UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

MÉTODO DE MONTE CARLO
COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO
DE PARÂMETROS

Jorge Chahine

*Tese apresentada ao Instituto de
Física e Química de São Carlos, USP,
para obtenção do Título de Doutor em
Ciências - Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

SÃO CARLOS

1989

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____
Jorge Chahine _____ APRESENTADA AO INSTITUTO DE
FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO,
EM 26 DE janeiro DE 1990

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. José R. Drugowich de Felício (orientador)

Prof. Dr. Roland Koberle

Prof. Dr. Francisco Castillo Alcaraz

Prof. Dr. Paulo Murilo Castro de Oliveira

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos

À minha saudosa avó Mariana

**Ao meu filho Gabriel
motivação de tudo que faço**

A realização deste trabalho não foi obtida sómente pela atitude obstinada de minha parte em abordar as questões aqui propostas. Foi também, e muito, a contribuição fundamental de várias pessoas.

AGRADEÇO

- Ao Professor *José Roberto Drugowich de Felício*, pela competência e compreensão mostradas na orientação, elementos sem os quais este trabalho não teria sido possível.
- Ao Professor *Nestor Caticha*, pela forma amistosa de compartilhar comigo o brilhantismo de suas idéias.
- Aos meus amigos e colegas do Departamento de Física do IBILCE-UNESP *Eikiti, José Roberto, João, Márcio, Johnny, Marcelo, Elói, Elso, Ramon, Marinônio* e ao saudoso *Luis*. Grato por terem aliado ao espírito científico, que sempre pautou suas condutas, a amizade sincera que sempre nos uniu.
- À *Irene*, pela boa vontade em oferecer sua competência profissional e que contribuiu pela bela impressão deste trabalho.
- Aos *Sr. Milton, Cláudia e demais funcionários da Prefeitura deste Campus*.
- Aos funcionários deste Instituto *Valdir, Valdeci, Italo, Wladerez, Samuel, Cecília e todos os demais*, pela presteza e boa vontade em ajudar na solução das dificuldades surgidas durante este trabalho.
- Aos caros amigos *Braz e Carla*, pela presteza e interesse no sucesso deste trabalho, aos caríssimos amigos *Francisco Bosco, Clisthenis, Lula, José Fontanari, Antonio Carlos, Flávio, Nagib, Niltinho, Márcio, Márcia, Miled, Wilson, Thomáz, José Carlos*, que transformaram nosso ambiente comum numa convivência saudável e construtiva, que trarei sempre dentro de mim.
- Ao caro amigo *Caparica*, pela amizade e pelo estímulo para iniciar este trabalho.
- Aos caros *Faria e Onody*, pela antiga e sempre atual amizade.
- À *CAPES*, pelo apoio financeiro.
- A este Instituto como um todo, do qual adquiri a formação necessária para realizar este trabalho e exemplos de seriedade e competência no trato com a ciência.

RESUMO

Nesta tese estudamos vários tópicos ligados a simulações Monte Carlo de sistemas clássicos de spin na rede.

Estamos interessados mais nos métodos do que em resultados de aplicações com grande precisão numérica, devido a limitações computacionais. A ênfase é dada principalmente ao método de Grupo de Renormalização via Monte Carlo.

Em primeiro lugar levamos a cabo um estudo detalhado do truncamento no espaço de Hamiltonianas para poder controlar numericamente os efeitos de operadores marginais. Um estudo detalhado do modelo Ashkin Teller $N = 2$ em duas dimensões é apresentado.

Procuramos, a seguir, entender melhor o método de Ferrenberg e Swendsen de histogramas estudando-o para poder calcular, em uma só simulação, valores de expoentes não universais. Apresentamos resultados do modelo de Ising com defeito em 2d.

Este método é aplicado ao problema da determinação da ordem de transições. Exemplos de modelos de Ising com interação de multispin são apresentados.

Mostramos a seguir uma nova e poderosa técnica de investigar transições de fase que é obtida da combinação de idéias do Grupo de Renormalização via Monte Carlo e do método de histograma. Estes métodos são finalmente usados para estudar o modelo Ashkin Teller $N = 3$ anisotrópico em duas dimensões.

ABSTRACT

In this thesis we study various topics in the realm of Monte carlo simulations of classical spin systems.

We are more interested in the methods themselves than in precise numerical results, due to computational limitations. Emphasis lies in the study of the Monte Carlo Renormalization Group.

First of all, we study the effects of truncations in Hamiltonian space on the marginal operators of a theory . A case study of the Ashkin Teller $N = 2$ in 2d is presented.

Next we turn to trying to understand better Ferrenberg and Swendsen's histogram method, extending it so that non universal exponents can be obtained from a single simulation. Results from simulations of the 2d Ising model with a defect are shown.

This method is then applied to the problem of phase transition order determination. Examples from 2d - Ising models with multispin interactions are presented.

We then present a new and powerful method for investigating phase transitions which derives from the combination of MCRG and the histogram method. This new technique is then used in the study of the $N = 3$, 2d, anisotropic Ashkin Teller model.

INDICE

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

CAPÍTULO 2 - REVISÃO DAS TÉCNICAS UTILIZADAS

2.A O Método de Monte Carlo.	7
2.A.1 Ergodicidade e tempo de relaxação.	10
2.A.2 Efeitos de tamanho finito e condições de contorno.	11
2.A.3 Monte Carlo com evolução no espaço de parâmetros	13
2.B O Grupo de Renormalização.	16
2.C O Grupo de Renormalização Via Monte Carlo.	22
2.C.1 Introdução.	22
2.C.2 O método MCRG para expoentes críticos.	23
2.C.3 O método MCRG para constantes de acoplamento.	25

CAPÍTULO 3 - USO DO MCRG NO MODELO DE ASHKIN-TELLER DE DUAS CORES

3.A Introdução.	28
3.B Descrição do Modelo.	29
3.C Determinação do diagrama de fases e dos expoentes críticos.	31

CAPÍTULO 4 - APLICAÇÕES DO MÉTODO DE MONTE CARLO COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

4.A Introdução.	46
4.B Cálculo de expoentes não universais.	47
4.C Transições de Fase em Sistemas com Interações Multispin	52

CAPÍTULO 5 - MCRG COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

5.A Introdução.	65
5.B Histogramas para obtenção de pontos críticos	65
5.C Histogramas para obtenção do fluxo no espaço de parâmetros	68

CAPÍTULO 6 - USO DO MCRG COM EVOLUÇÃO NO MODELO DE ASHKIN-TELLER $N = 3$

6.A Introdução	74
6.B Diagrama de fases	76
6.C Determinação de Expoentes Críticos.	85

APÊNDICE A - ALGORÍTMO DE METRÓPOLIS

APÊNDICE B - TEMPO DE CORRELAÇÃO

APÊNDICE C - MAPEAMENTO DE WEGNER

REFERÊNCIAS

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

O problema básico da ME das transições de fase consiste em localizá-las e classificá-las de acordo com o comportamento crítico exibido. Para atingir esse objetivo várias técnicas foram desenvolvidas e têm sido utilizadas em um sem número de modelos. O conjunto de ferramentas engloba desde a mais simples teoria do campo molecular ⁽¹⁾ até a solução exata de alguns poucos casos em que a matriz de transferência satisfaz relações de comutação que simplificam enormemente o problema ⁽²⁾. Longe dos casos extremos, citados anteriormente, encontram-se as técnicas numéricas, propostas há cerca de 40 anos ^(3,4), que ganharam força ainda maior com o advento de novos poderosos computadores. Todas essas forças de ataque porém, não contemplam algo que é essencial nas transições de fase : a invariância frente a transformações de escala. Essa propriedade, inicialmente explorada por Kadanoff ⁽⁵⁾, só foi adequadamente entendida por Wilson ⁽⁶⁾ que acabou por formular o Grupo de Renormalização aplicado à Mecânica Estatística. Nessa abordagem, pela primeira vez, a atenção do investigador não se concentra na solução completa do problema mas sim na maneira pela qual os parâmetros da Hamiltoniana se comportam frente à uma transformação de escala.

A década de 70 se caracterizou pelo aparecimento de uma série de maneiras distintas de se implementar o Grupo de Renormalização. Duas delas no entanto merecem destaque não só pela alta qualidade dos seus resultados mas também pela possibilidade do aperfeiçoamento sistemático que elas oferecem. Estamos falando do Grupo de Renormalização Fenomenológico (GRF) e do Grupo de Renormalização via simulações de Monte-Carlo (MCRG), que curiosamente foram propostas no mesmo ano (1976) por Nightingale⁽⁷⁾ e Ma⁽⁸⁾ respectivamente.

No primeiro caso (GRF) a idéia é comparar o comprimento de correlação de dois sistemas finitos (L e L') em uma direção. Como o comprimento (ξ) pode ser obtido a partir dos maiores autovalores da matriz de transferência ⁽²⁾, com a precisão da máquina, fica claro que se trata de uma técnica altamente precisa. No segundo caso (MCRG) o que se faz é implementar alguma regra para renormalização (tipo regra da maioria) nas configurações do sistema original obtidas por simulações de Monte-Carlo. Aqui há um erro inerente ao

método uma vez que apenas uma fração das configurações é tomada para efeito do cálculo (erro estatístico).

A grande vantagem do método de Nightingale (Grupo de Renormalização Fenomenológico ou Finite-size scaling) consiste na possibilidade de se produzir extrapolações confiáveis a partir de uma sequência de resultados precisos, que somente podem ser obtidos em casos muito simples, para sistemas tridimensionais. Também não se pode usar esse método para investigar situações em que as interações não sejam determinísticas. Em outras palavras, não é possível estudar com essa técnica modelos com diluição de ligações, vidros de spin e percolação correlacionada. Uma outra dificuldade a ser mencionada é a impotência do método no que tange à determinação da ordem de uma transição de fase. Trabalhos de Privman e Fisher ⁽⁹⁾ e outros autores ⁽¹⁰⁾ mostram que a equação fundamental do método também se verifica nas transições de primeira ordem. Isso significa que o investigador menos avisado poderia, de repente, determinar expoentes críticos numa situação em que eles simplesmente não existem. Finalmente é importante mencionar a pequena eficiência do método para determinar campos de escala, nos casos em que mais de um campo relevante participam do modelo. Mesmo com essas limitações o Finite-Size Scaling tem sido usado em larga escala nos últimos anos. A razão é que a partir dos trabalhos de Belavin, Polyakov, Zamotodchikov ⁽¹¹⁾ e Cardy ⁽¹²⁾ ficou evidente que a geometria "tipo cinta" utilizada no F.S.S. representa uma transformação conforme muito especial, pela qual os índices críticos são naturalmente exibidos no espectro do sistema finito.

O Grupo de Renormalização via simulações de Monte-Carlo (MCRG), por sua vez, também evoluiu nesses quase quinze anos. Embora não se tenha beneficiado diretamente dos progressos da invariância conforme, alguns avanços foram significativos. Primeiro foram os trabalhos de Swendsen ⁽¹³⁾ adaptando as idéias de Ma. Depois os trabalhos, de vários autores ⁽¹⁴⁾, tentando utilizar o método para obter a função de partição e a energia livre. Mais tarde ⁽¹⁵⁾ o uso da formulação de Kasteleyn ⁽¹⁶⁾ viria acelerar as simulações, permitindo que sistemas mais complicados, como vidros de spin, pudessem ser abordados ⁽¹⁷⁾ com bastante propriedade na linguagem de percolação. Finalmente, a grande contribuição para o desenvolvimento da técnica viria do reconhecimento de que uma simulação tem muito mais informações do que até então se suspeitava. Essa idéia já havia sido explorada em trabalhos anteriores ⁽¹⁸⁾ mas, a partir da "Letter" de Ferrenberg e Swendsen ⁽¹⁹⁾, no final

de 1988, ganhou consistência e aplicabilidade. É possível entender rapidamente o método, bastando para isso lembrar que a probabilidade de um macroestado depende de dois fatores: um deles é o fator de Boltzmann que é puramente energético, e o segundo é a contribuição entrópica (parte geométrica). O ponto importante é que essa segunda parte não depende das constantes de acoplamento e por isso mesmo pode ser calculada apenas uma vez. A dependência com as constantes de acoplamento está toda no fator de Boltzmann sobre o qual se tem todo controle. Dessa forma é possível transferir a probabilidade de se encontrar configurações com energia E à uma “temperatura” ($P_\beta(E)$) para uma outra temperatura com um cálculo extremamente simples:

$$P_{\beta'}(E) = P_\beta(E) e^{(\beta' - \beta)JB} / \sum_B P_\beta(E) e^{(\beta' - \beta)JB}$$

Como, a partir dessas probabilidades, se pode calcular a média de qualquer grandeza física do sistema (susceptibilidade, calor específico, função de correlação) fica claro que, a partir de uma única simulação, pode-se conseguir a variação dessas grandezas ao longo de todo um intervalo de temperatura.

