_1 &= 0, \\ m_{2,3} &= \pm \sqrt{-\frac{2\varepsilon}{\gamma}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

No caso em que $\varepsilon > 0$ ou $q > 1/6$, a solução é $m_1 = 0$ que corresponde ao estado paramagnético. No caso em que $\varepsilon < 0$ ou que $q < 1/6$ a solução é

$$m_* = \sqrt{\frac{2|\varepsilon|}{\gamma}}. \quad (3.12)$$

Portanto, $m_{2,3} = \pm m^*$. Estas duas soluções correspondem ao estado ferromagnético ou ordenado.

Esses dois valores da magnetização, $m_{2,3} = \pm m^*$, remetem ao fenômeno de transição de fase, contínua, que tem como mecanismo uma quebra espontânea de simetria. Tal tipo de transição de fase pode ser mostrado pela abordagem de aproximação de campo médio ao modelo de Ising na Mecânica Estatística de Equilíbrio. Pode ser mencionado aqui que o valor crítico teórico obtido é de $q_c = 1/6 = 0.1666$, enquanto o valor crítico obtido pela simulação computacional é de $q_c = 0.0754$, como é mostrado pela experiência computacional desenvolvida e analisada a seguir. Desta forma, esses valores parecem satisfazer as considerações de Stanley (Stanley, 1999) sobre a relação entre os valores obtidos pela aproximação de campo médio e os valores exatos. Com estas duas últimas equações fica bastante evidente que, do ponto de vista da aproximação de campo médio, os modelos VMAJ2.1 e VMAJ2.2 com spin central e VMAJ3.1 sem spin central têm o mesmo comportamento dinâmico. Eles são descritos pelo mesmo desenvolvimento teórico da equação de evolução. Esse desenvolvimento teórico, na aproximação de campo médio, não consegue discriminar esses modelos, fornecendo a mesma previsão de valores críticos para os parâmetros indutores da transição.

3.2.2 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Na primeira etapa desta seção identifica-se a natureza da transição de fase e o valor crítico para o modelo acima. Assim por meio do cumulante de quarta ordem, U_L , dado

pela relação 1.36 obtém-se o valor crítico do parâmetro indutor, enquanto por meio do comportamento da magnetização e da suscetibilidade identifica-se a natureza da transição de fase: transição de fase de segunda ordem ou contínua. A simulação computacional do modelo VMAJ3 padrão sem spin central revelou, pelo uso do método do cumulante, que o valor do ponto crítico é dado por $q_c = 0.0754$, como é ilustrado pelo gráfico abaixo:

Figura 3.2: O método do cumulante e o valor crítico $q_c = 0.0754$

Na mesma linha, podem-se averiguar os resultados do gráfico $M_L(q)$ *versus* q para diversos tamanhos, L , do sistema; por exemplo, pode-se constatar que abaixo do ponto crítico, $q < q_c$ a magnetização, M_L , é independente do tamanho, L , do sistema, enquanto acima do ponto crítico, $q > q_c$, a magnetização vai a zero para o tamanho, L , crescente. Este comportamento revela tratar-se de uma transição de fase de segunda ordem ou contínua, como pode-se ver pelo gráfico seguinte:

Figura 3.3: Gráfico da magnetização M_L versus q .

Do mesmo modo, com o uso do método da suscetibilidade pode-se avaliar ainda mais uma vez a natureza dessa transição de fase e, aproximadamente, o valor crítico do parâmetro indutor da transição. Esse método é do comportamento da suscetibilidade. Esse comportamento é descrito pela relação entre a suscetibilidade, χ_L , versus q . O comportamento da suscetibilidade mostra, em uma transição de fase de segunda contínua, uma tendência para a divergência, $\chi_L(q) \rightarrow \infty$ quando $q \rightarrow q_c$. Esse comportamento pode ser visto abaixo:

Figura 3.4: Gráfico da suscetibilidade χ_L versus q .

Uma vez identificada a natureza da transição de fase como uma transição de segunda

ordem ou contínua e o valor crítico dessa transição obtendo-se o valor de $q_c = 0.0754$, a próxima etapa refere-se à classe de universalidade. Para isso, procura-se obter os expoentes críticos deste modelo. Pelo argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985), esse modelo pertence à classe de universalidade de Ising. Desta forma, ao mesmo tempo que se identificam os expoentes críticos encontra-se suporte ou evidências para esse argumento. Essa etapa é a primeira etapa da aplicação da hipótese de escala mencionada anteriormente. O primeiro destes expoentes críticos é β/ν , obtido da lei de potência 1.40 para o comportamento da magnetização no ponto crítico, que por sua vez é obtido por meio do método de escala de tamanho finito como dado por 1.37. Essa lei de potência é dada por

$$M(q = q_c) \propto L^{-\beta/\nu}. \quad (3.13)$$

Assim, por meio de um gráfico log-log, dos dados da simulação e da regressão linear pode-se obter o valor do expoente. Esse processo pode ser visto no gráfico seguinte:

Figura 3.5: Gráfico de $\ln M$ versus $\ln L$ e regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1235 \pm 0.0058$

Como mostra o gráfico, o valor é $\beta/\nu = 0.1235 \pm 0.0058$ para esse expoente crítico, portanto, muito próximo do de Ising, que tem valor exato de $\beta/\nu = 0.125$. O segundo desses expoentes críticos é γ/ν , é obtido por meio da lei de potência¹ como dada pela relação 1.41, que é extraída da equação 1.38 no ponto crítico. Com o uso da relação log-log, dos dados da simulação computacional e da regressão linear pode-se construir o gráfico seguinte:

¹(Landau, 2000), pg.78; (Binder, 1997), pg.523-525; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312; (de Oliveira, 1996), pg.1322.

Figura 3.6: Gráfico de $\ln \chi$ versus $\ln L$ e regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.7430 \pm 0.0161$.

Deste gráfico obtém-se o valor de $\gamma/\nu = 1.7430 \pm 0.0161$, portanto, também muito próximo do de Ising, que tem valor exato de $\gamma/\nu = 1.75$. Com esses dois resultados identifica-se o modelo de Ising como a classe de universalidade deste modelo.

Na terceira etapa desta abordagem pode-se avaliar a consistência deste conjunto de valores críticos formado do valor crítico do parâmetro indutor da transição $q_c = 0.0754$ e dos expoentes críticos $\beta/\nu = 0.1235$ e $\gamma/\nu = 1.743$, por meio da hipótese de escala para as grandezas relevantes do sistema, magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem. A função de escala da magnetização 1.37 leva à construção da grandeza magnetização escalada $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$ e à grandeza parâmetro indutor reduzido e escalado $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico na sequência ilustra esse colapso.

Figura 3.7: A hipótese de escala para $\tilde{M}_L(q)$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

Tal colapso pode ser visto também para a grandeza suscetibilidade. A função universal para a suscetibilidade 1.38 leva à construção da grandeza suscetibilidade escalada $\tilde{\chi} = L^{\gamma/\nu}\chi$ e ao parâmetro indutor reduzido escalonado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico dessa relação para os dados da simulação pode ser visto abaixo como um bom ajuste.

Figura 3.8: A hipótese de escala para $\chi_L(q)$ *versus* $\tilde{\varepsilon}$

Finalmente, pode-se ver também o colapso, para a grandeza cumulante de quarta ordem. A função universal 1.39 permite construir a grandeza reescalada $\tilde{U} = U$ e a grandeza parâmetro indutor reduzido escalonado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico dessa relação para os dados da simulação pode ser visto abaixo como um bom ajuste.

Figura 3.9: A hipótese de escala para U *versus* $\tilde{\varepsilon}$.

3.3 Os modelos VMAJ3.1 e VMAJ3.2: descrição dos modelos.

Os modelos VMAJ3.1 e VMAJ3.2 consistem:

- de uma rede L por L com N spins descritos pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e três vizinhos, $z = 3$, mais próximos dos quatro vizinhos mais próximos. Esses vizinhos podem formar duas possíveis combinações convexas com os dois componentes, VMAJ3.1 (λ_{0111} , λ_{1110}) e VMAJ3.2, ou seja, (λ_{0111} , λ_{1011}).
- do modelo padrão para ambos os modelos. Modelo VMAJ3.1 formado de uma combinação convexa com a distribuição ($\lambda_{1110} = 0.5$, $\lambda_{0111} = 0.5$) ou modelo VMAJ3.2 formado de ($\lambda_{0111} = 0.5$, $\lambda_{1011} = 0.5$).
- da dinâmica dada pela regra da maioria sem regra de desempate, pois considera-se que todos os spins têm o mesmo peso.
- da dinâmica dada pela regra da maioria com regras de desempate. Pode-se por meio dessa regra construir outros tipos de modelos uma vez que poder-se-ia pensar que aqui não há regra de desempate. Contudo, isso é uma questão de interpretação.

O modelo VMAJ3.1, simétrico, é ilustrado abaixo:

Figura 3.10: Conjunto (1011) e (0111).

A outra combinação convexa, modelo VMAJ3.2, assimétrico, (0111) e (1101), com $\lambda_{0111} + \lambda_{1101}$ é ilustrada em seguida:

Figura 3.11: Conjunto (1101) e (0111).

3.3.1 A abordagem teórica: aproximação de campo médio.

Ambos os modelos têm a propriedade da simetria por inversão de spins e, portanto, são candidatos à classe de universalidade de Ising. Obtêm-se os mesmos resultados teóricos do modelo VMAJ3 padrão.

3.3.2 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados

Na seqüência fez-se a simulação computacional da composição convexa com dois submodelos do modelo VMAJ3, VMAJ3.1 e VMAJ3.2 reobtendo uma relação q_c e λ_{0111} para cada um dos modelos. Essas relações são ilustradas no gráfico seguinte composto das superposições

Os dois submodelos do modelo VMAJ3, VMAJ3.1 e VMAJ3.2, apresentam uma curva convexa entre q_c e λ_{0111} . Outro submodelo desses dois modelos VMAJ3.1 e VMAJ3.2 é o modelo VMAJ3 puro em que $\lambda' s = 0$. Com o uso do método do cumulante 1.36, obteve-se $q_c = 0.0800$, como mostrado em seguida:

3.4 O modelo VMAJ4 com spin central.

3.4.1 Descrição do modelo.

O modelo VMAJ4 consiste:

- de uma rede quadrada L por L com N spins em que cada spin é descrito por uma variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .

Figura 3.12: Superposição dos gráficos q_c versus λ_{0111}

- de um spin central $\sigma_{i,j}$ com quatro vizinhos mais próximos. Assim há uma única forma de ligação geométrica entre estes quatro vizinhos, (1111) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$.
- da dinâmica dada pela regra majoritária que define o estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo um spin central, a partir dos estados de seus quatro vizinhos mais próximos.
- da regra de desempate. Duas possibilidades:

uma regra do desempate tal que se escolhe um dos estados com probabilidade $p = 0.5$. Este é o modelo VMAJ4 sem spin central.

a outra regra de desempate é aquela denominada de regra do spin e que consiste em escolher o estado atual $\sigma_{i,j}$ em situação de desempate. Este é o modelo VMAJ4 com spin central.

A representação gráfica deste modelo é como se segue:

Com a regra de desempate que consiste em escolher um estado com probabilidade $p = 0.5$, define-se o modelo VMAJ4 sem spin central. Esse modelo tem simetria por inversão de spin ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$), que o coloca na classe de universalidade de Ising (Grinstein et al., 1985). Pode-se notar, pela análise das taxas de transição abaixo, que para qualquer outro valor de p semelhante àquele da presença de um campo externo no modelo de Ising, o modelo não possui a simetria por inversão. A taxa de inversão desse modelo, com regra desempate dado por $p = 0.5$ para qualquer dos estados, é descrita por

$$w_{i,j}(\sigma_{i,j}) = \frac{1}{2}[1 - \gamma\sigma_{i,j}S(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1})], \quad (3.14)$$

Figura 3.13: Método do cumulante $\rightarrow q_c = 0.0800$.

Figura 3.14: O conjunto (1111), um spin central e quatro vizinhos.

com a função sinal S definida anteriormente.

Esse modelo foi estudado exhaustivamente e foi o ponto de partida para toda a presente análise, conduzida neste capítulo, por Oliveira (de Oliveira, 1992), que obteve para o valor crítico $q_c = 0.075 \pm 0.001$ e os expoentes críticos $\gamma/\nu = 1.73 \pm 0.05$, com o uso do valor crítico, e $\gamma/\nu = 1.70 + 0.08$, sem o uso do valor crítico, enquanto obteve para o expoente crítico $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.005$, chegando, portanto, aos mesmos expoentes críticos do modelo de Ising. Recorrendo-se à regra da maioria com a regra do desempate do spin central, define-se o modelo VMAJ4 com spin central que é o foco de interesse desta seção. A regra da maioria, com a regra do desempate, é descrita para o caso de P_{l+1} , é explicitamente dada por

$$\begin{aligned}
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Pode-se ver que essa taxa de inversão satisfaz a propriedade da simetria de inversão. Isto pode ser comprovado substituindo acima os σ'_s por $-\sigma'_s$. Segue-se desta propriedade que o modelo se encontra na classe de universalidade do modelo de Ising, como diz o argumento de Grinstein (Grinstein et al., 1985).

3.4.2 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

Como a equação de evolução escreve-se

$$P_{l+1} = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'), \tag{3.16}$$

então, com essa taxa de transição, pode-se reescrevê-la, para o modelo VMAJ4 com spin central, na seguinte forma:

$$P_{l+1} = pP_l(1111) + 4pP_l(111-1) + 6pP_l(11-1-11) \\ + 6qP_l(11-1-1-1) + 4qP_l(1-1-1-1) + qP_l(-1-1-1-1). \quad (3.17)$$

Adotando-se a hipótese da aproximação de campo médio, ou seja, que $P(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\sigma_5) = P(\sigma_1)P(\sigma_2)P(\sigma_3)P(\sigma_4)P(\sigma_5)$ e substituindo acima, a equação pode ser escrita como

$$P_{l+1}(1) = pP_l^4(1) + 4pP_l^3(1)P_l(-1) + 6pP_l^3(1)P_l^2(1) \\ + 6qP_l^2(1)P_l^3(-1) + 4qP_l^3(-1)P_l + qP_l^4(-1). \quad (3.18)$$

Fazendo-se uso da propriedade $P_l(1) + P_l(-1) = 1$, a qual decorre do fato de que a variável estocástica descrevendo o estado de cada sítio tem apenas dois estados, $\sigma_i = \pm 1$, reescreve-se a equação anterior como

$$P_{l+1}(1) = pP_l^4(1) + 4pP_l^3(1)(1 - P_l(1)) + 6pP_l^3(1)(1 - P_l(1))^2 \\ + 6qP_l^2(1)(1 - P_l(1))^3 + 4q(1 - P_l(1))^3P_l(1) + q(1 - P_l(1))^4. \quad (3.19)$$

Depois de algum cálculo algébrico a equação acima reduz-se a

$$P_{l+1} = 6(p - q)P_l^5(1) + 15(q - p)P_l^4(1) + 10(p - q)P_l^3(1) + q. \quad (3.20)$$

Com a definição dada por $m_l = P_l(+1) - P_l(-1)$, pode-se obter que $P_l(1) = (1 + m_l)/2$ e, portanto, substituindo na equação acima, ela pode ser reescrita em termos de m_l como

$$P_{l+1}(1) = \frac{6}{32}(p - q)(1 + m_l)^5 + \frac{15}{16}(q - p)(1 + m_l)^4 + \frac{10}{8}(p - q)(1 + m_l)^3 + q. \quad (3.21)$$

Com o desenvolvimento algébrico chega-se a

$$P_{l+1} = \left[\frac{8}{16}(p - q) + q \right] + \left[\frac{75}{16}(p - q) - \frac{60}{16}(p - q) \right]m \\ + \left[\frac{100}{32}(p - q) + \frac{120}{32}(q - p) \right]m^3 + \left[\frac{3}{16}(p - q) \right]m^5. \quad (3.22)$$

Fazendo-se outras substituições, como por exemplo, $P_{l+1}(1) = (m_{l+1} + 1)/2$, e simplificações obtém-se

$$m_{l+1} = \frac{15}{8}(2p - 1)m - \frac{20}{16}(2p - 1)m^3 + \frac{3}{8}(2p - 1)m^5. \quad (3.23)$$

Somando-se em ambos os lados $-m_l$, lembrando que $\gamma = 2p - 1$, rearranjando-se os termos e passando-se para o contínuo, obtém-se

$$\frac{dm}{dt} = -\left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right)m - \frac{5}{4}\gamma m^3 + \frac{3}{8}\gamma m^5. \quad (3.24)$$

Há duas soluções para esta equação, fazendo-se $\varepsilon = 1 - \frac{15}{8}\gamma$ no caso em que $\varepsilon \neq 0$ e considerando-se que $\gamma > 0$ ou ainda que $p > 0.5$. Essas soluções podem ser obtidas de vários modos. Um destes modos considera o estado estacionário, portanto, $\frac{dm}{dt} = 0$. Assim tem-se que

$$0 = -\varepsilon m - \frac{5}{4}\gamma m^3 + \frac{3}{8}\gamma m^5. \quad (3.25)$$

Como nas proximidades do ponto crítico m é pequeno, pode-se desconsiderar m^5 , portanto,

$$0 = -\varepsilon m - \frac{5}{4}\gamma m^3, \quad (3.26)$$

que pode ser reescrita como

$$0 = -m\left(\varepsilon + \frac{5}{4}\gamma m^2\right). \quad (3.27)$$

Desta equação infere-se que

$$\begin{aligned} m_1 &= 0 \\ m_{2,3} &= \pm \sqrt{-\frac{4\varepsilon}{5\gamma}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

No caso em que $\varepsilon > 0$, portanto, $p < 23/30$ ou ainda que $q > 7/30 = 0.2333$, a solução é $m_1 = 0$.

No caso em que $\varepsilon < 0$ ou que $q < 7/30$ a solução é

$$m^* = \sqrt{\frac{4|\varepsilon|}{5\gamma}}, \quad (3.29)$$

portanto, $m_{2,3} = \pm m^*$. Estas duas soluções correspondem ao estado ferromagnético ou ordenado. Segue-se que o parâmetro de transição de fase, q_c , é dado por $q_c = 7/30 = 0.2333$.

Outro modo de ver as soluções para a equação acima é reescrevendo-a sem o termo em m^5 , na forma,

$$\frac{dm}{dt} = -\varepsilon m - \frac{5\gamma}{4}m^3. \quad (3.30)$$

Multiplicando-se ambos os lados por m , e lembrando que tem-se a equação

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} m^2 = -\varepsilon m^2 - \frac{5\gamma}{4} m^4. \quad (3.31)$$

Essa equação diferencial é uma equação ordinária de primeira ordem não homogênea do tipo

$$\frac{dx}{dt} + p(x)x = f(x), \quad (3.32)$$

que pode ser resolvida de maneira exata por integração direta. Assumindo-se que $m(0) = m_o$ é a condição inicial e usando-se o método do fator de integração, segue-se a solução

$$m^2 = \frac{2m_o^2\varepsilon}{\left(\frac{5}{2}m_o^2\gamma + 2\varepsilon\right) \exp(2\varepsilon t) - \frac{5}{2}\gamma m_o^2}. \quad (3.33)$$

Há duas soluções distintas para $t \rightarrow \infty$, ou seja, para o estado estacionário. Essas soluções dependem do sinal de $\varepsilon = \left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right)$. A primeira solução refere-se à fase desordenada e pode ser obtida como o primeiro caso da análise. Se $\varepsilon = \left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right) > 0$, portanto, $p < 23/30$ ou $q > 7/30 = 0.2333$, então $m \rightarrow 0$, ao qual está associado o estado desordenado ou paramagnético, para usar a terminologia do magnetismo. E o comportamento de m para esse caso é facilmente descrito, a partir da equação anterior 3.33, pois ela conduz a

$$m = D \exp(-\varepsilon t) = D \exp \left[- \left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right) t \right], \quad (3.34)$$

em que D é uma constante. Esta equação mostra explicitamente que $m \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty$ na fase paramagnética. Daqui segue-se que o tempo de relaxação é dado por $\tau = \left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right)^{-1}$, portanto, $\tau \sim |q - q_c|^{-1}$. A segunda solução refere-se à fase ordenada e pode ser obtida como o segundo caso da análise. Se $\varepsilon = \left(1 - \frac{15}{8}\gamma\right) < 0$, portanto, $p > 23/30$ ou $q < 7/30 = 0.2333$, então $m \rightarrow \pm m^*$ em que, da equação acima,

$$m^* = \sqrt{-\frac{4|\varepsilon|}{5\gamma}}. \quad (3.35)$$

Desta forma, o parâmetro de ordem m^* se comporta, nas proximidades do ponto crítico, como

$$m^* \sim |\varepsilon|^{1/2}, \quad (3.36)$$

portanto, apresentando o valor $\beta = 1/2$ para o expoente crítico da lei de potência do parâmetro de ordem. Esse parâmetro de ordem m decai para o seu valor estacionário $\pm m^*$ de forma exponencial. Esse decaimento na forma exponencial pode ser obtido por meio de uma expansão em Taylor para a 3.33, como foi feito no estudo do modelo VMAJ2.1, e, deste, obtém-se

$$m = \pm m^* + C \exp \left(-\frac{15}{4} |q - q_c| t \right), \quad (3.37)$$

a qual mostra o decaimento exponencial para $m \rightarrow m^*$. Deste decaimento pode-se inferir que o tempo de relaxação é dado por $\tau = \frac{4}{15 |q - q_c|}$. Com este comportamento tem-se que em ambos os casos o tempo de relaxação se comporta como $\tau \sim |q - q_c|^{-1}$. Pode-se também estudar agora o comportamento do parâmetro de ordem m , deste modelo, em torno do ponto crítico $p_c = 1 - q_c$ a partir da equação

$$m^* = \sqrt{\frac{4|\varepsilon|}{5\gamma}}. \quad (3.38)$$

Desta equação segue-se, então, que

$$m^* \sim \sqrt{-\frac{3}{2} \left(\frac{q_c - q}{q - \frac{1}{2}} \right)} \sim |q - q_c|^{1/2}, \quad (3.39)$$

com o valor desse expoente crítico o valor clássico $\beta = 1/2$.

3.4.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Na seqüência, procede-se à simulação computacional desse modelo VMAJ4 com spin central. O objetivo é tanto de obter o valor crítico do parâmetro indutor e a natureza da transição de fase quanto o comportamento do sistema em torno deste valor crítico. Este último objetivo consiste em calcular os expoentes críticos. Isso é feito por meio dos recursos dos métodos de escala de tamanho finito e regressão linear. Com esses expoentes procede-se à identificação da classe de universalidade do modelo. A primeira etapa, que consiste em obter tanto a natureza da transição de fase quanto a magnitude do valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase, q_c , começa pela rotina do uso do método do cumulante de quarta ordem dada por 1.36. Como visto anteriormente esse método ajuda a identificar o valor do ponto crítico pelo ponto de intersecção das diversas curvas, indexadas por L , definidas pela relação entre o cumulante de quarta ordem, $U_L(q)$, *versus* q , para os diversos tamanhos, L , do sistema. Com esse método e a simulação computacional, obtém-se o valor critico para esse modelo, que é dado por $q_c = 0.0849$, como ilustrado pelo gráfico seguinte.

Figura 3.15: Gráfico de $U(L)$ *versus* q

Nesta etapa da identificação da natureza da transição recorre-se novamente ao comportamento da magnetização do pela relação entre $M_L(q)$ *versus* q para diversos tamanhos, L , do sistema. O gráfico seguinte mostra tratar-se de uma transição contínua.

Figura 3.16: Gráfico da magnetização M_L versus q .

A tendência à divergência do comportamento da suscetibilidade, χ_L versus q , produz outra evidência da natureza contínua da transição. Isto pode ser visualizado na figura seguinte

Figura 3.17: Gráfico da suscetibilidade χ_L versus q .

Uma vez definida a natureza da transição e calculado o seu valor crítico, a próxima etapa é o cálculo dos expoentes críticos para resolver o problema da identificação da classe de universalidade deste modelo. Os expoentes críticos são obtidos a partir da lei de potências descrevendo o comportamento de algumas das quantidades relevantes do sistema. Desta lei de potência, do gráfico log-log, dos dados da simulação $M_L(q = q_c)$,

e da regressão linear obtém-se para a relação entre os expoentes críticos, o valor $\beta/\nu = 0.123 \pm 0.0025$, como pode-se ver no gráfico representativo desse processo:

Figura 3.18: Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.123 \pm 0.0025$

O outro expoente é obtido como a relação entre os expoentes críticos $\gamma/\nu = 1.732 \pm 0.014$ calculada com o valor máximo da suscetibilidade, $\chi_{\max}(q)$, para cada tamanho, L , do sistema, como mostra o gráfico abaixo:

Figura 3.19: Gráfico do máximo da suscetibilidade, $\chi_{\max}$, *versus* L .

Com esses valores, para os expoentes críticos, fica identificado o modelo de Ising como a classe de universalidade. Concluída essa etapa, a próxima refere-se à segunda parte da hipótese de escala que consiste em uma espécie de teste de consistência para os valores críticos obtidos acima. Pela hipótese de escala podem-se construir funções de escalas para as quantidades relevantes, magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem, que mostram ser invariantes ao tamanho L do sistema. Combinando-se essas funções com os valores críticos, o valor da transição de fase, $q_c = 0.0849$, dos expoentes críticos, $\gamma/\nu = 1.732 \pm 0.014$, $\beta/\nu = 0.123 \pm 0.0025$ para os tamanhos do sistema $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$ e $L = 40$, nas três relações abaixo, envolvendo a magnetização a suscetibilidade e o cumulante de quarta ordem, pode-se testar a consistência desses valores críticos. Isso ocorre porque o método da escala de tamanho finito² mostra que o comportamento da magnetização reescalada, $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$, em torno do ponto crítico, relativamente ao do parâmetro indutor reduzido reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$, é invariante ao tamanho do sistema. Com os dados provenientes da simulação computacional e das relações acima, pode-se construir o gráfico abaixo, que é a ilustração da hipótese do colapso para a quantidade magnetização.

Figura 3.20: A hipótese de escala para a relação $\tilde{M}$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

Tal resultado revela um apoio à consistência e adequação para o conjunto dos valores críticos. Do mesmo modo para o caso da suscetibilidade, em que o método de escala de tamanho finito descreve que o comportamento da suscetibilidade reescalada, $\tilde{\chi}_L = L^{\gamma/\nu} \chi$, em torno do ponto crítico, relativamente ao parâmetro indutor reduzido reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$, é invariante ao tamanho do sistema. Dessa relação tem-se o gráfico do

²(Binder, 1997),pg.523; (Landau, 2000), pg.77-78; (Stanley, 1999), pg.S360; (Widom, 1965), pg.3899-3901; (Fisher, 1967), pg.709; (de Oliveira, 1996), pg. 1322; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

colapso abaixo:

Figura 3.21: A hipótese de escala para a relação χ_L versus $\tilde{\varepsilon}$

Ainda uma nova evidência da consistência do conjunto dos valores críticos das quantidades relevantes do sistema estudado é dada pelo uso do cumulante de quarta ordem reescalado, $\tilde{U} = U$, relativamente ao parâmetro indutor reduzido reescalado $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Essa relação é obtida de 1.39. Com os dados da simulação e da relação acima constrói-se o gráfico abaixo:

Figura 3.22: A hipótese de escala para a relação $\tilde{U}$ versus $\tilde{\varepsilon}$.

Todos esses três últimos gráficos parecem corroborar a consistência dos valores críticos obtidos.

