Universidade de São Paulo
Instituto de Física

**Pontos Críticos
de Transições de Fase na Teoria
Quântica de Campos na Rede Euclidiana**

José Cleriston Campos de Souza

Banca Examinadora

Prof. Dr. Jorge L. deLyra (IFUSP) - Orientador
Prof. Dr. Mario José de Oliveira (IFUSP)
Prof. Dr. Nelson Augusto Alves (FFCLRP-USP)

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3691
ex. 2

Dissertação apresentada ao
IFUSP para a obtenção do
grau de mestre em ciências.

Julho de 2002

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

S 729 p
M
ex. 2

Sy6no 1255988

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Souza, José Cleriston Campos de

Pontos Críticos de Transições de Fase na Teoria
Quântica de Campos na Rede Euclidiana.
São Paulo 2002.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física – Departamento Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. Jorge Lacerda de Lyra
Área de Concentração: Física das Partículas
Elementares e Campos

Unitermos: 1. Modelos escalares;
2. Modelos sigma não-linear;
3. Modelo de ising; 4. Pontos Críticos;
5. Expoentes Críticos.

USP/IF/SBI-037/2002

Resumo

Neste trabalho apresentamos uma investigação sobre os pontos críticos de transições de fase, segundo um método numérico que se utiliza da implementação do modelo de Ising numa rede euclidiana finita com condições de contorno fixas. É mostrado aqui o método da expansão em cumulantes (ou momentos) do valor esperado do campo em torno do ponto crítico da transição, bem como a busca pelos pontos críticos em redes de vários tamanhos em duas, três e quatro dimensões. Os coeficientes dos cumulantes que são dominantes no limite do contínuo indicariam o valor do expoente crítico da magnetização. Não foi realizada uma análise numérica completa desta última faceta do problema devido às grandes dificuldades numéricas encontradas.

Agradecimentos

Devo agradecer aos que possibilitaram a conclusão deste trabalho e ajudaram na minha formação como físico.

Ao Prof. Dr. Jorge L. de Lencastre, pela orientação ao longo deste trabalho. Ao Departamento de Física Matemática (DMF) do IFUSP, pelo uso das suas instalações e do seu sistema de ensino, em que foi realizada a parte numérica deste trabalho.

Aos colegas do grupo de pesquisa em Física Matemática, especialmente R. R. da Silva, Francisco D. de Oliveira, e outros, pela ajuda e companheirismo durante a realização deste trabalho e ao longo da vida acadêmica.

Aos colegas e amigos do Departamento de Física Matemática do IFUSP, que possibilitaram a realização deste trabalho e a conclusão deste trabalho.

Abstract

In this work we present an investigation of the critical points of phase transitions, using a numerical method which uses an implementation of the Ising model in a finite Euclidean lattice with fixed boundary conditions. The method of cumulant (or moment) expansion for the expectation value of the field around the critical point of the transition is presented, as well as the search for the critical points on lattices of several sizes in two, three and four dimensions. The cumulants coefficients which are dominant in the continuum limit would indicate the value of the critical exponent of the magnetization. We could not perform a complete numerical analysis of this aspect of the problem due to the great numerical difficulties found.

Agradecimentos

Desejo agradecer aos que possibilitaram a conclusão deste trabalho e ajudaram na minha formação como físico:

Ao Prof. Dr. Jorge L. deLyra, pela orientação ao longo deste trabalho.

Ao Departamento de Física Matemática (DFMA) do IFUSP, pelo uso das suas instalações e do seu sistema computacional, em que foi realizada a parte numérica deste trabalho.

Aos colegas de grupo de pesquisa Arnaldo G. Oliveira Filho, Edgar R. R. Sanabria, Francisco D. Borges e Silvana Perez, pela ajuda e companheirismo nas diversas fases deste trabalho e da minha vida acadêmica.

Aos colegas e amigos do DFMA e de outros departamentos do IFUSP, que, felizmente, são em número grande o suficiente para que eu não possa nomeá-los sem arriscar cometer a injustiça de esquecer-me de alguém.

A Kelly C. Carvalho e Adriana R. de Miranda, pela longa e contínua amizade.

À FAPESP, pelo apoio financeiro.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Aspectos básicos	3
2.1	Transições de fase e modelos $SO(N)$	3
2.2	Definição da rede	7
2.3	<i>Finite-size scaling</i>	9
3	Definição do modelo	12
3.1	Modelo de Ising na rede euclidiana	12
3.2	Método de campo médio e condições de contorno	13
3.3	Expansão em cumulantes	19
4	Resultados	25
4.1	Pontos críticos	25
4.2	Expoentes críticos	32
5	Conclusões	38
A	Algoritmos estocásticos	40
A.1	Programas utilizados	43
B	Coeficientes da expansão do valor esperado do campo	46
	Bibliografia	48

Capítulo 1

Introdução

Um dos problemas mais famosos e estudados em Mecânica Estatística diz respeito ao sistema magnético resultante da interação de vários spins alinhados em uma configuração geométrica regular, como uma rede cristalina. Tal modelo, proposto por Lenz em 1928, ficou conhecido como Modelo de Ising (E. Ising, o primeiro a resolver o problema em uma dimensão, mostrando que nesse caso não ocorre uma transição de fase). Onsager, em 1944, deu uma solução analítica para o caso de dimensão igual a dois, no qual há uma transição de fase.

Entretanto, para dimensões maiores não existe solução analítica conhecida, sendo necessária a utilização de técnicas numéricas. Também é possível aplicar aproximações analíticas conhecidas, como expansão em séries de altas temperaturas, a fim de se encontrar os pontos e expoentes críticos para as transições de fase que porventura ocorram nesses sistemas.

É o caráter universal dos expoentes que surgem nas equações que descrevem as mais variadas transições de fases que suscita o interesse por estas quantidades em muitas áreas da Física, desde a Física da Matéria Condensada até a Astrofísica e a Cosmologia.

A análise desse tipo de problema sempre dependeu de grande volume de cálculos numéricos. Com o advento e popularização de computadores de grande capacidade de cálculo e baixo custo, foi possível para um número maior de pesquisadores investigar este tipo de problema a partir de diversos pontos de vista.

Pretende-se mostrar aqui um método baseado no trabalho que é feito em Teoria Quântica de Campos na Rede (TQCR), buscando-se resultados típicos de Mecânica Estatística, ou seja, a caracterização do comportamento

crítico da magnetização espontânea para um sistema de spins na fase de simetria quebrada, no limite do contínuo (análogo ao limite termodinâmico). Isto só é possível devido à analogia que se pode traçar entre os formalismos matemáticos dessas duas áreas da Física.

Este método se utiliza de algoritmos de Monte Carlo desenvolvidos para tratar o modelo de Ising como um caso particular de modelo Sigma com grupo de simetria interna $O(1)$, aos quais foram aplicadas as mudanças necessárias devido ao fato de considerarmos uma rede finita com condições de contorno fixas (não-periódicas) e com uma borda de valor constante (mais especificamente, valor nulo, como será visto mais adiante).

No próximo capítulo serão introduzidas as noções básicas sobre transições de fase e o método utilizado para definir a rede euclidiana (especialmente, a noção de observáveis em tal objeto).

No terceiro capítulo será discutido o objetivo da pretendida expansão em cumulantes do valor esperado da magnetização em torno do ponto crítico para redes com as condições de contorno específicas e não-usuais como as que foram utilizadas neste trabalho, bem como o método de procura pelos pontos críticos que cada rede em particular apresenta.

No capítulo seguinte mostraremos os resultados obtidos para os pontos críticos através de extensas simulações de Monte Carlo em redes cuja dimensão variou de 2 a 4.

Em seguida, apresentaremos as conclusões finais do trabalho.

Será apresentado também um breve resumo dos algoritmos estocásticos e dos códigos de programação utilizados.

Capítulo 2

Aspectos básicos

Este capítulo apresenta os conceitos e métodos básicos para a compreensão do trabalho realizado.

2.1 Transições de fase e modelos $SO(\mathcal{N})$

Estamos familiarizados, até mesmo através da nossa experiência cotidiana, com transformações de estado das mais variadas substâncias. Por exemplo, todos sabemos que nos pontos de fusão e evaporação a água sofre uma brusca mudança de estado. Para investigar esse processo, podemos começar medindo a densidade da água como função da temperatura. Este é um exemplo de fenômeno que apresenta *transição de fase de primeira ordem*, ou descontínua, e a grandeza observada (nesse caso, a diferença de densidade entre duas fases do fluido) é chamada de *parâmetro de ordem* do sistema. Neste tipo de transição, o parâmetro de ordem sofre uma mudança descontínua no chamado ponto de transição.

Numa *transição de fase de segunda ordem*, ou contínua, o parâmetro de ordem muda continuamente como função da temperatura. É a sua taxa de mudança (ou seja, a derivada em relação à temperatura) que sofre uma variação descontínua no ponto crítico. O paradigma desse tipo de transição é o aparecimento de magnetização espontânea numa estrutura reticular ferromagnética. O diagrama de fases para um sistema desse tipo, a campo externo H nulo, está esquematizado na figura 2.1.

Nesse sistema, para temperaturas T altas (ou seja, $\beta = 1/T$ pequeno), temos que o módulo da média da magnetização $\vec{M}$ tem valor nulo,

Figura 2.1: Diagrama de fases para a magnetização M em função de $\beta = 1/T$ para um sistema ferromagnético. Apesar da transição, de uma fase simétrica para uma não-simétrica, ser contínua, sua variação apresenta uma descontinuidade no ponto crítico β_c .

$$M = |\langle \vec{M} \rangle| = 0, \quad (2.1)$$

o que caracteriza a fase simétrica (sem direção preferencial) do modelo. Para temperaturas mais baixas, há uma magnetização residual, surgida a partir da chamada *quebra espontânea de simetria*, já que não estamos considerando um campo magnético externo H que pudesse forçar o aparecimento de uma direção preferencial para a orientação dos momentos magnéticos individuais. Esta fase de simetria quebrada é separada da anterior pelo ponto crítico do modelo.

A descontinuidade nesse caso se manifesta por exemplo através da divergência, na temperatura crítica, da susceptibilidade magnética

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (2.2)$$

Outra característica desse tipo de transição é o surgimento de um comprimento de correlação infinito no ponto crítico, como será visto mais adiante.