Esse aperfeiçoamento do método de Monte-Carlo abriu novas perspectivas de trabalho principalmente para aqueles investigadores que, como nós, não dispõem de equipamentos sofisticados. É dentro desse contexto que se insere essa tese, cuja organização apresentamos a seguir.

O capítulo 2 desse trabalho está inteiramente dedicado à apresentação dos métodos de Monte Carlo, do Grupo de Renormalização, e Monte Carlo com histogramas. Também está neste capítulo a combinação dos dois métodos que costuma ser chamada de Grupo de Renormalização via simulações de Monte-Carlo (MCRG), que formam o conjunto de técnicas já conhecidas que usaremos nesta tese, que contém as contribuições originais nos capítulos 3 a 6. No capítulo 3 o MCRG é utilizado, pela primeira vez, para estudar o modelo de Ashkin-Teller com duas cores em duas dimensões. Embora já bastante estudado ⁽²⁰⁾, esse modelo apresenta em diagrama de fase rico e não completamente conhecido. Além disso, trata-se de um passo natural na busca do entendimento de um modelo mais complicado, o AT com 3 cores e quebra de simetria entre elas ⁽²¹⁾. Um estudo minucioso ⁽²²⁾ foi feito para entender a importância dos vários operadores na determinação do autovalor ($y = 0$) do operador marginal, e na correta determinação do autovalor térmico nas vizinhanças do

ponto de Potts.

No capítulo 4 o novo método de Ferrenberg e Swendsen ⁽¹⁹⁾ é aplicado para estudar duas situações de interesse: a) obter a variação do expoente crítico η não universal da função de correlação do modelo de Ising com defeito ⁽²⁴⁾ com a constante de acoplamento modificada ⁽²⁵⁾, b) a combinação do método com a técnica do cumulante (de Binder e colaboradores ⁽²⁶⁾) para decidir sobre a ordem da transição de fase nos modelos bidimensionais com interações de multispin em uma das direções ⁽²⁷⁾.

No capítulo 5 introduzimos uma nova e poderosa técnica para investigar transições de fase, unindo o MCRG com as técnicas de histograma, ou evolução no espaço de parâmetros.

Finalmente, no Capítulo 6 são utilizados todos os recursos, apresentados anteriormente, na investigação do modelo de Ashkin-Teller a 3 cores com quebra de simetria ⁽²¹⁾. Esse modelo foi originalmente proposto e estudado por Goldschmidt, usando teoria de campo médio, por se tratar de uma possível discretização de uma teoria de campos supersimétrica que apresentaria um ponto multi-crítico tipo Kosterlitz-Thouless. O diagrama de fases é obtido e comparado com os resultados de Goldschmidt. Os expoentes críticos são calculados em vários pontos e uma proposta de classificação das transições é apresentada.

Todas as simulações foram feitas num computador do tipo VAX/780 e os tempos de CPU mencionados neste trabalho se referem a esse tipo de máquina.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DAS TÉCNICAS UTILIZADAS

2.A - O MÉTODO DE MONTE CARLO

Simulações em computadores desempenham papel cada vez mais importante nas diversas áreas do conhecimento e particularmente na Mecânica Estatística. O reduzido número de modelos que possuem solução exata conhecida, motiva fortemente a abordagem computacional de outros problemas de interesse cujo entendimento passa, muitas vezes, pelo cálculo de grandezas que aparecem como resultado de integrações multidimensionais. Para exemplificar, considere o caso particular envolvendo apenas uma dimensão. O que se deseja é calcular a integral de uma função $f(x)$ no intervalo $[a,b]$

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

Pode-se resolver esse problema, conhecendo-se a média de $f(x)$ entre a e b . Pelo teorema do valor médio

$$\langle f(x) \rangle = I/(b-a) \quad (2.2)$$

Assim faz-se o passo crucial de transformar um problema determinístico (2.1) em outro estocástico (2.2). A integral pode então ser feita escolhendo, arbitrariamente, N pontos x_i no intervalo $[a,b]$ e fazendo a média dos valores de $f(x)$

$$I = \int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad (2.3)$$

Essa é uma das mais simples aplicações do método de Monte Carlo. O nome se deve ao caráter aleatório da escolha dos x_i . Nesse caso todos os pontos são escolhidos uniformemente e não há referência à natureza de $f(x)$, ou seja, se f varia de forma acentuada no intervalo $[a,b]$ a incerteza da estimativa por Monte Carlo (2.3) será grande, quando comparado ao valor exato (2.1). A estimativa só será boa se a função for bem comportada. Isso pode ser conseguido da seguinte forma: suponha que $f(x)$ tenha um pico em torno de seu valor médio e ainda que pode-se construir $p(x) > 0$ que imite o comportamento de $f(x)$, mas que possa ser obtida analiticamente, tal que

$$\int_a^b p(x)dx = 1 \quad , \quad p(x) > 0 \quad (2.4)$$

A integral em (2.1) pode então, ser reescrita

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b [f(x)/p(x)] p(x)dx \quad (2.5)$$

Agora os pontos x_i são escolhidos de acordo com a medida $p(x)dx$ (ao invés de uniformemente), e um peso apropriado $p^{-1}(x)$ é atribuído à função calculada em x . Isso deve reduzir a incerteza em relação ao método de escolha uniforme, pois a maior parte dos valores de x virão da região perto do pico, que é a que realmente contribui para a soma $\sum_i f(x_i)$. A média da função $f(x)$ com seu respectivo peso é agora dada por

$$\langle f(x) \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{p(x_i)} \quad (2.6)$$

O somatório se refere agora a uma função uniforme no intervalo.

A variância σ é escrita como

$$\sigma^2 = \int_a^b [f(x)/p(x)]^2 p(x)dx - \left\{ \int_a^b [f(x)/p(x)] p(x)dx \right\}^2, \quad (2.7)$$

que praticamente se anula se $p(x)$ for escolhido na forma

$$p(x) = f(x) / \int_a^b f(x)dx = f(x)/I \quad (2.8)$$

Esse procedimento corresponde a um refinamento do método que costuma ser designado por "importance sampling", que consiste em escolher os pontos de acordo com a sua importância $p(x)$. O problema todo é que na expressão (2.8) a integral de interesse (I) deve ser previamente conhecida para determinar $p(x)$. Entretanto, conforme veremos adiante essa dificuldade pode ser superada. Para especificar vamos estudar um sistema governado por uma hamiltoniana $H(x)$, onde x é um ponto do espaço de fase Ω , cujo observável A deve ser calculado.

Seja $f(H(x))$ a função de distribuição do ensemble canônico

$$f(H(x)) = \exp(-H(x)/kT) \quad (2.9)$$

Por definição o valor médio do observável A é dado por

$$\langle A \rangle = \int_{\Omega} A(x) f(H(x)) dx / Z \quad (2.10)$$

onde

$$Z = \int_{\Omega} f(H(x)) dx$$

A constante de Boltzmann é k e T é a temperatura do sistema. Vamos aproximar a integral (2.10) por um somatório

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_{i=1}^n A(x_i) f(H(x_i))}{\sum_{i=1}^n f(H(x_i))}, \quad (2.11)$$

e escolher os estados do sistema com probabilidade $P(x_i)$. Então

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^n A(x_i) P^{-1}(x_i) f(H(x_i))}{\sum_{i=1}^n P^{-1}(x_i) f(H(x_i))} \quad (2.12)$$

A variância σ , que mede a incerteza no cálculo de $\langle A \rangle$ vai praticamente a zero se fizermos a escolha

$$P(x_i) = f(H(x_i)) / Z, \quad (2.13)$$

da mesma forma que no caso da integral unidimensional $f(x)$. Nesse caso também aparece o problema de conhecer antecipadamente a distribuição de equilíbrio dos estados do sistema. É aqui que entra a idéia de Metropolis e colaboradores ⁽³⁾ que propuseram um algoritmo para gerar as configurações de acordo com a distribuição de equilíbrio (2.9).

O algoritmo pode ser resumido da seguinte forma :

1. dada uma configuração inicial Ω_i para o sistema, caracterizado pela energia $E(\Omega_i)$, muda-se o estado de uma partícula qualquer e o sistema passa a ter uma nova energia $E(\Omega_j)$. A seguir calcula-se a variação de energia $\Delta E = E(\Omega_j) - E(\Omega_i)$.
2. Se $\Delta E < 0$, a mudança é aceita sem restrição. Se isso não ocorrer um número aleatório $R \in (0, 1)$ é gerado e comparado com $P_{i \rightarrow j} = e^{-\beta \Delta E}$. Se $R \leq P_{i \rightarrow j}$ aceita-se a nova configuração, caso contrário retorna-se à configuração inicial Ω_i . A distribuição de probabilidade $P(x)$ gerada dessa forma converge para a distribuição canônica (2.13) à medida que se aumenta, cada vez mais, o número de passos 1 e 2, conforme se mostra no Apêndice A. Portanto, conhecida a distribuição $P(x)$, a equação (2.12) devido à escolha (2.13) toma a forma

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(z_i) \quad (2.14)$$

que é uma média aritmética simples para o cálculo de valores esperados das grandezas de interesse.*

2.A.1 - ERGODICIDADE E TEMPO DE RELAXAÇÃO

Os passos 1 e 2 mencionados no ítem anterior só farão a distribuição de estados convergir para a distribuição canônica se o sistema for ergódico. Isto requer que qualquer configuração da cadeia de Markov possa ser obtida a partir de qualquer outra configuração através de um número finito de transições. Entretanto, a ergodicidade pode ser perdida, como é o caso de sistemas com quebra de simetria.

Para melhor entender isso, vale a pena lembrar que a qualquer simulação podemos associar duas escalas de tempo. Uma delas inerente ao sistema, é caracterizada por um tempo de relaxação τ , e outra, cujo parâmetro é τ_{obs} , que mede o tempo de observação do sistema. Se $\tau \gg \tau_{obs}$, a ergodicidade não será mantida e não teremos a verdadeira distribuição de equilíbrio canônica. Obviamente, para sistemas finitos, $\tau < \infty$ e para garantir que $\tau_{obs} \gg \tau$, é necessário que se tenha uma estimativa de τ .

De outra forma, devemos lembrar que a cadeia de Markov gerada pelos passos 1 e 2 exige configurações sem memória. Isso implica que não possuam correlações altas entre si. O parâmetro τ , é uma medida do tempo de correlação entre estados. No caso de uma simulação Monte Carlo, τ , significa o menor número de passos Monte Carlo entre os estados para que eles não estejam correlacionados. A simulação só fará medidas confiáveis se $\tau_{obs} \gg \tau$, (um exemplo de estimativa para τ , é dado no Apêndice B).