3.5 Os outros modelos homogêneos VMAJ_x.

Nesta seção o objetivo consiste em obter os valores críticos, q_c , para o modelo do votante majoritário, mas agora para outros valores do número de coordenação z , a saber: cinco vizinhos mais próximos, seis, sete e oito vizinhos e assim sucessivamente. No entanto, para os números de coordenação entre $z = 5$ e $z = 8$, têm-se agora, como referência, os quatro vizinhos mais próximos e os seguintes quatro vizinhos mais próximos. Estes últimos, denominados de segundos vizinhos mais próximos, são os quatro spins nos cantos do quadrado formado com os quatro primeiros vizinhos mais próximos. Repetir-se-á, agora, com esses segundos vizinhos, a mesma regra de formação de vizinhanças, aplicada para os primeiros mais próximos. No entanto, exceto por essa diferença, não se introduz outra distinção entre esses vizinhos. É possível haver outras regras de composição de vizinhanças, entre elas, uma regra por meio da qual pode-se introduzir uma competição entre as duas camadas. Desta maneira, forma-se um modelo um pouco mais complexo. Há ainda outras alternativas de construção de modelos, considerando-se noções diferentes de vizinhança. Ficando com a regra estabelecida inicialmente, de não fazer diferenças entre as camadas de vizinhos mais próximos, o modelo com spin central e cinco vizinhos mais próximos é formado considerando-se os quatro mais próximos como fixos mais um vizinho dos quatro seguintes mais próximos. Têm-se assim quatro possíveis formas geométricas de interação com cinco vizinhos mais próximos, como é mostrado pelo gráfico abaixo:

Figura 3.23: As quatro formas geométricas possíveis com cinco vizinhos.

Isso ocorre, assim, sucessivamente, para os modelos de seis, sete e oito vizinhos. Para

os demais modelos com nove, dez, onze e doze vizinhos, os primeiros oito vizinhos são aqueles do modelo de oito vizinhos e é escolhido para completar o modelo de nove vizinhos um vizinho entre os quatro seguintes mais próximos aos oito vizinhos já considerados. Tendo definido o modo de construir os diversos modelos para o número de coordenação $z > 4$ pode-se construir, com os resultados da simulação computacional para todos esses modelos, a relação procurada entre o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase, q_c , e o valor no número de coordenação, z . Essa relação é dada pelo gráfico, do tipo logaritmo, como visto abaixo:

Figura 3.24: Relação entre q_c e z para modelos com spin central.

Outro modo de ver isso e ainda também entender qual o intervalo de variação para o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase q_c com o número de coordenação crescente é o gráfico seguinte. Esse gráfico mostra os resultados da simulação computacional para a relação entre a magnetização, M , para um determinado tamanho do sistema, e o número de coordenação, z . Pode-se mostrar por meio da simulação computacional que para um número cada vez maior de vizinhos, z , o valor numérico do parâmetro indutor $q_c \rightarrow 0.5$. O que pode ser visto no gráfico seguinte. Como mencionado, pode-se identificar o intervalo de valores numéricos para o valor crítico. Ele encontra-se entre $q_c = 0.00$ e $q_c = 0.5$. Esse último valor pode ser obtido de um modelo que consiste em um spin central, para o qual os vizinhos mais próximos são todos os spins da rede. Esse modelo, pela sua descrição, coincide com o tratamento de campo médio para essa classe de modelos. Portanto, tem-se um *spectrum* de valores críticos, q_c , que vai desde aquele associado com o modelo formado de spin central com um único spin como vizinho mais próximo, com valor do parâmetro indutor crítico $q_c = 0.00$, até aquele do modelo formado de um spin central com todos os vizinhos da rede considerados como os mais próximos que forneceria o valor

MODELO VMAJ – SPIN CENTRAL

Figura 3.25: Relação entre magnetização, M , *versus* q para diversos z .

crítico de $q_c = 0.5$. O gráfico seguinte, relacionando a magnetização para cada número de coordenação, z , e o parâmetro indutor, q , mostra que, na aproximação de campo médio, $q_c \rightarrow 0.5$, em que cada spin interage com todos os demais spins da rede, a curva é uma reta que tangencia todas as demais curvas para cada z :

3.6 Os modelos heterogêneos: a relação entre q_c e ρ_z .

Nesta seção considera-se a construção de modelos do votante majoritário formados da combinação convexa de modelos com diferentes números, z , de coordenação, pois, um dos problemas que pode ser colocado no contexto da relação acima entre o valor crítico do parâmetro indutor q_c e o número de vizinhos ou de coordenação z , visualizada pelo gráfico anterior, que tem sido feito para z número inteiro, é aquele da possibilidade de tornar o gráfico contínuo, portanto, considerar o número de coordenação, z , como pertencente ao conjunto dos reais em lugar do conjunto dos inteiros positivos. Por exemplo, entre um e dois vizinhos, dois e três vizinhos, três e quatro vizinhos, e assim sucessivamente. Neste caso, estar-se-ia fazendo, talvez, o que os matemáticos poderiam chamar de compactamento do intervalo, entre os números inteiros de vizinhos. Uma das razões para a construção de um gráfico contínuo é o fato de corresponder a uma etapa na estratégia de encontrar uma solução para o problema de qual é o modelo mais simples do votante majoritário. Os modelos heterogêneos são construídos a partir da combinação convexa entre modelos com número, z , de coordenações diferentes. Para expressar esse tipo de combinação convexa como distinto da combinação convexa feita anteriormente, introduz-

se um novo parâmetro: densidade ρ_z para a mistura de modelos formados de spins com diferentes números de coordenação z . Esse parâmetro, ρ , se diferencia do parâmetro densidade λ aplicado para combinação convexa entre modelos formados de spins central com o mesmo número, z , de coordenação. Diferenciar entre esses parâmetros é importante para evitar confusão. Como há uma relação entre os valores críticos da transição de fase, q_c , e o número de coordenação, z , então seria oportuno dispor de alguma lei relacionando esses valores e com isto revelar uma certa regularidade cujo comportamento possa ser estudado, quando os modelos com números de coordenação, z , tendem para o modelo formado de um spin central com um único spin como vizinho, $z = 1$.

A existência deste tipo de combinação convexa é importante para estudar o comportamento de $q_c \rightarrow 0$. Para resolver essa nova questão considera-se, primeiro, o problema intermediário de compactar o intervalo entre modelos com números de coordenação vizinhos, por exemplo, $z = 2$ e $z = 3$. Esse problema pode ser resolvido com a idéia de se construírem modelos convexos do votante majoritário em redes L por L , consistindo de misturas de modelos com spin central e um spin como vizinho mais próximo, VMAJ1, e modelos, por exemplo, com spin central com dois spins como vizinhos, VMAJ2, e todas as outras possíveis combinações. Este é um outro método de construir convexidades ou redes mistas. Com esse método não se constituem mais apenas redes de spins com um único vizinho escolhido dentre os quatro primeiros vizinhos, mas, redes generalizadas, compostas parcialmente (percentagem ρ_{1v}) do spin central com um único vizinho, escolhido entre os quatro mais próximos, VMAJ1, e compostas parcialmente (percentagem ρ_{2v}) de spin central com dois vizinhos escolhidos entre os quatro mais próximos, VMAJ2, parcialmente (percentagem ρ_{3v}) de spin central com três vizinhos escolhidos dentre os quatro mais próximos, VMAJ3, e por fim parcialmente (percentagem ρ_{4v}) de spin central com quatro vizinhos escolhidos dentre os quatro mais próximos, VMAJ4, de modo que $\rho_{1v} + \rho_{2v} + \rho_{3v} + \rho_{4v} = 1$ em que $0 \leq \rho_i \leq 1$, para $i = 1, 2, 3, 4$. Isso pode ser generalizado para incluir os seguintes segundos vizinhos mais próximos. Com esse método da convexidade pode-se construir, então, todo um conjunto de novos modelos, por exemplo, modelos formados de apenas um vizinho com ρ_{1v} e aqueles formados de apenas dois vizinhos ρ_{2v} tais que $\rho_{1v} + \rho_{2v} = 1$.

Esse método de construir redes mistas ajuda a resolver alguns problemas, entre eles: (1) que alguns desses modelos podem desempenhar um papel importante: os mais simples; (2) entender as condições segundo as quais o modelo convexo – e, portanto, sua simulação – formado quase todo do modelo VMAJ1 com $\rho_{1v} = 0.99$ de participação e do modelo VMAJ2.1 com apenas $\rho_{2v} = 0.01$ deve apresentar um mesmo valor do parâmetro indutor da transição de fase, q_c , para as redes de diferentes tamanhos, $L = 10$, $L = 20$, $L = 40$; (3) que essas condições acima mostram que, por exemplo, para a rede de $L = 10$ é preciso ter 99 spins com um único vizinho e apenas 1 spin com dois vizinhos mais próximos;

enquanto para a rede de $L = 20$, é preciso ter 396 spins com um único spin como vizinho e quatro spins com dois spins como vizinhos mais próximos e assim sucessivamente para se poder falar do valor crítico de transição de fase; (4) aquele problema de apresentar um valor variável para o parâmetro indutor q_c se as condições forem o mesmo número de spins, por exemplo, do modelo VMAJ1, para todas as redes, como 99 spins com um único vizinho e um spin com dois vizinhos para $L = 10$, e, então, 399 spins com um único vizinho e um spin com dois vizinhos mais próximos para $L = 20$, e assim sucessivamente. Neste caso, exprime-se esse fato, considerando que a densidade, ρ_{1v} ou ρ_{2v} da rede varia. Pois para $L = 10$,

$$\rho = \frac{1}{100}, \quad (3.40)$$

enquanto para $L = 20$, a densidade, no caso de um único spin central com dois vizinhos mais próximos, ρ_{2v} de VMAJ2, seria dada por

$$\rho = \frac{1}{400}, \quad (3.41)$$

e, no caso de $L = 40$ ocorreria, por fim, a densidade dada por

$$\rho = \frac{1}{1600}. \quad (3.42)$$

Desta forma, pode-se observar, acerca dos dados da simulação computacional, que a diferença entre eles advém do fato de que, no primeiro caso, a densidade ρ é fixa para todos os tamanhos L em que a densidade é determinada pelo tamanho da primeira rede da série de redes, por exemplo, $\rho = 0.01$, o que significa $1/100 = 4/400 = 16/1600$, enquanto no segundo caso, a densidade varia com o tamanho da rede uma vez que se admite, por exemplo, haver um único spin com dois vizinhos para qualquer tamanho da rede. Na seqüência deste raciocínio, a densidade constante parece ser, entre diferentes tamanhos de rede, um fator de estabilidade ou invariância para o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase. Mas isso parece ser exatamente o que se deveria esperar. Pois é o que afirma a definição de transição de fase, entendida como um ponto não-analítico. Ela é definida no limite termodinâmico. A definição de transição de fase requer o limite termodinâmico em que se afirma que o número, N , de spins cresce para o infinito do mesmo modo que o tamanho $V(L^3)$ da rede; no entanto, $\rho = N/V$ deve ser mantido constante. Os dados da simulação parecem ser eloqüentes sobre este aspecto. A densidade constante neste caso nada mais é do que a regra da distribuição convexa de spins para a construção da rede; (5) Por fim, o método de construir redes mistas ajuda a resolver o problema de encontrar uma regularidade entre o valor crítico da transição de fase, q_c , e a densidade dos spins centrais, ρ_z . Esta regularidade auxiliará na resolução do problema de se encontrar o modelo mais simples do modelo do votante majoritário. Um dos modelos possíveis de se construir é aquele formado da composição VMAJ2.1 e VMAJ1. Seja ρ_{1v} a densidade

do modelo VMAJ1 e ρ_{2v} a densidade do spin central com dois vizinhos, VMAJ2.1 com spin central. Como se trata de uma combinação convexa, $\rho_{1v} + \rho_{2v} = 1$. Para o modelo VMAJ2.1 admite-se o modelo padrão, portanto, formado de $(\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5)$. Considera-se esta última composição do modelo VMAJ2.1 fixa. Mas ρ_{2v} ou ρ_{1v} variáveis. Para $\rho_{1v} = 0$ tem-se o modelo padrão para VMAJ2.1, com o valor crítico de $q_c = 0.052$ para $\rho_{0v} = 1$, tem-se o modelo VMAJ1 com o valor crítico de $q_c = 0.0$. O objetivo são os valores críticos intermediários de q_c para os modelos com composições variáveis destes dois modelos VMAJ1 e VMAJ2.1 padrão. A simulação computacional do modelo VMAJ2.1-VMAJ1 produziu dados ilustrados pelo gráfico abaixo, correspondente à relação entre os valores críticos q_c e a densidade ρ_{1v} com os valores extremos acima mencionados:

Figura 3.26: Relação entre q_c e a densidade ρ_{1v} .

As evidências da simulação computacional parecem, nas condições de erro consideradas, indicar que essa relação entre q_c e a densidade ρ é uma relação linear. Assume-se aqui, então, com o suporte destas evidências, que essa relação entre q_c e ρ é uma relação linear. Deve-se lembrar que se mantém fixa a composição do modelo VMAJ2.1, ou seja, $(\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5)$ e que ele tem associado o valor crítico $q_c = 0.052$. O modelo mais simples relacionado a esta composição, o modelo padrão VMAJ2.1-VMAJ1, como se vê abaixo, seria o que possui a composição heterogênea de $\rho_{v1} = 0.99$ e $\rho_{v2} = 0.01$. Da hipótese da relação linear encontrada, segue-se que o valor crítico correspondente a esse modelo, provisório, mais simples, deveria ser, por extrapolação, $q_c = 0.00052$. No entanto, depois deve-se manipular um outro parâmetro que é a densidade λ , e, então, inferir, dentro desta última classe, qual é o modelo mais simples.

3.7 O problema do modelo mais simples.

Foi observado anteriormente que é possível construir, por meio do método da convexidade, um conjunto muito grande de modelos. Assim, é natural continuar a perguntar qual, dentre estes, se candidata como o *modelo mais simples*. Esse modelo, pelo menos do ponto vista teórico, é importante, como menciona Yeomans, para identificar a classe de universalidade à qual pertence e estudar as propriedades dos fenômenos críticos. Como Yeomans (Yeomans, 1994) afirma:

Universality classes are often labelled by the simplest model system belonging to them.³.

Não se pretende discutir o que significa o modelo mais simples, mas adotar o critério de que este é identificado pelo menor valor crítico. Não é claro se apenas então pode-se colocar questões sobre a classe de universalidade.

3.7.1 O modelo convexo VMAJ2.1-VMAJ1.

Para resolver esse problema é necessário tratar da relação entre q_c e dois parâmetros: a densidade ρ_z e a densidade λ . O problema do modelo mais simples é formulado inicialmente pela análise da relação entre q_c e mudanças no parâmetro ρ . Esse parâmetro define a densidade da combinação convexa do modelo VMAJ2.1 padrão com spin central com o modelo VMAJ1. Pode-se dizer que ela expressa a diluição de formas geométricas de ligações do modelo VMAJ2.1 padrão com spin central em uma rede com formas geométricas de ligações do modelo VMAJ1 ilustrado pelo gráfico abaixo

Figura 3.27: As ligações geométricas (1100), (0011) e (0100).

³(Yeomans, 1994), pg. 29

O modelo VMAJ2.1-VMAJ1 padrão consiste:

- de uma rede bidimensional L por L com variáveis estocásticas, $\sigma_{i,j}$, associadas aos seus N sítios.
- de condições de contorno periódicas.
- de parâmetro fixo $\lambda_{1100} = \lambda_{0011} = 0.5$.
- da dinâmica dada pela combinação convexa da regra da maioria de VMAJ2.1 e do modelo VMAJ1.

Desta forma, o modelo VMAJ2.1-VMAJ1 é a combinação convexa de $\rho_{2v}VMAJ2.1 + \rho_{1v}VMAJ1$. Assim, a taxa de transição deste modelo é a combinação convexa da taxa de transição do modelo VMAJ2.1 com spin central com a taxa de transição do modelo VMAJ1, ambas discutidas nas seções anteriores. Para entender o papel desta densidade ρ é necessário proceder a um estudo analítico e de simulação computacional do modelo VMAJ2.1 padrão em combinação convexa com VMAJ1. Assim, neste modelo, a mudança se dá no parâmetro da densidade ρ_{2v} de VMAJ2.1 padrão, considerando-se a proporção padrão de $\lambda_{1100} = \lambda_{0011} = 0.5$ para cada um dos tipos de ligação e mantendo-a constante. A simulação computacional revela uma relação entre os valores críticos da transição, q_c , e a densidade, ρ_{2v} . Essa relação, como se verifica por meio da simulação computacional é uma relação linear.

3.7.2 A abordagem teórica: o enfoque de campo médio

A abordagem teórica desse modelo padrão do votante majoritário VMAJ2.1-VMAJ1 é feita diretamente da definição da equação de evolução,

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'). \quad (3.43)$$

Reescrevendo a equação da evolução com as regras de transição dos dois modelos, obtém-se a seguinte relação algébrica, para o termo $P_{l+1}(1)$,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \rho_{2v}[pP_l(11) + pP_l(1-11) + pP_l(-111) + qP_l(1-1-1) \\ & + qP_l(-11-1) + qP_l(-1-1)] + \rho_{1v}[pP_l(1) + qP_l(-1)]. \end{aligned}$$

A hipótese de campo médio consiste em assumir que a probabilidade de ocorrer cada estado é independente um do outro, isto é, $P(\sigma) = \prod_i P(\sigma_i)$ para cada “cluster” de vizinhos mais próximos, portanto,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \rho_{2v}[pP_l^2(1) + pP_l^2(1)P_l(-1) + pP_l^2(1)P_l(-1) \\ & + qP_l^2(-1)P_l(1) + qP_l^2(-1)(1) + qP_l^2(-1)] + \rho_{1v}[pP_l(1) + qP_l(-1)]. \end{aligned}$$

Contudo, como $P_l(1) + P_l(-1) = 1$, isto implica que $P_l(1) = [1 - P_l(-1)]$. Substituindo acima, tem-se

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}[pP_l^2(1) + 2pP_l^2(1)(1 - P_l(1)) + 2q(1 - P_l(1))^2P_l(1) + q(1 - P_l(1))^2] + \rho_{1v}[pP_l(1) + q(1 - P_l(1))],$$

que com alguma manipulação algébrica e simplificações pode-se escrever

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}[3(p - q)P_l^2(1) + 2(q - p)P_l^3(1) + q] + \rho_{1v}[(p - q)P_l(1) + q]. \quad (3.44)$$

Pela definição $m_l = P_l(1) - P_l(-1)$, obtém-se $P_l(1) = (m_l + 1)/2$. Substituindo acima, tem-se

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}[3(p - q)(\frac{m_l + 1}{2})^2 + 2(q - p)(\frac{m_l + 1}{2})^3 + q] + \rho_{1v}[(q - p)(\frac{m_l + 1}{2}) + q]. \quad (3.45)$$

Com mais manipulação algébrica chega-se a

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}[\frac{3}{4}(p - q)(m_l^2 + 2m_l + 1) + \frac{1}{4}(q - p)(m_l^3 + 3m_l^2 + 3m_l + 1 + q)] + \rho_{1v}[\frac{1}{2}(q - p)(m_l + 1) + q].$$

Agrupando-se em torno das potências de m_l , tem-se,

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}[\frac{(p - q)}{4}m_l^3 + (\frac{3(q - p)}{4} + \frac{3(p - q)}{4})m_l^2 + (\frac{3(p - q)}{2} + \frac{3(q - p)}{4})m_l + \frac{3(p - q)}{4} + 3q - 2p] + \rho_{1v}[\frac{(q - p)}{2}m_l + p - \frac{1}{2} + q].$$

Fazendo-se mais algumas simplificações e considerando que $\gamma = 2p - 1$ chega-se a

$$P_{l+1}(1) = \rho_{2v}(\frac{1}{2} + \frac{3}{4}\gamma m_l - \frac{\gamma}{4}m_l^3) + \rho_{1v}(\frac{\gamma}{2}m_l + \frac{1}{2}). \quad (3.46)$$

Substituindo-se $P_{l+1} = (m_{l+1} + 1)/2$ na equação acima e com mais manipulações algébricas, obtém-se

$$m_{l+1}(1) = \rho_{2v}(\frac{3}{2}\gamma m_l - \frac{\gamma}{2}m_l^3) + \rho_{1v}\gamma m_l. \quad (3.47)$$

Somando $-m_l$ em ambos os lados, eliminando o símbolo v de ρ_{1v} e ρ_{2v} para facilitar a leitura, passando ao contínuo e simplificando,

$$\frac{dm}{dt} = \rho_2(\frac{3}{2}\gamma m - \frac{\gamma}{2}m^3) + (\rho_1\gamma - 1)m. \quad (3.48)$$

Como $\rho_2 + \rho_1 = 1$, chega-se finalmente a

$$\frac{dm}{dt} = \rho_2(\frac{1}{2}\gamma m - \frac{\gamma}{2}m^3) - (1 - \gamma)m, \quad (3.49)$$

ou ainda na forma

$$\frac{dm}{dt} = -\left[1 - \left(\frac{\rho_2}{2} + 1\right)\gamma\right]m - \frac{\rho_2\gamma}{2}m^3. \quad (3.50)$$

Pode-se ver que essa equação se reduz às duas equações obtidas anteriormente, por exemplo, quando se faz $\rho_2 = 0$, obtém-se,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \gamma)m. \quad (3.51)$$

Em contrapartida, quando $\rho_2 = 1$, tem-se que

$$\frac{dm}{dt} = -\left(1 - \frac{3\gamma}{2}\right)m - \frac{\gamma}{2}m^3, \quad (3.52)$$

que é a mesma equação do modelo VMAJ2.1 com spin central obtida em uma seção anterior. Fazendo-se $\varepsilon^* = 1 - \left(\frac{\rho_2}{2} + 1\right)\gamma$ para distinguir dos $\varepsilon = \left(1 - \frac{3\gamma}{2}\right)$ anteriores, tem-se a equação

$$\frac{dm}{dt} = -\varepsilon^*m - \frac{\rho_2\gamma}{2}m^3. \quad (3.53)$$

Esta tem a mesma forma da equação para o modelo VMAJ2.1 das seções anteriores. Portanto, a solução da equação acima para o caso em que $\varepsilon^* \neq 0$, depois de algumas manipulações algébricas e após integração, é dada por

$$m^2 = \frac{2\varepsilon^*m_o^2}{(m_o^2\rho_2\gamma + 2\varepsilon^*)\exp(2\varepsilon^*t) - \rho_2\gamma m_o^2}, \quad (3.54)$$

em que m_o é a condição inicial. Há duas soluções distintas para $t \rightarrow \infty$, ou seja, no estado estacionário. Essas soluções dependem do sinal de $\varepsilon^* = 1 - \left(\frac{\rho_2}{2} + 1\right)\gamma$. No primeiro caso, se $\varepsilon^* > 0$, ou $p < \frac{1}{2} + \frac{1}{\rho_2 + 2}$ para cada densidade ρ_2 do componente VMAJ2.1, então $m \rightarrow 0$, ao qual está associado o estado desordenado ou paramagnético. Pode-se ver que, para os casos conhecidos de $\rho_2 = 0.0$ então $p < 1$, tem-se o estado desordenado ou paramagnético, o que era esperado. O mesmo acontece para o caso em que $\rho_2=1$, pois então, o estado estacionário ou paramagnético ocorre para $p < 5/6$ ou, de modo mais fácil de ver, para $q > 1/6$. Neste caso, a equação anterior pode ser reescrita para $t \rightarrow \infty$, na forma

$$m = B \exp(-\varepsilon^*t), \quad (3.55)$$

para uma constante B. No segundo caso, se $\varepsilon^* < 0$ ou $p > \frac{1}{2} + \frac{1}{\rho_2 + 2}$ para cada valor da densidade $\rho_2 \neq 0$ do componente VMAJ2.1, então, quando $t \rightarrow 0$, $m \rightarrow \pm m^*$ em que

$$m^* = \pm \sqrt{\frac{2|\varepsilon^*|}{\gamma\rho_2}}, \quad (3.56)$$

é correspondente à fase ordenada ou ferromagnética. O valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase é dado pela condição

$$\varepsilon^* = 1 - \left(\frac{\rho_2}{2} + 1\right)\gamma = 0. \quad (3.57)$$

Desta condição chega-se ao valor crítico dado por

$$p_c = \frac{1}{2} + \frac{1}{\rho_2 + 2}, \quad (3.58)$$

ou, de outra forma,

$$q_c = \frac{1}{2} - \frac{1}{\rho_2 + 2}, \quad (3.59)$$

ou ainda em uma forma mais compacta,

$$q_c = \frac{\rho_2}{2\rho_2 + 4}. \quad (3.60)$$

Pode-se testar essa equação para os valores de $\rho_2 = 1$, o qual fornece $p_c = 5/6$, e mesmo para o valor $\rho_2 = 0.0$, do qual se obtém $p_c = 1$, que são os valores extraídos nas análises de cada um dos seus modelos, ou seja, VMAJ2.1 e VMAJ1, respectivamente. O gráfico desta relação pode ser visto abaixo:

Figura 3.28: Gráfico teórico da relação q_c versus ρ_2 .

Enquanto a abordagem de simulação e o ajuste dos dados mostra uma relação linear entre q_c e ρ_2 dada por $q_c = 0.052\rho_2$, como pode-se ver adiante. Para estudar o comportamento do sistema quando $t \rightarrow \infty$ para o qual, no caso de $\varepsilon^* < 0$, $m \rightarrow \pm m^*$, é preciso que se conheçam antes alguns elementos dos quais se compõe esse comportamento. O primeiro deles é que

$$\begin{aligned} m^* &= \sqrt{\frac{2|\varepsilon^*|}{\gamma\rho_2}} \\ &= \sqrt{\frac{2[1 - (\frac{\rho_2}{2} + 1)\gamma]}{\gamma\rho_2}} \\ &= \sqrt{\frac{2(\rho_2 + 2)[\frac{\rho_2 + 4}{2(\rho_2 + 2)} - p]}{\gamma\rho_2}}. \end{aligned}$$

O outro elemento é o valor crítico do parâmetro, o qual é obtido com o uso da equação anterior e tem a seguinte expressão:

$$p_c = \frac{\rho_2 + 4}{2(\rho_2 + 2)}. \quad (3.61)$$

Destas duas últimas equações pode-se descrever o comportamento para m nas proximidades do ponto crítico, p_c como

$$m = \sqrt{\frac{2(\rho_2 + 2)}{\gamma\rho_2}}(p_c - p) \approx (p_c - p)^{1/2}. \quad (3.62)$$

Portanto, o expoente crítico mostra o valor $\beta = 1/2$, que coincide com o valor clássico, como seria de se esperar. Para este caso, quando $t \rightarrow \infty$, então $m \rightarrow \pm m^*$ com um decaimento na forma exponencial que pode ser obtido de 3.54 por meio de uma expansão de Taylor, como foi feito anteriormente no caso do modelo VMAJ2.1, e que tem a seguinte forma

$$m = \pm m^* + D \exp[-2(\rho_2 + 2)|p_c - p|t], \quad (3.63)$$

em que D é uma constante. Assim, o tempo de relaxação τ pode ser escrito como

$$\tau = \frac{1}{2(\rho_2 + 2)|p_c - p|}, \quad (3.64)$$

portanto, $\tau \propto (p_c - p)^{-1}$.

3.7.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Já foi visto que, por simulação computacional, o modelo formado da combinação convexa com $\rho_{2v} = 0.0$ de VMAJ2.1 e com $\rho_{1v} = 1$ de VMAJ1, tem, por exemplo $q_c = 0.00$, pois coincide com o do modelo VMAJ1, e $q_c = 0.052$, pois coincide com o do modelo VMAJ2.1. A simulação é conduzida portanto para os valores intermediários. A abordagem computacional desse modelo foi feita para valores de $\rho_{2v} = 0.8$, $\rho_{2v} = 0.6$, $\rho_{2v} = 0.4$ e $\rho_{2v} = 0.2$, obtendo-se os valores associados a q_c . Com estes valores pode-se construir um gráfico e proceder a uma regressão que mostra ser o melhor “fitting”, uma reta de inclinação 0.0514. Desta forma, constata-se por extrapolação que o valor crítico da transição de fase, para o modelo formado da combinação convexa de VMAJ2.1 com $\rho_{1v} = 0.01$ e de VMAJ1 com $\rho_{2v} = 0.99$, é $q_c = 0.000514$. Chega-se a esse resultado pelo seguinte: dado a hipótese de que a relação é linear e a inclinação da reta que passa pela origem é de 0.0514, basta então, para obter o valor crítico da transição, multiplicar a densidade 0.01 pela inclinação, portanto, $(0.01) \times (0.0514) = 0.000514$, aproximadamente 0.00052. No entanto, pela simulação computacional direta do modelo VMAJ2.1-VMAJ1

com a composição mencionada, também obteve-se esse mesmo resultado $q_c = 0.00052$ com erro envolvido ao trabalhar-se com um passo de Monte Carlo de 2×10^9 . Ainda assim, reconhece-se que um trabalho computacional mais rigoroso deve ser empreendido, principalmente quanto aos erros envolvidos.