Outra situação em que se pode encontrar transição de fases de segunda ordem é, no contexto da Teoria Quântica de Campos (TQC), a do modelo escalar interagente $\lambda\varphi^4$, de campos $\vec{\varphi}$ com simetria interna $SO(\mathcal{N})$. O diagrama de fases para esse modelo (no limite do contínuo) está esquematizado na figura 2.2. Este modelo tem sua dinâmica dada pela ação

$$S[\vec{\varphi}] = \frac{1}{2} \sum_{\ell} (\Delta_{\ell} \vec{\varphi}) \cdot (\Delta_{\ell} \vec{\varphi}) + \frac{\alpha}{2} \sum_s \vec{\varphi}(s) \cdot \vec{\varphi}(s) + \frac{\lambda}{4} \sum_s [\vec{\varphi}(s) \cdot \vec{\varphi}(s)]^2, \quad (2.3)$$

onde ℓ se refere aos *links* entre os sítios s da rede (cuja estrutura geométrica será definida na próxima seção), $\lambda \geq 0$ e α pode ter qualquer valor real (exceto no caso específico de $\lambda = 0$, quando é necessário ter $\alpha \geq 0$). A constante λ é chamada de *constante de acoplamento* do modelo. Observe-se que não estamos considerando a presença de uma fonte externa.

Na situação em que temos $\alpha = 0$ e os campos estão desacoplados, ou seja, $\lambda = 0$, a dinâmica dos campos livres é expressa pela ação que contém apenas o termo cinético (derivativo),

$$S_0[\vec{\varphi}] = \frac{1}{2} \sum_{\ell} (\Delta_{\ell} \vec{\varphi}) \cdot (\Delta_{\ell} \vec{\varphi}). \quad (2.4)$$

Quando impomos sobre os campos o vínculo (que também é invariante por $SO(\mathcal{N})$)

$$\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} = \beta, \quad (2.5)$$

onde β é algum número real positivo, passamos a descrever o chamado *modelo Sigma não-linear*.

Nos modelos em redes finitas, é comum fazer a simplificação do vínculo através de uma mudança de variáveis nos campos. Definindo o campo adimensional $\vec{\psi}$ de forma que $\vec{\varphi} = \sqrt{\beta} \vec{\psi}$, a ação pode ser escrita agora como

$$S_0[\vec{\psi}] = \frac{\beta}{2} \sum_{\ell} (\Delta_{\ell} \vec{\psi}) \cdot (\Delta_{\ell} \vec{\psi}), \quad (2.6)$$

e o vínculo fica simplificado para

$$\vec{\psi} \cdot \vec{\psi} = 1. \quad (2.7)$$

Expandindo os quadrados das diferenças finitas na rede, para cada uma das componentes do campo, da forma

$$(\Delta_\ell \psi_i)^2 = \psi_i^2(\ell_-) - 2\psi_i(\ell_-)\psi_i(\ell_+) + \psi_i^2(\ell_+), \quad (2.8)$$

sem soma sobre os índices i , onde $\psi_i(\ell_-)$ e $\psi_i(\ell_+)$ são os campos nas extremidades do *link* ℓ , e usando a equação de vínculo, vemos que podemos desprezar os termos quadráticos, que são constantes independentes dos campos, e reescrever a ação como

$$S'_0[\vec{\psi}] = -\beta \sum_\ell \vec{\psi}(\ell_-) \cdot \vec{\psi}(\ell_+). \quad (2.9)$$

No caso em que a simetria do modelo é $O(1)$, temos exatamente a ação do modelo de Ising, já que o vínculo se expressa agora por $\psi^2 = 1$, e os campos podem ter apenas os valores $+1$ e -1 . O modelo de Ising será apresentado com maior detalhe no próximo capítulo.

Figura 2.2: Diagrama de fases do modelo $\lambda\phi^4$, para $d \geq 3$.

Seja qual for o tipo de transição de fase de segunda ordem estudado, sabe-se que existe um conjunto de *expoentes críticos* (relacionados entre si através de desigualdades conhecidas [8]) que definem essas transições e que

só dependem de uma pequena quantidade de grandezas fundamentais. Para sistemas com interação de curto alcance, como os que serão estudados aqui, essas grandezas são apenas a simetria do modelo em questão e a dimensão espacial do sistema investigado. Entretanto, nem sempre é possível encontrar tais expoentes através de procedimentos analíticos, sendo necessária a utilização de métodos numéricos ou de simulações computacionais.

O que suscita o interesse no estudo de transições de fase são duas de suas características principais: as relações de escala e a universalidade dos expoentes críticos. É esta última que permite procurar os mesmos expoentes para sistemas tão diversos quanto uma rede composta de átomos de um metal e um conjunto de campos escalares que podem flutuar estocasticamente. A existência de relações de escala permite, através do procedimento conhecido como *finite-size scaling* (FSS), extrapolar resultados típicos de redes finitas (passíveis de serem simuladas em computador) para o limite de redes infinitas.

A linguagem e o formalismo utilizados aqui serão os usuais da Teoria Quântica de Campos na Rede Euclidiana (que chamaremos abreviadamente de TQCR).

2.2 Definição da rede

A estrutura que será utilizada para o desenvolvimento dos cálculos é a rede euclidiana, composta de pontos (sítios) igualmente espaçados e interligados através do que chamamos de *links*. Em duas dimensões, a rede tem o aspecto indicado na figura 2.3, que apresenta também o tamanho L da borda da rede e o espaçamento a entre seus sítios. Os *links* soltos que saem de cada um dos sítios da borda são ligados aos do lado oposto e implementam a periodicidade das condições de contorno.

Os N^d sítios da rede são usualmente interligados com condições periódicas de contorno, ou seja, os sítios localizados em uma borda são considerados vizinhos daqueles situados na borda oposta, o que também equivale a dizer que o primeiro sítio em cada direção é equivalente ao sítio $N + 1$.

Como se sabe que redes finitas com condições de contorno periódicas não apresentam transições de fase, é interessante mudar o tipo de borda da rede de tal forma que possamos usar condições de contorno fixas. Para uma rede assim, poderíamos ter a representação esquematizada na figura 2.4, onde os sítios da borda (representados com cruces) ligam-se agora apenas aos sítios internos da rede. Neste caso, o valor dos campos nos sítios da borda é mantido

Figura 2.3: Os elementos geométricos de uma rede bidimensional periódica.

fixo e independente dos campos nos sítios internos.

A rede que iremos utilizar para o desenvolvimento dos cálculos é aquela esquematizada na figura 2.5, na qual são considerados em separado os sítios internos que estão em contato com a borda. É nessa camada de sítios, aqui denominada de *peel*, que será efetuado o cálculo dos observáveis relevantes.

É possível fazer tal escolha de pontos devido ao fato de que os observáveis do modelo devem ser definidos como *variáveis de blocos* [14], sendo que estamos encarando o *peel* como um tipo de bloco.

O modelo que iremos analisar através desta construção da rede é o de Ising, com campos escalares de simetria $O(1)$.

A cada sítio fica associado um número real que representa o valor do campo escalar φ naquele ponto do espaço.

Como veremos, os pontos da borda são mantidos em um valor constante, enquanto os pontos internos têm flutuações estocásticas providenciadas pelo algoritmo de Monte Carlo que atualiza as configurações do campo.

O cálculo do valor esperado de um observável $\mathcal{O}$ qualquer na rede é efetuado através da integral funcional

$$\langle \mathcal{O}[\varphi] \rangle \equiv \frac{\int [d\varphi] \mathcal{O}[\varphi] e^{-S[\varphi]}}{\int [d\varphi] e^{-S[\varphi]}},$$

onde a notação $[d\varphi]$ significa $\prod_{\vec{n}} d\varphi_{\vec{n}}$ e S é a ação do modelo. Aqui, estamos usando para a rede um sistema de indexação por coordenadas inteiras n_{μ} ,

Figura 2.4: Os elementos geométricos de uma rede bidimensional com borda fixa.

$\mu = 1, \dots, d$, sendo que cada uma das d componentes n_μ do vetor $\vec{n}$ é um número inteiro que numera os sítios em uma das direções da rede. A soma sobre sítios pode ser escrita agora como

$$\sum_s \equiv \sum_{\vec{n}} \equiv \sum_{n_1=1}^N \cdots \sum_{n_d=1}^N. \quad (2.10)$$

Assim, o campo como função dos sítios $\varphi(s)$ pode ser escrito agora na forma equivalente $\varphi(\vec{n})$.

Como podemos ver, a definição do observável reproduz uma média ponderada sobre todas as configurações, sendo os pesos dados pela distribuição $e^{-S[\varphi]}$.

2.3 *Finite-size scaling*

Numa rede finita, no contexto da teoria de campos, as escalas de tamanho relevantes são definidas em termos do comprimento L da rede, da distância a entre os sítios e do chamado *comprimento de correlação adimensional*, ξ , que pode ser definido como a escala de comprimento que governa o decaimento da função de correlação de dois pontos $\langle \varphi(s_1) \varphi(s_2) \rangle$, também chamada de *propagador* do modelo. Essa é a distância dentro da qual flutuações na

Figura 2.5: Os elementos geométricos de uma rede bidimensional com borda fixa. Os observáveis são calculados apenas sobre a primeira camada de sítios internos, denominada *peel*, representada por círculos brancos. Os pontos da borda são mostrados como cruzes. Aqui, a é o espaçamento entre os sítios da rede e L o seu tamanho.

magnetização, por exemplo, em uma região da rede serão afetadas pelas flutuações em outra região. Dessa forma, se dois pontos estão separados por uma distância maior que o comprimento de correlação, suas flutuações serão essencialmente descorrelacionadas.

Se o decaimento da função de correlação for do tipo polinomial dizemos que as correlações do modelo têm alcance infinito, não estabelecendo uma escala intrínseca de distâncias na rede. Por outro lado, se esse decaimento for exponencial, temos essa escala natural estabelecida no modelo. Nesse caso, o comprimento de correlação pode inclusive ser usado como a unidade física de comprimento do modelo.

Verifica-se, através de simulações numéricas, que os modelos da TQCR utilizados aqui apresentam esse tipo de decaimento exponencial para suas funções de correlação pelo menos para uma das componentes do campo, em qualquer das duas fases que existem.