O conhecimento de τ , é importante não só para realizar medidas confiáveis mas também para estimar os erros estatísticos, oriundos do fato de se usar um número de amostras muito menor que o número total de configurações acessíveis ao sistema. Para

*Mais detalhes nas referências (28,29)

estimar esses erros usa-se a técnica denominada "Coarse-graining", que consiste em dividir a simulação de M configurações em m grupos, cada um com ΔM configurações, ou seja, $M = m\Delta M$. A n -ésima média de "Coarse-graining" de uma grandeza f é definida como

$$\langle f \rangle_n = \frac{1}{\Delta M} \sum_{j=(n-1)\Delta M+1}^{n\Delta M} f_j \quad (2.15)$$

O desvio padrão ou variância dessa grandeza pode então ser expressa em função dos resultados parciais $\langle f \rangle_n$

$$\sigma^2 = \sum_{n=1}^m \left[\langle f^2 \rangle_n - \langle f \rangle_n^2 \right] \quad (2.16)$$

Os valores de $\langle f \rangle_n$ devem estar descorrelacionados para que σ^2 tenha valores pequenos. A determinação de τ_r , permite o conhecimento do número de passos de Monte Carlo, que torna pequena a correlação entre os m grupos de configurações. Teremos então, uma grandeza confiável σ^2 , que mede o tamanho dos erros estatísticos.

2.A.2 - EFEITOS DE TAMANHO FINITO E CONDIÇÕES DE CONTORNO

Uma transição de fase de segunda ou maior ordem é caracterizada pela divergência do comprimento de correlação, e por isso mesmo nenhum sistema finito pode exibir uma verdadeira transição. Nesses últimos vinte anos, porém, ficou definitivamente provado que estudos de sistemas finitos podem fornecer importantes informações sobre a transição no sistema infinito.

Quando o comprimento de correlação for comparável à dimensão do sistema passa a ser importante a contribuição das fronteiras às quantidades analisadas. Por essa razão as condições de contorno são fundamentais para a análise adequada dos efeitos de tamanho finito, quando a temperatura for próxima à temperatura crítica (T_c) do sistema infinito.

Seja $F(T, V, N)$ a energia livre de um sistema de N partículas que ocupam um volume V à temperatura T . No limite termodinâmico a energia livre por unidade de volume é

$$f_{\infty}(T, \rho) = \lim_{N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty / \rho = N/V} [F(T, V, N)/V]. \quad (2.17)$$

Para o sistema finito com volume V podemos escrever

$$F(T, V, N) = V f_{\infty}(T, \rho) + O(V^{-1}) \quad (2.18)$$

onde $O(V^{-1})$ são correções de tamanho finito que vão a zero quando $V \rightarrow \infty$. O uso de condições de contorno periódicas ou antiperiódicas em vários modelos⁽³⁰⁻³²⁾ revelou o comportamento dessas correções, e permitem reescrever (2.18) na forma

$$F(T, V, N) = V f_{\infty}(T, \rho) + O(e^{-L\Gamma(T)}). \quad (2.19)$$

Se d for a dimensão do sistema, $L = V^{1/d}$ representa o comprimento característico do sistema e $\Gamma(T)$ é a tensão superficial. Esse decréscimo exponencial das correções de tamanho finito é a razão de se usar, frequentemente, as condições de contorno periódicas. Porém à medida que $T \rightarrow T_c$ o argumento $\Gamma(T)$ se anula e a expressão (2.19) não é mais apropriada para se tomar o limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$). Nessa região ($T \simeq T_c$) Ferdinand e Fisher⁽³⁰⁾ desenvolveram uma teoria de escala para efeitos finitos, que permite tomar de forma consistente o limite termodinâmico. De acordo com essa teoria a energia livre do sistema finito é dada por

$$F(N, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \tilde{F}(t L^{1/\nu}) \quad (2.20)$$

onde α é o expoente crítico do calor específico e ν é o expoente do comprimento de correlação, $\tilde{F}$ é uma função de escala que depende somente de L e $t = (T - T_c)/T_c$ na forma especificada (T_c é a temperatura crítica do sistema infinito). Fisher⁽³³⁾ a seguir verificou que o desvio entre a verdadeira temperatura crítica T_c e a temperatura onde ocorre um máximo de calor específico para uma rede de tamanho L , obedece a seguinte relação de escala :

$$\delta T_c = T_c(L = \infty) - T_c(L) \sim L^{-1/\nu} \quad (2.21)$$

A expressão (2.21) permite investigar o comportamento crítico de um dado sistema relacionando dois campos relevantes (t e L^{-1}). Por exemplo, o parâmetro de ordem ϕ que em um sistema infinito vai a zero em T_c como

$$\phi(t, h = 0) \sim (-t)^{\beta}, \quad (2.22)$$

para um sistema finito escala como

$$\phi = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(tL^{1/\nu}) \quad , \quad (2.23)$$

onde $\tilde{M}$ é a função de escala do parâmetro de ordem, que para fornecer o comportamento (2.22), deve ter a forma

$$\tilde{M}(tL^{1/\nu}) \sim (tL^{1/\nu})^\beta \quad . \quad (2.24)$$

É preciso garantir que estejamos próximos da região crítica o suficiente para valerem as expressões (2.20 - 2.23), ou seja, que L é grande o bastante para que δT_c em (2.21) seja pequeno, caso contrário as correções ao “scaling” passam a ser importantes e (2.21) toma a forma

$$\delta T_c \sim L^{-1/\nu} (1 + aL^{-\Delta} + \dots) \quad (2.25)$$

onde Δ é o expoente de correção ao “scaling”^(34,35). Simulações de Monte Carlo em modelo de Ising a duas e três dimensões, com condições de contorno periódicas⁽³⁶⁾, mostraram que para $L > 10$ os sistemas se comportam segundo (2.20), ou seja, as correções não são importantes.

2.A.3 - MONTE CARLO COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

O método de Monte Carlo tem servido como um excelente instrumento para estudar propriedades termodinâmicas de sistemas físicos. As informações obtidas de uma simulação consistem, geralmente, em obter médias das grandezas termodinâmicas num único ponto do espaço de parâmetros. A necessidade de varrer vastas regiões, tem dificultado a abordagem de muitos problemas de interesse. Um grande avanço em remover essa limitação foi feito recentemente por Ferrenberg e Swendsen⁽¹⁹⁾. A idéia, simples e genial, consiste em simular o sistema para gerar funções termodinâmicas que variam continuamente com as constantes de acoplamento que formam o espaço de parâmetros. As informações obtidas

de uma única simulação podem ser usadas para estudar a mudança no comportamento do sistema ao se variar as constantes de acoplamento, particularmente em torno de seus valores críticos que induzem as transições de fase. As técnicas usuais produzem uma série de pontos individuais com o mesmo número de simulações necessárias para obtê-las.

A genialidade dessa idéia vem do fato de que, apenas funções estatísticas simples e conhecidas são necessárias para obter o novo método que chamaremos Método de Monte Carlo com Evolução. Para ver isto vamos considerar o modelo de Ising num campo magnético H . A hamiltoniana é

$$-\beta\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum \sigma_i = KE + hM$$

onde $\beta = 1/kT$, $K = \beta J$ e $h = \beta H$. A distribuição de probabilidade de E e M para um dado par de valores (K, h) é dada por

$$P_{K,h}(E, M) = \frac{1}{Z_{K,h}} N(E, M) e^{KE + hM} \quad (2.26)$$

onde $N(E, M)$ é o número das diferentes configurações possíveis ao sistema para um dado par (E, M) do espaço de fase e $Z_{K,h}$ é a função de partição canônica dada por

$$Z_{K,h} = \sum_{E,M} N(E, M) e^{(KE + hM)} \quad (2.27)$$

Na simulação de Monte Carlo faz-se o histograma de valores (E, M) que deve ser proporcional à distribuição canônica $P_{K,h}(E, M)$. Esse histograma, armazenado no computador, pode fornecer informações sobre o comportamento da distribuição de probabilidades $P_{K',h'}$ para diferentes pontos (K', h') do espaço de parâmetros. A nova distribuição é dada por

$$P_{K',h'}(E, M) = \frac{1}{Z_{K',h'}} N(E, M) e^{K'E + h'M} \quad (2.28)$$

A razão entre (4.3) e (4.1) fornece

$$P_{K',h'}(E, M) = \frac{1}{Z_{K',h'}/Z_{K,h}} P_{K,h}(E, M) e^{(K'-K)E + (h'-h)M} \quad (2.29)$$

Uma vez que as distribuições de probabilidades estão normalizadas o denominador de (2.29) é dado por

$$\frac{Z_{K',h'}}{Z_{K,h}} = \sum_{E,M} P_{K,h}(E,M) e^{(K'-K)E+(h'-h)M} \quad (2.30)$$

e temos assim a nova distribuição em função da primeira

$$P_{K',h'}(E,M) = \frac{P_{K,h}(E,M) e^{(K'-K)E+(h'-h)M}}{\sum_{E,M} P_{K,h}(E,M) e^{(K'-K)E+(h'-h)M}} \quad (2.31)$$

Assim, variando-se os valores de K' e h' pode-se obter a média termodinâmica de qualquer grandeza para esses acoplamentos, conhecendo-se apenas a distribuição de probabilidades $P_{K,h}(E,M)$ num único ponto (K,h) do espaço de parâmetros. Esse método só está livre de grandes erros, devido à evolução no espaço de parâmetros, se nos restringirmos a varrer pequenas regiões neste espaço. O planejamento da dimensão dessa região, para que sejam pequenos os erros oriundos da evolução, está descrito num recente trabalho de Ferrenberg e Swendsen ⁽³⁷⁾ que sugere também uma forma de calcular esses erros.

2.B - O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

A técnica do Grupo de Renormalização, aplicada a Fenômenos Críticos pioneiramente por Wilson ⁽³⁸⁻⁴⁰⁾, é uma forma de tratar problemas envolvendo muitas escalas. Sua virtude está em buscar a analiticidade não em funções termodinâmicas (que são obviamente singulares na transição) mas sim nas próprias constantes de acoplamento. Tecnicamente o problema se resume em eliminar, passo a passo, as flutuações envolvidas (o chamado traço parcial) e acompanhar o efeito dessa integração sobre as constantes de acoplamento, levando em conta que a função de partição é um invariante.

Para fixar notação vamos considerar um sistema de N spins S_i situados nos pontos i de uma rede e descrito pela hamiltoniana $H(S)$. A função de partição é expressa como

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H(S)} \quad (2.32)$$

onde $\beta = 1/kT$ e $\{S\}$ significa uma soma sobre todas as configurações acessíveis ao sistema. Vamos realizar essa soma em duas etapas. Primeiramente dividimos o sistema em células de comprimento b (medida em termos do parâmetro de rede). Cada célula contém b^d spins, onde d é a dimensionalidade do sistema, conforme mostra a figura 1 para $b = 2$. A cada célula associa-se um spin S'_i numa rede b vezes menor de acordo com a regra da maioria, ou seja

$$S'_i = \text{ sinal de } \sum_{j=1}^4 S_i^j \quad (2.33)$$

Agora para se obter a função de partição é preciso somar sobre todas as configurações $\{S'\}$ dos novos spins de bloco que têm sua interação descrita por uma outra Hamiltoniana designada por H' . O número de spins de bloco é menor por um fator $b^d = N/N'$ onde $N(N')$ é o número de sítios da rede original (nova). Se ξ for o comprimento de correlação, medido em unidades do parâmetro de rede (a), então, após a transformação

teremos $\xi' = \frac{L}{b}$, desde que $a' = ba$. A transformação pode em princípio ser realizada sequencialmente até que ξ seja da ordem de um parâmetro de rede o que reduziria o problema a algo tratável com métodos tradicionais.

Figura 1: Regra da maioria para renormalização do sistema $L \times L$ a outro $\frac{L}{2} \times \frac{L}{2}$.

Dizemos então que existe uma transformação P que converte H em H' e este em H''

$$P(H) = H' \quad , \quad P(H') = H'' \quad (2.34)$$

O resultado mais simples dessas iterações ocorre quando a seqüência de hamiltonianas se aproxima de um ponto fixo H^* , ou seja

$$P(H^*) = H^* \quad . \quad (2.35)$$

O ponto fixo de uma transformação P é uma propriedade da própria transformação, de cuja existência não se tem conhecimento a priori.