As etapas desenvolvidas em termos computacionais consistiram primeiro na simulação do modelo VMAJ2.1 padrão, $\lambda_{1100} = 0.5$ e $\lambda_{0011} = 0.5$, formado apenas de spins centrais com dois vizinhos como os mais próximos; portanto, com a composição de $\rho_{2v} = 1$ o valor crítico da transição de fase é dado por $q_c = 0.0514$. Trata-se de uma simulação, com tempo computacional razoável com 2×10^6 passos de Monte Carlo para uma série de redes de tamanho $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$ e $L = 40$. O mesmo acontece para o modelo formado da combinação convexa de VMAJ2.1 com $\rho_2 = 0.8$ e VMAJ1 com $\rho_{1v} = 0.20$. A simulação computacional deste modelo com o mesmo *loop* de Monte Carlo mostrou o valor $q_c = 0.0426$. E, assim sucessivamente, simulou-se para várias combinações convexas, entre elas a composição de $\rho_{2v} = 0.20$ para VMAJ2.1 e $\rho_{1v} = 0.80$ para VMAJ1. Com a mesma simulação computacional obteve-se para essa combinação o valor crítico de $q_c = 0.0113$. Na seqüência realizou-se, então, a mesma simulação computacional para a combinação convexa de $\rho_{2v} = 0.10$ para VMAJ2.1 e $\rho_{1v} = 0.90$ para VMAJ1. Nesse caso, obteve-se o valor crítico dado por $q_c = 0.00514$. Finalmente, a combinação de $\rho_{1v} = 1$ para VMAJ1 e $\rho_{2v} = 0$ para VMAJ2 gera o modelo VMAJ1. A simulação computacional desse modelo mostrou o que seria esperado, $q_c = 0.000$. Na seqüência, construiu-se uma tabela relacionando esta combinação convexa de densidades ρ_{2v} e os valores críticos, q_c , associados a elas. Com esta tabela fez-se uso do ajuste de curvas para encontrar uma que melhor ajustasse esses valores. Na primeira etapa, fez-se uso do diagrama de dispersão para identificar algum padrão nessa relação e descobriu-se que a curva para ajuste seria uma reta. Empregando o método da regressão linear obteve-se a reta que melhor ajustasse esses valores. Neste contexto, pôde-se inferir que o candidato ao modelo mais simples deveria ser formado com a composição de $\rho_{1v} = 0.99$ e $\rho_{2v} = 0.01$ VMAJ2.1. Utilizando-se a reta resultante da regressão linear, inferiu-se que o valor crítico da transição de fase é dado por $q_c = 0.00052$. A simulação computacional direta, ainda que sem todo o rigor necessário, comprova esse valor, obtido indiretamente por extrapolação.

Figura 3.29: Relação entre q_c e ρ_{2v} .

E, para finalizar, superpõem-se os dois gráficos, tanto o resultado teórico feito na aproximação de campo médio quanto o resultado da simulação computacional, para efeitos de comparação

Figura 3.30: Relação entre q_c e ρ_{2v} .

3.7.4 A relação entre q_c e λ .

No entanto, o modelo VMAJ2.1-VMAJ1 padrão, que é a hipótese para a análise da relação entre q_c e ρ_{2v} , não é o modelo mais simples dessa classe de modelos, uma vez que se pode alterar o outro parâmetro que foi mantido fixo e que estava definindo o modelo como

padrão: λ . Neste contexto, a próxima etapa da estratégia para encontrar o modelo mais simples parece bastante natural, ou seja, estudar o modelo VMAJ2.1 mais simples, isto é, o componente do modelo VMAJ2.1-VMAJ1, que o define como padrão. A simulação computacional a partir do modelo padrão VMAJ2.1 com a variação no parâmetro da proporção λ_{1100} , em que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$, resultou no gráfico abaixo, fornecendo a relação entre q_c e a proporção entre as formas geométricas de ligação, λ_{1100} , com o mesmo número de coordenação, z :

Figura 3.31: Relação entre q_c versus λ_{1100} .

Esse gráfico mostra que o modelo mais simples quando se altera o parâmetro λ_{1100} é aquele com a combinação convexa $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$, ou vice-versa para o modelo VMAJ2.1.

3.7.5 O modelo mais simples.

Desta forma, o modelo mais simples vai ser obtido pela combinação das duas abordagens anteriores: a manipulação do parâmetro ρ_{2v} e do parâmetro λ_{1100} . Com a manipulação do parâmetro densidade ρ_{2v} , mostraram-se a partir das simulações numéricas, das regressões lineares e dos processos de extrapolação, candidatos naturais ao modelo mais simples, isto é, o modelo formado da combinação convexa de VMAJ2.1 padrão, com a combinação convexa de $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$, e VMAJ1 em redes com a seguinte distribuição de densidade $\rho_{1v} = 0.99$ de VMAJ1 e $\rho_{2v} = 0.01$ de spin central do VMAJ2.1. Essa combinação convexa, formando o modelo VMAJ2.1-VMAJ1, corresponde, para uma rede de $L = 10$, portanto, com 100 spins, a uma composição de 99 VMAJ1 e 1 VMAJ2.1. Contudo, esse modelo contém a hipótese de que VMAJ2.1 é o modelo padrão, portanto,

composto de $\lambda_{1100} = \lambda_{0011} = 0.5$. Tem-se portanto ainda outro grau de liberdade, ou seja, a mudança na proporção das ligações geométricas, λ_{1100} ou λ_{0011} . Assim o modelo VMAJ2.1-VMAJ1 acima, formado do modelo VMAJ2.1 padrão, pode não ser o modelo mais simples. Simulações computacionais para o Modelo VMAJ2.1 padrão revelam que alterando-se a quantidade λ_{1100} ou λ_{0011} , o valor crítico da transição, q_c , depende dessa proporção λ_{1100} da seguinte forma, como mostra o gráfico,

Figura 3.32: Da relação entre q_c e λ_{1100} tem-se que $\lambda_{1100} = 0.99 \rightarrow q_c = 0.0075$.

Neste caso, a forma funcional da relação entre estes dois parâmetros do problema, proporção dos tipos de ligação geométrica, λ , e o valor crítico das transições de fase, q_c , é bastante diferente da forma funcional da relação entre o parâmetro densidade do spin central, ρ_z , com seus vizinhos, considerados como vizinhos mais próximos, e o valor crítico da transição de fase, q_c . No primeiro caso, a combinação convexa de modelos homogêneos, a forma funcional, como se pode ver pelo gráfico, é semelhante a um semicírculo, que pode ser completa, para um gráfico simétrico como foi feito anteriormente. No último caso, na combinação convexa com modelos heterogêneos em que um deles é VMAJ1, a forma funcional é aquela de uma reta que passa pela origem como se constatou no gráfico anterior. Fazendo-se uso apenas do modelo VMAJ2.1, o valor crítico do modelo mais simples, tomando-se apenas a mudança na proporção das configurações geométricas, é dado por $q_c = 0.0075$ para uma proporção de $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$ ou vice-versa, pela simetria das ligações verticais e horizontais. Finalmente, combinando esses dois componentes analíticos, determinados, um deles pela densidade de spin, ρ , e o outro pela proporção do tipo da ligação geométrica, λ , pode-se chegar ao candidato ao modelo mais simples relacionado com o modelo VMAJ2.1-VMAJ1: o modelo convexo formado de uma composição, descrita pelo parâmetro densidade, de $\rho_1 = 0.99$ de VMAJ1 e, portanto,

$\rho_2 = 0.01$ de VMAJ2.1. Este último não é mais o modelo padrão, mas se encontra dado na proporção descrita pelo parâmetro $\lambda_{1100} = 0.99$ de uma forma geométrica de ligação e $\lambda_{0011} = 0.01$ de outra forma geométrica de ligação. Esta proporção do tipo de ligação $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$ seria um valor-limite para o modelo VMAJ2.1 que envolve apenas dois tipos de ligação geométrica: a forma de ligação vertical e a forma de ligação horizontal. Mas, poder-se-ia agora construir a relação formada de $\lambda_{0011} = 0.0001$ e $\lambda_{1100} = 0.9999$ e ter-se-ia outro valor limite, e muito menor, para q_c , portanto, nesta linha de raciocínio, por meio deste critério do menor valor crítico q_c não se pode definir nenhum modelo mais simples. Vamos contudo, considerar que se considera o mais simples dos modelos aquele da proporção dada por $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$. Construído o modelo que se considera o mais simples dos modelos gerados pelo modelo VMAJ2.1 padrão, portanto, com a variação do parâmetro λ_{1100} , pode-se agora avaliar a magnitude do valor crítico do modelo mais simples VMAJ2.1-VMAJ1 e com isso definir o modelo mais simples segundo esse critério. Tal valor é obtido, novamente, por dois métodos: pelo método de extrapolação dos valores críticos conseguidos com a simulação dos modelos formados da combinação convexa de modelos VMAJ2.1 e VMAJ1, descrita acima, e pelo método de simulação computacional direta do modelo. O valor crítico da transição de fase para o modelo mais simples como descrito acima é obtido por meio da extrapolação, ou seja, 0.01 multiplicado por 0.0075, cujo resultado é dado por $q_c = 0.000075$. Para isso parte-se da hipótese feita, a partir de evidências proporcionadas pela simulação computacional, de que a relação entre q_c e ρ é linear. Pois, por analogia com o raciocínio anterior, se uma densidade de $\rho_{2v} = 1$ do modelo VMAJ2.1-VMAJ1 com $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$ apresentar uma transição no valor crítico $q_c = 0.0075$ como foi visto, então também por analogia uma densidade $\rho_{2v} = 0.01$ do modelo VMAJ2.1-VMAJ1 com $\lambda_{1100} = 0.99$ e $\lambda_{0011} = 0.01$ terá, por extrapolação, um valor crítico associado de $q_c = 0.000075$, como pode ser visto na sequência:

Figura 3.33: Da relação q_c e ρ_{2v} tem-se que $\rho_{2v} = 0.01 \rightarrow q_c = 0.000075$.

Em contrapartida, por meio de simulação computacional direta para esse submodelo VMAJ2.1 com um *loop* de Monte Carlo de 2×10^9 , extrai-se o resultado de $q_c = 0.00007$ com relação ao qual não se está seguro acerca das margens de erro. Esse poderia ser um candidato da classe de modelos VMAJ2-VMAJ1 ao modelo mais simples. No entanto, julga-se o tratamento direto ainda insatisfatório, pois trabalhou-se com amostras que não são estatisticamente independentes e não se fez um estudo rigoroso em termos de erro. Assim, demanda-se um tratamento direto mais cuidados no futuro.

3.7.6 Propriedades do modelo mais simples.

Com a suposição do modelo mais simples para o modelo VMAJ2.1, para a densidade $\lambda_{0011} = 0.01$ e $\lambda_{1100} = 0.99$; podem-se estudar algumas das características da transição de fase e mesmo da classe de universalidade. (1)A primeira destas características é que a transição de fase só ocorre no limite termodinâmico, portanto, para $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$, mas tal que $\rho = N/V$ é constante. De fato, com o uso do modelo VMAJ2.1-VMAJ1 é fácil ver que se tem transição para um determinado e específico valor de q_c apenas quando, por exemplo, para uma rede de $L = 10$, tem-se a densidade fixa de $\rho_{2v} = 0.01$, e, neste caso, com um spin central com dois vizinhos, sendo os demais um spin com um vizinho. Para a rede $L = 20$, dever-se-á ter quatro spins centrais com dois vizinhos mais próximos para cada um deles e os demais um spin com um vizinho, mantendo-se a densidade $\rho_{2v} = 4/400$. Para $L = 40$, a densidade constante implica que $\rho_{2v} = 16/1600$ e assim sucessivamente. A simulação computacional desses modelos com essas densidades revela o mesmo valor crítico da transição de fase. Com $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$, $L = 40$ pode-se simular o sistema como se fosse um sistema no limite termodinâmico, o que dá

uma boa idéia do seu comportamento neste limite. (2) Outra característica importante a ser observada quanto à transição de fase e mesmo quanto à classe de universalidade refere-se à dimensionalidade do sistema como condição para a existência da transição de fase. O que significa a dimensão do sistema. Algumas idéias podem ser ilustradas a partir do modelo mais simples. Por exemplo, é importante notar: (i) que a simulação computacional com o modelo VMAJ.1 não revelou transição de fase em qualquer de suas combinações convexas; (ii) que a simulação computacional com o modelo VMAJ2 sem spin central não revelou transição de fase em qualquer de suas versões e de suas combinações convexas. Isso mostra que o modelo VMAJ2 sem spin central, que apresenta uma interação entre dois spins ainda que em diferentes formas geométricas de ligação, tem sua interação entre os spins interpretada como uma interação unidimensional, e, portanto, definida, pela linha unindo os dois spins. (iii) Como foi visto antes, o modelo VMAJ2.1 com spin central apresenta transição de fase. Mas, sob a condição de que não ocorra $\lambda_{1100} = 1$ e $\lambda_{0011} = 0$ ou vice versa, pois neste caso a simulação computacional mostrou também não haver transição de fase. Nestes dois últimos casos, é como se a simulação computacional estivesse trabalhando não com uma rede bidimensional, mas, com uma rede unidimensional. Isso talvez porque essa única ligação, λ_{1100} , no caso do modelo VMAJ2.1 com spin central e a interação entre os dois spins do modelo VMAJ2.1 sem spin central, mesmo aquele na forma geométrica do tipo L, portanto, $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i+1,j})$, deve ser interpretada como unidimensional, portanto, segundo a reta que une os dois spins em uma rede bidimensional. Desta forma, o que determina a transição é a dimensionalidade da interação entre os spins e, por isso, se requer um mínimo de três spins não colineares. A simulação computacional da combinação convexa, exceto nestes dois casos, apontou transição de fase, portanto, $q_c \neq 0$. Se se acrescenta o fato de que a abordagem teórica de campo médio mostra que a equação de evolução é a mesma para o modelo VMAJ2 com spin central e o modelo VMAJ3, poder-se-ia dizer que a condição para a existência de uma transição de fase é a presença de uma interação envolvendo três spins não colineares, para uma rede bidimensional, ainda que o terceiro spin tenha apenas a função de desempate, como é o caso do modelo VMAJ2.1. Desta forma, apenas modelos com três ou mais spins não colineares apresentam interações não unidimensionais e, portanto, capazes de apresentarem transições de fase, como constatado pelas abordagens teóricas na aproximação de campo médio e também pelas simulações computacionais. Portanto, quando se fala da dimensão da rede, o que, talvez, se queira frisar seja a dimensão da interação.

3.8 Conclusões.

Nestes dois últimos capítulos, com os métodos de mecânica estatística e estocásticos, entre eles, o método de Monte Carlo, estudaram-se as características da transição de fase

de vários modelos convexos do votante majoritário e procurou-se resolver o problema do que seria o modelo mais simples. Uma vez que, segundo Yeomans (Yeomans, 1994), é por meio do estudo de suas propriedades de criticalidade que se identifica qual é a sua classe de universalidade. Inicialmente, sem discutir a natureza do que seria um modelo mais simples considerou-se o critério do menor valor crítico, q_c , do parâmetro indutor de transição. Com este critério investigou-se tanto teórica quanto computacionalmente as propriedades de transição de fase para os modelos “computáveis”. Essas propriedades indicaram tratarem-se de transições de natureza contínua e com expoentes críticos que os colocam na classe de universalidade do modelo de Ising. Neste contexto, construíram-se tanto a relação entre q_c e a densidade λ quanto a relação entre q_c e a densidade ρ . A combinação desses resultados mostrou em primeiro lugar que não há um modelo mais simples. Uma vez que pode-se sempre construir um modelo, com tamanho inicial, L , crescente, tal que q_c é cada vez menor. Contudo, deve permanecer a questão quanto a se esses modelos estão ainda na mesma classe de universalidade. Pois algumas hipóteses intermediárias são feitas, que não podem ser avaliadas por questões de viabilidade computacional, para extrair essas extrapolações. Em segundo lugar, admitido um modelo mais simples, determinado pelo tamanho inicial L , observa-se, então, certas características ou condições para a existência de transição de fase, por exemplo, que o modelo deve ser formado do spin central com ao menos dois vizinhos mais próximos não colineares. E isso ocorre pois verifica-se que o que importa na transição de fase é a dimensão da interação entre os spins, e que esta deve ser ao menos $d = 2$, e não a dimensão da rede, uma vez que não há transição de fase para um modelo como o anterior mas com os vizinhos colineares.

Capítulo 4

O MODELO DO VOTANTE MINORITÁRIO-VMIN.

4.1 Introdução.

O desdobramento natural do estudo do modelo do votante majoritário, proporcionando uma fase semelhante à fase ferromagnética por analogia com o modelo de Ising, é perguntar-se pelo problema do modelo correspondente que proporcionaria uma fase análoga à fase antiferromagnética. A solução desse problema surgiu com a construção do modelo do votante minoritário, VMIN, elaborado em torno da regra minoritária em lugar da regra majoritária. A associação entre o modelo do votante minoritário com o modelo antiferromagnético só pôde ser solucionado com a definição da medida do parâmetro de ordem como aquela denominada “staggered”¹, ou seja,

$$m^* = \frac{1}{2}(m_a - m_b), \quad (4.1)$$

em que m_a é o parâmetro de ordem da sub-rede a enquanto m_b é o parâmetro de ordem da sub-rede b parâmetro de ordem é adequado para identificar os dois estados fundamentais do votante minoritário que consiste dos padrões formados de sinais alternados ao contrário dos dois estados fundamentais do votante majoritário que consistem do padrão formado do mesmo sinal. Neste contexto da construção do modelo do votante minoritário, VMIN, procurou-se resolver os mesmos problemas do modelo do votante majoritário, VMAJ, a saber, o problema de calcular o valor do ponto crítico da transição de fase, o problema de identificar a natureza da transição de fase, o problema da sua classe de universalidade. Com a identificação e classificação desse modelo tem-se as condições para abordar o problema do próximo capítulo que consiste em construir uma analogia em mecânica estatística

¹Gostaria de agradecer ao Prof. Carlos Yokoi por ter me chamado a atenção, quando da minha tentativa de resolver o problema acima de uma fase antiferromagnética, que esse seria um problema de encontrar o parâmetro de ordem adequado, o qual poderia ser o parâmetro de ordem “staggered”.

fora do equilíbrio, com estes dois modelos VMAJ e VMIN, para o modelo de Ising $\pm J$.

4.2 O modelo do votante minoritário (VMIN) - A fase antiferromagnética.

O primeiro objetivo desta seção é a construção de um modelo associado com um estado fundamental da fase antiferromagnética: os modelos do votante minoritário, VMIN. O segundo objetivo é encontrar o valor do ponto crítico, q_c , para cada um dos modelos em questão, o terceiro identificar a natureza da transição de fase associado com esses valores críticos, o quarto problema é calcular os expoentes críticos e por este meio identificar a sua classe de universalidade. O modelo do Votante Minoritário é um modelo tão semelhante ao Votante Majoritário que é a outra face da mesma moeda para usar de uma metáfora. Eles sempre vêm juntos. O modelo VMIN consiste:

- rede quadrada de dimensão L por L com N sítios, associados aos quais têm-se variáveis estocásticas $\sigma_{i,j}$.
- de condições de contorno periódicas.
- de variáveis estocásticas com dois estados $\sigma_{i,j} = \pm 1$ para cada sítio do reticulado. Desta forma para uma rede de N spin têm-se 2^N configurações possíveis.
- de uma vizinhança formada de z vizinhos e diferentes formas de ligações geométricas entre o spin central e os z spins vizinhos.
- de uma dinâmica ou um conjunto de regras, no caso a regra da minoria, definindo o estado que um spin, $\sigma_{i,j}$, assume em função dos estados dos seus vizinhos; segundo essa regra cada spin, $\sigma_{i,j}$, assume o estado correspondente ao estado que é aquele da minoria de seus vizinhos para uma determinada definição de vizinhança. Enquanto a regra da maioria escolhe o estado que resulta como o vencedor (a maioria) do processo de contagem dos estados dos vizinhos, a regra da minoria escolhe o estado que resulta como o perdedor (minoridade) do processo de contagem dos estados dos vizinhos.
- de uma regra de desempate. A regra do desempate serve para escolher o valor do estado quando ocorrer uma situação de indefinição pela aplicação da regra da minoria.

Cada modelo difere dos demais em termos:

- do número de vizinhos.

- da forma geométrica da ligação.
- da regra de desempate.
- da dinâmica que define como as configurações são alteradas.

Neste capítulo, a dinâmica vai ser considerada:

1. sempre a mesma e definida pela regra da minoria.
2. “single spin flip” ou mudança da configuração a partir da escolha aleatória de um único spin, $\sigma_{i,j}$ que se resume em substituir esse spin por $-\sigma_{i,j}$, de acordo com certa probabilidade p . Ela é denominada, por essa razão, de dinâmica assíncrona ou contínua.

Abaixo são construídos dois dos modelos do votante minoritário que são relevantes para os propósitos deste capítulo: VMIN2.1 e VMIN4.

4.3 O modelo minoritário VMIN2.1 sem spin central.

4.3.1 Descrição do modelo.

O modelo VMIN2.1 sem spin central consiste:

- de uma rede L por L de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- de condições de contorno periódicas.
- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, mais próximos com as ligações geométricas específicas (1100) representada pelo par $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$ que descreve os estados de seus dois vizinhos mais próximos sobre a mesma coluna e (0011) representado pelo $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$ que descreve os estados de seus dois vizinhos mais próximos sobre a mesma linha.
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tal que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$.
- do modelo padrão. O qual é formado de uma combinação convexa $(\lambda_{1100} = 0.5, \lambda_{0011} = 0.5)$.
- da dinâmica do modelo. A dinâmica do modelo VMIN2.1 é descrita pela regra minoritária que define o valor do estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo um spin central de uma vizinhança, a partir dos estados de seus vizinhos.

- da regra de desempate. A regra da minoria é completada com uma regra do desempate que pode assumir duas formas aqui:

a regra do desempate que consiste em escolher um dos estados com probabilidade $p = 0.5$. Esta regra define o modelo VMIN2.1 sem spin central.

a regra do desempate que consiste em escolher o estado atual do spin central com probabilidade p . Esta regra define o modelo VMIN2.1 com spin central.

A representação gráfica dos componentes desse modelo padrão, VMAJ2.1, é descrita pela figura 4.1.

Figura 4.1: Os dois modelos básicos (1100) e (0011).

O modelo VMIN2.1 sem spin central tem como taxa de inversão,

$$w_{i,j}(\sigma_{i,j}) = \frac{\lambda_{1100}}{2}[1 + \gamma\sigma_{i,j}S^*(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j})] + \frac{\lambda_{0011}}{2}[1 + \gamma\sigma_{i,j}S^*(\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1})], \quad (4.2)$$

em que função $S^*(a)$ é a função sinal definida segundo as seguinte regras: $S^*(a) = -1$ para $a > 0$, $S^*(a) = +1$ para $a < 0$ e $S^*(a) = 0$ para $a = 0$. De uma maneira explícita a taxa de inversão do votante minoritário VMIN2.1 sem spin central é como segue,

$$\begin{aligned} \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= p \\ \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q \\ \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\ \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \quad \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\ \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\ \lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
\lambda_{1100}.w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \quad \sigma_{i,j+1} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= 0.5 \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
\lambda_{0011}.w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \quad \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = -1)] &= q
\end{aligned} \tag{4.3}$$

A constatação de que tal regra satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal do $\sigma_{i,j}$ é direta bastando trocar os sinais de todos os σ 's. Com essa regra o modelo tem simetria por inversão de spin ($\sigma_{i,j} \rightarrow -\sigma_{i,j}$) o que o coloca na classe de universalidade de Ising (Grinstein et al., 1985). Como mencionou-se anteriormente pela análise das taxas de transição, que para qualquer outro valor de p , semelhante aquela da presença de um campo externo no modelo de Ising, o modelo não possui a simetria por inversão.

4.3.2 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

O desenvolvimento teórico para o modelo VMIN2.1 sem spin central pode ser feito do mesmo modo que para o modelo VMAJ2.1 sem spin central. Isso foi feito no capítulo anterior na aproximação de campo médio², a partir da equação, para a evolução da média

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_i\rangle = -2\langle\sigma_i w_i(\sigma)\rangle. \tag{4.4}$$

Fazendo uso dos recursos mencionados acima, obtem-se que

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -2\left\langle\sigma_{i,j}\left\{\frac{\lambda}{2}\left[\frac{1}{2} + \gamma\sigma_{i,j}S_h^*(a)\right] + \frac{(1-\lambda)}{2}\left[\frac{1}{2} + \gamma\sigma_{i,j}S_v^*(a)\right]\right\}\right\rangle, \tag{4.5}$$

em que S_h^* é a função sinal para a ligação horizontal enquanto S_v^* é a função sinal para a ligação vertical. Sendo que

$$S_v^*\left(\sum_{\delta}\sigma_{i+\delta,j}\right) = -\frac{\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j}}{2}, \tag{4.6}$$

e que

$$S_h^*\left(\sum_{\delta}\sigma_{i,j+\delta}\right) = -\frac{\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}}{2}. \tag{4.7}$$

²(Dotsenko, 2001), (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

Pode-se desenvolver a equação da evolução da média até a seguinte forma algébrica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = & -\lambda 2\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\lambda 2\left[\frac{\langle\sigma_{i+1,j}\rangle + \langle\sigma_{i-1,j}\rangle}{2}\right] \\ & - (1-\lambda)\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma(1-\lambda)\left[\frac{\langle\sigma_{i,j+1}\rangle + \langle\sigma_{i,j-1}\rangle}{2}\right]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nesta etapa pode-se fazer a seguinte hipótese simplificadora, a hipótese da homogeneidade linear horizontal e vertical, portanto que,

$$\begin{aligned} \langle\sigma_{i+1,j}\rangle &= \langle\sigma_{i-1,j}\rangle \\ \langle\sigma_{i,j+1}\rangle &= \langle\sigma_{i,j-1}\rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Com isto a equação de evolução temporal da média se reduz a

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -\lambda\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\lambda\langle\sigma_{i+1,j}\rangle - (1-\lambda)\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma(1-\lambda)\langle\sigma_{i,j+1}\rangle. \quad (4.10)$$

Fazendo agora a hipótese adicional da homogeneidade espacial, portanto,

$$\langle\sigma_{i+1,j}\rangle = \langle\sigma_{i,j+1}\rangle = \langle\sigma_{i,j}\rangle. \quad (4.11)$$

Obtem-se, finalmente

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{i,j}\rangle = -\langle\sigma_{i,j}\rangle + \gamma\langle\sigma_{i,j}\rangle, \quad (4.12)$$

a qual pode ser colocada, pela identificação $\langle\sigma_{i,j}\rangle = m$, na forma

$$\frac{dm}{dt} = -(1-\gamma)m. \quad (4.13)$$

A solução dessa equação é dada por

$$m = A \exp[-(1-\gamma)t], \quad (4.14)$$

em que A é uma constante que depende das condições iniciais. Pode-se ver que a magnetização, $m \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$, no caso em que $\gamma \neq 1$, portanto, $p \neq 1$ ou $q \neq 0$. O tempo de relaxação é dado por $\tau = \frac{1}{(1-\gamma)}$. τ diverge quando $\gamma \rightarrow 1$ ou seja quando $q \rightarrow 0$. Trata-se, portanto, de um comportamento semelhante àquele descrito por um modelo de Glauber unidimensional (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001). Assim, do ponto de vista teórico, não há transição de segunda ordem, ou transição de fase contínua, para qualquer q exceto uma transição de primeira ordem em $q_c = 0$.

4.3.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A simulação computacional desse modelo também mostra, como no caso do modelo majoritário VMAJ2.1 sem spin central, ausência de transição de fase de segunda ordem para os mesmos valores teóricos, exceto para $q_c = 0$, que poder-se-ia dizer que é uma transição de primeira ordem.