Para que a teoria tenha significado físico, impomos a condição de *finite-size scaling* (FSS), que diz que existem formas de se tomar o limite do contínuo de modo que o comprimento de correlação dimensional $\chi = a\xi$ se comporte de tal forma que a razão χ/L tenha um limite finito e não-nulo.

O caso em que esse comprimento se anula corresponderia à existência na rede de partículas com massa m infinita, o que impossibilitaria a propagação.

Note-se aqui que há uma diferença importante em relação ao limite termodinâmico, em que se faz o tamanho do sistema em consideração tender ao infinito. No nosso caso, o tamanho L da caixa permanece constante, enquanto a razão a/L deve ir a zero.

Assumindo essa condição como verdadeira, o que podemos inferir a partir da análise numérica, o estudo de sistemas finitos de tamanhos diferentes pode fornecer informações sobre os expoentes críticos de sistemas infinitos (macroscópicos). Isso permite, caso se tenha sucesso com o modelo utilizado, investigar sistemas pequenos o suficiente para serem simulados em computador e ainda assim manter uma conexão com o limite do contínuo, obviamente inatingível diretamente via simulação.

3.1 Modelo de Ising na rede euclidiana

No modelo de Ising, os spins σ_i são variáveis binárias, assumindo os valores ± 1 . A energia do sistema é dada por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

onde J é o acoplamento entre spins vizinhos e h é o campo magnético externo. A função de partição do sistema é dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$ é o inverso da temperatura. A energia média por sítio é dada por

Capítulo 3

Definição do modelo

Neste capítulo veremos como está definido o modelo de Ising na rede e como é possível a utilização do método de campo médio para chegar à expansão em cumulantes do valor esperado da magnetização espontânea. Daqui em diante estaremos considerando apenas um sistema com ordem de simetria $\mathcal{N} = 1$, e usaremos por comodidade a notação φ para o campo escalar.

3.1 Modelo de Ising na rede euclidiana

No modelo de Ising, procura-se descrever as propriedades magnéticas de um sistema fazendo uso da Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{[s_i, s_j]} \varphi(s_i) \varphi(s_j) - H \sum_s \varphi(s),$$

sendo H o campo magnético externo (que, no contexto da TQC, chamamos de fonte externa), o campo φ representa o spin em cada sítio, de valor ± 1 , e a primeira somatória é feita sobre pares de sítios vizinhos. A função de partição desse modelo é

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta \mathcal{H}[\varphi]},$$

sendo a soma efetuada sobre todas as possíveis configurações $\mathcal{C}$ do sistema.

A figura 3.1 esquematiza um sistema desse tipo, numa rede unidimensional.

Figura 3.1: Representação de um sistema ferromagnético simples através de uma rede unidimensional. As setas representam os momentos magnéticos de *spin* dos átomos, podendo valer ± 1 .

É possível mostrar [14] que há uma estreita relação entre o formalismo da Mecânica Estatística e o da Teoria Quântica de Campos na Rede.

Sabe-se que no modelo de Ising em uma dimensão não ocorre transição de fase. Em outras dimensões, entretanto, há uma transição para a qual se pode escrever para a magnetização, na fase quebrada, próximo ao ponto crítico (temperatura crítica T_c)

$$v \approx A(\beta - \beta_c)^\gamma,$$

onde $\beta = 1/T$, v é o valor esperado do campo $\langle \varphi \rangle$, que é proporcional à magnetização, A e γ são constantes.

Em $d = 2$, o expoente γ tem o valor $1/8$, que pode ser obtido analiticamente (Onsager, 1944). Para dimensões maiores não há solução analítica conhecida.

Há um método, conhecido como *aproximação de campo médio*, que consiste em trocar a interação entre um sítio e todos os outros pela interação entre esse sítio e um campo médio de fundo cujo valor não flutua estatisticamente. Deste procedimento resulta um expoente crítico $\gamma = 1/2$ em duas dimensões, em grande desacordo com a solução exata em $d = 2$. Entretanto, é possível mostrar que a aproximação funciona tanto melhor quanto maior for a dimensão do sistema considerado, daí sua utilidade.

3.2 Método de campo médio e condições de contorno

Uma particular aplicação do método da aproximação de campo médio em uma rede euclidiana infinita, em d dimensões, com interações exclusivamente

entre primeiros vizinhos, consiste em trocar o termo de interação entre um determinado sítio com todos os seus $2d$ vizinhos por um termo de interação com um campo não-dinâmico de valor igual à soma dos valores esperados dos campos flutuantes nos sítios vizinhos da seguinte forma

$$\sum_{\vec{n}_\ell} \varphi(\vec{n}) \cdot \varphi(\vec{n}_\ell) \rightarrow (2d)\varphi(\vec{n}) \cdot \langle \varphi(\vec{n}_\ell) \rangle,$$

onde ℓ numera os *links* que ligam o sítio em $\vec{n}$ aos seus primeiros vizinhos e $\langle \varphi(\vec{n}_\ell) \rangle$ denota o valor esperado do campo nos sítios vizinhos. Este valor esperado é calculado de forma auto-consistente, ou seja, ele é ajustado para que seja igual ao valor médio do campo no sítio ativo.

O resultado é a troca das interações detalhadas entre um sítio e todos os outros pela interação de cada sítio com um campo médio não flutuante, o que simplifica os cálculos mas traz o problema de não levar em conta as correlações entre os campos nos diversos sítios da rede.

Uma interpretação alternativa do método consiste em que os campos de todos os sítios são fixos em seu valor médio, exceto por um dos sítios escolhido ao acaso, cujo campo pode variar (este sítio será chamado de ativo). A figura 3.2 ilustra essa reinterpretação, que possibilita sua aplicação a crescentes *clusters* de sítios que representam melhoras progressivas da aproximação tradicional de campo médio. Essa reinterpretação permite o cálculo das funções de correlação entre os sítios, para *clusters* com mais de um sítio ativo.

Figura 3.2: Representação da aproximação de campo médio usual com $N = 1$.

Se considerarmos uma sequência crescente de sítios ativos, a aproximação pode ser estendida a redes com N crescente, até um tamanho arbitrário, o que será feito aqui, definindo-se as condições de contorno apropriadas. As figuras seguintes esquematizam esta extensão, até uma rede com $N = 3$.

Esta extensão do método de campo médio na rede tem semelhanças com o método de Bethe-Peierls, no qual as condições de contorno fixas se aplicam

Figura 3.3: Representação da extensão da aproximação de campo médio para uma rede com $N = 2$.

Figura 3.4: Representação da extensão da aproximação de campo médio para uma rede com $N = 3$.

às derivadas dos campos em duas camadas externas da rede (ao invés de se aplicar aos sítios da borda), e o *cluster* de sítios formado é agora de formato losangular, como ilustrado na figura 3.5.

Utilizando-se a rede cuja estrutura está representada na figura 2.5, a ação do modelo, necessária para o cálculo dos valores esperados, é essencialmente a Hamiltoniana do sistema, sem fonte externa (campo externo nulo), com a inclusão da constante β , podendo ser agora escrita como

$$S = -\beta \left[\sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+) + v_b \sum_{srf}^n \varphi \right],$$

onde v_b é o valor constante do campo na borda, a primeira somatória é efetuada sobre os dN^d *links* do interior da rede e a segunda sobre os $n =$

Figura 3.5: Rede utilizada no método de “clusters” de Bethe-Peierls.

$2dN^{d-1}$ *links* ligando os sítios do *peel* (que na somatória estão sendo indicados por *srj*) aos da borda. Os símbolos $-$ e $+$ indicam os sítios nas extremidades de cada *link*.

Será útil definir

$$S_0 = -\beta \sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+), \quad (3.1)$$

que corresponde à ação de uma rede com borda nula, ou seja, $v_b = 0$.

Numa rede finita, a integral de dimensão infinita é substituída por uma de dimensão finita sobre as componentes do campo flutuante que está sendo considerado, com uma ação discreta que pode ser vista como uma aproximação da ação exata.

Neste contexto, o valor esperado do campo nos sítios da camada aqui denominada *peel* é calculado como

$$v(N, \beta, v_b) = \frac{\int [d\varphi] \bar{\varphi} e^{-S[\varphi]}}{\int [d\varphi] e^{-S[\varphi]}}, \quad (3.2)$$

onde

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{n} \sum_{srj}^n \varphi,$$

sendo a soma efetuada sobre os n links que interligam os sítios internos aos da borda.

Na rede finita, temos

$$v(N, \beta, v_b) = \frac{\sum_c \left(\frac{1}{n} \sum_{srf}^n \varphi \right) e^{\beta \sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+) + \beta v_b \sum_{srf}^n \varphi}}{\sum_c e^{\beta \sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+) + \beta v_b \sum_{srf}^n \varphi}}. \quad (3.3)$$

A fim de se obter transições de fase bem definidas em redes finitas, implementam-se nas redes utilizadas condições de contorno não apenas fixas mas também *auto-consistentes*. Neste caso, os campos na borda são fixos não num valor arbitrário, mas num valor igual à média dos campos nos sítios no interior da rede (do *peel*, no nosso caso). Em termos de procedimento computacional, isso significa que os campos na borda são ajustados até que seu valor seja igual ao valor esperado do campo nos sítios internos.

Analicamente, pode-se impôr a condição de auto-consistência *a posteriori*, resultando numa equação algébrica para o valor esperado do campo em termos do número de sítios da rede, da constante β e do valor do campo na borda. A resolução desta equação permite o cálculo dos observáveis de interesse na teoria.

Numa simulação de Monte Carlo para redes com borda fixa pode-se usar algum procedimento de *feedback* que ajuste lentamente o valor da borda de forma que ele convirja para o valor médio do campo no interior da rede. Por exemplo, para uma rede com $N = 1$ (um sítio ativo), isso pode ser feito da seguinte maneira: fixa-se o campo nos sítios da borda em um valor tentativo, deixando o campo no sítio ativo livre para flutuar. Mede-se então o valor médio do campo neste sítio e, se ele diferir do valor da borda, esta é igualada ao valor médio do campo do interior da rede. Isto é feito tantas vezes quantas forem necessárias para que o ajuste se torne desprezível e a borda se mantenha exatamente no valor médio do campo no sítio interno. Para redes maiores, esse procedimento pode ser aplicado da mesma forma, desde que se tome o valor esperado do campo num bloco de sítios ativos do interior da rede.