Formalmente a hamiltoniana de célula $H'(S')$ é definida como ⁽⁴¹⁾

$$e^{[G+H'(S')]} = \sum_{\{S\}} P(S, S') e^{H(S)} \quad (2.36)$$

onde $P_{(S', S)}$ é um fator peso que depende das configurações de células $\{S'\}$ e de sítios $\{S\}$ e que satisfaz

$$\sum_{\{S'\}} P(S', S) = 1 \quad (2.37)$$

e G é independente das configurações de células $\{S'\}$.

De (2.36) e (2.37) tem-se

$$G + F' = \ell n \sum_{\{S'\}} e^{G+H'(S')} = \ell n \sum_{\{S'\}} \sum_{\{S\}} P(S', S) e^{H(S)} = \ell n \sum_{\{S'\}} e^{H(S)} = F \quad (2.38)$$

Define-se $F' = N' f(K')$, $F = N f(K)$ e $G = N g(K)$,

onde K representa o conjunto de constantes de acoplamento do sistema original $\{K_\alpha\}$, e K' aquelas do renormalizado $\{K'_\alpha\}$.

Então

$$f(K) = g(K) + b^{-d} f(K') \quad (2.39)$$

onde $K' = K'(K)$.

O objetivo do Grupo de Renormalização é obter informações acerca da parte singular de $f(K)$ a partir das funções regulares $G(K)$ e $K'(K)$. Para simplificar vamos fazer uma aproximação linear para a transformação em torno do ponto fixo. Nessa aproximação teremos

$$K'_\alpha - K_\alpha^* = \Sigma_\beta T_{\alpha\beta}^* (K_\beta - K_\beta^*) \quad (2.40)$$

onde $T_{\alpha\beta}^* = \left. \frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta} \right|_{K^*}$.

Chamando λ_i os autovalores de $T_{\alpha\beta}^*$, cujos autovetores à esquerda são φ_α^i , escrevemos

$$\Sigma_\alpha \varphi_\alpha^i T_{\alpha\beta}^* = \lambda_i \varphi_\beta^i \quad (2.41)$$

A transformação (2.40) toma uma forma bem mais simples em termos das combinações $u_i = \Sigma_\alpha \varphi_\alpha^i (K_\alpha - K_\alpha^*)$, que pode então ser reescrita como

$$u'_i = \Sigma_\alpha \varphi_\alpha^i (K'_\alpha - K_\alpha^*) = \Sigma_\alpha \varphi_\alpha^i \Sigma_\beta T_{\alpha\beta}^* (K_\beta - K_\beta^*) = \lambda_i \Sigma_\beta \varphi_\beta^i (K_\beta - K_\beta^*) = \lambda_i u_i \quad (2.42)$$

Em termos dessas novas variáveis (2.39) toma a forma :

$$f(u_1, u_2, \dots) = g(u_1, u_2, \dots) + b^{-d} f(\lambda_1 u_1, \lambda_2 u_2, \dots) \quad (2.43)$$

onde $u_u = \Sigma_\alpha \varphi_\alpha^u (K_\alpha - K_\alpha^*)$, $u = 1, 2, \dots$

A partir do resultado da transformação $u'_i = \lambda_i u_i$ pode-se estabelecer uma classificação para os campos : se $|\lambda_i| > 1$ então u_i é um campo relevante, se $|\lambda_i| < 1$ o campo é irrelevante e se $\lambda_i = 1$ o campo é dito marginal. Portanto os valores dos campos relevantes crescem após uma transformação do Grupo de Renormalização enquanto que os irrelevantes decrescem no mesmo processo.

O ponto fixo definido por $K'_\alpha(K^*) = K_\alpha^*$ corresponde a tomar todos os campos iguais a zero ($u_i = 0, \forall_i$)

Os autovetores φ_i de $T_{\alpha\beta}^*$ possuem uma clara relação com os operadores de interesse que aparecem nas hamiltonianas renormalizadas. Introduzimos um operador

$\theta^{(n)}$ escrito como uma combinação linear de operadores $S_\beta^{(n)}$ (que formam as hamiltonianas renormalizadas), então

$$\theta^{(n)} = \sum_\beta \varphi_\beta^i S_\beta^{(n)} \quad (2.44)$$

onde φ_β^i é autovetor de $T_{\alpha\beta}^*$ e n designa o estágio da transformação R do Grupo de Renormalização. Se b^ν é um autovalor de $T_{\alpha\beta}^*$ então $\theta^{(n)}$ é um autooperador de R com

$$R\theta^{(n)} = b^\nu \theta^{(n+1)} \quad (2.45)$$

Isto pode ser mostrado da seguinte forma:

$$R\theta^{(n)} = \sum_{\alpha,\beta} \varphi_\alpha^i T_{\alpha\beta}^* S_\beta^{(n+1)} = b^\nu \sum_\beta \varphi_\beta^i S_\beta^{(n+1)} = b^\nu \theta^{(n+1)} \quad (2.46)$$

Portanto se quisermos obter autooperadores de transformação, devemos calcular os autovetores de $T_{\alpha\beta}^*$.

Vamos agora realizar a conexão entre os autovalores λ_i de $T_{\alpha\beta}^*$ com os expoentes críticos, que definem o comportamento singular da energia livre e suas derivadas, perto de uma transição de fase. Suponha que $f(u_1, u_2, \dots)$ possa tomar a forma $A|u_1|^{a_1}$ para $u_2 = u_3 = \dots = 0$ (ponto fixo). Daí (2.43) nos dá

$$A|u_1|^{a_1} = b^{-d} A|\lambda u_1|^{a_1} \quad (2.47)$$

de onde segue que

$$b^{-d} \lambda_1^{a_1} = 1 \quad \text{ou} \quad a_1 = \frac{d \log b}{\log \lambda_1} \quad (2.48)$$

Vê-se que para que a energia livre seja finita em $u_1 = 0$, λ_1 deve ser relevante ($\lambda_1 > 1$). Wegner ⁽⁴²⁾ sugere para λ_1 a expressão

$$\lambda_1 = b^{Y_1}, \quad Y_1 > 0 \quad (2.49)$$

por se tratar de um grupo. Dessa forma

$$a_1 = \frac{d}{Y_1} \quad (2.50)$$

Tomando as derivadas apropriadas de f obtemos as várias funções termodinâmicas de interesse. Podemos então, analogamente, obter os expoentes críticos associados ao calor específico (α), magnetização (β e δ) e susceptibilidade (γ). Nesse ponto é possível verificar que os expoentes obedecem às chamadas relações de escala

$$\alpha = 2 - d\nu \quad , \text{ com } \quad \nu = 1/Y_T$$

$$\beta = (d - Y_H)/Y_T$$

$$\gamma = (2Y_H - d)/Y_T$$

$$\delta = Y_H/(d - Y_H) \tag{2.51}$$

onde Y_T e Y_H são os índices associados aos campos térmico (t) e magnético (h).

Esses expoentes críticos não dependem dos “detalhes” da interação e sim, como vimos, de como o sistema se comporta nas vizinhanças do ponto fixo. É por isso que muitos modelos aparentemente muito distintos acabam apresentando o mesmo tipo de comportamento crítico (o que levou à introdução das chamadas classes de universalidade).

O modelo de Baxter porém contrariou essa classificação por apresentar índices críticos que variam como função da constante de acoplamento (não universalidade). Segundo Kadanoff e Wegner ⁽⁴³⁾ isso pode ocorrer quando um dos autovalores for igual a zero (λ_M).

No capítulo 3 estaremos interessados em estudar a influência de operadores e autovalores marginais nos expoentes críticos do modelo de Ashkin-Teller de duas cores.

2.C - O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO VIA MONTE CARLO

2.C.1 - INTRODUÇÃO

O uso do Grupo de Renormalização (RG) no tratamento de propriedades críticas dos sistemas, tem mostrado excelente concordância com resultados conhecidos e tornou-se a principal ferramenta dos físicos estatísticos na abordagem de novos problemas ⁽⁴⁴⁾. A principal limitação desse método reside no fato, de que novas constantes de acoplamento são geradas a cada iteração do RG, e deveriam portanto constar do espaço de parâmetros mesmo não existindo no sistema original.

Por outro lado, o método de Monte Carlo (MC) usual, que simula diretamente o sistema de interesse, produz bons resultados em sistemas finitos e possui formas confiáveis de confirmar os resultados. Os erros oriundos desse método são de origem estatística, cuja magnitude pode ser obtida a partir dos dados gerados pela simulação. Porém, quando se tenta calcular propriedades do sistema, perto de sua temperatura crítica, aparecem os sérios problemas de tamanho finito, pois a dimensão do sistema pode se tornar menor que o comprimento de correlação (que diverge na temperatura crítica). Informações confiáveis sobre o sistema infinito exigem redes maiores que o comprimento de correlação ξ , e portanto, à medida que nos aproximamos da temperatura crítica, ξ cresce e necessitamos aumentar cada vez mais a dimensão linear da rede, o que pode tornar a simulação impraticável.

A combinação do Grupo de Renormalização (RG) com o método de Monte Carlo (MC) surgiu como uma forma eficiente de superar as limitações de ambos os métodos. Essa combinação, denominada MCRG, foi sugerida em 1.976 por Ma ⁽⁸⁾ e usada pioneiramente com sucesso em 1.979 por Swendsen ⁽¹³⁾.

2.C.2 - O MÉTODO MCRG PARA EXPOENTES CRÍTICOS

A estratégia do método MCRG está ilustrada na figura 2.

Figura 2 Esquema do MCRG para cálculo de propriedades críticas

O procedimento usual do Grupo de Renormalização é obter as constantes renormalizadas como função das constantes originais, como indicado pelas setas verticais à esquerda, ligando $H^{(0)}$ com $H^{(1)}$. Isso introduz a conhecida dificuldade de se lidar com um número grande de constantes de acoplamento. Ao invés disso o MCRG ensina simular a hamiltoniana original $H^{(0)}(\sigma^{(0)})$, que é função dos spins não renormalizados, para obter as configurações de equilíbrio $\{\sigma_i^{(0)}\}_t$. O conhecimento dessas configurações, além de permitir o cálculo de qualquer função de correlação de interesse, conduz à uma sequência de configurações $\{\sigma_i^{(1)}\}, \{\sigma_i^{(2)}\}$ características das Hamiltonianas $H^{(1)}(\sigma^{(1)}), H^{(2)}(\sigma^{(2)})$, todavia desconhecidas. Como esse procedimento não permite a determinação direta das novas constantes de acoplamento é necessário buscar uma forma alternativa, para montar a matriz T da transformação ($T_{\alpha\beta}^{(n+1,n)} = \partial K_{\alpha}^{(n+1)} / \partial K_{\beta}^{(n)}$).

Não existe aproximação envolvida na transformação do Grupo de Renormalização, isto é, a configuração $\{\sigma_i^{(1)}\}$, é igual àquela que seria obtida pela simulação direta de $H^{(1)}(\sigma^{(1)})$, se esta fosse conhecida. Esta é a razão da seta horizontal voltada também para esquerda, ou seja, o conhecimento das configurações $\{\sigma_i^{(1)}\}$, implica informações sobre $H^{(1)}(\sigma^{(1)})$, conforme veremos adiante.

Mas para conhecer $H^{(1)}(\sigma^{(1)})$, que contém um grande número de constantes de acoplamento, é necessário reduzir o espaço de parâmetros, para que seja praticável a sua obtenção. É aqui que surge o primeiro truncamento no método MCRG. Somente os acoplamentos que contém na rede finita são incluídos como aproximação de uma rede infinita. Se esse efeito conduz a resultados muito diferentes do caso real (infinito), pode ser verificado repetindo o cálculo por MCRG para vários tamanhos de rede. Isto fornece um teste autoconsistente para a validade do truncamento devido à finitude da rede.