4.4 O modelo minoritário VMIN2.1 com spin central.

4.4.1 Descrição do modelo.

O modelo VMIN2.1 com spin central consiste,

- de uma rede L por L de N spins em que cada spin é representado pela variável estocástica com dois estados $\sigma_{i,j} = \pm 1$;
- das condições de contorno que são as condições periódicas;
- do spin central $\sigma_{i,j}$ e dois vizinhos, $z = 2$, mais próximos com as ligações geométricas específicas (1100) representada pelo par $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j})$ que descreve os estados de seus dois vizinhos mais próximos sobre a mesma coluna e (0011) representado pelo par $(\sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$ que descreve os estados de seus dois vizinhos mais próximos sobre a mesma linha;
- de todas as suas combinações convexas $(\lambda_{1100}, \lambda_{0011})$, tal que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$;
- do modelo padrão dessa sub-classe que é formado de uma combinação convexa $\lambda_{1100} = 0.5$ e $\lambda_{0011} = 0.5$;
- da dinâmica que é descrita pela regra minoritária que define o valor do estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo um spin central de uma vizinhança, a partir dos estados de seus vizinhos;
- de uma regra de desempate que consiste em escolher com probabilidade p o estado atual do spin central e com probabilidade $q = 1 - p$ o oposto do estado atual. Essa regra define o modelo VMIN2.1 com spin central.

A dinâmica do modelo é obtida substituindo a regra do desempate acima $p = 0.5$ do modelo VMIN2.1 sem spin central pela regra em que se considera o spin central como tertium ou seja, por exemplo, em lugar de

$$w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = 0.5, \quad (4.15)$$

considera-se a regra

$$\begin{aligned} w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1, \quad \sigma_{i,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\ w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \quad \sigma_{i+1,j} = 1, \quad \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Essa mudança na regra de desempate altera e muito o resultado obtido pela simulação computacional dos parâmetros críticos para os dois modelos. As regras de transição, para

o modelo VMIN2.1 com spin central, são, agora, como se segue, de maneira explícita, para o caso de $P_{l+1}(1)$,

$$\begin{aligned}
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{1100} \cdot w[(\sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1), &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i,j} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\
\lambda_{0011} \cdot w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Novamente aqui, pode-se observar diretamente que tais regras de inversão satisfazem a propriedade da simetria por troca de sinal dos σ_i . Para isso basta inverter os sinais de todos os σ 's. O que significa que pelo argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985) este modelo encontra-se na classe de universalidade do modelo de Ising.

4.4.2 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A abordagem teórica desse modelo é feita a partir diretamente da definição da equação de evolução³ ou seja,

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'). \tag{4.18}$$

Reescrevendo a equação da evolução com essas regras de transição obtem-se, a seguinte relação algébrica,

$$\begin{aligned}
P_{l+1}(1) = & \lambda_{1100}[qP_l(11) + qP_l(1-11) + qP_l(11-1) + pP_l(-11-1) + \\
& pP_l(-1-11) + pP_l(-1-1)] + \lambda_{0011}[qP_l(11) + qP_l(1-11) + \\
& qP_l(11-1) + pP_l(-11-1) + pP_l(-1-11) + pP_l(-1-1)].
\end{aligned}$$

Em que $\lambda_{1100} + \lambda_{0011} = 1$ e $P(\sigma_o \sigma_1 \sigma_2)$ para o caso em que se considera o spin central σ_o com os dois vizinhos σ_1 e σ_2 . Fazendo-se agora a suposição da homogeneidade espacial,

³(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

e realizando algumas operações algébricas, obtem-se, da equação acima

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) &= qP_l(11) + qP_l(1-11) + qP_l(11-1) + pP_l(-11-1) \\ &\quad + pP_l(-1-11) + pP_l(-1-1). \end{aligned}$$

Fazendo uso da hipótese da aproximação de campo médio⁴, ou seja, fazendo que $P(\sigma_o\sigma_1\sigma_2) = P(\sigma_o)P(\sigma_1)P(\sigma_2)$ segue-se que

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) &= qP_l^2(1) + qP_l^2(1)P_l(-1) + qP_l(1)P_l^2(-1) + \\ &\quad pP_l^2(-1)P_l(1) + pP_l^2(-1)P_l(1) + pP_l^2(-1). \end{aligned}$$

Como tem-se variáveis estocásticas com dois estados, segue-se a propriedade que

$$P_l(1) + P_l(-1) = 1. \quad (4.19)$$

Substituindo a relação na equação anterior, obtem-se que,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) &= qP_l^2(1) + 2qP_l^2(1)[1 - P_l(1)] + \\ &\quad 2p[1 - P_l(1)]^2 P_l(1) + p[1 - P_l(1)]^2. \end{aligned}$$

Usando da manipulação algébrica, chega-se à seguinte equação algébrica

$$P_{l+1}(1) = [1 + 2q - 4p]P_l^2(1) + 2(p - q)P_l^3(1) + p. \quad (4.20)$$

Como $q = 1 - p$, substituindo e organizando os termos, tem-se,

$$P_{l+1} = -3[2p - 1]P_l^2(1) + 2(2p - 1)P_l^3(1) + p. \quad (4.21)$$

Fazendo $m_l = P_l(1) - P_l(-1)$ pode-se reescrever $P_l(1) = (1 + m_l)/2$ e, então, substituindo na equação acima, e após algum desenvolvimento algébrico, chega-se à seguinte relação

$$m_{l+1} = -\frac{3}{2}\gamma m_l + \frac{1}{2}\gamma m_l^3. \quad (4.22)$$

Pela adição a ambos de lados $-m_l$, tem-se que,

$$m_{l+1} - m_l = -(1 + \frac{3}{2}\gamma)m_l + \frac{1}{2}\gamma m_l^3, \quad (4.23)$$

que escreve-se, no contínuo

$$\frac{dm}{dt} = -(1 + \frac{3}{2}\gamma)m + \frac{1}{2}\gamma m^3. \quad (4.24)$$

Comparando essa relação com aquela do modelo VMAJ2.1 que é dada pela equação,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 - \frac{3}{2}\gamma)m - \frac{1}{2}\gamma m^3. \quad (4.25)$$

⁴(Dotsenko, 2001), (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

pode-se ver que definindo $\gamma' = -\gamma$ e substituindo na equação anterior esta fica exatamente como a última equação. Desta forma ambos os modelos devem apresentar o mesmo comportamento em torno dos pontos críticos, q_c , ainda que esses pontos sejam distintos. No que diz respeito ao valor crítico a previsão de q_c para o modelo VMIN2.1 é dado por $\frac{3}{2}\gamma + 1 = 0$ o qual implica que $q_c = 5/6$, enquanto o valor crítico para o modelo VMAJ2.1 é dado por $\frac{3}{2}\gamma - 1 = 0$ o qual implica que $q_c = 1/6$. Isso significa que eles se encontram à mesma distância de ambos os extremos ainda que apresentam fases diferentes nas regiões próximas dos extremos, $q = 1$ no caso do VMIN2.1 e $q = 0$ no caso do VMAJ2.1. A estimativa teórica é algo distante dos valores numéricos exatos obtidos pela simulação computacional para ambos os modelos. Como pode-se ver abaixo, a simulação computacional identifica para a versão minoritária, VMIN2.1 desse modelo o valor crítico $q_c = 1 - p_c = 0.0514$. Esse resultado é o mesmo do modelo VMAJ2.1 fazendo a devida transformação $p = 1 - q$. A diferença entre os dois modelos é a mesma do modelo ferromagnético e antiferromagnético. Ela encontra-se no fato de que o estado fundamental do modelo do votante majoritário é dado pela configuração em que todos os spins têm a mesma orientação, enquanto o estado fundamental do modelo do votante minoritário é dado pela configuração em que os spins aparecem alternados. Desta forma, têm-se como estado fundamental, nos dois casos, diferentes padrões, o que implica que deve-se ter os parâmetros de ordem adequados para identificá-los.

4.4.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

A primeira etapa da simulação computacional está voltada para o cálculo do valor do ponto crítico. O valor do ponto crítico, q_c , como no caso do modelo VMAJ2.1, pode ser obtido por meio de simulação computacional e de métodos de análise dos dados. O primeiro desses métodos é do cumulante de quarta ordem descrito pela equação 1.36. O valor do ponto crítico, para este modelo, é dado por $q_c = 0.0514$ cujo processo de obtenção é mostrado no gráfico seguinte

Figura 4.2: Cumulante de quarta ordem $U_L(q)$: intersecção no valor crítico $q_c = 0.0514$.

Na seqüência do roteiro desta primeira etapa identifica-se a natureza dessa transição de fase e para tanto usa-se dos dois métodos já mencionados para esse fim: magnetização⁵ $M_L(q)$, e suscetibilidade⁶, $\chi_L(q)$. Como se pode observar no gráfico seguinte e considerando o padrão descrito anteriormente para o comportamento da magnetização trata-se de um transição de fase contínua.

Figura 4.3: Magnetização, $M_L(q)$, versus q para valores de L .

⁵(Barkema and Newman, 1999), pg.83.

⁶(Binder, 1998), pg.176.

Na busca dos comportamentos característicos da transição de fase de contínua o comportamento da suscetibilidade mostra a presença de uma tendência à divergência dessa quantidade no ponto crítico. Esse é um traço característico da transição de fase contínua. O gráfico abaixo ilustra esse comportamento.

Figura 4.4: Suscetibilidade, $\chi_L(q)$, versus q para valores de L .

Na segunda etapa procura-se determinar as características da criticalidade, ou seja, a classe de universalidade do presente modelo. Para esse fim o meio é obter os expoentes críticos a partir das leis de potências⁷ de suas grandezas relevantes, magnetização dada pela relação 1.40 e suscetibilidade com a relação 1.41 que descrevem o comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico $q_c = 0.0514$. O valor do expoente crítico para a lei de potência da magnetização é $\beta/\nu = 0.1210$. Esse processo é ilustrado no gráfico seguinte,

⁷ (Landau, 2000), (Binder and Heermann, 1988), (Binder, 1997), pg.523; (de Oliveira, 1996), pg. 1322; (Stanley, 1999); (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

Figura 4.5: Regressão linear: expoente crítico $\beta/\nu = 0.1210$.

O valor desse expoente crítico é próximo do valor exato $\beta/\nu = 0.125$ associado com o modelo de Ising, portanto, colocando o modelo do votante minoritário VMIN2.1 em sua classe de universalidade. O segundo expoente crítico associado com a lei de potência da suscetibilidade, por meio do método do valor máximo da suscetibilidade⁸ sem considerar o valor do ponto crítico, dá o valor $\gamma/\nu = 1.7632$. Esse processo é ilustrado no gráfico abaixo

Figura 4.6: Regressão linear: expoente crítico $\gamma/\nu = 1.7632$.

Esse mesmo expoente crítico obtido da lei de potência, dada pela relação 1.41, porém

⁸(Binder, 1997), pg. 525.

calculado no ponto crítico. O método consiste no uso do gráfico log-log, dos dados da simulação e na regressão linear. O valor do expoente é $\gamma/\nu = 1.7753$. Este valor é próximo do valor exato do modelo de Ising $\gamma/\nu = 1.7500$. Esse procedimento é ilustrado abaixo,

Figura 4.7: Regressão linear: expoente crítico $\gamma/\nu = 1.7753$.

Resolve-se, assim, de maneira conclusiva que o modelo VMIN2.1, com os valores dos expoentes críticos $\beta/\nu = 0.1210$ e $\gamma/\nu = 1.7753$ bastante próximos dos valores exatos $\beta/\nu = 0.125$ e $\gamma/\nu = 1.750$, pertence à classe de universalidade do modelo de Ising conforme o argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985).

Nesta próxima etapa mais evidências de apoio aos valores críticos é dada pelo teste de consistência desses valores por meio das funções colapso. Esta etapa corresponde à segunda parte da hipótese de escala⁹. A função universal da magnetização dada por 1.37, leva à grandeza reescalada $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M(q)$, quando colocada em relação ao parâmetro indutor reduzido e reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Essa relação condensa todos os dados correspondentes aos diversos tamanhos do sistema. O gráfico correspondente pode ser visto na sequência,

⁹ (Stanley, 1999), pg.S358.

Figura 4.8: Função universal $L^{\beta/\nu} M(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

O resultado desse colapso mostra que os valores obtidos tanto para o valor crítico do parâmetro indutor, $q_c = 0.0514$, quando para o dos expoentes críticos, $\beta/\nu = 0.1210$ e $\gamma/\nu = 1.763$ são bastante adequados. A segunda dessas grandezas é a suscetibilidade, cuja função universal é dada pela equação 1.38 a qual leva à grandeza reescalada $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$, relativamente ao parâmetro indutor reduzido e reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico seguinte parece preencher o objetivo de mostrar a adequação do colapso dos dados da simulação produzido para os diversos tamanhos do sistema.

Figura 4.9: Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

A função universal do cumulante dada pela equação 1.39 leva à grandeza reescalada $U(q) = U$, versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico seguinte dessa relação proporciona o

colapso dos dados obtidos para todos os tamanhos do sistema.

Figura 4.10: Função universal $U(q)$ como função de $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

4.5 O modelo minoritário VMIN4 com spin central.

4.5.1 Descrição do modelo.

O modelo VMIN4 com spin central consiste:

- de uma rede quadrada L por L com N spins em que cada spin é descrito por uma variável estocástica $\sigma_{i,j}$ com dois estados ± 1 .
- de condições de contorno periódicas.
- do spin central $\sigma_{i,j}$ com quatro vizinhos mais próximos escolhido entre os quatro mais próximos. Assim, há uma única forma de ligação geométrica entre estes quatro vizinhos, (1111) ou $(\sigma_{i-1,j}, \sigma_{i+1,j}, \sigma_{i,j-1}, \sigma_{i,j+1})$.
- da dinâmica do modelo VMIN4. Ela é governada pela regra da minoria que define o valor do estado da variável estocástica $\sigma_{i,j}$, descrevendo o estado do spin central de uma vizinhança, a partir dos estados de seus vizinhos. A regra da minoria escolhe o estado correspondente àquele com o menor número de votos dos vizinhos.
- uma regra de desempate. Essa regra de desempate assume duas formas aqui:

uma regra do desempate tal que se escolhe um dos estados com probabilidade $p = 0.5$. Com isso define-se o VMIN4 sem spin central, que tem a sua taxa de

inversão descrita pela expressão,

$$w_{i,j}(\sigma) = \frac{1}{2} [1 + \gamma \sigma_{i,j} S^*(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j})]. \quad (4.26)$$

Pela troca direta dos sinais dos σ 's pode-se ver que essa regra satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal. Esse modelo fornece os mesmo resultados que o modelo VMAJ4 onde se obteve para o valor crítico $q_c = 0.075 \pm 0.001$ e os expoentes críticos $\gamma/\nu = 1.73 \pm 0.05$ e $\beta/\nu = 0.125 \pm 0.005$ mostrando, portanto, possuir os mesmos expoentes críticos do modelo de Ising.

a outra regra de desempate é denominada de regra do spin central que consiste em escolher o estado atual $\sigma_{i,j}$ em situação de desempate.

A representação gráfica deste modelo é como se segue:

Figura 4.11: O conjunto (1111), um spin central e quatro vizinhos.

A taxa de inversão do modelo VMIN4 com spin central, é dada por

$$\begin{aligned} w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\ w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = p \\ w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \\ w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = 1) &\rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] = q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, j = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= q \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = 1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = -1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, \sigma_{i+1,j} = -1, \sigma_{i,j+1} = 1, j = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p \\
w[(\sigma_{i,j-1} = -1, \sigma_{i,j+1} = -1, \sigma_{i-1,j} = 1, \sigma_{i+1,j} = 1, \sigma_{i,j} = -1) \rightarrow (\sigma_{i,j} = 1)] &= p
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Por meio destas regras pode-se constatar que esse modelo também satisfaz a propriedade da simetria “up-down”. A substituição direta dos $\sigma's$ por $-\sigma's$ mostra essa invariância.

4.5.2 A abordagem teórica: aproximação de campo médio.

O objetivo aqui é encontrar a evolução temporal para a média da variável estocástica $m = \langle \sigma_{i,j} \rangle$, a qual representa uma espécie de magnetização do modelo, mas, isto de maneira aproximada, inicialmente, por meio da abordagem de campo médio. Como a equação de evolução (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001) escreve-se

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'), \tag{4.28}$$

então com essa taxa de transição pode-se reescrevê-la, para o modelo VMIN4 com spin central, para $P_{l+1}(1)$, na seguinte forma,

$$\begin{aligned}
P_{l+1}(1) &= qP_l(1111) + 4qP_l(111-1) + 6qP_l(11-1-11) \\
&+ 6pP_l(11-1-1-1) + 4pP_l(1-1-1-1) + pP_l(-1-1-1-1). \tag{4.29}
\end{aligned}$$

Adotando a hipótese da aproximação de campo médio¹⁰, ou seja, que $P(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\sigma_5) = P(\sigma_1)P(\sigma_2)P(\sigma_3)P(\sigma_4)P(\sigma_5)$ e substituindo acima, a equação pode ser escrita como,

$$\begin{aligned}
P_{l+1}(1) &= qP_l^4(1) + 4qP_l^3(1)P_l(-1) + 6qP_l^3(1)P_l^2(-1) \\
&+ 6pP_l^2(1)P_l^3(-1) + 4pP_l^3(-1)P_l + pP_l^4(-1).
\end{aligned}$$

¹⁰(Dotsenko, 2001); (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001)

Com o uso da propriedade, associada ao fato que a variável estocástica descrevendo o estado de cada sítio tem apenas dois estados, $\sigma_i = \pm 1$, que $P_l(1) + P_l(-1) = 1$, reescreve-se a equação anterior como,

$$P_{l+1}(1) = qP_l^4(1) + 4qP_l^3(1 - P_l) + 6qP_l^3(1)(1 - P_l(1))^2 \\ + 6pP_l^2(1)(1 - P_l(1))^3 + 4p(1 - P_l(1))^3 P_l(1) + p(1 - P_l(1))^4.$$

Depois de algum cálculo algébrico a equação acima reduz-se a

$$P_{l+1}(1) = 6(q - p)P_l^5(1) + 15(p - q)P_l^4(1) + 10(q - p)P_l^3(1) + p. \quad (4.30)$$

Com a definição dada por $m_l = P_l(+1) - P_l(-1)$ pode-se obter que $P_l(1) = (1 + m_l)/2$ e, portanto, substituindo na equação acima, ela pode ser reescrita em termos de m_l como,

$$P_{l+1}(1) = \frac{6}{32}(q - p)(1 + m_l)^5 + \frac{15}{16}(p - q)(1 + m_l)^4 + \frac{10}{8}(q - p)(1 + m_l)^3 + p. \quad (4.31)$$

Com o desenvolvimento algébrico chega-se a

$$P_{l+1}(1) = [\frac{8}{16}(q - p) + p] + [\frac{75}{16}(q - p) - \frac{60}{16}(q - p)]m_l \\ + [\frac{100}{32}(q - p) + \frac{120}{32}(q - p)]m_l^3 + [\frac{3}{15}(q - p)]m_l^5.$$

Fazendo-se outras substituições, como por exemplo, $P_{l+1}(1) = (m_{l+1} + 1)/2$ e simplificações obtêm-se,

$$m_{l+1} = [\frac{15}{8}(1 - 2p)]m_l - [\frac{20}{16}(1 - 2p)]m_l^3 + [\frac{3}{8}(1 - 2p)]m_l^5. \quad (4.32)$$

Somando em ambos os lados $-m_l$, rearranjando os termos e passando para o contínuo, obtêm-se,

$$\frac{dm}{dt} = -(1 + \frac{15}{8}\gamma)m + \frac{5}{4}\gamma^3 - \frac{3}{8}\gamma^5. \quad (4.33)$$

Definindo $\gamma' = -\gamma$ ou que $\gamma' = (1 - 2p)$ e $\varepsilon_1 = 1 - \frac{15}{8}\gamma'$ pode-se reescrever a equação acima como,

$$\frac{dm}{dt} = -\varepsilon_1 m - \frac{5}{4}\gamma' m^3 + \frac{3}{8}\gamma' m^5. \quad (4.34)$$

Essa equação é a mesma que aquela para o modelo VMAJ4 obtida no capítulo anterior. Como nas proximidades do ponto crítico m é pequeno, pode-se desconsiderar m^5 , portanto,

$$0 = -\varepsilon_1 m - \frac{5}{4}\gamma' m^3. \quad (4.35)$$

Desta forma, para esta equação tem-se três soluções para m quando $\gamma' > 0$, ou seja, quando $p < 0.5$,

$$m_1 = 0 \\ m_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{|\varepsilon_1|}{\frac{5}{4}\gamma'}}. \quad (4.36)$$

Segue-se que o parâmetro de transição de fase, q_c , é dado por $q_c = 23/30 = 0.7666$. Expandindo q em torno de q_c tal que $\varepsilon_1 = (q_c - q)/q_c$, tem-se que se $\varepsilon_1 > 0$ ou seja $q < q_c$ então $m_1 = 0$ e quando $\varepsilon_1 < 0$, portanto, $q > q_c$ então $m_{2,3} = \pm[(q - q_c)/q_c]^{1/2}$ com o expoente $\beta/\nu = 1/2$. As mesmas soluções acima podem ser obtidas de outro modo, por exemplo, multiplicando-se ambos os lados da equação acima para $\frac{dm}{dt}$ por m , tem-se a equação (de Oliveira e Tânia Tomé, 2001),

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} m^2 = -\varepsilon_1 m^2 - \frac{5\gamma'}{4} m^4. \quad (4.37)$$

Essa equação diferencial é uma equação ordinária de primeira ordem não homogênea igual àquela para o modelo VMAJ4 do capítulo anterior. Assumindo que $m(0) = m_o$ é a condição inicial e considerando que $\varepsilon_1 \neq 0$, por meio do método do fator de integração segue-se a solução,

$$m^2 = \frac{2m_o^2 \varepsilon_1}{[(\frac{5}{2}m_o^2 \gamma' + 2\varepsilon_1) \exp(2\varepsilon_1 t) - \frac{5}{2}\gamma' m_o^2]}. \quad (4.38)$$

Há duas soluções distintas para $t \rightarrow \infty$, ou seja, no estado estacionário. Essas soluções dependem, para $\gamma' > 0$, do sinal de $\varepsilon_1 = (1 - \frac{15}{8}\gamma')$. (1) No primeiro caso, se $\varepsilon_1 = (1 - \frac{15}{8}\gamma') > 0$, portanto, $p > \frac{7}{30}$ ou $q < \frac{23}{30} = q_c = 0.7666$ então $m \rightarrow 0$ ao qual está associado o estado desordenado ou paramagnético para usar a terminologia do magnetismo. O comportamento de m para esse caso é facilmente visto ser descrito, a partir da equação anterior, por

$$m = D \exp(-\varepsilon_1 t) = D \exp(-(1 - \frac{15}{8}\gamma')t), \quad (4.39)$$

em que D é uma constante. Esta equação mostra explicitamente que $m \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty$ na fase paramagnética. Daqui segue-se que o tempo de relaxação é dado por $\tau = (1 - \frac{15}{8}\gamma')^{-1}$, portanto, $\tau \sim |q - q_c|^{-1}$. (2) No segundo caso, se $\varepsilon_1 = (1 - \frac{15}{8}\gamma') < 0$, portanto, $p < p_c = 7/30 = 0.2333$ ou $q > 23/30 = q_c = 0.7666$ então $m \rightarrow \pm m^* = m_{2,3}$ em que, da equação acima,

$$m^* = \sqrt{\frac{4|\varepsilon_1|}{5\gamma'}}. \quad (4.40)$$

Desta forma, o parâmetro de ordem m^* se comporta, nas proximidades do ponto crítico, como

$$m^* \sim |\varepsilon_1|^{1/2}, \quad (4.41)$$

portanto, apresentando o valor $\beta = 1/2$ para o expoente crítico da lei de potência do parâmetro de ordem. Por outro lado, o parâmetro de ordem m decai para o seu valor estacionário $\pm m^*$ de forma exponencial. Essa decaimento pode ser visto fazendo uma expansão em Taylor para a 4.38 como no estudo do modelo VMAJ2.1. Desta expansão obtem-se,

$$m = \pm m^* + C \exp(-\frac{15}{4}|q - q_c|t), \quad (4.42)$$

a qual mostra o decaimento exponencial para $m \rightarrow m^*$. Pode-se daqui inferir o tempo de relaxação: $\tau = \frac{4}{15|q - q_c|}$. Com este comportamento tem-se que, em ambos os casos, o tempo de relaxação se comporta como $\tau \sim |q - q_c|^{-1}$. O comportamento do parâmetro de ordem m , deste modelo, em torno do ponto crítico $p_c = 1 - q_c$ é dado a partir da equação,

$$m^* = \sqrt{\left(\frac{|\varepsilon_1|}{\frac{5}{4}\gamma'}\right)}. \quad (4.43)$$

Desta equação segue-se que

$$m \sim \sqrt{-\frac{3}{2}\left(\frac{|q_c - q|}{q - \frac{1}{2}}\right)} \sim |q - q_c|^{1/2}. \quad (4.44)$$

A qual fornece o valor desse expoente crítico que é o valor clássico $\beta = 1/2$.

4.5.3 A simulação computacional: resultados numéricos e a análise dos dados.

Obtém-se inicialmente o valor crítico de transição de fase. O método do cumulante de quarta ordem dado por 1.36, mostra, no gráfico abaixo, que o valor crítico do parâmetro indutor da transição é dado por $q_c = 0.0848$ associado com o o valor do cumulante de $U_L = 0.61$ que é o valor para a classe de universalidade de Ising.

Figura 4.12: O método do cumulante $U_L(q)$: a intersecção no valor crítico $q_c = 0.0848$.

Com os próximos dois métodos o da magnetização¹¹ e da suscetibilidade¹², identifica-se a natureza da transição de fase. O comportamento da magnetização com independência do tamanho do sistema para $q_c < q$ é mostrado pelo gráfico seguinte,

Figura 4.13: A magnetização $M_L(q)$ versus q para alguns valores de L .

O comportamento da suscetibilidade¹³ com a tendência para a divergência no valor do ponto crítico é mostrado pelo gráfico seguinte,

Figura 4.14: A suscetibilidade χ_L versus q e tendência à divergência em $q_c = 0.0848$.

¹¹ (Barkema and Newman, 1999), pg.83

¹² (Binder, 1998), pg.176.

¹³ (Binder, 1998), pg.176.

Uma vez identificado tanto o valor crítico da transição de fase quando a natureza dessa transição, como contínua, trata-se, como parte do roteiro, então de resolver o problema da classe de universalidade. O critério é aquele dos expoentes críticos. Um dos expoentes pode ser obtido da lei de potência descrevendo o comportamento da magnetização dado em 1.37, de um gráfico log-log, dos dados da simulação computacional e por meio do método da regressão linear. Esse processo identifica o valor $\beta/\nu = 0.1232$, portanto muito próximo do valor exato $\beta/\nu = 0.125$ do modelo de Ising bidimensional, como é ilustrado pelo gráfico abaixo,

Figura 4.15: Regressão linear $\rightarrow \beta/\nu = 0.1232$.

De forma análoga, o comportamento da suscetibilidade¹⁴ que pode ser descrito de dois modos, no ponto crítico e de maneira independente do ponto crítico. Com o método independente do valor crítico o expoente tem o valor de $\gamma/\nu = 1.7049$, próximo do valor exato $\gamma/\nu = 1.750$ do modelo de Ising.

¹⁴(Binder, 1997), pg.523-525.

Figura 4.16: Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.705$.

O outro método para o cálculo do expoente γ/ν depende do valor crítico do parâmetro. A lei de potência, obtida para o valor crítico, o gráfico log-log, os dados da simulação e o método de regressão linear fornecem para o expoente crítico o valor de $\gamma/\nu = 1.741$, bastante próximo do valor exato $\gamma/\nu = 1.750$ do modelo de Ising. O gráfico na sequência mostra esse processo,

Figura 4.17: Regressão linear $\rightarrow \gamma/\nu = 1.741$.

Com estes três resultados pode-se classificar o modelo VMIN4 como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional.