O uso desse tipo de condição de contorno possibilita encontrar o ponto crítico de forma mais precisa e rápida. O resultado desse procedimento é que se pode determinar, para cada rede com N^d sítios ativos, um ponto crítico

$\beta_c(N)$. No limite $N \rightarrow \infty$ presume-se que o limite de $\beta_c(N)$ seja igual ao ponto crítico de redes com condições de contorno periódicas, tomando-se o mesmo limite. A figura 3.6 esboça a situação.

Figura 3.6: Diagrama esquematizando as curvas críticas para a magnetização M em função de $\beta = 1/T$ para N crescente. β_c^* representaria o ponto crítico para uma rede infinita ($N \rightarrow \infty$).

Assim, vemos que a auto-consistência leva ao aparecimento de comportamento crítico completo mesmo em sistemas com um número finito de graus de liberdade.

Neste trabalho, os observáveis na rede são calculados através de simulação computacional. Se fôssemos considerar a função de partição no cálculo das médias, como define a equação (3.2), o número de configurações que deveria ser levado em conta é obviamente grande demais (numa rede quadrada de 10 pontos, seria 2^{100}), inviabilizando o trabalho numérico. A fim de contornar este problema, efetua-se uma *amostragem de importância* no espaço de configurações, através dos métodos de Monte Carlo, explicitados no Apêndice A, que garante que as configurações (randomicamente construídas) sobre as quais se efetuam as médias são as que mais contribuem para a função de partição do modelo.

3.3 Expansão em cumulantes

Pode-se mostrar que todas as curvas da figura 3.6 apresentam $\gamma = 1/2$ se tomarmos o limite para o ponto crítico, seja qual for o tamanho da rede. Entretanto, este procedimento corresponde a uma inversão da ordem dos limites, tomando-se o limite para o ponto crítico antes do limite do contínuo, quando gostaríamos de poder fazer o contrário. Através de uma expansão em torno do ponto crítico, obtemos um método matemático que nos permite examinar o comportamento dos limites na ordem desejada. É neste contexto que introduzimos a expansão em cumulantes.

Uma distribuição aleatória pode ser representada pelo conjunto dos seus *momentos*. Mostramos aqui resumidamente como isso pode ser feito (ver [6]).

Seja uma distribuição aleatória de uma variável X , com uma função geratriz (também chamada de função característica) $\phi(s) = \langle e^{isX} \rangle$. Os momentos dessa distribuição são as derivadas da função geratriz, da forma

$$-i^k \frac{d^k \phi(s)}{ds^k} \Big|_{s=0} = \langle X^k \rangle. \quad (3.4)$$

Definimos a função geratriz dos cumulantes (ou segunda função característica) como o logaritmo da função característica

$$\Phi(s) = \ln \phi(s). \quad (3.5)$$

Note-se aqui a semelhança entre essas duas definições e as definições de funções geradoras das funções de Green completas e conexas, respectivamente, na TQC. Estas serão introduzidas logo adiante.

Assumindo que todos os momentos existem, podemos expandir $\Phi(s)$ em série de potências na forma

$$\Phi(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n s^n}{n!} \langle \langle X^n \rangle \rangle. \quad (3.6)$$

As quantidades $\langle \langle X^n \rangle \rangle$ são os *cumulantes* da variável X .

Uma expansão similar pode ser feita para a função $\phi(s)$ e seus momentos

$$\phi(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n s^n}{n!} \langle X^n \rangle. \quad (3.7)$$

Expandindo o logaritmo da última expressão e comparando com (3.6), encontra-se o valor dos cumulantes em função dos momentos. Por exemplo, os primeiros cumulantes são:

$$\begin{aligned}\langle\langle X^1 \rangle\rangle &= \langle X \rangle, \\ \langle\langle X^2 \rangle\rangle &= \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \\ \langle\langle X^3 \rangle\rangle &= \langle X^3 \rangle - 3\langle X \rangle \langle X^2 \rangle + \langle X \rangle^3.\end{aligned}$$

No nosso caso, a variável aleatória é a média $\bar{\varphi}$ do campo nos pontos do *peel*. Podemos então efetuar uma expansão semelhante, utilizando a expressão para v mostrada em (3.2) e que repetimos aqui escrevendo a ação $S[\varphi]$ explicitamente

$$v(N, \beta, v_b) = \frac{\int [d\varphi] \bar{\varphi} e^{\beta \sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+)+\beta v_b \sum_{srf}^n \varphi}}{\int [d\varphi] e^{\beta \sum_{int}^{dN^d} \varphi(-)\varphi(+)+\beta v_b \sum_{srf}^n \varphi}}. \quad (3.8)$$

Usando a definição de S_0 e notando que

$$\sum_{srf}^n \varphi = n\bar{\varphi},$$

a última expressão para v fica

$$v(N, \beta, v_b) = \frac{\int [d\varphi] \bar{\varphi} e^{-S_0+\beta v_b n\bar{\varphi}}}{\int [d\varphi] e^{-S_0+\beta v_b n\bar{\varphi}}} = \frac{\int [d\varphi] \bar{\varphi} e^{\beta v_b n\bar{\varphi}} e^{-S_0}}{\int [d\varphi] e^{\beta v_b n\bar{\varphi}} e^{-S_0}}. \quad (3.9)$$

No contexto da TQC, esta é a expressão para a função de correlação (ou função de Green) de um ponto na presença de uma fonte externa j , papel aqui representado pelo valor do campo na borda v_b . As funções de Green podem ser obtidas a partir do gerador funcional com fonte externa, definido por

$$Z = \frac{\int [d\varphi] e^{-S[\varphi]}}{\int [d\varphi] e^{-S_0[\varphi]}}, \quad (3.10)$$

através de suas derivadas funcionais

$$\frac{1}{Z[j]} \frac{\delta^n Z[j]}{\delta j_1 \dots \delta j_n} = \langle \varphi_1 \dots \varphi_n \rangle_j = \frac{\int [d\varphi] \varphi_1 \dots \varphi_n e^{-S}}{\int [d\varphi] e^{-S}}. \quad (3.11)$$

Nesta expressão usamos δ para denotar derivada funcional, que neste contexto não é mais do que a derivada parcial em relação a $j_{\vec{n}}$.

A partir de Z podemos definir um outro gerador funcional por meio de

$$Z[j] = e^{W[j]}, \quad (3.12)$$

de forma que a função de um ponto pode ser escrita como

$$\langle \varphi_1 \rangle_{(j)} = v = \frac{\delta W[j]}{\delta j_1}. \quad (3.13)$$

O funcional W definido desta forma é o chamado gerador funcional das funções de Green conexas.

No limite de $v_b \rightarrow 0$ as funções de correlação equivalem a valores esperados tomados na medida de S_0 (sem fonte externa). Nesse limite, a expansão em Taylor de v em termos de v_b é escrita como

$$v(N, \beta, v_b) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{-a_{2i+1}}{(2i+1)!} (n\beta v_b)^{2i+1}, \quad (3.14)$$

onde os coeficientes a_{2i+1} são funções de β , que identificamos como os cumulantes da variável aleatória $\bar{\varphi}$. Esses cumulantes estabelecem a relação entre as funções de Green completas e as conexas, e podem ser calculados comparando-se a expansão anterior com as funções de correlação obtidas através das derivadas funcionais. Mais explicitamente, v fica sendo

$$v = n\beta v_b \langle \bar{\varphi}^2 \rangle_0 - \frac{n^3 \beta^3 v_b^3}{6} [3 \langle \bar{\varphi}^2 \rangle_0^2 - \langle \bar{\varphi}^4 \rangle_0] + \dots \quad (3.15)$$

O índice 0 denota um valor esperado calculado na medida de S_0 . Observe-se que, ao trocar o cálculo numérico do observável pelo cálculo numérico dos cumulantes da sua expansão, estamos efetivamente trocando simulações com borda constante mas não-nula, que precisam ser ajustadas dinamicamente, por simulações em redes com borda nula, ou seja, nas quais o valor do campo na borda é mantido fixo em zero, evitando a necessidade do ajuste dinâmico.

Como se pode perceber, há apenas potências pares de $\bar{\varphi}$ na última expressão, devido ao fato de que a ação S é simétrica quando fazemos $v_b = 0$, anulando as potências ímpares.

Por exemplo, os três primeiros desses cumulantes, obtidos por meio de um programa de computação algébrica [15], são

$$\begin{aligned} a_1 &= -\langle \bar{\varphi}^2 \rangle \\ a_3 &= 3\langle \bar{\varphi}^2 \rangle^2 - \langle \bar{\varphi}^4 \rangle \\ a_5 &= -30\langle \bar{\varphi}^2 \rangle^3 + 15\langle \bar{\varphi}^2 \rangle \langle \bar{\varphi}^4 \rangle - \langle \bar{\varphi}^6 \rangle. \end{aligned}$$

Coefficientes de ordem superior são mostrados no Apêndice B.

Voltando à equação (3.14), impomos analiticamente a condição de auto-consistência da rede, ao fazer $v_b = v$, o que leva ao cancelamento de uma potência de v dos dois lados da equação (ou seja, a remoção da solução trivial $v = 0$), resultando

$$1 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{-a_{2i+1}}{(2i+1)!} (n\beta)^{2i+1} v^{2i}. \quad (3.16)$$

Como estamos interessados no ponto crítico do sistema, no qual $v = 0$ pois a transição é de segunda ordem, podemos impôr $v = 0$ para obter o ponto crítico de uma determinada rede finita com N pontos,

$$\beta_c^{-1}(N) = -na_1 = n\langle \bar{\varphi}^2 \rangle. \quad (3.17)$$

Como é fácil ver a partir da expansão, o valor esperado do quadrado do campo é também uma função de β , $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle = \langle \bar{\varphi}^2 \rangle(\beta)$. Temos então a seguinte equação transcendente,

$$\frac{1}{n\beta_c(N)} = \langle \bar{\varphi}^2 \rangle(\beta_c), \quad (3.18)$$

que pode ser resolvida numericamente na busca pelo ponto crítico de cada uma das redes finitas utilizadas.