Vamos escrever a hamiltoniana renormalizada n vezes na forma

$$H^{(n)} = \sum_{\alpha} K_{\alpha}^{(n)} S_{\alpha}^{(n)} \quad (2.52)$$

onde $K_{\alpha}^{(n)}$ são as constantes renormalizadas e $S_{\alpha}^{(n)}$ são operadores constituídos pelos spins renormalizados. Por exemplo, para $\alpha = 1$, $S_1^{(n)}$ é o operador de primeiros vizinhos

$$S_1^{(n)} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^{(n)} \sigma_j^{(n)} \quad (2.53)$$

Para $\alpha = 2$, $S_2^{(n)}$ é o operador de segundos vizinhos e assim por diante. Na seção 2.B falamos da aproximação linear da transformação do Grupo de Renormalização em torno do ponto fixo dado pela expressão (2.40) e que a matriz $T_{\alpha\beta}$ possuía autovalores ligados aos expoentes críticos. Relembrando que

$$T_{\alpha\beta} = \frac{\partial K_{\alpha}^{(n+1)}}{\partial K_{\beta}^{(n)}} \quad (2.54)$$

escrevemos uma equação para as correlações $\langle S_{\gamma}^{(n)} \rangle$ de qualquer operador de interesse,

$$\frac{\partial \langle S_{\gamma}^{(n+1)} \rangle}{\partial K_{\beta}^{(n)}} = \sum_{\alpha} \frac{\partial K_{\alpha}^{(n+1)}}{\partial K_{\beta}^{(n)}} \frac{\langle S_{\alpha}^{(n+1)} \rangle}{\partial K_{\alpha}^{(n+1)}} \quad (2.55)$$

As derivadas na expressão podem ser obtidas pela simulação através das expressões

$$\frac{\partial \langle S_\gamma^{(n+1)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n)}} = \langle S_\gamma^{(n+1)} S_\beta^{(n)} \rangle - \langle S_\gamma^{(n+1)} \rangle \langle S_\beta^{(n)} \rangle \quad (2.56)$$

e

$$\frac{\partial \langle S_\gamma^{(n)} \rangle}{\partial K_\alpha^{(n)}} = \langle S_\gamma^{(n)} S_\alpha^{(n)} \rangle - \langle S_\gamma^{(n)} \rangle \langle S_\alpha^{(n)} \rangle \quad (2.57)$$

chamados calores específicos generalizados. Como já dissemos, o truncamento da base de operadores nos leva a realizar a análise num subespaço S_ρ das constantes de acoplamento, ρ representa o conjunto de números de operadores da base truncada. Na expressão (2.55) existem duas formas de se realizar a soma em α no subespaço S_ρ . Pode-se realizar a soma em α (em princípio infinita) e depois projetar o resultado no subespaço S_ρ , ou fazer-se, primeiramente, as projeções de $T_{\alpha\beta}^{(n+1,n)}$ e $\partial \langle S_\gamma^{(n+1)} \rangle / \partial K_\alpha^{(n)}$ no referido subespaço e depois tomar-se a soma. A primeira é a forma correta de fazer a projeção, porém não é possível por envolver infinitos valores de α . Aqui um segundo truncamento é necessário para tornar a análise factível. Mas a influência de um número finito de constantes de acoplamento no cálculo dos expoentes críticos pode ser acompanhada à medida que aumentamos o valor α . É típico do método MCRG necessitar de poucas constantes para obter boas estimativas dos expoentes críticos. Finalmente, o conhecimento das correlações (2.56) e (2.57) permite que $T_{\alpha\beta}^{(n+1,n)}$ seja diagonalizada obtendo-se assim os autovalores de interesse. Isso é feito para várias iterações n do Grupo de Renormalização, o que nos permite acompanhar a influência da renormalização no cálculo dos expoentes.

No capítulo 3 realizaremos sucessivas diagonalizações de $T_{\alpha\beta}^{(n+1,n)}$ para o modelo de Ashkin-Teller de duas cores para três valores de n .

2.C.3 - O MÉTODO MCRG PARA CONSTANTES DE ACOPLAMENTO RENORMALIZADAS

Os expoentes críticos terão valores mais confiáveis quanto mais próximos estiverem do ponto fixo da transformação. Um método simples para se ter um conhecimento

aproximado do ponto crítico foi sugerido por Wilson ⁽⁴⁵⁻⁴⁶⁾. A idéia consiste em cancelar os efeitos de tamanho finito realizando simulações em redes de diferentes dimensões. Se as duas redes diferem por um fator b , a iteração do Grupo de Renormalização na rede maior fará surgir outra de tamanho igual ao da rede menor, como mostrado na figura 3 onde $L^{(n)} = L/b^n$. Os subíndices G e P se referem às redes grande e pequena que diferem por um fator b .

Figura 3 Método de Wilson para a determinação de pontos críticos e de constantes renormalizadas.

Suponha que a hamiltoniana tenha a expressão

$$H^{(0)} = K_1 S_1^{(0)} + K_2 S_2^{(0)} \tag{2.58}$$

onde $S_1^{(0)}$ e $S_2^{(0)}$ são operadores de primeiros e segundos vizinhos. O objetivo é determinar os valores críticos de K_1 e K_2 . Para dado K_1 fixo e para vários valores de K_2 mede-se a função de correlação $\langle S_\alpha^{(n)} \rangle_G$ associada ao operador $S_\alpha^{(n)}$ na rede $(L^{(n)} \times L^{(n)})$ descrita por $H_G^{(n)}$,

$$\langle S_\alpha^{(n)} \rangle_G = \langle (S_\alpha^{(n)})^2 \rangle_{H_G^{(n)}} - \langle S_\alpha^{(n)} \rangle_{H_G^{(n)}}^2 \tag{2.59}$$

Em seguida repete-se esse procedimento para a rede do mesmo tamanho associada a $H_p^{(n-1)}$

$$\langle S_a^{(n-1)} \rangle_p = \langle (S_a^{(n-1)})^2 \rangle_{H_p^{(n-1)}} - \langle S_a^{(n-1)} \rangle_{H_p^{(n-1)}}^2 \quad (2.60)$$

Uma possível igualdade entre (2.59) e (2.60) para um dado valor de K_2 implica $H_G^{(n)} = H_p^{(n-1)} = H^*$, onde H^* é a hamiltoniana de ponto fixo. Este valor de K^2 é que torna crítica a hamiltoniana original, uma vez que, para esse valor, as renormalizações conduzem o sistema para o ponto fixo.

É possível o uso de redes de dimensões pequenas 8×8 e 4×4 , por exemplo. Aí os efeitos de tamanho em cada função de correlação será grande, mas como a comparação dos mesmos é feita em redes de mesmo tamanho, espera-se que os efeitos de tamanho finito se cancelem.

Em geral uma única renormalização não conduzirá o sistema para o ponto fixo de transformação e haverá diferenças entre as funções de correlações que, se forem pequenas, permite a seguinte aproximação linear:

$$\delta \langle S_a^{(1)} \rangle = \langle S_a^{(1)} \rangle_G - \langle S_a^{(0)} \rangle_P = \sum_\beta \frac{\partial \langle S_a^{(0)} \rangle_P}{\partial K_\beta^{(0)}} \delta K_\beta \quad (2.61)$$

As derivadas indicadas, dadas por (2.57), são oriundas da rede pequena, mas poderiam ser obtidas da rede grande renormalizada, ou seja, $\frac{\partial \langle S_a^{(1)} \rangle_G}{\partial K_\beta^{(1)}}$. Invertendo-se as derivadas em (2.61) obtêm-se as grandezas δK_β , que medem o afastamento das constantes de acoplamentos renormalizadas do ponto fixo. Esse procedimento feito sucessivas vezes nos dá um conjunto de constantes renormalizadas no espaço de parâmetros escolhido (truncado), que formam um fluxo na direção do ponto fixo da transformação.

No capítulo 5 estenderemos as técnicas de histogramas às equações do MCRG para obter fluxo de hamiltonianas renormalizadas no espaço de parâmetros de duas dimensões constituído das constantes de acoplamento de primeiros e segundos vizinhos.

C A P Í T U L O 3

USO DO MCRG NO MODELO DE ASHKIN-TELLER DE DUAS CORES

3.A - INTRODUÇÃO

Nos últimos anos diversas técnicas têm sido usadas para estudar o modelo de Ashkin-Teller, de duas ⁽⁴⁷⁾ ou mais cores, em duas dimensões. Aproximações de campo médio, simulações de Monte Carlo ⁽⁴⁸⁾, análise por matriz de transferência ⁽⁴⁹⁾, estudos da hamiltoniana de tempo contínuo ⁽⁵⁰⁾, Grupo de Renormalização na aproximação de Campo Médio (MFRG) ⁽⁵¹⁾ e expansão em $1/N$ ⁽⁵²⁾. Todo esse esforço para obter informações a respeito da física do modelo, porém, não esgotou o problema. Nesse sentido, parece natural continuar investigando-o, usando outras técnicas. A nossa proposta para esse capítulo é usar o Grupo de Renormalização Via Monte Carlo (MCRG), um método suficientemente testado ⁽⁵³⁾ e comprovado em várias aplicações, para estudar o modelo em questão, no caso particular $N = 2$.*

Além da determinação do diagrama de fases e dos índices críticos, estaremos particularmente interessados em entender o papel do operador marginal, bem como a influência do truncamento sobre a sua determinação. Operadores marginais de outros modelos revelaram-se difíceis de serem obtidos por esse método. Por exemplo, num trabalho recente ⁽⁵⁴⁾, Swendsen e Krinsky não obtiveram boas estimativas para o autovalor marginal no modelo de Baxter. Mais tarde chegaram à conclusão que foram mantidos números e tipos inadequados de operadores no truncamento. Os resultados melhoraram sensivelmente, adicionando maior número de operadores de quatro spins, que acoplam ambas as subredes ⁽⁵⁵⁾. Operadores marginais também são responsáveis pela lenta convergência nas iterações do MCRG no modelo de Potts de quatro estados ⁽⁵⁶⁾, o que não ocorre no modelo de Baxter-Wu ⁽⁵⁶⁾, embora ambos pertençam à mesma classe de universalidade. Vale a pena mencionar que, uma forma satisfatória de lidar com os operadores marginais do modelo XY ⁽⁵⁷⁾, usando MCRG, ainda não foi encontrada.

*O capítulo 5 será dedicado à investigação do caso mais geral $N = 3$ com quebra de simetria entre as 3 cores

3.B - DESCRIÇÃO DO MODELO

O modelo de Ashkin-Teller (AT) foi proposto como uma generalização do modelo de Ising, e consiste em dois sistemas de Ising acoplados por uma interação de quatro spins ⁽⁵⁸⁾. Cada sítio (i, j) é ocupado por dois spins σ_i e μ_i . A hamiltoniana é definida como

$$-\frac{H}{kT} = \sum_{\langle i,j \rangle} (K_1 \sigma_i \sigma_j + K_2 \mu_i \mu_j + K_4 \sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j) \quad (3.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ designa uma soma sobre primeiros vizinhos, e K_4 acopla quatro spins. Vamos nos restringir ao caso em que os acoplamentos de dois spins são iguais ($K_1 = K_2 = K$). Esse modelo ainda não foi resolvido exatamente, porém são conhecidas algumas de suas propriedades críticas. Essas podem ser melhor entendidas dividindo-se o espaço de parâmetros (K, K_4) em duas regiões : $K_4 \leq K$ e $K_4 > K$.

3.B.1 - $K_4 \leq K$

Nessa região, para $K_4 = 0$ o modelo se reduz a dois modelos de Ising desacoplados e para $K_4 = K$ é equivalente ao modelo de Potts de quatro estados. Nesses dois limites o modelo exhibe transições de fase de segunda ordem, mas com diferentes índices críticos. Os dois pontos críticos desses modelos são conectados por uma linha crítica na qual os expoentes variam continuamente com K_4 (a interação de 4-corpos), conforme verificou Wegner ⁽⁵⁹⁾ depois de aplicar ao modelo uma transformação de dualidade que o tornou equivalente à versão alternada do modelo de 8-vértices ⁽⁶⁰⁾. Os detalhes do mapeamento são fornecidos no Apêndice C, mas alguns resultados importantes são resumidos na sequência.