Transita-se agora, novamente para a terceira etapa com a busca de mais evidências de apoio aos valores críticos. Uma delas consiste no teste de consistência que faz uso das funções universais. A função universal da magnetização construída, de maneira descrita

anteriormente, leva à grandeza reescalada $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M(q)$, e ao parâmetro indutor da transição reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O resultado dessa relação é um gráfico do colapso que condensa todos os dados correspondentes aos diversos tamanhos do sistema e pode ser visto a seguir,

Figura 4.18: Função universal $L^{\beta/\nu} M(q)$ versus $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

Esse gráfico mostra que os valores obtidos tanto para o valor crítico, q_c , quanto para o dos expoentes críticos, β/ν e γ/ν são bastante adequados.

A segunda dessas grandezas é a suscetibilidade, cuja função universal, dada pela relação 1.38, leva à grandeza escalada $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$, e ao parâmetro q_c reduzido e reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Com isto obtem-se um gráfico do colapso bastante adequado como se pode ver na sequência,

Figura 4.19: Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q)$ versus $L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$.

Na mesma linha de raciocínio, constrói-se a função universal para o cumulante de quarta ordem. Essa função universal, leva à grandeza $\tilde{U}(q) = U$ e à grandeza $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$. A relação entre essas grandezas produz também um gráfico do colapso para vários tamanhos do sistema como é visto na sequência,

Figura 4.20: Função universal $U(q)$ versus $L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$.

Capítulo 5

O MODELO CONVEXO DO VOTANTE MAJORITÁRIO-MINORITÁRIO: VMAJ4VMIN4.

5.1 Introdução.

Os objetivos neste capítulo são dois: construir, em mecânica estatística fora do equilíbrio, com os modelos VMIN e VMAJ, um modelo análogo ao modelo de Ising $\pm J$ e abordar de maneira “quenched” ou temperada os modelos VMAJ para proceder a uma comparação com a abordagem “annealed” que tem sido a abordagem adotada nesta tese. O primeiro objetivo é o de construir, seguindo a heurística da analogia com o modelo de Ising, ainda que agora o Modelo de Ising $\pm J$, o análogo para a mecânica estatística fora de equilíbrio. Esse modelo consiste na combinação convexa entre o modelo do votante majoritário, VMAJ, e o votante minoritário, VMIN. Com respeito a esse modelo, colocam-se os mesmos objetivos ou problemas anteriores, o do cálculo do valor crítico, da natureza da transição deste novo modelo, das características da criticalidade ou da classe de universalidade e novos problemas como aquele da construção do diagrama de fase, e, da identificação da possível existência de uma fase “spin glass” para o modelo com a combinação convexa formada da densidade $\lambda = 0.5$ para cada um desses componentes, como consequência da analogia mencionada.

5.2 O modelo VMAJ4VMIN4.

5.2.1 Introdução.

A combinação convexa do modelo do votante minoritário, VMIN4 com o do votante majoritário VMAJ4 produz um modelo VMAJ4VMIN4 que não satisfaz a regra da reversibilidade microscópica, portanto, classifica-se como um modelo fora de equilíbrio. Considera-se λ_{min} como o parâmetro de convexidade ou mesmo a densidade de spins centrais que seguem a regra minoritária enquanto $\lambda_{vmaj} = 1 - \lambda_{vmin}$ é a densidade daqueles que seguem a regra majoritária. Neste contexto, o parâmetro de ordem adotado, simbolizado por m é aquele adequado, pela presença do modelo VMAJ4, para identificar o estado fundamental ferromagnético ou seja o estado que tem como configuração todos os spins para cima ou todos para baixo. Enquanto, pela presença do modelo minoritário, VMIN4, é preciso também fazer uso do outro parâmetro de ordem, m^* , adequado agora para identificar o estado fundamental desse modelo o estado antiferromagnético, o qual consiste na configuração apresentando estados alternados. O modelo VMAJ4VMIN4 apresenta os dois traços essenciais do modelo de Ising $\pm J$: a desordem e a frustração. De um lado tem-se uma desordem espacial proporcionada pela combinação convexa do votante majoritário e do votante minoritário. Tem-se distribuído pela rede interações majoritárias com interações minoritárias. A princípio eles deveriam fazer o papel da interação $\pm J$. De outro lado, a analogia também poderia encontrar uma correspondência na presença de frustração nos dois modelos. Um modo de ver essa frustração surgir é pela presença da regra do desempate. Por exemplo, por meio de uma escolha aleatória de $p = 0.50$ entre os dois estados possíveis poder-se-ia reproduzir o mesmo efeito que ocorre no modelo de Ising $\pm J$, o de um spin estar submetido a duas orientações igualmente possíveis decorrentes da interação com os seus vizinhos mais próximos. Essa propriedade da frustração é ilustrada no gráfico seguinte

Figura 5.1: Estes são exemplos de plaquetas (I) não frustradas e de (II) frustradas.

Desta forma, pressupondo a hipótese de uma possível analogia, que, entretanto, deverá ainda ser mais trabalhada e mais bem fundamentada, fazer-se-á uso dela como um recurso heurístico para ser investigada propriedades desta combinação convexa. Qual a vantagem? Reproduzir com modelos que não obedecem o balanceamento detalhado, portanto que se classificam como descrevendo fenômenos fora de equilíbrio, as mesmas propriedades que possuem modelos que satisfazem a propriedade do balanceamento detalhado. Por exemplo, como se sabe (Ozeki and Nobuyasu, 1998) sem analisar as possíveis controvérsias, o modelo de Ising $\pm J$, para dimensão $d \geq 3$, apresenta quatro regiões, a região ferromagnética, a paramagnética, a região antiferromagnética e a região vidro de spin constituída de um ponto. O mesmo aconteceria com o modelo VMAJ4VMIN4 mas com alguma controvérsia para o modelo de duas dimensões, em que a região de vidro de spin se encontraria no ponto de densidade $\lambda_{vmin} = \lambda_{vmaj} = 0.50$. Tais analogias conduzem à necessidade de se colocar e resolver o problema da identificação no modelo de combinação convexa do votante majoritário e votante minoritário, de regiões ferro e antiferromagnética. Isto significa que se deve obter uma relação entre o valor crítico do parâmetro indutor, q_c , e , por exemplo, densidade, λ_{min} , de spins centrais, que seguem a regra minoritária. Os modelos-base para a combinação convexa são: o modelo do votante majoritário VMAJ4 com spin central e o modelo minoritário VMIN4 com spin central.

5.2.2 A descrição do modelo VMAJ4VMIN4.

O modelo VMAJ4VMIN4 consiste:

- de uma rede quadrada L por L com N spins.
- de condições de contorno periódicas.

- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e os quatro vizinhos mais próximos, $\sigma_{i-1,j}$, $\sigma_{i+1,j}$, $\sigma_{i,j-1}$, $\sigma_{i,j+1}$.
- da combinação convexa da regra da maioria, λ_{vmaj} com a regra da minoria, λ_{vmin} tal que $\lambda_{vmin} + \lambda_{vmaj} = 1$.
- de uma regra do desempate. Dois tipos:

uma regra do desempate tal que escolhe-se um dos estados com probabilidade $p = 0.5$. Essa regra define o modelo sem spin central.

uma regra do desempate dada pela regra do spin central tal que escolhe-se o estado do spin central com probabilidade p e o contrário deste estado com probabilidade $q = 1 - p$ que define o modelo com spin central.

No caso de se considerar o modelo VMIN4 e VMAJ4 sem spin central a taxa de inversão desse modelo convexo é descrita por

$$w_{i,j}(\sigma_{i,j}) = \lambda/2[1 - \gamma\sigma_{i,j}S(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1})] \\ + (1 - \lambda)/2[1 + \gamma\sigma_{i,j}S^*(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1})].$$

A função $S(a)$ é a função sinal definida segundo as seguintes regras: $S(a) = +1$ para $a > 0$, $S(a) = -1$ para $a < 0$ e $S(a) = 0$, para $a = 0$ enquanto $S^*(a)$ é a função sinal definida segundo as regras: $S^*(a) = 1$ para $a < 0$, $S^*(a) = -1$ para $a > 0$ e $S^*(a) = 0$ para $a = 0$. Essa taxa de inversão é igual as regras do modelo original que simula-se computacionalmente nesta tese exceto que considera-se a regra de desempate como $p = 0.5$ para aceitar um ou o outro estado. No entanto, o foco da atenção refere-se ao modelo VMAJ4VMIN4 com spin central a ser discutido abaixo.

5.2.3 O modelo VMAJ4VMIN4 com spin central.

O modelo VMAJ4VMIN4 com spin central consiste,

- de uma rede quadrada L por L com N spins.
- do spin central, $\sigma_{i,j}$ e os quatro vizinhos mais próximos, $\sigma_{i-1,j}$, $\sigma_{i+1,j}$, $\sigma_{i,j-1}$, $\sigma_{i,j+1}$.
- de condições de contorno periódicas.
- da taxa de transição formada da combinação convexa da regra da maioria, λ_{vmaj} com a regra da minoria, λ_{vmin} tal que $\lambda_{vmin} + \lambda_{vmaj} = 1$.
- de uma regra de desempate dada pela regra do spin central tal que escolhe-se o estado do spin central com probabilidade p e o contrário deste estado com probabilidade $q = 1 - p$.

- da combinação convexa dos dois modelos VMAJ4 e VMIN4 com spin central.
- de uma realização desse modelo consistindo de $\lambda_{vmaj} = 0.95$, portanto, $\lambda_{vmin} = 0.05$.

A análise da taxa de transição do modelo VMAJ4VMIN4 com spin central, que consiste da combinação convexa da taxa de transição de VMAJ4 com a da taxa de transição de VMIN4, mostra que ela satisfaz a propriedade da simetria por inversão de sinal. Uma vez que seus componentes satisfazem cada um deles essa mesma propriedade, o que, por meio do argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985), o classifica, teoricamente, como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising. Discute-se a abordagem teórica de maneira geral, portanto, para qualquer da densidade λ_{vmaj} . No entanto, do ponto de vista da abordagem da simulação computacional trabalha-se com modelos específicos. A ilustração utilizada para resolver o problema do valor crítico, da natureza da transição e da classe de universalidade é do modelo consistindo da combinação convexa feita de $\lambda_{vmaj} = 0.95$ e, portanto, $\lambda_{vmin} = 0.05$. Depois, trabalha-se com modelos definidos por outros valores de λ_{vmaj} para calcular os valores críticos e construir o diagrama de fase.

5.2.4 A abordagem teórica: a aproximação de campo médio.

A equação de evolução(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001) escreve-se

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma') P_l(\sigma'). \quad (5.1)$$

Com as taxas de transição descritas para os dois modelos VMAJ4 e VMIN4 com spin central, pode-se construir o modelo convexo VMAJ4VMIN4 com spin central, com o parâmetro densidade λ , e reescrever a equação acima para P_{l+1} na seguinte forma,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda[pP_l(1111) + 4pP_l(111-1) + 6pP_l(111-1-1) \\ & + 6qP_l(-111-1-1) + 4qP_l(-1-1-11) + qP_l(-1-1-1-1)] \\ & + (1-\lambda)[qP_l(1111) + 4qP_l(111-1) + 6qP_l(111-1-1) \\ & + 6pP_l(-111-1-1) + 4pP_l(-1-1-11) + pP_l(-1-1-1-1)]. \end{aligned}$$

Adotando a hipótese da aproximação de campo médio¹, ou seja, que $P(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\sigma_5) = P(\sigma_1)P(\sigma_2)P(\sigma_3)P(\sigma_4)P(\sigma_5)$ e substituindo acima, a equação pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda[pP_l^4(1) + 4pP_l^3(1)P_l(-1) + 6pP_l^3(1)P_l^2(-1) \\ & + 6qP_l^3(-1)P_l^2(1) + 4qP_l^3(-1)P_l(1) + qP_l^4(-1)] \\ & + (1-\lambda)[qP_l(1)^4 + 4qP_l^3(1)P_l(-1) + 6qP_l^3(1)P_l^2(-1) \\ & + 6pP_l^3(-1)P_l^2(1) + 4pP_l^3(-1)P_l(1) + pP_l^4(-1)]. \end{aligned}$$

¹(Dotsenko, 2001), pg.4;(de Oliveira e Tânia Tomé, 2001).

Dando início às substituições, por exemplo, $P_l(-1) + P_l(1) = 1$,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda[pP_l^4(1) + 4pP_l^3(1)(1 - P_l(1)) + 6pP_l^3(1)(1 - P_l(1))^2 \\ & + 6q(1 - P_l(1))^3P_l^2(1) + 4q(1 - P_l(1))^3P_l(1) + q(1 - P_l(1))^4] + \\ & (1 - \lambda)[qP_l^4(1) + 4qP_l^3(1)(1 - P_l(1)) + 6qP_l^3(1)(1 - P_l(1))^2 \\ & + 6p(1 - P_l(1))^3P_l^2(1) + 4p(1 - P_l(1))^3P_l(1) + p(1 - P_l(1))^4]. \end{aligned}$$

E, na seqüência, por meio de manipulações algébricas e simplificações chega-se a,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda[q + 10(q - p)P_l^3(1) + 15(q - p)P_l^4(1) + 6(q - p)P_l^5(1)] \\ & + (1 - \lambda)[p + 10(q - p)P_l^3(1) + 15(q - p)P_l^4(1) + 6(q - p)P_l^5(1)]. \end{aligned}$$

Depois de mais algumas manipulações algébricas, obtem-se um resultado mais compacto,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda q + (1 - \lambda)p + 10(2p - 1)(2\lambda - 1)P_l^3(1) \\ & - 15(2p - 1)(2\lambda - 1)P_l^4(1) + 6(2p - 1)(2\lambda - 1)P_l^5(1). \end{aligned}$$

Com a substituição de $m_l = P_l(1) - P_l(-1)$ na equação acima e com várias passagens algébricas e simplificações, tem-se,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \lambda q + (1 - \lambda)p + \frac{5}{4}(2p - 1)(2\lambda - 1)(1 + 3m_l + 3m_l^2 \\ & + m_l^3) - \frac{15}{16}(2p - 1)(2\lambda - 1)(1 + 4m_l + 6m_l^2 + 4m_l^3 \\ & + m_l^4) + \frac{3}{16}(2p - 1)(2\lambda - 1)(1 + 5m_l + 10m_l^2 + 10m_l^3 + 5m_l^4 + m_l^5). \end{aligned}$$

Organizando segundo as potências de m , e, como $p + q = 1$ chega-se a,

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) = & \frac{1}{2} + \frac{15}{16}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m_l \\ & - \frac{5}{4}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m_l^3 + \frac{3}{16}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m_l^5. \end{aligned}$$

Com a substituição de $P_{l+1} = (m_{l+1} + 1)/2$ e adicionando $-m_l$ em ambos lados, tem-se finalmente,

$$\begin{aligned} m_{l+1} - m_l = & [\frac{15}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1) - 1]m_l - \frac{5}{2}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m_l^3 \\ & + \frac{3}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m_l^5. \end{aligned}$$

No contínuo, tem-se,

$$\frac{dm}{dt} = [\frac{15}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1) - 1]m - \frac{5}{2}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m^3 + \frac{3}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m^5. \quad (5.2)$$

No estado estacionário, $\frac{dm}{dt} = 0$, tem-se a seguinte equação,

$$0 = [\frac{15}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1) - 1]m - \frac{5}{2}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m^3 + \frac{3}{8}(1 - 2q)(2\lambda - 1)m^5. \quad (5.3)$$

A partir dessa equação pode-se obter os valores críticos dos parâmetros indutores da transição, pois,

$$158(1 - 2q)(2\lambda - 1) = 1. \quad (5.4)$$

Considerando, $\lambda = \lambda_{vmin}$, pode-se escrever a relação acima como,

$$q = \frac{1}{2} - \frac{4}{15(2\lambda_{vmin} - 1)}, \quad (5.5)$$

a qual define uma linha de pontos críticos (λ_{vmin}, q_c) em que alguns são bastante imediatos, por exemplo, que ao valor $\lambda_{vmin} = 1$ está associado o valor $q = 7/30 = 0.233$ enquanto com o valor $q = 0$ está associado o valor $\lambda_{vmin} = 23/30 = 0.766$. Com os pontos intermediários (q, λ_{vmin}) , que definem a vizinhança do ponto $(q = 0, \lambda_{vmin} = 1)$, e são compatíveis com a relação acima, pode-se construir uma região de fase antiferromagnética no gráfico q versus λ_{min} . Do mesmo modo, para a mesma relação, ao valor $\lambda_{vmin} = 0$ está associado o valor de $q = 23/30 = 0.766$ enquanto que o valor de $q = 1$ está associado com o valor de $\lambda_{vmin} = 7/30$. Outros pontos são aqueles definidos por $\lambda_{vmin} = p$, o qual substituindo na equação acima, fornece,

$$(2p - 1)(2p - 1) = \frac{8}{15}. \quad (5.6)$$

Resolvendo para p tem-se $p = 0.5(1 \pm \sqrt{\frac{8}{15}})$, portanto, que $p \approx 0.870$ e $p \approx 0.130$ ou seja, em termos de q , tem-se que $q \approx 0.130$ e $q \approx 0.870$. Desta forma, temos quatro outros pontos $(0.870, 0.870)$, $(0.870, 0.130)$, $(0.130, 0.870)$, e, $(0.130, 0.130)$. Por meio de outros pontos intermediários (q, λ_{min}) , compatíveis com a relação anterior, aos pontos mencionado acima, que definem a vizinhança em torno do ponto $(q = 1, \lambda_{vmin} = 0)$, pode-se construir uma outra região de fase antiferromagnética no mesmo gráfico mostrando na sequência ou seja q versus λ_{vmin} ,

Figura 5.2: O gráfico q *versus* λ_{vmin} .

Considerando, por outro lado, que $\lambda = (1 - \lambda_{vmin})$, então, a mesma relação pode-se escrever como,

$$\frac{15}{8}(1 - 2q)(2\lambda_{vmin} - 1) = -1. \quad (5.7)$$

Portanto, segue-se que

$$q = \frac{1}{2} + \frac{4}{15(2\lambda_{vmin} - 1)}. \quad (5.8)$$

Analogamente como foi feito acima, pode-se ver que para o valor $\lambda_{vmin} = 0$ tem-se associado o valor $q = 7/30 = 0.233$ enquanto ao valor $q = 0$ obtem-se o valor associado de $\lambda_{vmin} = 7/30 = 0.233$. Os pontos intermediários (q, λ_{vmin}) a esses pontos, que definem a vizinhança do ponto $(q = 0, \lambda_{vmin} = 0)$ e são compatíveis com essa última relação, permitem construir uma região de fase ferromagnética no gráfico q *versus* λ_{vmin} . E, finalmente, o valor $\lambda_{vmin} = 1$ está associado ao valor $q = 23/30 = 0.766$ enquanto que ao valor $q = 1$ encontra-se associado o valor $\lambda_{vmin} = 23/30$. Novamente, com os pontos intermediários (q, λ_{vmin}) a esses últimos pontos, definindo a vizinhança do ponto $(q = 1, \lambda_{vmin} = 1)$ e que são compatíveis com essa última relação acima, pode-se construir outra região de fase ferromagnética como mostrado no gráfico seguinte,

Figura 5.3: O gráfico q versus λ_{vmin} .

Com esses dados constrói-se quatro regiões como vizinhanças dos quatro cantos de uma caixa descrita por quatro pontos, $(\lambda_{vmin} = 0, q_c = 0)$, $(\lambda_{vmin} = 1, q_c = 0)$, $(\lambda_{vmin} = 1, q_c = 1)$, e, $(\lambda_{vmin} = 0, q_c = 1)$. Tais vizinhanças são ilustradas no gráfico seguinte descrito pelos eixos q e λ_{vmin} ,

Figura 5.4: O gráfico q versus λ_{vmin} .

A abordagem de campo médio feita acima terá seus resultados comparados com os valores exatos obtidos por simulação computacional. Na sequência estuda-se esses modelos para obter os valores exatos das quantidades relevantes, por meio da abordagem computacional, e uma relação entre elas, por exemplo, a relação entre q_c e λ_{vmin} .

5.2.5 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Trabalhando com os parâmetros de ordem, m e m^* , procedeu-se à simulação computacional para diversos valores de λ encontrou-se por um lado o valor da magnetização, M_L e, por outro, o valor do ponto crítico q_c . Aplicaram-se todos os recursos mencionados acima, ou seja, a simulação computacional, o método de escala de tamanho finito e os outros métodos para diferentes tamanhos do sistema, $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$, $L = 40$. O objetivo é obter tanto o valor crítico, q_c , quanto os expoentes críticos, β/ν e γ/ν , para uma densidade específica de $\lambda_{vmaj} = 0.95$, como representante do conjunto dos valores de λ no intervalo $[0, 1]$, com os quais se trabalhará, sem contudo, entrar em detalhes, com vista à relação entre q_c e λ_{vmin} . Seguindo roteiro estabelecido pelo estudo dos fenômenos críticos e transição de fase em mecânica estatística, começa-se por calcular o valor do

ponto crítico, e, para isso, usa-se o método do cumulante de quarta ordem². Esse valor é dado pela intersecção das curvas do cumulante U_L para cada tamanho do sistema L , *versus* q . O gráfico na sequência ilustra esse procedimento e mostra que esse valor é dado por $q_c = 0.0380$,

Figura 5.5: O método do cumulante obtemos $q_c = 0.0380$ para $\lambda_{vmaj} = 0.95$.

Obtido o valor crítico da transição de fase o próximo passo é identificar a natureza dessa transição de fase. Para isso conta-se, como já foi mencionado várias vezes, com dois métodos, o das curvas da magnetização e da suscetibilidade. O método das curvas da magnetização são construídas da relação entre a magnetização, M_L e o parâmetro indutor da transição, q para cada tamanho, L . O comportamento contínuo da magnetização e independente do tamanho do sistema para $q_c < q$ pode ser visto no gráfico seguinte,

²(Binder and Heermann, 1988), pg.46 e pg.107; (Landau, 2000), pg.78;(de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder, 1997), pg.523, citePlischke94, pg. 289; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

Figura 5.6: A relação da magnetização, M_L , com q .

Contudo, nada mostra de maneira mais evidente, ao menos visualmente, tanto o fenômeno quanto a natureza da transição de fase de segunda ordem do que a tendência para a divergência da função suscetibilidade, χ_L em termos do parâmetro indutor de transição, q , para tamanhos, L , crescentes do sistema cujo comportamento pode ser visto no gráfico seguinte,

Figura 5.7: A relação da suscetibilidade, χ_L com q .

Calculado o valor do ponto crítico e identificada a natureza da transição como contínua tem-se na etapa a seguir resolver o problema da classe de universalidade desse modelo. Como foi visto são os expoentes críticos que definem a classe de universalidade do modelo.

As leis de potência³ descrevendo o comportamento das duas grandezas relevantes, magnetização M_L , como dada pela relação 1.40, suscetibilidade, dada pela relação 1.41, no ponto crítico, q_c , fornecem esses expoentes. A partir dos recursos acima e de um gráfico log-log, dos dados da simulação e da regressão linear, como é ilustrado abaixo, tem-se o valor do expoente crítico $\beta/\nu = 0.1225$.

Figura 5.8: O gráfico log-log da magnetização $M_L(q_c)$, versus L .

O segundo desses expoentes críticos, γ/ν , é obtido, por meio de dois métodos já mencionados. O primeiro método a ser usado é o método do valor máximo da suscetibilidade⁴ que fornece o valor de $\gamma/\nu = 1.7300 \pm 0.0138$, como pode ser visto a seguir,

³(Binder, 1997), pg.523-525; (Landau, 2000), pg.77-78.

⁴(Binder, 1997), 523-525; (Landau, 2000), pg. 77-78

Figura 5.9: Gráfico log-log da suscetibilidade $\chi_{\max}$ versus L .

Com a lei de potência para a suscetibilidade ⁵, dada por 1.41, pode-se obter também o expoente crítico, γ/ν calculada no ponto crítico. Com essa técnica e por meio do gráfico log-log, dos dados da simulação e da regressão linear tem-se o valor do expoente crítico dado por $\gamma/\nu = 1.7424$. Isso é feito no gráfico log-log abaixo,

Figura 5.10: Gráfico log-log da suscetibilidade, $\chi_L(q_c)$, versus L .

Com esses valores acima de $\beta/\nu = 0.1225$ e de $\gamma/\nu = 1.7424$, que são bastante próximos dos valores exatos para o modelo de Ising que são $\beta/\nu = 0.125$ e $\gamma/\nu = 1.750$, sustenta-se o argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985) que esse modelo VMAJ4VMIN4 estaria

⁵(Binder, 1997), 523-525, (Landau, 2000), pg. 77-78.

na classe de universalidade do modelo de Ising por possuir a propriedade da simetria de inversão.

Com esta parte concluída chega-se à última parte da etapa envolvendo a hipótese de escala. Ela consiste no teste de consistência para os valores críticos obtidos acima. Esse teste envolve as funções universais descritas anteriormente. A primeira dessas funções universais, a função universal magnetização dada por 1.37, leva à grandeza magnetização reescalada, $\tilde{M}(q) = L^{\beta/\nu} M$, e ao parâmetro indutor reduzido e reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Com essas duas grandezas reescaladas pode-se construir o gráfico que mostra, com os dados da simulação, o colapso para todos os tamanhos L do sistema,

Figura 5.11: Função Universal $\tilde{M}(q) = L^{\beta/\nu} M$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

A segunda função universal a ser construída é a suscetibilidade reescalada dada pela equação 1.38. Ela leva à grandeza escalada $\tilde{\chi}(q) = L^{-\gamma/\nu} \chi$ e ao parâmetro indutor reescalado $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico do colapso construída com essa relação e os dados do sistema pode ser visto a seguir,

Figura 5.12: Função universal $\tilde{\chi}(q) = L^{-\gamma/\nu} \chi$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

E, finalmente, a função universal⁶ do cumulante de quarta ordem, dada pela relação 1.39 leva à grandeza escalada $U(q)$ e ao parâmetro indutor reduzido e escalado $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. O gráfico do colapso para os dados da simulação pode ser mostrado abaixo,

Figura 5.13: Função universal $U(q)$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

⁶(Stanley, 1999); (Landau, 2000); (Binder, 1997), pg. 523; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

Uma vez definido que este modelo, combinação convexa do votante majoritário, VMAJ4, e do votante minoritário, VMIN4, se encontra na classe de universalidade do modelo de Ising, passa-se então a resolver o problema de determinar as regiões do ferromagnetismo, do paramagnetismo e a do antiferromagnetismo. Com os recursos da simulação computacional pode-se construir outras realizações, outros λ_{vmin} , semelhantes ao modelo anterior definido para $\lambda_{vmin} = 0.05$. Faz-se para isso, em primeiro lugar, a análise dos demais valores da densidade $\lambda_{vmin} \in [0, 1]$ da probabilidade $p \in [0.5, 1]$. Depois, para os mesmos valores de λ_{vmin} , mas, agora para $p \in [0.00, 0.5]$. Obtendo-se os pontos críticos para cada valor de λ_{vmin} ou λ_{vmaj} , poderão ser notadas três regiões bem definidas para cada uma das duas regiões. A primeira região, é a ferromagnética. Nesta primeira abordagem considera-se o intervalo dos valores para $1 \geq p \geq 0.5$ ou de $0 \leq q = (1 - p) \leq 0.5$. Tem-se então três regiões: a primeira região, RI, para os valores desde $\lambda_{vmin} = 0.0$ até $\lambda_{vmin} = 0.0805$, correspondendo a $\lambda_{vmaj} = 1.00$ até $\lambda_{vmaj} = 0.9195$. A região RI define a região ferromagnética, por apresentar apenas o estado fundamental do ferromagneto que é o estado fundamental do modelo do votante majoritário, ou seja $++++ \dots, +++$. A segunda região, RII, para os valores desde $\lambda_{vmin} = 0.0805$ até $\lambda_{vmin} = 0.9195$. Esta é uma região que apresenta magnetização nula, seja para o parâmetro de ordem m , que deveria medir o estado fundamental do ferromagneto, seja para o parâmetro de ordem m^* , isto é, a magnetização “staggered”, que deveria medir o estado fundamental do antiferromagneto. A última região, a RIII, para os valores desde $\lambda_{vmin} = 0.9195$ até o valor $\lambda_{vmin} = 1.00$. Ela é a região antiferromagnética, pois apresenta apenas o estado fundamental do antiferromagneto que é o estado fundamental do modelo do votante minoritário, ou seja $+ - + - + - + - \dots + - + -$. Essas três regiões são mostradas no gráfico de q_c versus λ_{vmin} , abaixo,

COMBINACAO CONVEXA VMAJ4 e VMIN4

Figura 5.14: Domínios (F) e (AF) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $p \geq 0.5$.