Voltando à equação (3.16), podemos escrever

$$1 = -a_1\beta n - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_{2i+1}}{(2i+1)!} (n\beta)^{2i+1} v^{2i}. \quad (3.19)$$

Usando o valor do coeficiente a_1 , temos

$$1 - n\beta \langle \bar{\varphi}^2 \rangle = - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_{2i+1}}{(2i+1)!} (n\beta)^{2i+1} v^{2i}. \quad (3.20)$$

Podemos definir a função

$$1 - n\beta \langle \bar{\varphi}^2 \rangle \equiv f(\beta). \quad (3.21)$$

Observe-se que $f(\beta)$ vai a zero quando $\beta \rightarrow \beta_c$, pois neste caso $v \rightarrow 0$ e todos os termos à direita na expansão se anulam. Além disso, a forma como $f(\beta)$ vai a zero quando nos aproximamos do ponto crítico está relacionada à forma como v vai a zero nestas condições e, portanto, ao expoente crítico de v .

Agora podemos, através de simulações numéricas, calcular $f(\beta)$ e os coeficientes (pelo menos até a_{11} , de acordo com o modo como nosso programa está escrito) do lado direito da equação (3.20), para β no ponto crítico e em uma boa quantidade de pontos em volta dele. Assim, pretendíamos construir a função $f(\beta)$ com suficiente precisão para nos permitir avaliar o expoente crítico de v . Isso deveria ser feito para redes de tamanho crescente, de forma que essas quantidades pudessem ser analisadas através de algum tipo de extrapolação para o limite do contínuo.

Como $f(\beta) \rightarrow 0$ para $\beta \rightarrow \beta_c$, podemos escrever, em torno de β_c ,

$$f(\beta) \sim A'(\beta - \beta_c)^{\gamma'}, \quad (3.22)$$

onde A' e γ' são constantes e $\gamma' > 0$. O expoente γ' poderia então ser encontrado através de

$$\gamma' = (\beta - \beta_c) \frac{\partial}{\partial \beta} \ln f(\beta). \quad (3.23)$$

Voltando à equação (3.20), podemos comparar o valor de $f(\beta)$ com os valores esperados encontrados por meio de simulações estocásticas no ponto crítico $\beta_c(N)$ de cada rede, lembrando que $f(\beta)$ também pode ser escrita como

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_{2i+1}}{(2i+1)!} (n\beta)^{2i+1} v^{2i} = -f(\beta). \quad (3.24)$$

No limite do contínuo, os coeficientes a_{2i+1} devem se anular, enquanto os correspondentes fatores de n^{2i+1} divergem. Desta forma, presumimos que um dos termos da expansão seja dominante,

$$N \rightarrow \infty \implies \frac{a_{2\bar{i}+1}}{(2\bar{i}+1)!} (n\beta)^{2\bar{i}+1} v^{2\bar{i}} = -f(\beta). \quad (3.25)$$

Observando qual coeficiente $a_{2\bar{i}+1} n^{2\bar{i}+1}$ diminui mais lentamente com o aumento de N , podemos identificá-lo como o coeficiente dominante no limite do contínuo, e assim obter a potência $2\bar{i}$ do valor esperado correspondente, possibilitando calcular o valor do expoente crítico γ para a magnetização espontânea, através da relação

$$\gamma = \frac{\gamma'}{2\bar{i}}. \quad (3.26)$$

Nessa expressão, a grandeza que é mais difícil de se obter é a potência $2\bar{i}$, que depende dos coeficientes a_{2i+1} calculados para redes bastante grandes e que demandaria a realização de muitas outras simulações em computador.

Todo esse processo não pôde ser realizado até o fim. Como veremos no próximo capítulo, devido às dificuldades decorrentes dos erros numéricos envolvidos, procedeu-se apenas à busca pelos pontos críticos de várias redes, em $d = 2, 3, 4$, tentando-se uma extrapolação para o limite do contínuo.

4.1 Pontos críticos

Através da relação (3.16), procedeu-se à busca dos pontos críticos para cada uma das redes obtidas para $d = 2, 3, 4$. Para tal, foi necessário obter os valores de β_c e v_c para cada uma das redes. Para isso, foi necessário resolver a equação (3.16) para cada uma das redes.

A figura 4.1 mostra um exemplo da busca dos pontos críticos para a rede $d=2$. Inicialmente, procedeu-se à busca dos pontos críticos para a rede $d=2$. Para tal, foi necessário obter os valores de β_c e v_c para cada uma das redes. Para isso, foi necessário resolver a equação (3.16) para cada uma das redes.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo mostraremos o processo de análise numérica efetuado na busca pelos pontos críticos e pelos cumulantes a_{2i+1} .

São mostrados aqui os gráficos utilizados e os resultados obtidos para β_c , em comparação com os valores mais precisos aceitos hoje na literatura (lembrando que esses resultados referem-se a redes com condições de contorno periódicas). Também serão apresentados, a título de exemplo, a função $f(\beta)$ construída para algumas redes, e os correspondentes cumulantes encontrados numericamente através de simulações de Monte Carlo. O código de programação utilizado está resumido no Apêndice A.

4.1 Pontos críticos

Através da relação (3.18), procedeu-se à busca dos pontos críticos para cada uma das redes utilizadas para $d = 2, 3, 4$. Isso foi efetuado por meio do ajuste de curvas nos gráficos obtidos para o observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função de β , com o uso de simulações de Monte Carlo.

A figura 4.1 mostra um exemplo do tipo de análise que foi feita.

Inicialmente procedia-se a uma rodada de simulações para alguns valores de β . Isto foi feito através do método de Monte Carlo de *clusters* de Wolff, utilizando-se, em todas as dimensões consideradas, de 100 submédias dos observáveis, cada uma das quais envolvendo 2500 iterações de Monte Carlo. Para a obtenção do campo relaxado necessário ao cálculo destes observáveis foram utilizadas 50 submédias com 500 iterações. Ao gráfico de $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função de β obtido dessa forma era então superposta a função $1/n\beta$, como

Figura 4.1: Exemplo de gráfico do valor esperado do campo $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função do parâmetro β , que se obtém após simulações de Monte Carlo em torno do ponto crítico da transição de fase. A linha tracejada, que representa a função $1/n\beta$, foi construída para que se pudesse identificar a região onde seria necessário refinar a procura pelo ponto crítico, segundo (3.18). Os dados foram tomados para uma rede com 20 pontos internos em duas dimensões.

mostra o gráfico 4.1. Dessa maneira, podia-se identificar de forma grosseira o ponto crítico dessa rede em particular. Então, efetuava-se nova rodada de simulações, com a mesma estatística (em termos de número de médias), em torno desta primeira estimativa do ponto crítico, de forma que se obtivesse um conjunto razoável de pontos para o ajuste de uma reta. Usualmente, de forma a poupar tempo de computação, especialmente para as redes maiores, quando já se tinha uma idéia da localização do ponto crítico partia-se diretamente para a simulação mais refinada em torno do mesmo. O tempo necessário para essas rodadas de simulação variou desde alguns minutos, para as redes menores em $d = 2$, até várias horas, para aquelas em $d = 4$, dependendo também fortemente da carga de utilização por outros usuários dos processadores disponíveis.

Tabela 4.1: Valores do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ e sua incerteza σ obtidos para alguns valores de β em torno do ponto crítico para uma rede com $N = 20$, $d = 2$.

β	$\langle \bar{\varphi}^2 \rangle \pm \sigma$
0.36397	0.03643 ± 0.00011
0.36199	0.03618 ± 0.00012
0.36002	0.03566 ± 0.00012
0.35805	0.03541 ± 0.00011
0.35608	0.03483 ± 0.00012
0.35411	0.03463 ± 0.00013
0.35215	0.03421 ± 0.00012
0.35019	0.03379 ± 0.00012
0.34823	0.03343 ± 0.00012
0.34628	0.03303 ± 0.00012

As tabelas a seguir trazem exemplos de dados obtidos em simulações deste tipo para redes nas dimensões consideradas.

Estes dados eram processados então em um programa de análise de dados (foram utilizados aqui Gnuplot e Glove, programas de distribuição livre), para que se obtivesse uma curva ajustada, com parâmetros e erros conhecidos. Os gráficos 4.2, 4.3 e 4.4 mostram os dados obtidos e os ajustes efetuados, para alguns tipos de rede.

A reta obtida numericamente era igualada a $1/n\beta$, da forma

$$a\beta + b = \frac{1}{n\beta}.$$

A resolução desta equação fornecia o ponto crítico β_c e seu erro σ_{β_c} para cada rede. Isto foi feito com o uso de um programa de cálculo (Maple). A propagação dos erros nos dados foi feita da maneira usual,

$$\sigma_{\beta_c}^2 = \sigma_a^2 (\partial_{\beta} a)^2 + \sigma_b^2 (\partial_{\beta} b)^2.$$

Esse procedimento foi efetuado para redes de vários tamanhos, a partir de $N = 2$, obtendo-se como resultado final uma coleção de pontos críticos para cada um dos tamanhos da rede, em cada uma das dimensões investigadas.

Estes dados foram colocados em gráficos que mostram o ponto crítico β_c como função do inverso do número de pontos, $1/N$, de forma a facilitar a estimativa do valor do ponto crítico no limite do contínuo.

Tabela 4.2: Valores do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ e sua incerteza σ obtidos para alguns valores de β em torno do ponto crítico para uma rede com $N = 8$, $d = 3$, através de simulações de Monte Carlo. Esses resultados foram usados no ajuste de reta que permitiu o cálculo de β_c .

β	$\langle \bar{\varphi}^2 \rangle \pm \sigma$
0.207090	$0.013903 \pm 2.1\text{E-}05$
0.205270	$0.013509 \pm 2.2\text{E-}05$
0.203452	$0.013129 \pm 1.9\text{E-}05$
0.201635	$0.012842 \pm 1.8\text{E-}05$
0.199820	$0.012509 \pm 1.9\text{E-}05$
0.198005	$0.012194 \pm 1.8\text{E-}05$
0.196192	$0.011887 \pm 1.9\text{E-}05$

Tabela 4.3: Valores do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ e sua incerteza σ obtidos para alguns valores de β em torno do ponto crítico para uma rede com $N = 3$, $d = 4$.