Após o trabalho de Wegner, várias relações entre os índices críticos dos dois modelos foram obtidos, e são válidos na região $K_4 \leq K$, representada pela linha AO na figura 4. Essa linha é autodual e se expressa como ⁽⁶¹⁾

$$e^{-2K_4} = \sinh 2K. \quad (3.2)$$

Outra importante relação envolvendo os expoentes críticos de ambos os modelos ⁽⁶²⁾ é dada

por

$$(Y_T^{8V} - 2)(Y_T^{AT} - 2) = 1 \quad (3.3)$$

onde Y_T^{AT} e Y_T^{8V} são, respectivamente, os expoentes térmicos dos modelos de Ashkin-Teller e 8-vértices. O segundo expoente é dado pela fórmula de Baxter

$$Y_T^{8V} = \frac{2}{\pi} \cos^{-1}(\tanh 2\lambda) = \frac{1}{\nu^{8V}} \quad (3.4)$$

que mostra sua dependência com o acoplamento de quatro spins (λ) do modelo de 8-vértices.

A relação entre λ e K_4 (do modelo de Ashkin-Teller) é dada por ⁽⁶³⁾

$$\tanh(2\lambda) = \frac{1 - \tanh(2K_4)}{\tanh(2K_4)} \quad (3.5)$$

O comportamento não universal também aparece no expoente crítico do operador elétrico (Y_E^{AT}). Sua expressão é obtida das relações de escala ⁽⁶⁴⁾

$$Y_E^{AT} = \frac{1}{4} (6 + Y_T^{AT}). \quad (3.6)$$

O expoente crítico Y_E^{AT} está associado a um campo $-E\Sigma\sigma_i\mu_i$ e o expoente crítico magnético Y_H^{AT} , associa-se a um campo $-H\Sigma\sigma_i$. Este último, ao contrário do primeiro, não depende da constante de acoplamento. Tem sempre o valor igual ao expoente crítico de Ising, 1.875, demonstrando que o operador marginal não é capaz de mudar a dimensão anômala do operador de spin (σ_i ou μ_i).

3.B.2 - $K_4 > K$

A situação é completamente diferente nessa região, tanto no que se refere ao diagrama de fases quanto no que diz respeito ao comportamento dos expoentes críticos. Nesse setor, a transição não pode ser única, caso contrário teria que acontecer na continuação da linha de Baxter, que acidentalmente é a linha auto-dual ⁽⁶⁵⁾ do modelo. O conhecimento detalhado do 8-V, garante que ali o sistema não é crítico. Daí se conclui que nessa região

haverá mais de uma transição, representada pelas linhas OB e OC na figura 4, correspondendo à quebra da simetria primeiramente do spin produto ($\tau = \sigma\mu$) e depois de σ e μ sozinhos.

Embora praticamente não existam resultados rigorosos para essa região (exceto no caso limite representado pelo ponto $K_2 = 0$ e $K_4 = 0.44$), vários autores ⁽⁶⁶⁾ têm sugerido que os expoentes críticos ao longo das duas linhas devam ser os mesmos do modelo de Ising.

3.C - DETERMINAÇÃO DO DIAGRAMA DE FASES E DOS EXPOENTES CRÍTICOS

A figura 4 mostra o diagrama de fases do modelo de Ashkin-Teller de duas cores. A linha contínua, dada pela expressão (3.2), é autodual e apresenta expoentes críticos variáveis. As duas linhas tracejadas são mutuamente duais e devem pertencer à classe de universalidade do Ising.

Figura 4: Diagrama de fase do modelo de Ashkin-Teller de duas cores. Na fase I todos os parâmetros de ordem $\langle \sigma \rangle$, $\langle \mu \rangle$ e $\langle \sigma \mu \rangle$ são diferentes de zero, na fase II são todos iguais a zero e na fase III $\langle \sigma \mu \rangle \neq 0$.

Os pontos destacados nas linhas foram obtidos pelo método MCRG, usando a comparação de correlações de duas redes de mesmo tamanho, porém em diferentes estágios de renormalização, conforme descrito no Capítulo 2. Nesse caso foram usadas redes de dimensões 8×8 e 4×4 . A primeira foi renormalizada e suas correlações comparadas com aquelas da rede menor. O cruzamento dessas correlações, que está associado ao ponto crítico, pode ser visto na figura 5.

Figura 5: $F(L', L)$ é a função de correlação de primeiros vizinhos de uma rede L' obtida renormalizada outra de dimensão L .

Os pontos realçados na figura 4 mostram como o método MCRG é eficiente na determinação de acoplamentos críticos, mesmo quando são usadas redes relativamente pequenas, o que reduz substancialmente o esforço computacional necessário à análise. O método de Monte-Carlo aqui utilizado foi do tipo banho térmico o que significa que o estado inicial do spin central não é considerado para efeito de comparação energética. Todos os estados finais possíveis são tomados em conta, com probabilidades proporcionais aos fatores de Boltzmann (que dependem obviamente do estado de vizinhança), que após a normalização tornam-se equivalentes aos comprimentos dos intervalos (ver figura 6) correspondentes àqueles estados. Finalmente, um número aleatório é gerado e situado em algum dos segmentos, o que determina o estado final do spin central naquela passagem. Como nesse caso o

número de estados do spin central é igual a quatro e o número de possíveis estados para a vizinhança é de 256 foi necessário construir e armazenar uma tabela com todos os fatores de Boltzmann,

	B_0		B_1		B_2	B_3
FATORES DE BOLTZMANN	0					1
ESTADOS DE SITIO	0	1	2	3		

Figura 6: Os quatro estados de um sítio (0,1,2 e 3) são escolhidos sempre que os respectivos fatores de Boltzmann forem maior do que um número aleatório que é comparado primeiro com B_0 . Se este for menor tenta-se B_1 e assim por diante

O esquema de renormalização adotado baseia-se na regra da maioria para a determinação dos spins de bloco. Cada família de spins (σ_i e μ_i) é renormalizada independentemente. No caso das linhas OB e OC verificou-se que a convergência era mais lenta mas melhorava muito quando a variável renormalizada era $\tau_i = \sigma_i \mu_i$ ao invés de σ_i e μ_i . Essas linhas, ao contrário da linha AO, não possuem localizações conhecidas exatamente mas, a posição das mesmas foi confirmada pelas relações de dualidade obtidas por Fan ⁽⁶⁷⁾, o que aumentou o grau de confiança nos resultados obtidos por esse método naquela região. As funções de correlação usadas para comparação foram as do tipo spin-spin. Para uma rede $L \times L$ renormalizada para outra de dimensões $L' \times L'$ ($L' = L/2$), a função de correlação na rede menor é escrita como

$$F(L, L') = \sum_{\langle ij \rangle} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \tag{3.7}$$

onde a variável S_i designa σ_i , μ_i ou $\sigma_i \mu_i$ da rede L' . Os dados das simulações referentes à figura 4 estão na tabela 3.1. As barras de erro foram obtidas, agrupando a simulação de 100.000 passos em cinco blocos de 20.000, uma vez que a coleta dos cinco resultados parciais permite o cálculo da média e do desvio padrão. Na figura 4 que mostra o diagrama de

fases, o tamanho dos pontos é aproximadamente igual à dimensão das barras de erro.

Tabela 3.1 - Uso do método MCRG para a determinação do diagrama de fases do modelo de Ashkin-Teller $N = 2$. Dados coletados a cada 5 passos de Monte Carlo. Tempo de CPU por ponto obtido

Dimensão da rede (L)	8	4
Número de passos Monte Carlo	100.000	60.000
Passos descartados para equilíbrio térmico	5.000	2.000
Tempo de CPU	21 min	4 min

Passaremos agora à análise dos expoentes críticos. Como já adiantamos no capítulo anterior os expoentes estão relacionados com a matriz $T_{\alpha\beta}^{(n+1,n)}$, obtida pela linearização da transformação do Grupo de Renormalização. Sua expressão é dada pelas equações (2.54 - 2.57).

A diagonalização dessa matriz fornece os autovalores Λ_i e conseqüentemente os expoentes críticos $Y_i = \ln \Lambda_i / \ln b$, $i = 1, 2, \dots m$. Estamos interessados em estudar o comportamento não universal do modelo de Ashkin-Teller, comprovando a conjectura de Kadanoff ⁽⁶²⁾ sobre o maior autovalor, relacionado com o expoente crítico térmico. Estamos, também, empenhados no estudo do segundo maior autovalor, que se relaciona com a dimensão anômala do operador marginal.

Os operadores de interesse podem ser obtidos pelos autovetores de $T_{\alpha\beta}$, como já comentado no Capítulo 2. A tabela 3.2 mostra a base truncada de operadores usada na análise.

Tabela 3.2 -Notação para os operadores usados na análise de MCRG.

SETOR ÍMPAR	SETOR PAR	
$S_1 = \sum_i (\sigma_i + \mu_i)$	$S_2 = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$	$S_3 = \sum_{nnn} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$
$S_3 = \sum_i \sigma_i \mu_i$	$S_6 = \sum_{ i-j =2} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$	$S_8 = \sum_{ i-j =\sqrt{5}} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$
$S_5 = \sum_i (\sigma_{i\pm x} \sigma_i \sigma_{i\pm y} + \mu_{i\pm x} \mu_i \mu_{i\pm y})$	$S_{10} = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$	$S_{12} = \sum_{nnn} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$
	$S_{14} = \sum_{ i-j =2} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$	$S_{16} = \sum_{ i-j =\sqrt{5}} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$
	$S_{18} = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j - \mu_i \mu_j)$	

A tabela 3.3 mostra valores para o expoente crítico térmico Y_T e que estão em boa concordância com as equações (3.3), (3.4) e (3.5).

Tabela 3.3 - Autovalores térmicos do modelo de Ashkin-Teller para $K = 0.4$ e $K_4 = 0.06$; valor exato $Y_T = 1.079$. NR é o estágio de renormalização, S_α é o tipo de operador incluído na base truncada; L é a dimensão da rede não renormalizada.

NR	S_α	$L = 32$	$L = 16$	$L = 8$
1	S_2, S_{10}	1.014 (7)	1.014 (3)	1.000 (4)
	S_4	1.057 (4)	1.064 (3)	1.057 (5)
	S_{12}	1.056 (5)	1.066 (2)	1.057 (7)
	S_6	1.057 (5)	1.068 (2)	1.059 (6)
2	S_2, S_{10}	1.038 (4)	1.028 (2)	
	S_4	1.077 (3)	1.070 (5)	
	S_{12}	1.078 (4)	1.072 (3)	
	S_6	1.081 (4)	1.080 (2)	
3	S_2, S_{10}	1.050 (9)		
	S_4	1.090 (10)		
	S_{12}	1.090 (10)		
	S_6	1.090 (10)		

Os erros são obtidos em dez resultados, oriundos da divisão do comprimento total da simulação Monte Carlo, cujos dados estão na tabela 3.4.

Tabela 3.4 - Uso do método MCRG para cálculo de calores específicos generalizados. Modelo de Ashkin-Teller $N = 2$. Dados coletados a cada 5 passos de Monte Carlo.