Com os valores para $p \in [0.00, 0.5]$ define-se novamente três regiões, apenas que invertidas relativamente à região anterior. Essas regiões encontram-se na parte superior de um gráfico com os mesmos eixos. A região I, para valores desde $\lambda_{vmin} = 0.00$ até o valor $\lambda_{vmin} = 0.0720 \pm 0.01$ é uma região antiferromagnética. A região II, do valor $\lambda_{vmin} = 0.0720$ até o valor $\lambda_{vmin} = 0.9280 \pm 0.01$ é uma região paramagnética. Finalmente, a região III, definida para os valores de $\lambda_{vmin} = 0.9280$ até o valor $\lambda_{vmin} = 1.00$, que é uma região ferromagnética. Essas três regiões podem ser vistas no gráfico abaixo,

COMBINACAO CONVEXA VMAJ4 e VMIN4

Figura 5.15: Domínios (AF) e (F) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $0.00 \leq p \leq 0.5$.

Finalmente, pode-se compor esses dois gráficos para fornecer um terceiro gráfico com a imagem final do diagrama de fase. Esse diagrama mostra que o gráfico definido pelo

intervalo da variável $p \in [0.00, 1.00]$ e a variável $\lambda_{vmin} \in [0.00, 1.00]$ pode ser dividido em cinco regiões. As duas regiões definidas em cantos alternados e opostos descritas pelos pontos de referência, $(1, 0)$ e $(0, 1)$. Esses pontos identificam as regiões ferromagnéticas como pode-se ver dos dois gráficos anteriores. As outras duas regiões em cantos alternados e opostas, descritas pelas vizinhanças dos pontos de referência $(0, 0)$ e $(1, 1)$ são identificadas como regiões antiferromagnéticas. E, finalmente, a outra região é aquela que encontra-se entre as regiões descritas acima e é definida como uma região paramagnética. O gráfico na sequência pretende ilustrar esse diagrama

Figura 5.16: Domínios (AF) e (F) do modelo convexo VMAJ4VMIN4 com $0.00 \leq p \leq 1.00$.

Pode-se agora comparar os resultados teóricos fornecidos anteriormente na aproximação de campo médio e estes últimos obtidos pela simulação computacional. Exceto pela discrepância numérica esperada por tratar-se de comparar a abordagem teórica na aproximação de campo médio com os valores numéricos exatos proporcionados pela simulação computacional, os gráficos se superpõem em termos das características gerais do modelo. Tem-se assim evidências da robustez das técnicas utilizadas para abordar esses modelos. Continuando a fazer uso dessas técnicas procura-se agora precisar, em termos numéricos, outros detalhes desse modelo.

5.2.6 O modelo VMAJ4VMIN4 e o valor crítico λ_c .

O problema a ser abordado na sequência, é aquele do valor crítico da densidade λ_{vmin} e de λ_{vmaj} , a partir do qual ocorre uma transição de fase, tanto entre a fase paramagnética e a fase antiferromagnética, quanto entre a fase paramagnética e a fase ferromagnética. Esse

problema do valor crítico de transição, λ_c , e, posteriormente, o problema da natureza dessa transição quanto o problema da classe de universalidade à qual ela pertence são os novos focos de atenção. Para responder a esses problemas acima, constrói-se como parâmetro de ordem a magnetização do votante majoritário para o valor zero do parâmetro indutor de transição, ou seja, $M(q = 0)$. Desta forma, tem-se agora a densidade λ_{vmin} como o novo parâmetro indutor de transição e a magnetização para $q = 0$ do votante majoritário, $M(q = 0)$, como o novo parâmetro de ordem. A primeira etapa é calcular o valor da transição de fase para o qual utiliza-se o método do cumulante de quarta ordem⁷, definido pela relação 1.36, ou pelo uso da equação,

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (5.9)$$

A aplicação desse método é mostrado no gráfico abaixo em que a intersecção das curvas descritas pela função cumulante, $U_L(q)$ relativamente ao valor de q para os diversos tamanhos, L , do sistema dá o valor de $\lambda_{vmin} = 0.0800 \pm 0.008$.

Figura 5.17: O método do cumulante, U_L versus q , $\rightarrow \lambda_{vmin} = 0.0800 \pm 0.008$.

As demais relações extraídas entre as variáveis relevantes do sistema e a densidade, como, por exemplo, aquela da magnetização, $M_L(q = 0)$ relativamente à densidade, λ_{vmin} reitera a presença dessa transição de fase em torno do valor $\lambda_{vmin} = 0.0800$. O próximo problema é o da natureza dessa transição. O método é o comportamento característico da magnetização e da suscetibilidade na transição de fase de segunda ordem ou contínua. O comportamento da magnetização, M_L ,⁸ contínua e independente do tamanho do sistema para $\lambda < \lambda_c$, e tendendo a zero, $M_L \rightarrow 0$, para valores crescentes do tamanho, L , do

⁷ (Binder and Heermann, 1988), pg.46 e pg.107; (Landau, 2000), pg.78; (de Oliveira, 1996), pg.1322; (Plischke, 1994), pg. 289; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

⁸ (Barkema and Newman, 1999), pg.83; (Binder, 1997), pg.522-525; (Binder, 1976).

sistema para $\lambda > \lambda_c$ é indicativo de que a natureza da transição de fase é contínua. O gráfico seguinte ilustra esse comportamento bastante bem.

Figura 5.18: O gráfico da magnetização($M(q = 0)$) *versus* λ_{vmin} .

O padrão da relação entre a suscetibilidade⁹, χ_L , e a densidade, λ_{vmin} , revela também a presença de uma transição de fase contínua pois mostra tendência à divergência no valor do ponto crítico. Esse comportamento pode ser visto pelo gráfico seguinte,

Figura 5.19: O gráfico da suscetibilidade($\chi(q = 0)$) *versus* λ_{vmin} .

Por meio dessas técnicas mencionadas caracterizam-se, então, tanto a presença de uma transição de fase quanto ao seu valor em torno do valor $\lambda_{vmin} = 0.0800$. Além disso, revela que a natureza dessa transição é de segunda ordem ou contínua.

⁹(Barkema and Newman, 1999), pg.83; (Binder, 1997), pg.522-525; (Binder, 1976), (Privman, 1990).

A próxima etapa refere-se ao problema da decisão quanto à classe de universalidade. O critério está relacionado com os expoentes críticos. Por meio da lei de potência da magnetização, do gráfico do log-log, dos dados da simulação, do método de interpolação chega-se ao valor de $\lambda_c = 0.0806$, como mostrado no gráfico seguinte,

Figura 5.20: O gráfico $\ln M(q = 0, \lambda_{vmin} = \lambda_c)$ versus $\ln L$. Dois valores simulados e quatro valores interpolados $\rightarrow \lambda_c = 0.0806$.

Por meio desses recursos, infere-se, como sugestão, que um possível valor mais preciso para o valor do ponto de transição seria $\lambda_c = 0.0806$. Tal questão se apresenta de maneira apropriada, pois, como se pode observar no gráfico anterior, os expoentes críticos para a simulação dos valores de $\lambda_{vmin} = 0.0800$ e $\lambda_{vmin} = 0.0900$ são bastante diferentes um do outro. Enquanto o primeiro conduz ao valor $\beta/\nu = 0.111$, o segundo dá o valor de $\beta/\nu = 0.540$. Desta forma, mesmo para os valores vizinhos de λ , há uma grande discrepância entre os valores dos expoentes críticos. No entanto, o uso da técnica de interpolação nos sugere valores mais apropriados e consistente com valores conhecidos dos expoentes críticos. Esse é o caso de $\lambda_{vmin} = 0.0805$, o qual teria um comportamento de lei de potência com expoente crítico dado por $\beta/\nu = 0.1273 \pm 0.0011$. Com esta informação, constrói-se o modelo formado da combinação convexa de $\lambda_{vmin} = 0.0805$ com $\lambda_{vmaj} = 0.9195$ e leva-se a cabo sua simulação computacional. Recalculando o valor do expoente crítico β/ν agora para esse novo valor de $\lambda_c = 0.0806$ e com a lei de potência acima¹⁰ obtém-se o valor do expoente crítico $\beta/\nu = 0.1273 \pm 0.0011$ como indicado pelo gráfico log-log a seguir

¹⁰ (Landau, 2000) pg.77-78

Figura 5.21: O gráfico $\ln M(q = 0, \lambda = \lambda_c)$ *versus* $\ln L$ da regressão linear.

Da lei de potência, 1.41, da suscetibilidade, do gráfico log-log a seguir, dos dados da simulação e da regressão linear obtem-se o valor do expoente crítico $\gamma/\nu = 1.780 \pm 0.014$,

Figura 5.22: O gráfico $\ln \chi(q = 0, \lambda = \lambda_c)$ *versus* $\ln L$ da regressão linear.

Esse valores dos expoentes críticos $\beta/\nu = 0.1273 \pm 0.0011$, e $\gamma/\nu = 1.780 \pm 0.014$ que são bastante próximos àqueles do modelo de Ising classificam esse modelo na classe de universalidade do modelo de Ising.

A segunda etapa do método de escala de tamanho finito ou do método de escala é o colapso da função universal para a magnetização e suscetibilidade¹¹. mas tendo como parâmetro indutor reduzido o parâmetro $\varepsilon = (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$. Com essas funções universais, tem-se um forte apoio à hipótese de que $\lambda_{vmin} = 0.0805$ é um excelente valor do ponto crítico e também de que, com seus expoentes críticos com os valores já mencionados, se pode classificar o modelo como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising. A função universal da quantidade magnetização, 1.37, leva à grandeza magnetização escalada calculada no ponto $q = 0$, $\tilde{M}_L = L^{\beta/\nu} M(q = 0, \lambda_{vmin})$, e à grandeza densidade escalada, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} \varepsilon = L^{1/\nu} (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$. A relação entre essas duas grandezas deve proporcionar um colapso dos dados da simulação. Como se pode ver pelo gráfico seguinte tem-se um colapso dos dados bastante bom para os diversos tamanhos do sistema, dando prova da consistência dos valores para o ponto crítico e do expoente crítico β/ν ,

Figura 5.23: Função universal $L^{\beta/\nu} M(q = 0, \lambda_{vmin})$ versus $L^{1/\nu} (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.

O mesmo se pode dizer da função universal da quantidade suscetibilidade, 1.38, que leva à grandeza escalada da suscetibilidade calculada no ponto $q = 0$, $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi(q = 0, \lambda_{vmin})$ e à grandeza densidade reescalada, $L^{1/\nu} (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$. A relação entre essas duas grandezas leva à uma invariância do sistema aos seus diversos tamanhos. O gráfico dessa relação parece realizar bastante bem o colapso dos dados da simulação,

E, finalmente, procede-se à construção da função universal da quantidade cumulante

¹¹(de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder, 1997), 523; (Landau, 2000), pg.77-78; (Stanley, 1999); (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

COLAPSO DOS DADOS

Figura 5.24: Função universal $L^{-\gamma/\nu} \chi(q = 0, \lambda_{vmin})$ versus $L^{1/\nu} (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.

de quarta ordem dada pela equação 1.39 que leva à grandeza escalada $\tilde{U} = U$ e também à grandeza densidade escalada, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} (\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$. A relação entre essas grandezas reescaladas deve mostrar o ajuste dos dados para os diversos tamanhos do sistema. Essa última relação completa o roteiro da busca por adicionais evidências à sustentabilidade da hipótese da consistência dos valores obtidos, por meio da simulação computacional no ponto crítico que são o valor crítico da densidade $\lambda_c = 0.0805$ e os valores para seus expoentes críticos como $\beta/\nu = 0.1273 \pm 0.0011$ e $\gamma/\nu = 1.780 = 0.014$. O colapso dos dados para a função universal da quantidade do cumulante de quarta ordem escalada *versus* a densidade escalonada mostra, como os demais gráficos das funções universais, um ajuste bastante bom. O gráfico seguinte é bastante expressivo quanto a este resultado.

Figura 5.25: Função universal U versus $L^{1/\nu}(\lambda_{vmin} - \lambda_c)/\lambda_c$.

5.3 Os tipos de desordem: “annealed” e “quenched”.

O último problema a ser abordado é aquele de uma comparação entre duas possíveis abordagens dos modelos VMAJ: a abordagem “annealed” e a abordagem “quenched”. A abordagem da simulação computacional feita até agora no capítulo anterior e na parte anterior deste capítulo é denominada de “annealed”. Nesta seção o objetivo é abordar o modelo VMAJ de maneira “quenched” para proceder então a uma comparação entre os resultados dessas duas abordagens. A primeira comparação é comparar as possíveis alterações nos valores críticos da transição de fase. A segunda comparação é analisar possíveis alterações na natureza da transição de fase e finalmente por meio do cálculo dos expoentes críticos analisar possíveis alterações na classe de universalidade do modelo estudado.

5.3.1 O modelo VMAJ98AN: a abordagem “annealed”.

Nesta seção o objetivo é tratar o modelo formado da combinação convexa de sub-modelos do modelo do votante majoritário VMAJ2.2, consistindo inicialmente da seguinte combinação $\lambda_{1001} = 0.98$ e $\lambda_{1010} = 0.02$. A simulação computacional desse modelo VMAJ2.2.2, segundo o método do tipo cozido (“annealed”) é denominada de VMAJ2.2.2AN. Esse tipo de desordem (Brout, 1959) é aquele em que se consideram sistemas (cozidos) nos quais o tempo de difusão é maior ou da mesma ordem que o de relaxação. A simulação computacional foi seguida da análise dos dados do mesmo modo conduzido anteriormente, portanto, em três etapas, que proporciona uma avaliação de três relevantes grandezas do

sistema: o cumulante de quarta ordem, a magnetização e a suscetibilidade. Na primeira etapa resolve-se o problema de calcular o valor crítico da transição de fase com o método do cumulante que, para uma simulação computacional com 2×10^6 passos de Monte Carlo, forneceu o valor $q_c = 0.0666$ cujo gráfico vê-se a seguir

Figura 5.26: O gráfico do cumulante de quarta ordem *versus* q .

Na seqüência procurou-se determinar a natureza dessa transição de fase contando com os dois métodos já utilizados exaustivamente: o comportamento da magnetização e da suscetibilidade¹². O gráfico seguinte reflete o comportamento padrão da magnetização para uma transição de fase contínua,

¹²(Privman, 1990); (Binder, 1976).

Figura 5.27: O gráfico da magnetização M_L versus q .

Do mesmo modo esse outro gráfico na sequência ilustra o traço característico da transição de fase contínua para a relação entre a suscetibilidade¹³ do sistema *versus* o parâmetro indutor da transição com sua tendência para a divergência em torno do ponto crítico.

Figura 5.28: O gráfico da suscetibilidade χ_L versus q .

¹³(Privman, 1990); (Binder, 1976).

Identificado o valor crítico e a natureza da transição de fase procura-se agora, nesta nova etapa, calcular os expoentes críticos para esse modelo. E, resolver por esse meio o problema da identificação da classe de universalidade. Esta etapa é abordada por meio da hipótese de escala¹⁴, a qual consiste de duas partes. Na primeira faz-se uso das leis de potências e de gráficos log-log¹⁵ para obter tais expoentes críticos. O primeiro destes expoentes é dado pela lei de potência do comportamento da grandeza suscetibilidade em torno do ponto crítico, ou seja, γ/ν . Esse expoente¹⁶ pode ser obtido de dois modos: com o uso do valor crítico da transição de fase ou sem tal valor, e, neste caso, utilizando o valor máximo da suscetibilidade, χ_L , e seu comportamento divergente com o tamanho crescente do sistema. Por este último método e da regressão linear obtém-se o valor do expoente $\gamma/\nu = 1.7250 \pm 0.0128$ como mostra o gráfico a seguir.

Figura 5.29: O gráfico da $\ln \chi_{\max}$ versus $\ln L$.

O mesmo expoente crítico é obtido agora a partir dos valores da suscetibilidade no ponto crítico q_c ou seja, $\chi_L(q_c)$, por meio da lei de potência 1.41 obtida da equação 1.38 e por meio da regressão linear. Esse processo é mostrado abaixo com a ajuda da interpolação o qual fornece o valor de $\gamma/\nu = 1.762 \pm 0.0066$.

¹⁴ (Stanley, 1999)

¹⁵ (Binder, 1997), pg.522-525; (Landau, 2000), pg.77-79; (de Oliveira, 1996), pg. 1322; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

¹⁶ (Binder, 1997), pg.522-523.

Figura 5.30: O gráfico do $\ln \chi_q$ *versus* $\ln L$.

O segundo dos expoentes críticos relevantes é dado pela relação β/ν cujo valor obtém-se também, por meio da lei de potência 1.40, por meio da regressão linear, dos valores da magnetização¹⁷ no ponto crítico, $M_L(q_c)$ para diversos tamanhos do sistema. Como pode-se ver a seguir, esse valor é $\beta/\nu = 0.1248 \pm 0.0024$,

Figura 5.31: O gráfico do $\ln M_L$ *versus* $\ln L$.

¹⁷(Binder, 1997); pg. 522-525.

Com esses valores para os expoentes críticos pode-se classificar o modelo VMAJ2.2AN como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising confirmando o argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985) de que por possuir a propriedade de simetria por inversão de sinal do spin ele estaria nessa classe de universalidade. A segunda parte da hipótese de escala está voltada para a construção de uma função universal¹⁸ para cada uma das grandezas mencionadas anteriormente, magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem. Essas funções levam ao colapso dos dados para os diversos tamanhos do sistema. A ocorrência desse colapso aparece como uma espécie de teste de consistência para esses valores característicos do modelo por meio dos quais constroem-se essas funções. A primeira dessas funções universais é a da magnetização cuja relação dada por 1.37 leva à grandeza magnetização reescalada, $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M_L$ e à grandeza reescalada $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. A relação entre essas grandezas, prediz o método de escala de tamanho finito, deve mostrar uma invariância aos dados para os diversos tamanhos do sistema. Esse gráfico para os dados da simulação, com um ajuste bastante bom, pode ser visto a seguir,

Figura 5.32: O gráfico do colapso $L^{\beta/\nu} M_L$ versus $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

Do mesmo modo tem-se a função universal para a suscetibilidade dada por 1.38 que leva à grandeza reescalada $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi$ e à grandeza $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. A relação entre essas grandezas deve produzir um colapso dos dados. O gráfico dessa relação para os dados da simulação para alguns tamanhos do sistema pode ser visto na sequência

¹⁸(de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder, 1997), 523; (Landau, 2000), pg.77-78; (Stanley, 1999), S360; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

Figura 5.33: O gráfico do colapso $L^{-\gamma/\nu} \chi$ versus $L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$.

E, finalmente, o mesmo tipo de consideração pode ser feita para a função universal associada com o cumulante. Essa função universal leva à grandeza reescalada $\tilde{U} = U$, e à grandeza reescalada $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$. A relação entre essas grandezas deve produzir um colapso dos dados. Isso que se pode observar no gráfico seguinte para essa relação com os dados obtidos pela simulação computacional para alguns tamanhos do sistema,

Figura 5.34: O gráfico do colapso U versus $L^{1/\nu} (q - q_c)/q_c$.

O ponto relevante a observar é que, para esse modelo convexo do votante majoritário, abordado segundo o método “annealed”, VMAJ2.2.2AN, em que o sistema é tratado como um sistema cozido, o valor crítico da transição de fase é dado por $q_c = 0.0666$, apresenta

uma transição de fase contínua e classifica-se, por meio dos valores dos seus expoentes críticos, na classe de universalidade de Ising. O objetivo é compará-lo com ele mesmo mas agora considerado-o segundo o método de desordem “quenched”, em que o sistema é, então, tratado como temperado.

5.3.2 O modelo VMAJ98Q: a abordagem “quenched”.

Nesta seção vão ser estudadas as propriedades críticas do mesmo modelo anterior em sua versão de modelo convexo, mas, agora, submetido a um processo em que se tem apenas a desordem de estados, considerando-se as ligações como fixas ou congeladas. De acordo com o que se sabe dos estudos sobre sistemas desordenados, um dos processos possíveis pelos quais alguns materiais foram produzidos é aquele denominado de “quenched”. Neste tipo de processo, o que está acontecendo é que o tempo de relaxação é muito menor do que o tempo de difusão das ligações. Assim, nestas condições, pode-se aceitar que os átomos ou spins estão fixos nos sítios da rede e do mesmo modo as formas de ligação entre eles. Diferentemente das seções anteriores, não se tratará de todos os modelos, mas apenas do modelo convexo do votante VMAJ2.2. Vai-se trabalhar com um sub-modelo desse modelo, mais exatamente com o modelo VMAJ2.2.2. Pretende-se utilizá-lo para definir o perfil do valor de alguns parâmetros críticos para este tipo, as formas de ligações geométricas congeladas de sistema desordenado. O modelo VMAJ2.2.2 segundo o tratamento “quenched” será denominado de VMAJ2.2.2Q para diferir do modelo VMAJ2.2.2AN tratado segundo a abordagem “annealed”. O cálculo do valor do ponto crítico é feito por meio dos mesmos métodos descritos anteriormente. O primeiro objetivo é identificar a presença de uma transição de fase obtendo tanto o valor crítico do parâmetro indutor da transição de fase, q_c , quanto identificando a natureza dessa transição. Depois, pelo estudo do comportamento desse sistema em torno do ponto crítico, identifica-se a sua classe de universalidade. Podem-se também comparar os resultados dessa abordagem “quenched” com os resultados da abordagem “annealed”. O modelo VMAJ2.2.2Q mostra possuir, pois apresenta as mesmas regras de transição, a propriedade da simetria “up - down”, então, já mostra, pelo argumento de Grinstein(Grinstein et al., 1985), do ponto de vista teórico, pertencer à classe de universalidade do modelo de Ising.

5.3.3 A simulação computacional: resultados numéricos e análise dos dados.

Pela simulação computacional do modelo VMAJ2.2.2Q - mas, como descrito acima, tal que $\lambda_{1001} = 0.98$ e, portanto, $\lambda_{1010} = 0.02$ - verifica-se que o uso da equação 1.36 do

cumulante de quarta ordem¹⁹

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (5.10)$$

no ponto crítico assume um valor específico, $U(q_c) = 0.61$. No entanto, pode-se prescindir desse valor, e aplicar essa equação para diversos tamanhos do sistema, o valor do ponto crítico é dado pela intersecção das curvas do cumulante associados com o tamanho L . O gráfico abaixo mostra que se pode identificar por meio deste método o valor do ponto crítico como dado por $q_c = 0.058$.

Figura 5.35: Gráfico U_L versus q com $U^* = 0.61$.

Identificado o valor do ponto crítico, identifica-se agora a natureza dessa transição de fase. Para esse fim faz-se uso de uma análise mais qualitativa que é dada pela análise do comportamento da magnetização, M_L , como função do parâmetro indutor da transição de fase, q , na qual se reconhece o padrão de comportamento típico²⁰ de um sistema que passa por uma transição de fase do tipo contínuo, ou seja, que, para o valor $q > q_c$, apresenta magnetização nula em redes muito grandes, simulados pelos diversos tamanhos $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$, $L = 40$, enquanto mostra que a magnetização aumenta continuamente do valor nulo para o máximo, para valores de $q < q_c$ como ilustrado a seguir.

¹⁹ (Binder and Heermann, 1988), pg.46 e pg.107; (Landau, 2000), pg.78; (de Oliveira, 1996), pg.1322; (Binder, 1997), pg. 523; (de Oliveira and Chiappin, 1997), pg. 311-312.

²⁰ (Privman, 1990); (Binder, 1976); (Binder, 1997), pg. 522-523.

Figura 5.36: O gráfico da magnetização, M_L versus q .

O comportamento da suscetibilidade χ_L versus q , de tendência para a divergência em torno do ponto crítico, para L crescente, que é indicativo da transição contínua, pode ser visto no gráfico abaixo.

Figura 5.37: O gráfico da suscetibilidade, χ_L versus q .

A seqüência do roteiro de procedimentos nessa área da análise de fenômenos críticos requer agora o problema da classe de universalidade. E, portanto, o cálculo dos expoentes críticos. O primeiro dos expoentes críticos relevantes, associado com o comportamento da magnetização²¹ nas proximidades do ponto crítico, é dado por β/ν . Com o uso dos recursos mencionados anteriormente pode-se construir o gráfico log-log seguinte, com os valores da magnetização no ponto crítico, q_c , pelo qual obtém-se o valor do expoente crítico como $\beta/\nu = 0.1220 \pm 0.0023$, bastante próximo do valor exato $\beta/\nu = 0.1250$ do modelo de Ising bidimensional.

Figura 5.38: O gráfico de $\ln M_L$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente β/ν .

À suscetibilidade está associada o expoente crítico γ/ν . Tal expoente crítico Com o uso de um gráfico log-log chega-se ao valor do expoente crítico γ/ν . Isto de dois modos, no ponto crítico, q_c , ou, pelo valor do parâmetro indutor para os valores máximos da suscetibilidade para cada tamanho, L , do sistema. O primeiro gráfico é representativo do primeiro método que dá $\gamma/\nu = 1.796 \pm 0.007$

²¹(Landau, 2000); (de Oliveira, 1996).

Figura 5.39: O gráfico da $\ln \chi_q$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente γ/ν .

Com o segundo método chega-se ao valor de $\gamma/\nu = 1.762 \pm 0.010$, conforme o gráfico a seguir,

Figura 5.40: O gráfico da $\ln \chi_{\max}$ versus $\ln L \rightarrow$ expoente γ/ν .

Esses resultados para os expoentes críticos são evidências de que o modelo VMAJ2.2Q pertence à classe de universalidade do modelo de Ising(Grinstein et al., 1985).

Agora, como última etapa do roteiro, faz-se o teste da consistência dos valores obtidos para o parâmetro indutor de transição de fase e para os expoentes críticos. Ele faz uso da função universal para cada uma das grandezas utilizadas anteriormente, magnetização, suscetibilidade e cumulante de quarta ordem, para os diversos tamanhos do sistema. O resultado é um gráfico do colapso ou da superposição dos dados reescalados para

cada uma das funções. Com os valores críticos q_c , e os expoentes β/ν e γ/ν do sistema submetido ao processo “quenched”, pode-se construir, então, tais gráficos do colapso que ilustram a consistência desse conjunto de valores para os parâmetros característicos da transição de fase.

A partir da função universal magnetização dada pela relação 1.37 pode-se construir o gráfico do colapso para as grandezas reescaladas magnetização $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$ e da grandeza reescalada $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$. Esse gráfico para os dados da simulação computacional pode ser visto na sequência,

Figura 5.41: O gráfico do colapso $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

O segundo desses gráficos está relacionado com a função escala da suscetibilidade , 1.37, descrevendo o comportamento da suscetibilidade reescalada, $\tilde{\chi} = L^{\gamma/\nu} \chi$, versus, q_c reduzido e reescalado, $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$, como se pode ver abaixo

COLAPSO DOS DADOS

Figura 5.42: O gráfico do colapso $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu}\chi$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

Finalmente, tem-se a função escala da quantidade do cumulante de quarta ordem U , versus, $L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$, que proporciona o gráfico seguinte

COLAPSO DOS DADOS

Figura 5.43: O gráfico do colapso $\tilde{U} = U$ versus $\tilde{\varepsilon} = L^{1/\nu}(q - q_c)/q_c$.