β	$\langle \bar{\varphi}^2 \rangle \pm \sigma$
0.140541	$0.034786 \pm 5.1\text{E-}05$
0.138762	$0.034116 \pm 5.4\text{E-}05$
0.136983	$0.033617 \pm 5.1\text{E-}05$
0.135205	$0.033015 \pm 4.5\text{E-}05$
0.133429	$0.032412 \pm 4.7\text{E-}05$
0.131653	$0.031850 \pm 4.6\text{E-}05$
0.129877	$0.031437 \pm 4.4\text{E-}05$
0.128103	$0.030793 \pm 4.3\text{E-}05$
0.126329	$0.030309 \pm 4.4\text{E-}05$
0.124557	$0.029825 \pm 4.0\text{E-}05$

Figura 4.2: Exemplo de gráfico do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função do parâmetro β , que se obtém após simulações de Monte Carlo em torno do ponto crítico da transição de fase, para uma rede com 20 pontos internos em duas dimensões. A linha tracejada representa a função $1/n\beta$, sendo $n = 80$. A linha sólida é o ajuste numérico de uma reta e a linha pontilhada é o ajuste de uma parábola aos valores obtidos.

A partir destes gráficos, foi feito um novo ajuste de curva numérico que permitiu encontrar o valor do ponto crítico quando $1/N = 0$, ou seja, uma situação que representa o limite do contínuo. Como foram ajustadas parábolas $y = ax^2 + bx + c$, o valor do coeficiente c , obtido numericamente, é o ponto crítico β_c^* procurado. O programa utilizado fornecia também o erro estimado. Os gráficos para $d = 2, 3$ e 4 são mostrados a seguir.

A tabela 4.4 mostra os valores encontrados para esses pontos críticos, bem como os melhores resultados conhecidos correspondentes a redes infinitas com condições periódicas de contorno e aqueles previstos pelo método de campo médio usual (lembrando que ele prevê $\beta_c = 1/2d$).

A análise numérica indica que o método funciona razoavelmente bem na procura pelos pontos críticos, mesmo em $d = 3$ e $d = 4$, em que é mais difícil

Figura 4.3: Exemplo de gráfico do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função do parâmetro β , que se obtém após simulações de Monte Carlo em torno do ponto crítico da transição de fase, para uma rede com 8 pontos internos em três dimensões. A linha tracejada representa a função $1/n\beta$, sendo $n = 384$. A linha sólida é o ajuste numérico de uma reta efetuado através do programa Gnuplot. A linha pontilhada é o ajuste de uma parábola aos valores obtidos.

Tabela 4.4: Resultados para os pontos críticos β_c no limite do contínuo. A segunda coluna mostra os valores encontrados através do ajuste numérico das curvas dos gráficos anteriores. A quarta coluna apresenta os resultados conhecidos para redes com condições periódicas de contorno. A quinta coluna mostra as diferenças relativas Δ entre β_c e β_c^* . A última coluna mostra os resultados do método de campo médio (C.M.) usual.

d	$\beta_c(N \rightarrow \infty)$	Erro em %	β_c^*	$\Delta(\%)$	C. M.
2	0.369 ± 0.005	1.36	0.44069	19.4	0.25
3	0.212 ± 0.002	0.9	0.22165(4)	4.4	0.167
4	0.146 ± 0.002	1.32	0.15 ± 0.02	2.7	0.125

obter pontos com erros razoáveis em tempo hábil.

Figura 4.4: Exemplo de gráfico do observável $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ como função de β , para uma rede com 3 pontos internos em quatro dimensões. A linha tracejada representa a função $1/n\beta$, sendo $n = 216$. A linha sólida é o ajuste numérico de uma reta. A linha pontilhada representa o ajuste de uma parábola ao mesmo conjunto de pontos.

Nas dimensões consideradas, exceto em $d = 2$, parece haver uma convergência para um valor próximo ao ponto crítico de redes periódicas, ainda que não exatamente. Como se pode ver nos gráficos e na tabela 4.4, as diferenças percentuais entre os pontos críticos obtidos e os resultados conhecidos (para redes com condições de contorno periódicas) são bastante maiores que os erros percentuais em β_c , principalmente em duas dimensões.

Estas diferenças podem indicar que estender o procedimento para redes maiores resultaria num valor de ponto crítico no limite do contínuo diferente dos resultados conhecidos, refletindo a influência das condições de contorno utilizadas no valor do ponto crítico. O fato de usarmos um campo constante, sem flutuações, na borda pode forçar os sítios do interior da rede a se comportar de forma a modificar o valor de β_c .

É preciso notar que em $d = 4$ o resultado disponível para o ponto crítico

Figura 4.5: Gráfico do ponto crítico em função de $1/N$ para redes de 2 até 20 pontos, consecutivamente, e também de 30 e 40 pontos, em duas dimensões. A linha tracejada representa a solução analítica de Onsager, para redes com condições periódicas de contorno [3]. A linha sólida é o ajuste de um polinômio de segundo grau aos pontos mostrados, resultando para o ponto crítico no limite o valor $\beta_c^* = 0.369 \pm 0.005$ (tabela 4.4). A diferença entre os resultados é de 19.4% e o erro em β_c^* corresponde a 1.4%.

também apresenta um erro bastante grande, abrangendo todos os pontos utilizados para o ajuste da curva no gráfico 4.7.

Uma possível variação do método seria incluir algum tipo de flutuação do campo na borda da rede, possivelmente definida de forma auto-consistente, como fazemos para o valor médio, de modo a se tentar obter os mesmos resultados de redes com condições periódicas de contorno.

4.2 Expoentes críticos

O próximo passo seria calcular o valor de $\langle \bar{\varphi}^2 \rangle$ nas imediações do ponto crítico β_c , para cada uma das redes estudadas, bem como os cumulantes que aparecem na expansão de v em torno do ponto crítico. Os coeficientes da

Figura 4.6: Gráfico do ponto crítico em função de $1/N$ para redes de 2 a 15 pontos, em três dimensões. A linha tracejada representa a melhor solução conhecida através de cálculo numérico [2]. Seu erro é muito pequeno e não pode ser mostrado no gráfico. A linha sólida mostra o ajuste de um polinômio de segundo grau. Neste caso, $\beta_c^* = 0.212 \pm 0.002$, e a diferença é de 4.4%, para um erro de 0.9% em β_c^* .

expansão indicariam a potência de v que sobreviveria no limite do contínuo. Obtivemos numericamente esses coeficientes para os pontos críticos encontrados. Porém, como eles apresentam erros muito grandes, não permitem uma análise precisa do limite do contínuo.

Assim, usando de novo como exemplo uma rede de 10 pontos em três dimensões, teríamos que $n = 2dN^{d-1} = 600$, e o erro do termo dominante seria também muito grande. A tabela 4.5 traz os cumulantes encontrados para três exemplos de redes, em todas as dimensões consideradas, e seus respectivos erros, para se ter uma idéia quantitativa da dificuldade numérica a ser enfrentada.

Por outro lado, a referida função $f(\beta)$, cuja derivada em torno do ponto crítico fornece o expoente γ' , seria usada para obter γ . O expoente γ' seria extrapolado para o limite do contínuo, quando então seria combinado, da forma já descrita, com o índice $2i$ do cumulante que domina a expansão de v

Figura 4.7: Gráfico do ponto crítico em função de $1/N$ para redes de 2 até 8 pontos, em quatro dimensões. A linha tracejada representa a melhor solução numérica conhecida [1]. Seu erro foi mostrado como uma linha pontilhada vertical. A linha sólida mostra o ajuste de uma função quadrática aos pontos obtidos. Aqui, $\beta_c^* = 0.146 \pm 0.002$. A diferença entre os resultados é de 2.72% e o erro em β_c^* vale 1.32%.

neste limite. Isso deveria ser suficiente para uma indicação forte do expoente crítico γ para cada uma das dimensões consideradas. As figuras seguintes exemplificam a construção de curvas deste tipo, para alguns tamanhos de rede.

As curvas obtidas mostram que, em torno do ponto crítico (onde $f(\beta) \approx 0$), a derivada desta função tem algum valor finito e não-nulo, implicando em que o expoente γ' seja exatamente igual a 1. Se isto não ocorresse, a derivada de $f(\beta)$ divergiria ou se anularia no ponto crítico, uma situação muito diferente do que os gráficos indicam.

Desta forma, concluímos que o expoente crítico só depende realmente do índice i do cumulante dominante no limite do contínuo,

$$\gamma = \frac{1}{2i}, \quad (4.1)$$

tornando ainda mais importante o cálculo preciso destes cumulantes no limite do contínuo para estimar o valor do expoente crítico.

Devido à dificuldade de se obter estes cumulantes com boa precisão no tempo disponível, não foi possível chegar a esse tipo de resultado.

Figura 4.8: Exemplo de gráfico que se pode construir para $f(\beta)$, para uma rede de 20 pontos em $d = 2$. O modo como essa função se anula (com derivada finita) no ponto crítico determina o valor do expoente γ' .

Figura 4.9: Exemplo de gráfico de $f(\beta)$ em uma rede de 10 pontos em $d = 3$. A função mostrada tem claramente uma derivada finita e não-nula em torno do ponto crítico.

Tabela 4.5: Resultados para os coeficientes $a_{2i+1}n^{2i+1}$ (calculados através do programa descrito no Apêndice A) próximo ao ponto crítico β_c de três redes diferentes. Notem-se os grandes valores dos erros, especialmente para os coeficientes a_9 e a_{11} . Estes erros foram encontrados através da propagação dos erros nos observáveis calculados numericamente, por meio das expressões mostradas no Apêndice B.

$a_{2i+1}n^{2i+1}$	$(N = 20, d = 2)$	$(N = 10, d = 3)$	$(N = 3, d = 4)$
a_1n^1	-2.81 ± 0.01	-3.72 ± 0.01	-7.27 ± 0.01
a_3n^3	77.3 ± 21.5	$2.7E02 \pm 2.5E02$	$1.6E03 \pm 1.7E02$
a_5n^5	$-1.5E04 \pm 6.4E04$	$-2.0E06 \pm 7.6E06$	$-2.1E06 \pm 3.4E06$
a_7n^7	$10.0E06 \pm 2.6E08$	$1.5E10 \pm 3.3E12$	$3.7E09 \pm 9.7E10$
a_9n^9	$-1.1E10 \pm 1.5E12$	$5.0E13 \pm 2.0E17$	$-2.4E13 \pm 3.7E15$
$a_{11}n^{11}$	$1.6E13 \pm 8.4E15$	$1.1E18 \pm 1.2E21$	$-1.2E17 \pm 1.5E20$

Capítulo 5

Conclusões

Figura 4.10: Exemplo de gráfico de $f(\beta)$ em uma rede de 3 pontos em $d = 4$. A linha tracejada é uma reta que mostra que esta função é suave o bastante, dentro dos erros obtidos, para que sua derivada seja finita e não-nula em torno do ponto crítico.