Dimensão da rede (L)	32	16	8
Número de passos Monte Carlo	215000	240000	200000
Número de passos descartados para equilíbrio térmico	15000	10000	5000
Tempo de CPU	9 h	2.5 h	0.8 h

Observe a primeira coluna da tabela 3.3 que fornece os valores de Y_T , partindo de uma rede 32×32 . Considere a coluna correspondente a $L = 32$ e $NR = 1$, cujos valores se referem à primeira iteração do grupo de Renormalização. Existe uma clara diferença entre usar somente um operador (primeiros vizinhos) na análise e usar dois, incluindo o operador de segundos vizinhos. A inclusão de um operador de quatro spins (S_{12}), no entanto, praticamente não altera o valor anterior. É claro que nessa região do espaço de parâmetros ($K = 0.4$, $K_4 = 0.06$) na qual o modelo se aproxima do Ising dobrado, operadores de quatro spins importam pouco para a determinação de Y_T . Após a inclusão do quarto operador (S_6) nota-se que o valor Y_T difere menos que 3% do valor exato. Certamente não podemos esperar que a primeira renormalização traga o sistema original para o respectivo ponto fixo, mas após a segunda iteração ($NR = 2$) a hamiltoniana renormalizada se aproxima mais do ponto fixo e as estimativas para Y_T (1.081 após S_6) diferem menos de 0.2% do valor exato. A terceira iteração mostra um desvio maior que o anterior e a explicação é que a essa altura, já estaremos trabalhando com uma rede 4×4 , para a qual efeitos de tamanho finito já são muito importantes, pois o alcance dos operadores é comparável ao tamanho do sistema. Mesmo assim a diferença é algo em torno de 1%. Ao longo das diagonais da tabela 3.3 podemos acompanhar o efeito de diferentes números de iterações do Grupo de Renormalização, em redes de mesmo tamanho. Por exemplo, para $L = 16$, o valor 1.068 (2) após a primeira iteração, e após S_6 , pode ser comparado com 1.081 (4) para $L = 32$ após a segunda iteração. Nesse caso os efeitos de tamanho finito se cancelam pois as redes possuem o mesmo tamanho (8×8). Pode-se notar que as iterações aproximam Y_T de seu valor exato.

Segue, agora, um comentário sobre a diagonalização de $T_{\alpha\beta}$. Ela é constituída pelo produto da média dos diversos operadores, mostrados na tabela 3.2. No que se refere à paridade desses produtos (par ou ímpar pela inversão de σ_i e μ_i), $T_{\alpha\beta}$ é da forma

onde os retângulos representam submatrizes. Para aumentar a precisão dos cálculos, as matrizes constituídas pelos produtos $\text{PAR} \times \text{ÍMPAR}$, tiveram seus elementos igualados a zero pois, na ausência de um campo externo que quebre a mencionada simetria, os operadores ímpares devem ter média nula, tornando a matriz T bloco-diagonal.

A tabela 3.5.a mostra os valores do expoente crítico marginal Y_M , bem como a sua dependência com o tamanho da base truncada, e a natureza de seus operadores. Os números à direita de Y_M são os coeficientes (C_α) dos elementos (S_α), ou seja, se M é o operador marginal, então

$$M = \sum_{\alpha} C_{\alpha} S_{\alpha} \quad (3.8)$$

Com o objetivo de revelar o efeito de cada operador, olhamos para as projeções do operador marginal nos subespaços gerados por essas diferentes bases. Como pode ser visto na tabela 3.5, o efeito dos operadores de dois spins ($S_{\alpha}, \alpha = 2, 4 \text{ e } 6$) é pequeno e tende a desaparecer quando o número de operadores de quatro spins ($S_{\alpha}, \alpha = 10 \text{ e } 12$) é aumentado. As contribuições dos operadores de dois spins também diminui com o aumento de iterações do Grupo de Renormalização. Isto é consistente com o fato de que somente os operadores de quatro spins conduzem o valor de Y_M para zero (valor exato). Pode-se ver claramente, que da primeira para a segunda linha da tabela 3.5, o expoente crítico Y_M praticamente não se altera. Isso significa que o acréscimo de S_4 , que é um operador de dois spins, não melhora a determinação de Y_M . Situação completamente diferente ocorre ao descer da segunda para a terceira linha. Agora Y_M se aproxima sensivelmente de zero, quando se acrescenta S_{12} , que é um operador de quatro spins.

Tabela 3.5 - Componentes do operador marginal com o aumento da base truncada (Y_m é o expoente marginal). (a) Operadores de dois e quatro spins estão aqui incluídos para $L = 32$; (b) Somente operadores de quatro spins são incluídos e $L = 16$.

NR	Y_M	S_2	S_{10}	S_4	S_{12}	S_6	S_{14}	S_{16}
(a)								
1	-0.36 (1)	-0.55	0.84					
	-0.36 (2)	-0.58	0.82	-0.03				
	-0.07 (2)	-0.52	0.74	-0.20	0.37			
	-0.07 (2)	-0.56	0.73	-0.18	0.36	-0.08		
2	-0.34 (2)	-0.55	0.84					
	-0.34 (2)	-0.56	0.83	0				
	-0.07 (2)	-0.51	0.75	-0.22	0.37			
	-0.06 (2)	-0.54	0.73	-0.19	0.36	-0.09		
3	-0.46 (3)	-0.56	0.83					
	-0.46 (3)	-0.58	0.82	-0.01				
	-0.07 (3)	-0.50	0.73	-0.24	0.39			
	-0.07 (3)	-0.54	0.71	-0.22	0.38	-0.11		
(b)								
1	-0.33 (5)		1.00					
	-0.074 (7)		0.92		0.39			
	-0.024 (6)		0.93		0.37		0.02	
	-0.002 (7)		0.93		0.36		0.02	0.01

Esses são, realmente, os elementos importantes para a construção do operador marginal, e por isso construímos a tabela 3.5.b, na qual somente os operadores de quatro spins aparecem. Após a inclusão do quarto operador (S_{16}), notamos que o valor de Y_M está muito mais próximo de zero do que o valor inicial. Note-se ainda que o que nos permite truncar a base de uma forma consistente é o fato de que a influência dos operadores

$$S_a = \sum_{|i-j|=R} \sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j \tag{3.9}$$

é cada vez menor ao se aumentar o valor de R . Repare no coeficiente de S_{16} cujo valor é 0.01 ($R = \sqrt{5}$) contra o coeficiente de S_{10} , que vale 0.93 ($R = 1$).

Os elementos do autovetor à direita de $T_{a\beta}$ de fato diminuem com o aumento do alcance dos operadores conforme provado por Shankar, Gupta e Murthy⁽⁶⁸⁾.

A tabela 3.6 mostra os valores do expoente crítico magnético Y_H . Podemos notar que seus valores diferem pouco em todas as colunas e que, por sua vez, apresentam diferenças pequenas em relação ao valor exato. Isto é característico do autovalor magnético, que é geralmente muito menos sensível a efeitos de tamanho finito e à distância do ponto

fixo do que os autovalores térmicos.

Os erros estatísticos também são menores, devido ao fato de que a parte subtraída nas expressões $(2.5)_{\theta}$ $(2.5)_{\theta}$ é colocada igual a zero, que é o valor exato da média de operadores ímpares.

Tabela 3.6 - Autovalores magnéticos do modelo de Ashkin-Teller para $K = 0.4$ e $K_4 = 0.06$; valor exato $Y_B = 1.875$. NR é o estágio de renormalização; S_a é o tipo de operador incluído na base truncada, L é a dimensão da rede não renormalizada.

NR	S_a	$L = 32$	$L = 16$	$L = 8$
1	S_1	1.883 (1)	1.879 (1)	1.876 (2)
	S_3	1.882 (2)	1.876 (2)	1.879 (3)
	S_5	1.881 (2)	1.875 (1)	1.879 (3)
2	S_1	1.876 (1)	1.879 (1)	
	S_3	1.875 (3)	1.875 (2)	
	S_4	1.875 (2)	1.876 (2)	
3	S_1	1.876 (1)		
	S_3	1.874 (2)		
	S_5	1.875 (2)		

O autovalor térmico mostrado na tabela 3.3, como já mencionado, mostra boa concordância com o valor exato. Entretanto, ao nos aproximar do ponto de bifurcação O na figura 4 , que corresponde ao modelo de Potts de quatro estados, vemos que resultados para o expoente térmico pioram sensivelmente. A razão é que ambos os operadores, térmico e marginal, possuem grandes projeções nos operadores de quatro spins. Quando S_{10}, S_{12} e S_{14} são incluídos na análise, eles têm que contribuir para que Y_T vá para o seu verdadeiro valor e ao mesmo tempo devem levar o valor de Y_M a zero. Essa competição entre Y_T (exato) e $Y_M = 0$ faz aparecer um valor intermediário para Y_T , que está entre zero e o seu valor exato. Este último, no ponto $K = 0.28$ e $K_4 = 0.264$ (próximo ao modelo de Potts), vale 1.436, enquanto que o valor obtido pelo MCRG é 1.276 (8), uma diferença maior que 10 %. Na tabela 3.3 vimos que as diferenças eram da ordem de 1 % ou menores, no ponto $K = 0.4, K_4 = 0.06$. Esse problema pode no entanto ser contornado calculando-se o expoente crítico do operador *crossover* Y_{CR}^{AT} (S_{18} , na tabela 3.2), e usando a relação

$$X_T^{AT} = \frac{1}{X_{CR}^{AT}}, \quad (3.10)$$

que em termos dos respectivos expoentes críticos pode ser reescrita como

$$Y_T^{AT} = \frac{3 - 2Y_{CR}^{AT}}{2 - Y_{CR}^{AT}}. \quad (3.11)$$

A razão para isso é que o operador *crossover* tem projeção muito pequena no operador marginal, mesmo na base reduzida que usamos (a análise por MCRG comprova esse fato). A inclusão do operador S_{18} , fornece o valor $Y_{CR}^{AT} = 0.23(2)$, resultado que não se altera ao incluir os demais e leva ao resultado $Y_T^{AT} = 1.434(6)$, muito próximo do resultado exato $Y_T^{AT} = 1.436$.

Há outra explicação para que os resultados piorem perto do Potts. Como se sabe, na ausência de operadores relevantes, sob uma transformação do Grupo de Renormalização, a hamiltoniana vai na direção do ponto fixo de acordo com uma taxa de fluxo dada pelos autovalores irrelevantes (os autovalores relevantes dão a taxa de fluxo para fora do ponto fixo). O maior autovalor irrelevante Y_c dá a correção dominante ao scaling L^Y , onde L é a dimensão da rede renormalizada e $Y_c < 0$. Assim, quanto menor Y_c , menores as correções ao scaling e mais rapidamente vai a hamiltoniana para o ponto fixo da transformação. Longe do Potts ($K = 0.4, K_4 = 0.06$) esse expoente é pequeno, $Y_c = -1.838(6)$, porém quando se aumenta a interação de quatro spins ($K = 0.28, K_4 = 0.264$) esse expoente já vale $Y_c = -0.961(7)$, valor sensivelmente superior ao primeiro e que resulta em correções maiores ao scaling. Na verdade o valor de Y_c tende a zero à medida que nos aproximamos do Potts ($K = K_4 = 0.2746 \dots$), e nesse ponto as correções tornam-se logarítmicas.

Uma outra razão ainda pode ser mencionada quando retornamos ao Apêndice B. Lá estão calculados os tempos de correlação para pontos longe e perto do Potts. Verificamos que, nesse último caso, as configurações estavam mais correlacionadas que no ponto perto do Ising. Isso contribui para que as médias tenham variâncias maiores e portanto erros maiores. Note que o expoente térmico do *crossover* perto do Potts tem erro na segunda casa decimal, ao passo que em torno do Ising detectamos erros na terceira casa.

Reunimos, num único gráfico (figura 7) a expressão exata de Y_T^{AT} , obtida de (3.3), (3.4) e (3.5) e os valores desse expoente obtidos pelo MCRG.

Figura 7: Expoente térmico. A curva é obtida das equações (3.3), (3.4) e (3.5)

Para finalizar esse capítulo calculamos os autovalores na linha OC da figura

4.. Os resultados obtidos para os expoentes críticos são consistentes com a classificação dessa linha na mesma classe da universalidade do modelo de Ising. Num ponto dessa linha ($K = 0.16, K_4 = 0.42$), encontrado pelo método da comparação entre correlações, foi feita a análise por MCRG numa rede 16×16 . Com apenas uma renormalização e três operadores (primeiro, segundo e terceiro vizinho encontramos para o expoente térmico o valor $0.997(9)$, a ser comparado com o valor exato de Ising, $Y_T = 1$. O valor do expoente crítico magnético, com apenas um operador ímpar, é $1.887(9)$. O valor exato é $Y_H = 1.875$.