Os valores obtidos pela simulação computacional para o modelo VMAJ2.2.2 com $\lambda_{1001} = 0.98$ e $\lambda_{1010} = 0.02$ são bastante adequados e consistentes. Neste contexto, compara-se este conjunto com o conjunto dos valores para o mesmo modelo VMAJ2.2.2, mas, agora, na abordagem “annealed” realizado no início deste capítulo. Pode-se verificar, a partir dos expoentes críticos, que ambos os modelos se encontram na classe de universalidade do modelo de Ising. Entretanto, eles parecem diferir quanto ao valor numérico

do ponto crítico. O modelo VMAJ2.2.2AN na abordagem “annealed” apresenta o valor de $q_c = 0.066 \pm 0.003$. Isso é mostrado pelos dois gráficos abaixo. O primeiro gráfico, imediatamente abaixo, fornece um enfoque mais panorâmico,

Figura 5.44: O valor de $q_c = 0.066$ para $\lambda_{1001} = 0.98$ pelo método “annealed”.

O segundo oferece um enfoque mais microscópico desse valor.

Figura 5.45: O mesmo ponto crítico anterior em destaque.

Em contrapartida, na abordagem “quenched”, VMAJ2.2.2Q, esse valor, como mostrado acima, cai para $q_c = 0.058 \pm 0.003$. Para efeito de comparação, reapresenta-se aqui o gráfico mostrando, pelo método do cumulante, o valor crítico do parâmetro indutor.

Metodo do Cumulante $\rightarrow q_c=0.058 \pm 0.003$

Figura 5.46: O gráfico do valor crítico $q_c = 0.058$ pelo método “quenched”.

Para efeito comparativo direto, superpomos os dois gráficos representando os valores do ponto crítico do modelo M2.2.2, para a mesma densidade $\lambda_{1001} = 0.98$ tanto para a abordagem “annealed” quanto para a abordagem “quenched” como se segue:

Figura 5.47: A superposição dos dois gráficos para $\lambda_{1001} = 0.98$.

5.3.4 O modelo VMAJANQ: q_c versus λ_{1001} .

Fez-se aqui uma abordagem introdutória acerca da comparação entre as duas abordagens, “quenched” e “annealed” para um dos modelos VMAJ2.2 ou seja o modelo VMAJ2.2.2. Este modelo VMAJ2.2.2 consiste na combinação convexa da forma geométrica de ligação (1001) com a forma (1010). Nesta abordagem foi identificado os traços importantes do modelo com seus expoentes críticos para uma das realizações do mod-

elo VMAJ2.2.2 ou seja aquele com a combinação convexa $\lambda_{1001} = 0.98$, e, portanto, $\lambda_{1010} = 0.02$ classificando-o como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising. A abordagem da simulação computacional foi feita para uma rede de vários tamanhos, $L = 10$, $L = 20$, $L = 30$, $L = 40$. Contudo, agora a abordagem simulacional foi estendida para alguns outros valores da densidade λ_{1001} , lembrando também que $\lambda_{1001} + \lambda_{1010} = 1$ com 2×10^6 passos de Monte Carlo. No caso da abordagem “quenched”, usou-se ainda de um 20 “loops” externos, ou 20 amostras, para garantir o “self-average” do sistema, representado pelo modelo M2.2.2. O resultado da abordagem da simulação computacional proporcionou a seguinte relação entre os valores críticos q_c e a densidade λ_{1001} . Ela é expressa no gráfico abaixo.

Figura 5.48: O gráfico da abordagem “quenched” de q_c *versus* λ_{1001} .

Finalmente, a comparação entre as duas abordagens pode ser visualizada pela superposição dos dois gráficos no seguinte gráfico comparativo, para a abordagem “annealed” e para a abordagem “quenched”.

Figura 5.49: O gráfico da superposição dos dois gráficos: “quenched” e “annealed”.

5.4 Conclusões.

Nestes dois últimos capítulos o modelo convexo do votante minoritário foi construído e estudado. A analogia com o modelo do votante majoritário e sua fase ferromagnética conduziu à construção do modelo do votante minoritário com uma fase antiferromagnética. O estudo de suas propriedades críticas mostrou uma transição de fase contínua e que os expoentes críticos o classificam como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising. Em seguida, o estudo da combinação convexa dos modelos do votante majoritário e do minoritário, por analogia com o modelo de Ising $\pm J$, revelou uma transição de fase contínua, de valor crítico $\lambda_{vmin} = 0.0805$ e também pertencente, pelos expoentes críticos, na classe de universalidade de Ising. Cogitou-se da possibilidade de apresentar um fase de vidro de spin, no entanto, as tentativas computacionais não foram bem sucedidas para duas dimensões. Ainda que há esperanças de que tal ocorra para dimensões maiores. Uma hipótese adotada nesta tese é de considerar os modelos convexas votante majoritário como sistemas desordenados portanto que devem ser tratados com os tipos de desordens “annealed” e “quenched”. Esses modelos foram tratados com os dois tipos sendo que a comparação mostrou discrepâncias em seus valores críticos. Em particular, os resultados para os tipos de desordem “quenched” apontam para uma indecisão na presença de três regiões em lugar de duas regiões para $0 \leq \lambda \leq 1$ conforme os gráficos anteriores. Pois eles mostram que q_c poder-se-ia anular para algum valor de λ . Acredita-se que uma abordagem computacional mais rigorosa poderia proporcionar decisões conclusivas quanto a esses resultados atuais.

Capítulo 6

O PROBLEMA DA EMERGÊNCIA DA COOPERAÇÃO ENTRE INDIVÍDUOS INTERAGENTES.

6.1 Introdução.

Neste capítulo (Chiappin and Oliveira, 1999) pretende-se investigar um outro modelo, agora, na área de teoria dos jogos, mas, novamente, no quadro teórico de processos estocásticos irreversíveis fora de equilíbrio. Esse estudo concentra-se sobre o problema de achar as condições de emergência da cooperação entre indivíduos interagentes que se comportam de acordo com seu auto-interesse na evolução de jogos dinâmicos. A análise, por meio da teoria dos jogos dinâmicos, do problema das condições de emergência da cooperação entre indivíduos, que se comportam de acordo com seu auto interesse, foi introduzida por Axelrod(Axelrod, 1984). A análise é feita por meio de um modelo de duas ações conhecido como Dilema do Prisioneiro. Este modelo consiste em representar cada indivíduo, em sua interação com os outros indivíduos em sua vizinhança, dispondo para isso de duas ações possíveis, cooperar ou não cooperar, com respeito a qualquer assunto de interesse dos indivíduos em interação. O jogo do dilema do prisioneiro é tal que para qualquer escolha de um jogador, cooperação ou não-cooperação, o outro jogador consegue um “payoff” maior escolhendo a estratégia defensiva de sempre jogar não cooperação. Contudo, se ambos os jogadores escolherem tal estratégia defensiva, não-cooperação, o “payoff” total será menor do que o “payoff” total que conseguiriam se ambos tivessem escolhido cooperação. Esta é a solução estática do jogo.

A abordagem dinâmica do problema foi introduzida por Axelrod(Axelrod, 1984) e é

extensa e frequentemente utilizada por outros autores¹. Em cada movimento, os jogadores revisam suas escolhas e jogam de acordo com regras específicas ou, usando um termo mais apropriado em teoria dos jogos, *strategies*. O movimento seguinte poderia depender apenas do último movimento ou poderia incluir a trajetória inteira do jogo até a situação atual. A estratégia poderia ser determinística, tal como a estratégia “tit-for tat”, ou ainda, probabilística. Nesta investigação consideramos a evolução do jogo ser um processo estocástico de Markov, no qual as estratégias são probabilísticas e dependem apenas do último movimento. Além disso, o processo de Markov é considerado do tipo tempo-contínuo, ou seja, assíncronico, que consiste em mudar o estado de um único indivíduo em cada movimento. Esse processo, descrito pela equação-mestra, contrasta com aquele do autômato celular probabilístico no qual os estados são revisados sincronicamente ou os estados de todos os indivíduos são revisados simultaneamente.

Nesta investigação tratamos com o problema de achar as condições de emergência da cooperação na evolução do jogo acima definido, no contexto dos recursos técnicos de uma representação dos sistemas de partículas interagentes e tendo como representação modelos de gás de redes ou reticulados, definindo suas configurações. E, além disso, devido a suas regras de evolução, pode-se também classificá-lo no contexto de sistemas irreversíveis, uma vez que essas regras de dinâmica, não conduzem a uma hamiltoniana, ou antes, não satisfazem o princípio do balanceamento detalhado. Neste contexto, apresentamos modelos para estudar a evolução de n indivíduos interagentes localizados nos sítios de uma rede. Os indivíduos participam do jogo de duas ações somente com os indivíduos pertencentes a uma pequena vizinhança, a qual pretende simular interações reais entre indivíduos de uma população. Jogos espaciais similares têm sido considerados antes por vários autores². Em um contexto mais particular, focamos mais especificamente o trabalho desenvolvido por Szabó e Töke (Szabó and Töke, 1998) e a partir do qual pretendemos obter resultados com regras distintas e mais simplificadas a serem descritas. A principal regra - *s1*- do jogo é que um jogador não muda sua ação quando ele e seu oponente mantêm a mesma ação na jogada imediatamente anterior. Esta regra leva a existência de dois estados congelados (absorventes), um no qual a rede está completa com cooperadores e a outra na qual a rede está completa com não cooperadores. A evolução desse jogo é realizada por meio de simulações numéricas em redes de uma e duas dimensões. O primeiro resultado que essas simulações em redes quadradas tem mostrado é que além de dois estados congelados há também um estado ativo estacionário no qual a rede tem uma densidade finita de cooperadores e não cooperadores. O segundo resultado importante das simulações mostra que o estado ativo está presente em duas dimensões mas não em uma.

¹(Sigmund, 1993); (Nowak et al., 1995).

²(Nowak and May, 1993); (Nowak et al., 1994); (Huberman and Glance, 1993); (Szabó and Töke, 1998).

6.2 O modelo.

Vamos considerar um modelo para estudar a evolução de N spins (indivíduos) interagentes localizados nos sítios de uma rede. Esses indivíduos interagem apenas com indivíduos pertencentes a uma pequena vizinhança em torno dele. Para isso vamos considerar a população de N spins (jogadores) localizados sobre os sítios de uma rede regular de tamanho L . O jogo evolui como uma sucessão de “rounds” (rodadas) ocorrendo em intervalos de tempos (definidos como a revisão dos passos de Monte Carlo, os quais incluem uma varredura da rede), no quais os indivíduos jogam suas ações possíveis: cooperação (C) ou não-cooperação (D). Em cada intervalo de tempo um jogador, escolhido aleatoriamente, revisa sua ação de acordo com uma regra (estratégia) que especifica o resultado dependendo do que os vizinhos tenham jogado na rodada anterior. O modelo é um modelo estocástico Markoviano governado por uma equação mestra cujas regras e taxas de transição seguem-se abaixo.

Um dado jogador (spin) interage somente com os jogadores (spins) pertencentes a uma pequena vizinhança, aqui definidos como jogadores vizinhos mais próximos. Mas, seguindo Axelrod (Axelrod, 1984), assume-se uma primeira regra que determina o número de vizinhos dentre os quatro vizinhos mais próximos com os quais um dado jogador se relaciona em cada interação: apenas um jogador de cada vez, ou seja, ele interage apenas com um vizinho dentre os quatro possíveis. De acordo com esta regra, quatro possíveis resultados podem ocorrer, de uma rodada deste jogo de duas ações entre um dado jogador e seu oponente (vizinho),: CC, CD, DC e DD. Esses resultados Nowak e seus colaboradores (Nowak et al., 1995) denominaram de “Recompensa”, “Perda”, “Tentação”, “Punição”, respectivamente. As regras propostas para fazer evoluir o jogo são, contudo, distintas daquelas propostas por Szabó e Töke (Szabó and Töke, 1998). Elas podem ser descritas como seguem.

Em primeiro lugar, adotamos o sistema de “single flip spin” para alterar a configuração atual do jogo para uma nova configuração, ou seja, um jogador ou spin é escolhido aleatoriamente, o jogador i , dentre os N jogadores da rede. Em seguida, estabelecem-se as regras segundo as quais este jogador ou spin revisa a sua ação, a qual se dá pela avaliação da sua própria ação e da ação de um único vizinho escolhido dentre os quatro possíveis como dita a regra anterior.

Assim, o processo de revisão da ação do jogador i , começa pela escolha de um jogador oponente ou vizinho, jogador j , também de maneira aleatória dentre os quatro jogadores vizinhos possíveis. Na sequência, temos as seguintes regras:

- (a) se na rodada imediatamente anterior, ambos os jogadores, ou spins, i e j , têm mantido a mesma ação, isto é, se o resultado da jogada anterior foi os estados CC ou DD, portanto, “Recompensa” ou “Perda”, conforme a nomenclatura estabelecida

por Nowak(Nowak et al., 1995), então, o jogador i não muda sua ação, ou seja, mantém sua mesma ação anterior.

- (b) se, em contrapartida, eles, os jogadores ou spins, têm ações distintas como resultado da rodada anterior, portanto, CD ou DC, então, têm-se dois casos a serem considerados:
 1. O primeiro caso ocorre, se o jogador i tem jogado C e o jogador j tem jogado D, isto é, o resultado anterior é CD, ou seja, “perda”; então, neste caso, o jogador i revisa sua ação, agora, para D, com uma taxa de transição a .
 2. O segundo caso ocorre, se o jogador i tem jogado D e o jogador j tem C, isto é, o resultado anterior é DC, ou seja “tentação”, então, neste caso, um outro jogador vizinho k é escolhido, distinto do jogador j ($k \neq j$), de maneira aleatória.
 - (i) Se o jogador k tem jogado C, então, o jogador i muda sua ação i , e joga C, com uma taxa de transição b_1 .
 - (ii) Se, contudo, o jogador k tem jogado D, então, o jogador i também muda sua ação, e joga C, mas, com uma taxa de transição b_2 .

Deste modo, podemos observar que o modelo trabalha com três parâmetros que são as taxas de transição a , b_1 e b_2 . No entanto, como essas taxas de transição aparecem nos termos da direita da equação-mestra, podemos dividi-los todos os dois membros da equação-mestra por b_2 . Assim, o modelo pode ser reduzido à dependência de apenas dois parâmetros. Desta forma, podemos definir tanto o parâmetro de retaliação como $r = a/b_2$, quanto o parâmetro de cooperação como $c = b_1/b_2$. O parâmetro r pode ser interpretado como a magnitude ou intensidade com a qual o jogador i retalia, jogando D, na rodada $t + 1$, contra seu oponente j , quando este não coopera na rodada t , portanto, joga a ação D, enquanto i joga C na mesma rodada, produzindo, então, como resultado da rodada t , CD ou “perda”. Assim, na rodada $t + 1$, o jogador i vai ser tentado, com taxa r , a retaliar o jogador j jogando D. Com o aumento da magnitude da retaliação, ou seja, com o aumento de r , espera-se um decréscimo no número de indivíduos que querem ser cooperadores ou que vão jogar a ação de cooperação. Do mesmo modo, pode-se interpretar o parâmetro c como fornecendo a magnitude da cooperação entre indivíduos, o que pode ser traduzido pela quantidade de indivíduos que jogariam a ação C, cooperação, dentre os N indivíduos no jogo. Aumentando c espera-se aumentar o número de indivíduos propensos à cooperação, ou seja, a jogar a ação C, cooperação.

Essas regras podem ser formalizadas de modo a construir a equação governando esse jogo evolutivo que é a equação-mestra. Como vimos na parte inicial, em que descrevemos

o aspecto teórico do processo estocástico markoviano, essa equação básica é a equação-mestra. O sistema pode ser descrito por um gás de rede. Uma rede de N sítios em que cada sítio localiza-se um indivíduo, cuja ação é descrita por uma variável aleatória σ_i . Como esse indivíduo tem apenas duas ações possíveis, coopera (+) e não coopera (-), seu estado é descrito por $\sigma_i = \pm$. Desta forma, os 2^N estados do sistema de N indivíduos são descritos pelo vetor $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}, \sigma_N)$. E a evolução temporal desse sistema através do espaço das 2^N configurações é dada pela equação-mestra:

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} W(\sigma, \sigma') P(\sigma', t) - W(\sigma', \sigma) P(\sigma, t), \quad (6.1)$$

a qual descreve a probabilidade de transição do estado σ para o estado σ' por unidade de tempo. $P(\sigma, t)$ é a probabilidade de ocorrer a configuração σ no instante t e $W(\sigma, \sigma_1)$ é a taxa de transição de σ_1 para σ .

Como nessa tese, estamos tratando apenas do caso em que a dinâmica de evolução das configurações é feita pelo método do “single flip spin”, isto é, que as transições entre as configurações são realizadas pela avaliação de um único sítio da rede, podemos escrever a taxa de transição com o uso da função delta na seguinte forma:

$$W(\sigma, \sigma') = \sum_i \delta(\sigma'_1, \sigma_1) \delta(\sigma'_2, \sigma_2), \dots, \delta(\sigma'_i, -\sigma_i), \dots \delta(\sigma'_N, \sigma_N) w_i(\sigma), \quad (6.2)$$

em que $\delta(\sigma_j, \sigma'_j) = 1$, se $\sigma_j = \sigma'_j$ e $\delta(\sigma_j, \sigma'_j) = 0$, se $\sigma_j \neq \sigma'_j$. E o fator $w_i(\sigma)$ é interpretado como a taxa de inversão do estado do i -ésimo sítio de σ_i para $-\sigma_i$. Agora, se substituirmos esta última expressão na equação-mestra, obtém-se a forma da equação-mestra para o caso em que se usa o método do “single flip spin”, que consiste em escolher aleatoriamente apenas um spin da rede e avaliar a sua alteração de estado, gerando assim uma nova configuração, e com a repetição desse processo, por sua vez, a trajetória no espaço das configurações ou dos estados do sistema em questão, formado de 2^N estados ou configurações, ou seja, obtém-se a nova forma da equação-mestra,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_i^N (w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)). \quad (6.3)$$

Nela $\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)$ e é obtida da troca de σ_i por $-\sigma_i$. Pretendemos agora, adaptar essas expressões da equação-mestra e da taxa de transição para a representação que adotamos para formalizar o modelo desse sistema de indivíduos interagentes e estudar as condições de emergência de cooperação. Assim, em lugar de representarmos as ações de cada indivíduo pela variável dinâmica σ_i , utilizamos a variável dinâmica η_i , que toma os valores de 1 ou 0, representando as duas ações possíveis do indivíduo i : cooperar ou não cooperar, respectivamente. Com essa representação, reescrevemos a

equação-mestra 6.2, governando a evolução temporal da probabilidade $P(\eta, t)$ de encontrar o sistema no estado $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$ no tempo t , na seguinte forma

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_i (w_i(\eta^i)P(\eta^i, t) - w_i(\eta)P(\eta, t)), \quad (6.4)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \eta_2, \dots, 1 - \eta_i, \dots, \eta_N)$.

A taxa de transição $w_i(\eta)$ de η_i para $1 - \eta_i$ é dada, então, por:

$$w_i(\eta) = \frac{1}{z} \sum_j (\eta_i(1 - \eta_j)a + (1 - \eta_i)\eta_j \frac{1}{z-1} \sum_{k(\neq j)} [b_1\eta_k + b_2(1 - \eta_k)]), \quad (6.5)$$

em que j e k são os vizinhos mais próximos de i , e z é o número de coordenação da rede.

Como o interesse deste trabalho recai principalmente na densidade de cooperadores $\rho = \langle \eta_i \rangle$, é importante que tenhamos a evolução temporal na aproximação de campo médio da média $\langle f(\eta) \rangle$ de uma função $f(\eta)$ de estado do sistema, que representa um dado observável ou quantidade mensurável do sistema. Mas, isso já obtivemos nos capítulos anteriores, onde se demonstrou que

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=1}^N \langle (f(\eta^i) - f(\eta))w_i(\eta) \rangle. \quad (6.6)$$

Com esta equação, podemos obter, por meio da substituição, e um pouco de álgebra, a evolução temporal da média $\rho = \langle \eta_i \rangle$. Depois, por meio de uma aproximação de campo médio a equação de evolução desta quantidade é dada por,

$$\frac{d}{dt}\rho = \rho(1 - \rho)[-a + b_1\rho + b_2(1 - \rho)] \quad (6.7)$$

. As soluções estacionárias ou seja para $\frac{d}{dt}\rho = 0$ são $\rho = 0$, que é um estado de não-cooperação (D), $\rho = 1$ que é um estado de cooperação (C), e

$$\rho = \frac{1 - r}{1 - c} \quad (6.8)$$

o estado ativo (A). Linearização em torno de $\rho = 0$ mostra que o estado D é estável para $r > 1$ e instável para $r < 1$. Linearização em torno de $\rho = 1$ mostra que o estado C é estável para $c > r$ e instável para $c < r$.

6.3 Simulação numérica.

Nós simulamos o modelo em uma e duas dimensões. O modelo exhibe dois estados congelados(absorventes): o estado de cooperação (C), no qual $\rho = 1$ e o estado de não-cooperação (D), no qual $\rho = 0$. Além destes dois estados congelados o modelo pode mostrar um estado ativo (A) para o qual $0 < \rho < 1$. Nossas simulações indicam que o

estado ativo está presente na rede de duas dimensões, mas não na de uma dimensão. O diagrama de fase para o caso de uma dimensão mostra apenas os dois estados congelados separados por uma linha de transição de primeira ordem. O estado de não-cooperação (D) ocorre para $r > 1$, embora o estado de cooperação (C) ocorra para $r < 1$, independente do valor de c . Os resultados foram obtidos para uma cadeia de 1000 sítios com condições de contorno periódicas. O estado inicial era um estado completamente aleatório, isto é, uma configuração na qual cada sítio era ocupado por um cooperador ou por um não-cooperador com igual probabilidade. O número de passos de Monte Carlo variou de 10^4 a 10^6 . Em duas dimensões, simulamos o modelo em uma rede quadrada com 100 por 100 sítios iniciando-se com uma configuração completamente aleatória de jogadores. Usamos um número de passos de Monte Carlo que variou de 10^4 a 10^6 . O diagrama de fase é mostrado na figura 1 abaixo,

Diagrama de fase 1

Figura 6.1: Diagrama de fase no plano (r, c) obtido da simulação numérica em uma rede quadrada. As três fases são o estado de plena cooperação (C) para o qual $\rho = 1$, estado ativo (A) para o qual $0 < \rho < 1$, e estado de não-cooperação plena (D) para o qual $\rho = 0$. As linhas de transições C-A e A-D são linhas críticas embora a linha C-D é uma linha de transição descontínua. As três linhas encontra-se no ponto $r = c = 1$.

Esse diagrama mostra três fases: o estado cooperação congelado (C) com $\rho = 1$, o estado de não-cooperação (D) congelado com $\rho = 0$ e o estado ativo (A) com $0 < \rho < 1$. O estado ativo está presente apenas dentro da região $\rho < 1$ e $c < 1$. Nesta região há duas linhas de transição de fase correspondendo às transições C-A e A-D. A densidade ρ varia continuamente quando cruzamos estas duas linhas. A região $r > 1$ e $c > 1$ é separada por uma linha de transição correspondendo à transição (C-D), na qual a densidade pula do valor $\rho = 1$ para $\rho = 0$. As três linhas encontram-se no ponto $c = r = 1$.

Quando variamos r para um valor fixo de $c < 1$, a densidade ρ varia continuamente, como mostrado na figura 2 abaixo.

Diagrama de fase 2

Figura 6.2: Densidade do cooperador ρ versus o parâmetro r para vários valores de c , obtidos das simulações numéricas. Da esquerda para a direita os valores de c são 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, e 0.9.

Cada ponto da figura foi calculado usando 10^4 passos de Monte Carlo. A transição do estado A para o estado congelado (absorvente) (D) é uma transição de fase e seu comportamento crítico está na mesma classe de universalidade do modelo de percolação direcionada. Nós calculamos o expoente crítico β relacionado ao parâmetro de ordem e encontramos resultados os quais estão em bom acordo com os resultados conhecidos para tal classe de universalidade. Como exemplo, construímos o gráfico mostrado na figura 6.3 a seguir, para o caso de $c = 0$, de $\ln \rho$ versus $\ln(r_c - r)$ e procuramos o melhor ajuste linear.

Figura 6.3: Gráfico de $\ln \rho$ versus $\ln \Delta r$ em que $\Delta = r_c - r$ para o caso $c = 0$. As três linhas correspondem, da esquerda para a direita, para valores tentativas de $r_c = 0.798, 0.800$, e 0.802 . O melhor ajuste linear dá $r_c = 0.800 \pm 0.001$ e o expoente crítico $\beta = 0.58 \pm 0.01$.

Achamos, para este caso, $r_c = 0.800 \pm 0.001$ e, da inclinação desta linha, o expoente crítico $\beta = 0.58 \pm 0.01$, o qual está em bom acordo com os resultados para a classe de universalidade da percolação direcionada em $2 + 1$ dimensões (Brower et al., 1978). Cada ponto foi calculado usando 10^6 passos de Monte Carlo. Também, como esperado, achamos que, para $0 < \rho < 1$, a transição do estado A para o estado congelado C é também contínua e pertence à mesma classe de universalidade.

Não podemos deixar de apontar que o caso de $r = c = 1$ corresponde ao do modelo do votante (Lebowitz and Saleur, 1986). É conhecido que em duas dimensões o modelo do votante tem apenas dois estados estacionários independentemente das condições iniciais (Lebowitz and Saleur, 1986). Eles são correspondentes, neste caso, aos estados congelados C e D.

Nosso resultado final decorre da comparação com uma rede com um pequeno número de jogadores interagindo de acordo com as mesmas regras. Neste caso, observam-se apenas os dois estados congelados. Para valores fixos das taxas de transição alcança-se um ou outro estado dependendo das condições iniciais. Quando o número de jogadores cresce para um grande número, o modelo acaba por exibir apenas um dos estados congelados, ou o estado ativo, independentemente da condição inicial. Desta forma, esta comparação ajuda a mostrar claramente que cooperação e não-cooperação são fenômenos coletivos que não dependem de como os jogadores escolhem suas ações no começo do jogo. É importante notar que tal comportamento é típico para todos os sistemas apresentando estados absorventes.

6.4 Conclusões.

O primeiro resultado da análise conduzida acima é que o modelo, em duas dimensões, exibe, de um modo similar àquele de Szabó e Töken (Szabó and Töke, 1998), os dois estados congelados (absorventes): a cooperação ($\rho = 1$) e a não-cooperação ($\rho = 0$). Além disso, como um resumo das considerações acima, o modelo também mostra um estado ativo para o qual $0 < \rho < 1$. O estado de não cooperação ocorre para valores suficientemente grandes de r e o estado de cooperação ocorre para valores suficientemente grandes de c . Para certas combinações de c e r também temos um estado ativo. O segundo resultado relaciona-se com o expoente crítico associado ao comportamento de lei de potência do parâmetro de ordem, quando as taxas de transição aproximam-se de seus valores críticos. Os resultados numéricos obtidos para o expoente crítico β colocou o modelo na classe de universalidade da percolação direcionada como esperado de acordo com a conjectura de Grassberger (Grassberger, 1982) e Janssen (Janssen, 1981).

Capítulo 7

MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO: MODELO QUÂNTICO.

7.1 Introdução.

O objetivo neste capítulo é desenvolver uma outra aplicação do método estocástico numérico como o método de Monte Carlo, agora, contudo, no quadro da mecânica de estatística de equilíbrio e para problemas determinísticos como o problema do autovalor. Neste âmbito vamos tratar do modelo de Ising em um campo transversal definido pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x, \quad (7.1)$$

em que σ_i^x e σ_j^z são os operadores de Pauli colocados no sítio i , e $\Gamma > 0$ é a intensidade do campo transversal. À temperatura zero, o modelo exibe uma transição de fase contínua, para um valor finito, Γ_c , de um estado desordenado ocorrendo para $\Gamma > \Gamma_c$ para um estado ordenado no domínio $\Gamma < \Gamma_c$. Teoricamente essa transição é considerada como pertencente à classe de universalidade do modelo de Ising ordinário (escalar) e, portanto, os expoentes críticos são aqueles do modelo de Ising de dimensão $d+1$. Desta forma o modelo de Ising quântico de uma dimensão é equivalente ao modelo de Ising ordinário (escalar) de dimensão dois. O modelo de uma dimensão pode ser mapeado em um sistema de fermions não interagentes, embora haja o uso de uma transformação de Wigner-Jordan¹ da qual várias quantidades podem ser calculadas exatamente. Neste contexto do mapeamento do modelo de Ising quântico de uma dimensão no modelo de Ising ordinário de duas dimensões, o primeiro objetivo consiste, então, em estabelecer tanto o resultado teórico

¹(Lieb et al., 1961);(Katsura, 1962);(Pfeuty, 1970).

acima, ou seja, tanto o valor numérico exato das grandezas relevantes desse modelo por meio da simulação computacional quanto a identificação da sua classe de universalidade. Para realizar esse objetivo fazemos uso do método Monte Carlo à temperatura zero². Esse método é apropriado para obter as propriedades do estado fundamental de alguns sistemas de spin quânticos. A primeira etapa desse método está em fazer uso da equivalência mencionada acima entre o sistema quântico de dimensão d com o sistema clássico de dimensão $d + 1$. Com isto, simula-se um sistema da mecânica estatística clássica de dimensão $(d + 1)$ construído de tal modo que sua matriz transferência $\mathcal{F}$ comuta com o Hamiltoniano $\mathcal{H}$. Como sabemos, se o comprimento do sistema da mecânica estatística na dimensão extra for suficientemente grande então as suas propriedades serão dominadas pelo maior autovetor. Se, ademais, o maior autovetor de $\mathcal{F}$ for escolhido como o estado fundamental de $\mathcal{H}$, então uma simulação de Monte Carlo do sistema clássico proporcionará as propriedades do sistema quântico à temperatura zero.