Capítulo 5

Conclusões

Após as várias simulações realizadas, ficou claro que a busca pelos pontos críticos é mais sutil e trabalhosa do que inicialmente se imaginava. Especialmente para dimensões maiores, β_c é mais difícil de se obter em redes um pouco maiores com incertezas aceitáveis. Isso dificultou uma busca mais precisa pelos pontos críticos do limite do contínuo, já que parece ser necessário o uso de simulações mais extensas e para redes maiores, que não puderam ser praticadas no âmbito deste trabalho.

Levando-se em conta os erros estimados, os resultados obtidos para os pontos críticos em $d = 2, 3, 4$, mostrados na tabela 4.4, podem ser considerados como indicativos de que valores próximos daqueles para condições periódicas de contorno seriam obtidos se fossem realizadas essas simulações mais extensas. A diferença entre os resultados talvez seja devida ao efeito das condições de contorno fixas sobre o sistema. Uma possível melhoria nestas condições de contorno seria a inclusão de flutuações em torno da média do campo, que as tornariam mais parecidas com as condições de contorno periódicas. Ainda com o intuito de conseguir melhores resultados, também seria possível, ao invés de calcular observáveis apenas sobre os pontos do *peel*, tomar valores esperados sobre todos os pontos do interior da rede.

Em duas dimensões, é bem sabido que a aproximação de campo médio não fornece resultados coerentes com o analítico de Onsager ou com a experiência. Por exemplo, ela prediz o valor 0.25 para o ponto crítico, em vez de 0.44069, ao passo que a extensão que apresentamos aqui parece funcionar melhor, dando um resultado mais próximo do exato. Esperamos que o método exposto aqui seja mais eficiente na obtenção dos expoentes críticos (resultando, por exemplo, num valor de γ mais próximo de $1/8$ do que de

sta dimensão do que o campo médio usual.

Sar da importância dos cálculos em $d = 2$ como forma de se testar o por comparação com os resultados exatos conhecidos, o método pro-ente tem mais chance de vir a funcionar bem para dimensões maiores $d = 3$ ou $d = 4$. Isto se deve ao fato de que nestas dimensões os valores oente crítico estão mais próximos do valor $\gamma = 1/2$ da aproximação po médio. Com isto, deve ser possível obter os resultados com cumu- a_{2i+1} de ordem menor e, portanto, mais fáceis de se medir. Com o seu de $\gamma = 1/8$ o modelo de Ising em $d = 2$ mostrou ser particularmente orável para este método, no que diz respeito ao expoente crítico.

S cumulantes a_{2i+1} calculados numericamente apresentaram também er-uito grandes. Como eles são essenciais para o cálculo do expoente γ , estimativa desta grandeza ficou impossibilitada. De novo, somente com tempo de computação em pontos críticos mais precisos poder-se-ia obter es mais confiáveis.

O próximo passo na continuidade do trabalho seria o refinamento da busca

pontos críticos através de simulações que envolvessem mais iterações

Monte Carlo, a fim de se diminuir os erros estatísticos, utilizando-se a

uma metodologia apresentada aqui, com maior cuidado em relação aos

mulantes.

Apêndice A

Algoritmos estocásticos

Devido à grande quantidade de configurações possíveis para uma rede finita (definindo uma configuração como um conjunto de valores dos campos nos sítios), é obviamente impossível calcular exatamente qualquer observável. Entretanto, podemos estimar estas grandezas através de procedimentos estocásticos, conhecidos como métodos de Monte Carlo, que calculam as médias sobre algumas dentre todas as configurações possíveis, escolhidas segundo uma determinada regra. As configurações selecionadas devem ser aquelas que contribuem mais fortemente no cálculo das médias, dentre o número excessivamente grande de configurações possíveis. Isso é o que se chama *amostragem de importância*. Vamos tentar explicar sucintamente aqui dois destes métodos.

O objetivo dos métodos estocásticos é produzir uma cadeia de Markov das configurações, em que uma configuração depende apenas daquela que lhe é imediatamente anterior. Existem vários algoritmos que permitem obter tal sequência de configurações, mas qualquer um deles deve obedecer a certos requisitos, alguns dos quais podem ser resumidos da seguinte forma:

1. **Normalização.** Seja $W_{CC'}$ a probabilidade de transição de uma configuração C para outra C' , gerada pelo algoritmo utilizado. Essa condição impõe que a soma das probabilidades de todas as possíveis configurações deve ser igual a 1,

$$\sum_{C'} W_{CC'} = 1.$$

2. **Ergodicidade.** Deve ser possível gerar uma configuração a partir de qualquer outra, num número finito de transições,

$$W_{CC'}^n = \sum_{C_1} \sum_{C_2} \dots \sum_{C_n} W_{CC_1} W_{C_1 C_2} \dots W_{C_n C'} > 0.$$

3. **Balanco detalhado.** Esta condição diz que, para um sistema em equilíbrio, a probabilidade $W_{CC'}$ deve seguir a distribuição de Boltzmann, com pesos dados pela exponencial $e^{-\beta S(C)}$. Isto pode ser escrito como

$$W_{CC'} e^{-\beta S(C)} = W_{C'C} e^{-\beta S(C')}.$$

Uma demonstração de que esta condição leva à distribuição de Boltzmann pode ser encontrada, por exemplo, em [16].

O método de simulação estocástica de Metrópolis permite obter os valores médios de observáveis da rede a partir da geração de configurações aleatórias do sistema. Começando com uma configuração C_0 qualquer (obtida por meio do gerador de números aleatórios de um computador) calcula-se a sua ação $S(C_0)$, na verdade a Hamiltoniana do sistema, já mencionada.

Gerando uma outra configuração aleatória C_1 a partir de C_0 através de uma modificação do campo em determinado sítio, procede-se ao cálculo da nova ação $S(C_1)$. Calcula-se então a diferença na ação produzida por essa mudança

$$\Delta S = S(C_1) - S(C_0).$$

Um número aleatório r entre 0 e 1 é então escolhido de forma que: se $r < e^{-\beta \Delta S}$, com β relacionado à temperatura do sistema, a configuração C_1 é aceita; se $r > e^{-\beta \Delta S}$, a mudança na ação é rejeitada e mantém-se a configuração C_0 . Podemos escrever para a probabilidade de transição

$$W_{CC'} = \begin{cases} 1 & \text{se } S[C'] < S[C], \\ e^{-\beta \Delta S} & \text{se } S[C'] > S[C]. \end{cases}$$

Isso leva o sistema a uma situação de equilíbrio, a partir da qual pode-se calcular as médias dos observáveis $\mathcal{O}$:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{n - n_0 - 1} \sum_{k=n_0+1}^n \mathcal{O}(C_{(k)}),$$

onde n_0 é o número de configurações desprezadas até se chegar ao equilíbrio (relaxação).

Este método simples apresenta o problema de que as medidas podem ser altamente correlacionadas, já que uma determinada configuração depende fortemente da configuração anterior. Definimos uma quantidade chamada função de autocorrelação

$$\kappa(p) = \frac{\langle f_{C_i} f_{C_{i+p}} \rangle - \langle f_{C_i} \rangle \langle f_{C_{i+p}} \rangle}{\langle f_{C_i}^2 \rangle - \langle f_{C_i} \rangle^2},$$

onde C_i é a i -ésima configuração, f é a grandeza a ser medida e as médias são tomadas para duas configurações distanciadas p passos uma da outra. Esta função indica o grau de autocorrelação de uma grandeza medida estocasticamente. Esta função de autocorrelação é normalizada de forma a fornecer $\kappa(0) = 1$ e $\kappa(p) = 0$ se a grandeza medida já está totalmente descorrelacionada após p passos. Através dela é possível calcular o número de passos entre duas medidas de um observável para que elas sejam consideradas independentes. Esse é o chamado *tempo de autocorrelação* τ

$$\tau \sim \xi^z, \quad (\text{A.1})$$

que depende do comprimento de correlação ξ e do expoente z . Perto do ponto crítico, esse tempo pode ser muito longo, especialmente para redes grandes, já que para o método de Metropolis $z \sim 2$. Verifica-se assim que este método não é muito eficiente em termos de produção de medidas estatisticamente descorrelacionadas.

Um método melhor (para o qual $z \sim 0.14$) é o algoritmo de *clusters* de Wolff, em que se caminha mais rápido no espaço de configurações através da mudança dos campos em vários sítios ao mesmo tempo, e se consegue evitar a situação conhecida como “*critical slowing down*”, por meio do seguinte procedimento (descrito aqui para modelos com simetria $O(1)$):

1. Escolha aleatória de um sítio da rede.

2. "Ativação" dos *links* entre o sítio sorteado e seus primeiros vizinhos de spin igual, atribuindo-se-lhes a probabilidade

$$P = 1 - e^{-2\beta}.$$

Os sítios que foram ativados dessa forma são considerados ligados ao aglomerado (*cluster*) de spins que está sendo construído.

3. Repetição do passo anterior para cada novo spin ligado ao *cluster*, devendo-se sempre manter as ligações já verificadas e não mudar spins já visitados, até que não se consiga ligar mais nenhum spin novo ao *cluster*.
4. Inversão do sinal de todos os spins ligados ao *cluster* ($\sigma \rightarrow -\sigma$).

É possível demonstrar que esse algoritmo obedece às condições mencionadas anteriormente. Também é possível generalizá-lo para aplicação a um sistema com simetria $SO(N)$, em que o vetor de spin poderia apontar para qualquer das N dimensões do espaço interno, e uma simples mudança de sinal não seria suficiente para modificar a configuração de forma correta. Essas demonstrações não serão feitas aqui (ver [16], [14]).

A.1 Programas utilizados

Para o trabalho numérico necessário, utilizamo-nos de programas de computador, elaborados em linguagem FORTRAN, desenvolvidos ao longo de vários trabalhos de pesquisa, sendo alteradas algumas de suas rotinas sempre que assim exigia determinada investigação. Tais programas consistem de milhares de linhas de programação, inviabilizando sua apresentação aqui. Será dada aqui uma descrição dos aspectos mais relevantes dos seus algoritmos.

Os algoritmos utilizados foram escritos originalmente para o cálculo de observáveis no modelo $\lambda\phi^4$, em redes com condições periódicas de contorno. Esses algoritmos foram convenientemente modificados para analisar o modelo de Ising numa rede fixa sempre que necessário.

O primeiro programa utilizado (INPDATA) é responsável pela checagem dos parâmetros de entrada (número de dimensões, valor do acoplamento e da constante β etc.) bem como o registro de arquivos de controle. Se

houver alguma inconsistência (como dimensão maior que 5, por exemplo), o programa não permite o prosseguimento da simulação.

A partir daí, executa-se um programa (MCRELAXER) que produz um campo com configuração relaxada, ou seja, que atingiu o equilíbrio termodinâmico, necessária para a medida dos observáveis através das simulações de Monte Carlo propriamente ditas.

Estas são efetuadas através do programa chamado MCSAMPLER, de estrutura similar ao MCRELAXER. Como esta rotina deve gerar um número de configurações necessário para o cálculo dos observáveis, é utilizada uma implementação de processamento paralelo a fim de produzir resultados com boa estatística em um tempo razoável. Também é este programa que contém os algoritmos que foram alterados para os cálculos necessários a este trabalho, como aqueles referentes à estrutura de indexação dos sítios da rede.

A função desses dois programas pode ser resumida como segue, correspondendo às sub-rotinas que os compõem:

1. Inicialização de vários parâmetros da rede e armazenamento da configuração inicial.
2. Indexação dos sítios da rede de forma que ainda se mantenha a relação de primeiros vizinhos, mas se possa usar um vetor contendo os valores dos campos, ao invés de uma matriz. Isto é feito através de um algoritmo que lineariza uma dada matriz de dimensão qualquer, resultando num vetor unidimensional, para simplicidade e eficiência de manipulação [14]. Aqui devemos implementar as condições de contorno fixas requeridas pela condição de auto-consistência.
3. Acumulação dos observáveis calculados e geração de configurações de campo (por meio do algoritmo já descrito na seção anterior) com as distribuições estatísticas corretas para que o cálculo das médias reproduza satisfatoriamente a soma sobre todas as configurações possíveis da integração funcional.

Para analisar a eficiência do algoritmo estocástico utilizado e calcular a já referida função de autocorrelação entre as médias dos observáveis em diferentes configurações do campo, executa-se o programa MCAUTOCORRS, semelhante aos anteriores, com a diferença de que, sendo executado um número muito menor de vezes, não necessita de paralelização.

Neste ponto já se tem todos os dados necessários, de forma que os programas seguintes têm por objetivo calcular a estatística dos números produzidos (STATISTICS) e definir os resultados finais (RESULTS).

O trabalho computacional foi efetuado no *cluster* de nós (processadores Athlon e DEC-Alpha) do Departamento de Física Matemática. A paralelização foi realizada com uso de uma biblioteca PVM.

Coeficientes da expansão do valor esperado do campo

Mostramos aqui os coeficientes c_n para a expansão do valor esperado $\langle \phi \rangle$ em termos de momentos calculados com banda finita. Os coeficientes c_n são dados por $c_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n \langle \phi \rangle}{d\lambda^n} \bigg|_{\lambda=0}$, onde λ é um parâmetro de deformação. Os coeficientes c_n são calculados para potências pares de n até a ordem 12.

Apêndice B

Coeficientes da expansão do valor esperado do campo

Mostramos aqui os coeficientes a_{2i+1} obtidos para a expansão do valor esperado v do campo em termos de cumulantes calculados com borda nula (ou seja, na medida da ação S_0), por meio de um programa de computação algébrica (Mathematica). Eles foram calculados, para potências pares de v , até a ordem 17.

$$\begin{aligned}a_1 &= -\langle \bar{\psi}^2 \rangle \\a_3 &= 3\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 - \langle \bar{\psi}^4 \rangle \\a_5 &= -30\langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 + 15\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle - \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\a_7 &= 630\langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 - 420\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle + 35\langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 + 28\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle - \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\a_9 &= -22680\langle \bar{\psi}^2 \rangle^5 + 18900\langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^4 \rangle - 3150\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \\&\quad - 1260\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle + 210\langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle + 45\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle - \langle \bar{\psi}^{10} \rangle \\a_{11} &= 1247400\langle \bar{\psi}^2 \rangle^6 - 1247400\langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^4 \rangle + 311850\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \\&\quad - 11550\langle \bar{\psi}^4 \rangle^3 + 83160\langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^6 \rangle - 27720\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\&\quad + 462\langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 - 2970\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^8 \rangle + 495\langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\&\quad + 66\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle - \langle \bar{\psi}^{12} \rangle \\a_{13} &= -97297200\langle \bar{\psi}^2 \rangle^7 + 113513400\langle \bar{\psi}^2 \rangle^5 \langle \bar{\psi}^4 \rangle - 37837800\langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \\&\quad + 3153150\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle^3 - 7567560\langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\&\quad + 3783780\langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle - 210210\langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle - 84084\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 \\&\quad + 270270\langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^8 \rangle - 90090\langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle + 3003\langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -6006 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^{10} \rangle + 1001 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle + 91 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^{12} \rangle \\
& - \langle \bar{\psi}^{14} \rangle \\
a_{15} = & 10216206000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^8 - 13621608000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^6 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \\
& + 5675670000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 - 756756000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^3 \\
& + 15765750 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^4 + 908107200 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^5 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\
& - 605404800 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle + 75675600 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\
& + 15135120 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 - 1681680 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 \\
& - 32432400 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^8 \rangle + 16216200 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\
& - 900900 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^8 \rangle - 720720 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\
& + 6435 \langle \bar{\psi}^8 \rangle^2 + 720720 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^{10} \rangle \\
& - 240240 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle + 8008 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle \\
& - 10920 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^{12} \rangle + 1820 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{12} \rangle \\
& + 120 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^{14} \rangle - \langle \bar{\psi}^{16} \rangle \\
a_{17} = & -1389404016000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^9 + 2084106024000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^7 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \\
& - 1042053012000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^5 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 + 192972780000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^3 \\
& - 9648639000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle^4 - 138940401600 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^6 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\
& + 115783668000 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle - 23156733600 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \\
& + 643242600 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^6 \rangle - 3087564480 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 \\
& + 771891120 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle^2 - 5717712 \langle \bar{\psi}^6 \rangle^3 \\
& + 4962157200 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^5 \langle \bar{\psi}^8 \rangle - 3308104800 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\
& + 413513100 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^8 \rangle + 165405240 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle \\
& - 18378360 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle - 1969110 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^8 \rangle^2 \\
& - 110270160 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^4 \langle \bar{\psi}^{10} \rangle + 55135080 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle \\
& - 3063060 \langle \bar{\psi}^4 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^{10} \rangle - 2450448 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle \\
& + 43758 \langle \bar{\psi}^8 \rangle \langle \bar{\psi}^{10} \rangle + 1670760 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^3 \langle \bar{\psi}^{12} \rangle \\
& - 556920 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{12} \rangle + 18564 \langle \bar{\psi}^6 \rangle \langle \bar{\psi}^{12} \rangle \\
& - 18360 \langle \bar{\psi}^2 \rangle^2 \langle \bar{\psi}^{14} \rangle + 3060 \langle \bar{\psi}^4 \rangle \langle \bar{\psi}^{14} \rangle \\
& + 153 \langle \bar{\psi}^2 \rangle \langle \bar{\psi}^{16} \rangle - \langle \bar{\psi}^{18} \rangle
\end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] *Finite Lattice Systems with True Critical Behavior*, Jorge L. deLya, Timothy E. Gallivan and See Kit Foong, Phys. Rev. **D46** (1992) 1643–1657.
- [2] *Finite-Size Scaling in the Three-Dimensional Ising Model*, M.N. Barber, R. B. Pearson, D. Toussaint and J.L. Richardson, Phys. Rev. **B32** (1985), 1720.
- [3] Salinas, Sílvia R. A. *Introdução à Física Estatística*. São Paulo, Edusp (1997).
- [4] Chandler, D. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. New York, Oxford University Press (1987).
- [5] Cardy, J. L. *Finite-Size Scaling*. North-Holland (1988).
- [6] Gardiner, C. W. *Handbook of Stochastic Methods*. Springer-Verlag (1983).
- [7] Bevington, P., Robinson, D., *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill (1992).
- [8] Yeomans, J. M. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford, Oxford University Press (1992).
- [9] Goldenfeld, N. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Addison-Wesley (1992).
- [10] Binney, N., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., Newman, M. E. J. *The Theory of Critical Phenomena*. Oxford, Oxford University Press (1992).

- [11] Itzykson, C., Drouffe J.-M. *Statistical Field Theory*, in *Cambridge Monographs on Mathematical Physics*. Cambridge University Press (1992).
- [12] Domb, C. *Ising Model*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Volume 3 (C. Domb e M. S. Green, editores). Londres, Academic Press (1974).
- [13] Mouritsen, O. G. *Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Berlin, Springer-Verlag (1984).
- [14] *Teoria Quântica de Campos na Rede, uma abordagem radical*, o Grupo Latt; o texto pode ser encontrado, na íntegra, em:
- <http://latt.if.usp.br/bazar/>
- [15] *Critical exponents on finite self-consistent lattices*, Jorge L. deLyra, André C. R. Martins, Carlos E. I. Carneiro, Proceedings of the *Theoretical Physics Symposium in honor of Paulo Leal Ferreira*. São Paulo, IFT (1995).
- [16] Oliveira F^o, Arnaldo G. de, *Configurações Topológicas no Modelo Sigma Não-Linear SO(2)* - dissertação de mestrado apresentada ao IFUSP em Março de 1998, disponível no endereço:

<http://latt.if.usp.br/~agolivei>

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo

3691

ex. 2

tornando ainda mais importante o cálculo preciso destes cumulantes no limite do contínuo para estimar o valor do expoente crítico.

Devido à dificuldade de se obter estes cumulantes com boa precisão no tempo disponível, não foi possível chegar a esse tipo de resultado.

Figura 4.8: Exemplo de gráfico que se pode construir para $f(\beta)$, para uma rede de 20 pontos em $d = 2$. O modo como essa função se anula (com derivada finita) no ponto crítico determina o valor do expoente γ' .