O método de Monte Carlo usado aqui assemelha-se a outros métodos estocásticos, tais como o método de Monte Carlo da integral de trajetória³ no sentido de que um sistema clássico de $(d+1)$ -dimensões é usado para obter as propriedades de um sistema de spin quântico de d -dimensões. Contudo, o método de integral de trajetória é realizado à temperatura finita e assim propriedades do estado fundamental devem ser obtidas por uma extrapolação para temperatura zero. Mas, o método de Monte Carlo, por sua vez, já é um método a temperatura zero. E, também, diferente de outros métodos de Monte Carlo a temperatura zero aplicados aos sistemas de spin quânticos tais como o método de Monte Carlo da função de Green⁴ e o algoritmo “random-walk” dirigido⁵. Estas técnicas, por sua vez, são versões estocásticas do método da potência no qual o maior autovetor é projetado por uma multiplicação matricial repetida. O foco do presente capítulo é a aplicação do método de Monte Carlo ao modelo de Ising unidimensional em um campo transversal para obter valores numéricos para as grandezas relevantes deste modelo. Obtiveram-se os valores tanto para a magnetização, M , e a suscetibilidade, χ , ambas na direção z , tanto quanto para o cumulante reduzido de quarta ordem⁶ U como função de Γ para diversos tamanhos, L , do sistema. Uma vez obtidos esses valores numéricos passamos à análise desses dados do método de Monte Carlo com a ajuda de um outro método da Mecânica Estatística, o método de escala de tamanho finito. Reiteramos o ponto em que

²(Sauerwein and de Oliveira, 1994); (Sauerwein and de Oliveira, 1995); (Neirotti and Oliveira, 1996); (de Oliveira, 1993); (de Oliveira, 1996).

³(de Oliveira, 1996); (Hirsch et al., 1982); (DeRaedt and Lagendijk, 1985); (Reger and Young, 1988); (Takahashi, 1988); (Meshkov, 1993); (Rieger and Young, 1994).

⁴(Gross et al., 1989); (Carlson, 1989); (Takahashi, 1989); (Trivedi and Ceperly, 1990); (Golinelli et al., 1992).

⁵(Barnes and Daniel, 1988); (Barnes and Swanson, 1987).

⁶(Binder, 1976); (Binder and Heermann, 1988); (Binder, 1997).

por meio desse método, de escala de tamanho finito, extrapolamos os resultados obtidos pela aplicação do método de Monte Carlo a sistemas de tamanho finito para os sistemas de tamanho infinito. Os resultados da mecânica estatística de equilíbrio são aplicados aos sistemas de tamanho infinito. Por este meio, método de escala de tamanho finito, mostra-se que a presente análise numérica dos dados do método de Monte Carlo dá resultados consistentes com os valores exatos tanto para o ponto crítico, Γ_c , quanto para os expoentes críticos β/ν e γ/ν . Em particular, podemos apontar que o resultado numérico que obtemos, com o método de Monte Carlo, para o cumulante reduzido de quarta ordem está em acordo com aquele obtido para o modelo de Ising bidimensional por meio do uso do método da matriz transferência⁷. Redefinindo os objetivos e suas motivações para o presente capítulo, podemos dizer que eles são três. O primeiro objetivo consiste na aplicação e avaliação de um método, no caso, o método de Monte Carlo. Para isso é importante que seja aplicado inicialmente a um modelo solúvel, portanto, o modelo de Ising bidimensional. A aplicação a um modelo solúvel pode dar uma medida da eficiência do método. O segundo objetivo decorre do fato de que, como nem todas as quantidades dos modelos solúveis são conhecidas em uma forma fechada ou analítica, cálculos alternativos da magnetização e suscetibilidade devem sempre ser bem-vindos. No caso do modelo de Ising unidimensional em um campo transversal, isto é, um modelo quântico, é relativamente fácil obter uma forma fechada para a magnetização e a suscetibilidade na direção x . Contudo, o cálculo da magnetização e da suscetibilidade na direção z para sistemas finitos é muito complicado e formas fechadas para M e χ como função do tamanho do sistema, L , não são disponíveis. O mesmo é verdadeiro para o caso do cumulante de quarta ordem U .

7.2 Fórmulas básicas.

Define-se o operador

$$\mathcal{F} = \sum_{\langle ij \rangle} (1 + \sigma_i^z \sigma_j^z) + \Gamma \sum_i \sigma_i^x, \quad (7.2)$$

tal que

$$\mathcal{F} = -\mathcal{H} + \frac{Nz}{2}, \quad (7.3)$$

e na sequência definimos a matriz T cujos elementos são dados por

$$T(\sigma', \sigma) = \langle \sigma' | \mathcal{F} | \sigma \rangle, \quad (7.4)$$

⁷(Burkhardt and Derrida, 1985).

em que

$$|\sigma\rangle = |\sigma_1\sigma_2\sigma_3\ldots\sigma_N\rangle, \quad (7.5)$$

com $\sigma_i = \pm 1$ é o vetor no espaço de Hilbert tal que os operadores σ_i^z são diagonais. Os elementos diagonais $T(\sigma, \sigma)$ são dados por

$$T(\sigma, \sigma) = \sum_{\langle ij \rangle} (1 + \sigma_i \sigma_j), \quad (7.6)$$

e igualam a duas vezes o número de pares de spins paralelos de vizinhos mais próximos. Os elementos fora da diagonal $T(\sigma', \sigma)$ equivalem a zeros exceto quando σ' e σ diferem por apenas um spin, em cujo caso

$$T(\sigma', \sigma) = \Gamma. \quad (7.7)$$

Uma vez que $T(\sigma', \sigma) \geq 0$, é possível definir uma distribuição de probabilidade $P(\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3, \dots, \sigma^K)$ como:

$$P(\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3, \dots, \sigma^K) = T(\sigma^1, \sigma^2)T(\sigma^2, \sigma^3), \dots, T(\sigma^{K-1}, \sigma^K)T(\sigma^K, \sigma^1), \quad (7.8)$$

em que K é um inteiro grande. Se $\mathcal{A}$ é um operador diagonal tal que se

$$\langle \sigma' | \mathcal{A} | \sigma \rangle = A(\sigma) \delta(\sigma'_1, \sigma_1) \dots \delta(\sigma'_N, \sigma_N), \quad (7.9)$$

então pode-se provar que, para K suficientemente grande, tem-se que

$$\langle \phi_o | \mathcal{A} | \phi_o \rangle = \langle A(\sigma) \rangle, \quad (7.10)$$

em que $|\phi_o\rangle$ é o estado fundamental de $\mathcal{H}$ (e também o maior autovetor de $\mathcal{F}$) e o lado direito da equação acima 7.10 é a média de $A(\sigma)$ com a distribuição de probabilidade definida pela 7.8. Portanto, as propriedades da mecânica estatística clássica, definida por 7.8, dão as propriedades do estado fundamental do sistema quântico definido pelo Hamiltoniano 7.1.

7.3 O método de Monte Carlo.

Para obter as propriedades de um sistema, como por exemplo o sistema definido por 7.1, construímos um processo estocástico de Markov cuja distribuição de probabilidade estacionária é exatamente a probabilidade dada por 7.8. Sejam $A = (\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^j, \dots, \sigma^K)$ e $B = (\sigma^1, \sigma^2, \dots, \tau^j, \dots, \sigma^K)$ dois estados que diferem por apenas um componente, o componente- j . A probabilidade de transição $W(A \rightarrow B)$ que define o processo de Markov é escolhida para satisfazer a condição do balanceamento detalhado

$$P(A)W(A \rightarrow B) = P(B)W(B \rightarrow A), \quad (7.11)$$

a qual escrevemos, com o uso da 7.8 e de alguma simplificação, na forma

$$T(\sigma^{j-1}, \sigma^j)T(\sigma^j, \sigma^{j+1})W(A \rightarrow B) = T(\sigma^{j-1}, \tau^j)T(\tau^j, \sigma^{j+1})W(A \rightarrow B). \quad (7.12)$$

A definição real de $W(A \rightarrow B)$ é baseada na prescrição de Metropolis (Metropolis and Ulam, 1949), a qual satisfaz o princípio do balanceamento detalhado consistente com a existência de uma Hamiltoniana. Distinguimos cinco casos possíveis:

1. Suponha-se que $\sigma^{j-1} = \sigma^j = \sigma^{j+1}$. Neste caso

$$W(A \rightarrow B) = \frac{1}{N} \min \left\{ \frac{N\Gamma^2}{D^2(\sigma^j)}, 1 \right\}, \quad (7.13)$$

em que $D(\sigma^j) = T(\sigma^j, \sigma^j)$.

2. Suponha-se que $\sigma^{j-1} = \sigma^j \neq \sigma^{j+1}$, tal que $\sigma^{j-1} \neq \tau^j \neq \sigma^{j+1}$. Neste caso

$$W(A \rightarrow B) = \min \left\{ \frac{D(\tau^j)}{D(\sigma^j)}, 1 \right\} \quad (7.14)$$

3. Suponha-se que $\sigma^{j-1} \neq \sigma^j = \sigma^{j+1}$, tal que $\sigma^{j-1} = \tau^j \neq \sigma^{j+1}$. Neste caso

$$W(A \rightarrow B) = \min \left\{ \frac{D(\tau^j)}{D(\sigma^j)}, 1 \right\}. \quad (7.15)$$

4. Suponha-se que $\sigma^{j-1} \neq \sigma^j \neq \sigma^{j+1}$ e $\sigma^{j-1} = \sigma^{j+1}$, tal que $\sigma^{j-1} = \tau^j = \sigma^{j+1}$. Neste caso

$$W(A \rightarrow B) = \min \left\{ \frac{D^2(\tau^j)}{N\Gamma^2}, 1 \right\}. \quad (7.16)$$

5. Suponha-se que $\sigma^{j-1} \neq \sigma^j \neq \sigma^{j+1}$ e $\sigma^{j-1} \neq \sigma^{j+1}$. Neste caso

$$W(A \rightarrow B) = 1. \quad (7.17)$$

7.4 Algoritmo.

O algoritmo de mudança configuracional para a simulação do modelo de Ising unidimensional em um campo transversal é realizado da seguinte maneira:

1. Definir uma rede quadrada com K colunas com L sítios cada uma. A cada sítio associar uma variável estocástica que pode estar em um de dois estados possíveis: ± 1 .
2. Inicia-se com uma configuração na qual quaisquer duas colunas consecutivas são iguais ou diferem apenas por um sítio.

3. Dada uma certa configuração, a seguinte é obtida deste modo:
4. Uma das K colunas é escolhida aleatoriamente e denotada por C . A coluna seguinte à coluna escolhida é designada por F , enquanto a precedente é designada por P . Logo, temos cinco casos possíveis
5. $P = C = F$. Neste caso, escolhe-se aleatoriamente um sítio de C . O estado escolhido de C é modificado com probabilidade

$$\min \left\{ \frac{L\Gamma^2}{D^2(C)}, 1 \right\}, \quad (7.18)$$

em que $D(C)$ é duas vezes o número de pares de sítios de vizinhos mais próximos com o mesmo sinal na coluna C .

6. $P = C \neq F$. A coluna C é distinta de F por apenas um sítio. O estado deste sítio é modificado com probabilidade

$$\min \left\{ \frac{D(F)}{D(P)}, 1 \right\}. \quad (7.19)$$

7. $P \neq C = F$. A coluna C é distinta de P por apenas um sítio. O estado deste sítio é modificado com probabilidade

$$\min \left\{ \frac{D(P)}{D(F)}, 1 \right\}. \quad (7.20)$$

8. $P \neq C \neq F$, mas $P = F$. Coluna C é distinta de F e P pelo mesmo sítio. O estado deste sítio é modificado com probabilidade

$$\min \left\{ \frac{D^2(F)}{L\Gamma^2}, 1 \right\}. \quad (7.21)$$

9. $P \neq C \neq F$, mas $P \neq F$. Coluna C é distinta de F por um sítio e distinta de P por um outro sítio. Os estados destes dois sítios são modificados com probabilidade um.

7.5 Resultados numéricos.

Fazendo-se uso do algoritmo descrito anteriormente realizamos simulações de cadeias de tamanhos $L = 8, 16, 32$ e 64 , e medimos as quantidades relevantes, magnetização M_L , χ_L , U_L . Os valores numéricos dessas quantidades são obtidos a partir dos dados produzidos pela simulação com a seguinte definição: A magnetização, M_L , é definida por

$$M_L = \langle |m| \rangle, \quad (7.22)$$

enquanto a suscetibilidade, χ_L , é dada por

$$\chi_L = L[\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2], \quad (7.23)$$

e a quantidade cumulante reduzido de quarta ordem, U_L , definido por (Binder, 1981)

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (7.24)$$

em que

$$m = (1/L) \sum_{i=1}^L \sigma_i \quad (7.25)$$

Estas quantidades descritas acima podem ser visualizadas nos gráficos abaixo começando com o gráfico da relação entre a magnetização, M , e o parâmetro indutor da transição, Γ .

O cumulante reduzido de quarta ordem pode ser usado para determinar o valor do ponto crítico, uma vez que $U_L(\Gamma_c) = \tilde{U}(0) = U^*$ independentemente de L .

Modelo de Ising com campo transverso.

Figura 7.1: Cumulante de quarta ordem $U_L(\Gamma)$: intersecção no valor crítico $\Gamma_c = 1.000$ para o valor de $U_L(\Gamma_c) = 0.55$.

A análise do gráfico que aparece na figura anterior mostra que todas as curvas se interceptam no ponto $\Gamma_c = 1$, o qual é o valor exato para o campo crítico. Tem-se como resultado teórico que o valor do cumulante no ponto crítico é uma quantidade universal que depende apenas do tipo de condições de contorno⁸. Obtivemos $U^* = 0.55 \pm 0.01$, que está em um acordo bastante adequado com o valor ⁹ $U^* = 0.557 \pm 0.007$, obtido para o modelo de Ising quadrado pelo uso da abordagem da matriz transferência.

Modelo de Ising com campo transverso

Figura 7.2: Magnetização M como função do parâmetro Γ para vários valores L da cadeia.

Por meio desse gráfico, podemos contemplar a propriedade de que a transição de fase é contínua, uma vez que não se apresenta uma descontinuidade no valor da magnetização em termos do parâmetro indutor da transição. Com o gráfico da relação entre a suscetibilidade e o parâmetro Γ pode-se claramente visualizar a presença da transição de fase em torno do ponto crítico $\Gamma_c = 1.00$, pela propriedade mais característica da transição de fase, que é a divergência desta função no ponto crítico.

⁸(Burkhardt and Derrida, 1985)

⁹(Burkhardt and Derrida, 1985)

Figura 7.3: Suscetibilidade M como função do parâmetro Γ para vários valores L da cadeia.

E, então, fazendo-se uso do método de escala de tamanho finito¹⁰, e por meio do qual extrapolamos os dados obtidos com os sistemas de tamanhos finitos para sistemas infinitos, pode-se estabelecer que estas quantidades devem comportar-se nas proximidades do ponto crítico, Γ_c , de acordo com as seguintes relações:

$$M_L(\Gamma) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (7.26)$$

$$\chi_L(\Gamma) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (7.27)$$

$$U_L(\Gamma) = \tilde{U}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (7.28)$$

em que ε é o desvio do parâmetro Γ de seu valor crítico Γ_c , ou seja, $(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$ e $\tilde{M}(x)$, $\tilde{\chi}_L(x)$, $\tilde{U}(x)$ são funções universais.

Nas figuras abaixo mostramos o colapso dos dados para as três quantidades com os gráficos das relações funcionais $\tilde{M} = L^{\beta/\nu} M_L$, $\tilde{\chi} = L^{-\gamma/\nu} \chi_L(\Gamma)$, e $\tilde{U} = U_L(\Gamma)$ versus $x = L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$, em que usamos $\Gamma_c = 1$ e os valores exatos para os expoentes críticos,

¹⁰(Privman, 1990).

a saber, $\nu = 1$, $\beta = 1/8$ e $\gamma = 3/4$. O ajuste apresentado por esses gráficos do colapso abaixo construídos com o uso desse conjunto de valores críticos mostra tanto a consistência quanto um teste da qualidade destes valores.

O primeiro destes gráficos do colapso obtido pelo método de escala de tamanho finito é aquele da magnetização escalada *versus* o parâmetro escalado:

Figura 7.4: Função universal $\tilde{M} = L^{1/8} M$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.

Enquanto o segundo gráfico do colapso representa a relação entre a suscetibilidade escalada *versus* o parâmetro escalado, ou seja,

Figura 7.5: Função universal $\tilde{\chi} = L^{-3/4}\chi$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.

O último desses gráficos do colapso representa a relação entre o cumulante de quarta ordem *versus* o parâmetro escalado, como podemos ver abaixo:

Figura 7.6: Função universal $\tilde{U} = U$ como função de $L^{1/\nu}(\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$.

7.6 Conclusões.

Usamos um método de Monte Carlo para obter as propriedades do estado fundamental do modelo de Ising unidimensional em um campo transversal, tais como a magnetização, a suscetibilidade e o cumulante reduzido de quarta ordem. Por uma escala de tamanho finito, obtemos resultados que são consistentes com os valores exatos tanto para o campo crítico quanto para os expoentes críticos. O método pode ser aplicado ao mesmo modelo em dimensão maior e outros sistemas de spin quânticos, uma vez que o hamiltoniano pode ser mapeado em um operador cujos elementos de matriz não são negativos.

Referências Bibliográficas

- Axelrod, R. (1984). *The evolution of Cooperation*. Basic Books.
- Barber, M. (1983). Finite-size scaling. In Domb, C. and J.L.Lebowitz, editors, *Phase Transitions and Critical Phenomena.*, volume 8, chapter 1. Academic Press.
- Barkema, G. T. and Newman, M. (1999). *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press.
- Barnes, T. and Daniel, G. (1988). Numerical solution of spin systems and the $s=1/2$ Heisenberg-antiferromagnetic using guided random-walks. *Phys. Rev. B.*, 37(7):3637–3651.
- Barnes, T. and Swanson, E. S. (1987). Two-dimensional Heisenberg-antiferromagnetic - a numerical study. *Phys. Rev. B.*, 37(16):9405–9409.
- Binder, K. (1976). Monte carlo investigations of phase transitions and critical phenomena. In Domb, C. and Green, M. S., editors, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 5b, chapter 1. Academic Press.
- Binder, K. (1981). Finite size scaling analysis of Ising model block of distributions-functions. *Z. Phys. B.*, 43(2):119–140.
- Binder, K. (1997). Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Rep. Prog. Phys.*, 60:487–559.
- Binder, K. (1998). Some recent progress in the phenomenological theory of finite size scaling and application to Monte Carlo studies of critical phenomena. In Privman, V., editor, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems.*, chapter 4. World Scientific.
- Binder, K. and Heermann, D. W. (1988). *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An introduction*. Springer-Verlag.
- Binder, K. and Young, A. (1986). Spin glasses: experimental facts, theoretical concepts and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58(4):801–976.

- Brout, R. (1959). Statistical mechanical theory of a random ferromagnetic system. *Phys. Rev.*, 115(4):824–835.
- Brower, R. C., Furman, M., and Moshe, M. (1978). Critical exponents for Reggeon quantum spin model. *Phys. Lett. B*, 76B(2):213–219.
- Brunstein, A. (1999). *Comportamento crítico e transições de fase dinâmicas em autômatos celulares probabilísticos*. PhD thesis, Universidade de São Paulo.
- Burkhardt, T. W. and Derrida, B. (1985). Moments of the total magnetization and conformal-invariance in the finite two-dimensional Ising-model. *Phys. Rev. B.*, 32(11):7273–7279.
- Callen, H. B. (1985). *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley, second edition.
- Carlson, J. (1989). Ground-state and low-lying excitations of the Heisenberg-Antiferromagnet. *Phys. Rev. B.*, 40(1):846–849.
- Chiappin, J. R. N. and Oliveira, M. J. (1999). Emergence of cooperation among interacting individuals. *Physical Review E*, 59(6):6419–6421.
- de Oliveira, M. J. (1992). Isotropic majority-vote model on a square lattice. *Journal of Statistical Physics*, 66(1/2):273–281.
- de Oliveira, M. J. (1993). Ground-state properties of the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg chain obtained by use of a Monte-Carlo method. *Phys. Rev. B*, 48(9):6141–6148.
- de Oliveira, M. J. (1996). Numerical stochastic methods in statistical mechanics. *International Journal of Modern Physics B*, 10(11):1313–1327.
- de Oliveira, M. J. and Chiappin, J. R. N. (1997). Monte Carlo simulation of the quantum transverse Ising model. *Physica A*, 238:307–316.
- de Oliveira e Tânia Tomé, M. J. (2001). *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. EDUSP.
- DeRaedt, H. and Lagendijk, A. (1985). Monte-Carlo simulation of quantum statistical lattice models. *Phys. Rep. B.*, 127(4):233–307.
- Dotsenko, V. (2001). *An Introduction to the Replica Theory Of Disordered Statistical Systems*. Cambridge University Press.
- Fisher, M. E. (1967). The theory of equilibrium critical phenomena. *Rep. Prog. Physics*, 30:615–730.

- Glauber, R. (1963). Time-dependent statistics of the ising model. *J. Math Phys.*, 294(4).
- Goldenfeld, N. (1992). *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Addison-Wesley Publishing Company.
- Golinelli, O., Jolicoeur, T., and Lacaze, R. (1992). Haldane gaps in a spin-1 Heisenberg chain with easy-plane anisotropy. *Phys. Rev. B.*, 45(17):9798–9805.
- Grassberger, P. (1982). On phase-transitions in Schlogl 2nd model. *Z. Phys. B.*, 47(4):365–376.
- Greiner, W., Neise, L., and Stocker, H. (1995). *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag.
- Grinstein, G., Jayaparakash, C., and He, Y. (1985). Statistical mechanics of probabilistic cellular automata. *Phys. Rev. Lett.*, 55:2527–.
- Gross, M., Sanchez-Velasco, E., and Siggia, E. (1989). Ground-state properties of the two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg-model. *Phys. Rev. B.*, 39(4):2484–2493.
- Hirsch, J., Sugar, R. L., Scalapino, D. J., and Blankenbecler, R. (1982). Monte-Carlo simulations of one-dimensional fermion systems. *Phys. Rev. B.*, 26(2):5033–5055.
- Huberman, B. and Glance, N. S. (1993). Evolutionary games and computer-simulations. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 90(16):7716–7718.
- Janssen, H. (1981). On the non-equilibrium phase transition in reaction- diffusion systems with an absorbing stationary state. *Z. Phys. B.*, 42(2):151–154.
- Kadanoff, L. P. e. a. (1967). Static phenomena near critical points: Theory and experiment. *Rev. Mod. Phys.*, 39(395).
- Katsura, S. (1962). Statistical mechanics of anisotropic linear heisenberg model. *Phys. Rev.*, 127(5):1508–1518.
- Landau, D. P. (1976). Finite-size behavior of the Ising square lattice. *Phys. Rev. B*, 13(7):2997–3011.
- Landau, D. P. (2000). *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press.
- Lebowitz, J. L. and Saleur, H. (1986). Percolation strongly correlated systems. *Physica A*, 138(1-2):194–205.

- Lieb, E., Schultz, T., and Mattis, D. (1961). 2 soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys.*, 16(3):407–466.
- Meshkov, S. (1993). Monte-Carlo study of quantum spin chains. *Phys. Rev. B.*, 48(9):6167–6178.
- Metropolis, N. and Ulam, S. (1949). The Monte-Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341.
- Neirotti, J. P. and Oliveira, M. d. (1996). Monte-Carlo method for obtaining the ground-state properties of quantum spin systems. *Mod. Phys. Rev. B.*, 53:668.
- Nowak, M. A., Bonhoeffer, S., and May, R. A. (1994). More spatial games. *Int. J. Bifurcation Chaos Appl. Sci. Eng.*, 4(1):33–56.
- Nowak, M. A. and May, R. A. (1993). The spatial dilemmas of evolution. *Int. J. Bifurcation Chaos Appl. Sci. Eng.*, 3(1):35–78.
- Nowak, M. A., May, R. A., and Sigmund, K. (1995). The arithmetics of mutual help. *Scientific American*, 272(6):76–81.
- Ozeki, Y. and Nobuyasu, I. (1998). Multicritical dynamics for the $\pm J$ Ising model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 31:5451–5465.
- Pfeuty, P. (1970). One-dimensional Ising model with a transverse field. *Ann. Phys.*, 57(1):79.
- Plischke, M. (1994). *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific.
- Privman, V. (1990). *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. World Scientific.
- Privman, V. (1998). Finite-size scaling theory. In Privman, V., editor, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems.*, chapter 1. World Scientific.
- Reger, J. and Young, A. P. (1988). Computer simulation of the Heisenberg spin-glass with Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida like coupling. *Phys. Rev. B.*, 37(10):5493–5499.
- Rieger, H. and Young, A. P. (1994). Zero-temperature quantum phase-transition of a 2-dimensional Ising spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 72(26):4141–4144.
- Salinas, S. R. (1996). *Mecânica Estatística*. EDUSP.
- Sauerwein, R. A. and de Oliveira, M. J. (1994). Ground-state properties of the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice by a Monte-Carlo method. *Phys. Rev. B*, 49(9):5983–5987.

- Sauerwein, R. A. and de Oliveira, M. J. (1995). Ground-state properties of the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a cubic lattice by a Monte-Carlo method. *Mod. Phys. Lett. B.*, 9(10):619–627.
- Sigmund, K. (1993). *Games of Life*. Oxford University Press.
- Stanley, H. (1971). *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Clarendon Press.
- Stanley, H. (1999). Scale, universality, renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 71(2):S358–S366.
- Szabó, G. and Töke, C. (1998). Evolutionary prisoner’s dilemma game on a square lattice. *Phys. Rev. E*, 58(1):69–73.
- Takahashi, M. (1988). Spin-correlation function of the $s=1$ antiferromagnetic Heisenberg chain at $T=0$. *Phys. Rev. B.*, 38(7):5188–5191.
- Takahashi, M. (1989). Monte-Carlo calculation of elementary excitation of spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 62(19):2313–2316.
- Thompson, C. J. (1972). *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press.
- Thompson, C. J. (1988). *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*. Clarendon Press.
- Tomé, T. (1996). *Irreversibilidade: Modelos de Rede com Dinâmicas Estocásticas*. Universidade de São Paulo. Tese de Livre Docência.
- Trivedi, N. and Ceperly, D. (1990). Ground-state correlations of quantum antiferromagnets-a Green function Monte-Carlo study. *Phys. Rev. B.*, 41(7):4552–4569.
- Widom, B. (1965). Equation of state in the neighborhood of the critical point. *Journal of Chemical Physics*, 43(11):3898–3905.
- Wilson, K. G. (1979). Problems in physics with many scales of length. *Scientific American*, 241(2):158–240.
- Yeomans, J. (1994). *Statistical Mechanics of Phase Transition*. Clarendon Press.