C A P Í T U L O 4

APLICAÇÕES DO MÉTODO DE MONTE CARLO COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

4.A - INTRODUÇÃO

O capítulo anterior tratou do AT, $N = 2$ com as técnicas já convencionais do MC e do MCRG. Neste capítulo estudamos aplicações do Monte Carlo com evolução. A possibilidade de varrer amplas regiões do espaço de parâmetros com uma única simulação, permite a abordagem de vários problemas de interesse que até então seria inviável, a não ser por um espaço computacional altíssimo. A localização de pontos críticos através de picos de calor específico, que estamos acostumados a ver como pontos isolados no espaço de parâmetros, aparecem, com o novo método como curvas praticamente contínuas obtidas em menor tempo de CPU. Esse ganho de tempo permite a utilização de redes cada vez maiores para uma extrapolação mais confiável em direção ao limite termodinâmico, das grandezas de interesse. Uma dessas é um cumulante ⁽⁶⁹⁾ de quarta ordem, cujo valor, no limite termodinâmico está associado à ordem das transições de fase servido, portanto, como um parâmetro para classificá-las. Ferrenberg e Swendsen ⁽¹⁹⁾ mostram como isso pode ser feito, com um reduzido esforço, no caso do modelo de Potts de oito estados e também para o modelo de Ising com campo magnético ambos associados à transições de primeira ordem, determinadas de maneira inequívoca pelo novo método.

A primeira aplicação que fizemos, descrita em 4.B, consiste em estudar a universalidade num modelo de Ising crítico com um defeito linear. A idéia vem do fato de que o histograma das grandezas de interesse, realizado em um valor do acoplamento nessa linha, permite obter a distribuição de probabilidades para qualquer valor desse acoplamento. Se a média termodinâmica dessas grandezas estiverem associadas a expoentes críticos não universais, obtém-se então, a expressão desses como função do acoplamento. É exatamente isso que ocorre na linha com defeito, onde o expoente crítico η , que governa o comportamento da função de correlação spin-spin, é não universal pois depende do valor do acoplamento nessa linha. Simulando os sistemas num único valor K do acoplamento obtivemos a expressão de η numa larga região em torno de K .

A seguir mostramos em 4.C uma aplicação do método de histogramas que consiste em estudar modelos de Ising com interação multispin com m spins acoplados ao longo de uma direção (horizontal e vertical). A determinação da ordem das transições para

$m = 3$ e 4 é feita de forma inequívoca, através do cálculo de cumulantes em larga região do espaço de parâmetros. O enorme esforço computacional que seria preciso para varrer essa região, caso fosse investigada ponto a ponto, praticamente inviabilizaria a simulação. O novo método tornou possível a realização dessa tarefa para diversos valores das dimensões do sistema, o que permitiu a obtenção de excelentes extrapolações dos cumulantes para o limite termodinâmico.

4.B - CÁLCULO DE EXPOENTES NÃO UNIVERSAIS

O modelo de Baxter é um dos modelos que apresentou comportamento crítico não universal, mas certamente não é o único. Desde o início da década de setenta vários outros casos foram encontrados em que os índices críticos dependiam da constante de acoplamento. O mais conhecido é o do modelo de Ashkin-eller já apresentado no capítulo anterior mas podemos citar também o modelo de Ising com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos ⁽⁷⁰⁾. Em todos esses casos o expoente crítico γ varia, mas há uma espécie de universalidade generalizada para a razão α/γ . Um caso mais intrigante do que esses mencionados é o do modelo de Ising com uma linha de acoplamentos diferentes (J_d) (Figura 8).

Figura 8: Modelo de Ising bidimensional com uma linha vertical com defeito.

Esse modelo, ao contrário dos demais, não apresenta o γ variável e sim o expoente da função de correlação ao longo da linha de defeitos (η^*).

A dependência de η^* com a constante J_d foi obtida por McCoy e Perk ⁽²⁵⁾

e se expressa como

$$\eta^* = \left(\frac{2}{\pi} \tan^{-1} Q \right)^2 \quad (4.7)$$

onde

$$Q = \frac{\tanh(\beta_c J_1)}{\tanh(\beta_c J)} \quad (4.8)$$

e J_1 está relacionado com J_d pela relação de dualidade

$$e^{-2\beta_c J_1} = \tanh(\beta_c J_d) \quad (4.9)$$

A simplicidade desse modelo* aliada à riqueza de seu comportamento acabaram por transformá-lo em um laboratório ideal para testar novas técnicas. Já se utilizou grupo de renormalização no espaço real ^(71,72), finite-size scaling ⁽⁷³⁾ e métodos de invariância conforme ⁽⁷⁴⁾. Todos esses métodos têm a desvantagem de requerer um esforço proporcional ao número de valores de J_d , que se deseja examinar. A nossa proposta para essa seção é obter a dependência de η^* com J_d , sobre uma longa faixa de valores desse último, utilizando a técnica de Ferrenberg-Swendsen com uma singela modificação: ao invés de fazer a evolução na temperatura nós fixamos esta última e variamos o acoplamento J_d . Escolhemos $K_d = J_d \beta_c = 0.4$ para realizar a simulação, cujos dados estão na tabela 4.1.

A fim de tratar, de forma apropriada, os efeitos de tamanho finito, seguimos a proposta de Binder ⁽⁷⁵⁾ que analisa, sistematicamente, os casos devido às correções ao *scaling*. Na temperatura crítica T_c essas correções, para susceptibilidade magnética de uma rede $L \times L$, são da forma

$$\chi_0 L^{\eta^*} [1 + \chi_1 L^{-X_c} + \dots] \quad (4.10)$$

onde χ_0 e χ_1 são amplitudes e X_c é um expoente que descreve as correções ao *scaling*. Utilizando-se de uma outra rede quadrada de dimensão linear bL ($b > 1$) obtemos a razão

$$\frac{\ln[\chi(bL)/\chi(L)]}{\ln b} = \eta^* - \frac{\chi_1 L^{-X_c}(1 - b^{-X_c})}{\ln b} \quad (4.11)$$

* A temperatura crítica para esse modelo só depende do acoplamento regular J e é dada por $kT_c = J/\ln(1 + \sqrt{2})$.

Pode-se fazer o gráfico de η^* contra $1/\ell n b$ e extrapolar linearmente para $1/\ell n b \rightarrow 0$. Porém a lenta convergência logarítmica exige grandes valores de b , tornando enorme o esforço computacional necessário para a realização de uma boa extrapolação. Ao invés disso fixamos a dimensão da rede grande (bL), e fizemos L crescer para três valores diferentes. O termo L^{-X} em (4.11) garante um decréscimo mais rápido dos efeitos de tamanho. Esse procedimento não pode ser adotado muito próximo de $b = 1$ sem comprometer a precisão do cálculo do lado direito de (4.11) (a razão entre os susceptibilidades decresce a ponto de se tornar comparável com os erros estatísticos). Por isso mantivemos o valor de b suficientemente grande para garantir que as razões calculadas fossem pelo menor 10 vezes maior que os erros estatísticos.

Tabela 4.1 - Método de Monte Carlo para cálculo de susceptibilidades. Os dados são coletados a cada 5 passos de Monte Carlo para $K = 0.4$

Dimensão da rede (L)	8	14	20
Nº passos Monte Carlo	1.000.000	1.500.000	1.000.000
Nº passos descartados para o equilíbrio	5.000	10.000	15.000
Tempo de CPU	1.9 h	8.4 h	11.5 h

Para calcular a susceptibilidade associada à linha com defeito tivemos que medir a distribuição de probabilidades para a magnetização na referida linha, cuja expressão é :

$$M = \sum_d \sigma_d \tag{4.12}$$

onde d indica os sítios da linha de defeitos.

Também foi necessário obter a distribuição de probabilidades para a energia associada aos spins σ_a . A razão para dispensar o cálculo da distribuição para a energia do volume é que na expressão (4.6) a constante de acoplamento K não muda fora da linha ou seja $K' - K$ só é diferente de zero na linha com defeito. Mais uma observação com relação à expressão (4.6) é que fizemos a medida de $P_{k,h(B,M)}$ para $h = 0$ pois a susceptibilidade χ que desejávamos calcular era

$$\chi_K = \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (4.13)$$

que é proporcional a

$$\langle M^2 \rangle_k - \langle M \rangle_k^2 \quad (4.14)$$

onde $\langle M \rangle_k$ significa $\sum_{E,M} M P_k(E, M)$. O conhecimento de $P_k(E, M)$ em função de $P_k(E, M)$ (equação 4.6), permite o conhecimento de χ_K para qualquer valor k' da constante de acoplamento na linha. O conhecimento de $P_k(E, M)$ é obtido pela contagem do número de vezes que um dado par de valores (E, M) aparece numa simulação de Monte Carlo. Para cada par de redes (L, bL) basta uma única simulação, num dado valor de K_d (nesse caso igual a 0.4) para obter a dependência de η^* .

Na figura 8 apresentamos os resultados para 3 pares de redes de dimensões (8,14), (8,20) e (14,20) que estão em concordância crescente com o resultado exato (linha cheia) dado pela equação (4.7). Para o valor (14,20) o maior desvio em relação ao resultado exato é da ordem de 3% na região de baixa temperatura (altos valores de K). Podemos entender porque a sequência (8,14), (8,20) e (14,20) fornece resultados cada vez melhores. Correções de tamanho finito para o par (8,20) são menores do que para (8,14) uma vez que o valor de L é o mesmo em ambos porém o valor de b cresce o que provoca, de acordo com (4.11), uma diminuição das correções. Por outro lado o par (14,20) possui valor de b menor do que o par (8,14), porém o crescimento de L garante um substancial decréscimo (L^{-x_c}), das correções de tamanho finito. Realizamos ainda um quarto cálculo para o par (18,20), que não consta na figura 8. Nesse caso o valor de b já era suficientemente próximo de 1 para que o logaritmo da razão entre as respectivas susceptibilidades se tornasse comparável aos erros estatísticos. Para contornar isso seria necessário aumentar o número de passos de Monte Carlo da ordem de 50 vezes para manter nosso compromisso de deixar as medidas de $\ln[\chi(bL)/\chi(L)]$ pelo menos dez vezes maiores que os erros estatísticos, o que elevaria o tempo de CPU a níveis impraticáveis.

Figura 9: η^* contra K obtido de pares (L, bL) para valores $(8,14)$, $(8,20)$ e $(14,20)$ respectivamente, indicados por traços de comprimentos decrescentes.

Concluindo, podemos dizer que o referido método de Ferrenberg e Swendsen pode ser usado de forma muito convincente para o cálculo de expoentes críticos não universais.

4.C - ORDEM DE TRANSIÇÕES DE FASE EM SISTEMAS COM INTERAÇÕES MULTISPIN

A determinação da ordem das transições de fase, bem como suas localizações, em sistemas de spin nem sempre está livre ambiguidades quando se trata de sistemas finitos. Os efeitos de tamanho finito nas transições de segunda ordem receberam um tratamento adequado ⁽³⁰⁻³²⁾ permitindo o uso de sistemas pequenos em simulações Monte Carlo e posterior extrapolação para redes de dimensões infinitas. Por outro lado, efeitos de tamanho finito em transições de primeira ordem têm sido abordados apenas em anos recentes ⁽⁷⁶⁻⁷⁸⁾. Aqui, não existem as flutuações de longo alcance que caracterizam as transições de segunda ordem e que dão origem à teoria de escala na região crítica. As singularidades no calor específico e susceptibilidade em transições de primeira ordem, são devidos à coexistência de fases e não existe região crítica pois o comprimento da correlação permanece finito na temperatura de transição. Se a teoria de escala em transições de segunda ordem prevê uma divergência para o calor específico segundo $L^{a/\nu}$, nas de primeira ordem o tamanho L da rede aparece apenas por causa do volume, e o pico do calor específico diverge como L^d , em d dimensões. Esse comportamento (L^d) só vale para $L \rightarrow \infty$ o que dificulta sua investigação por simulação computacional. Além do mais as diferenças entre as energias internas das fases coexistentes podem tornar suficientemente pequenas a ponto de comprometer a determinação da ordem de transição. Exemplo dessas dificuldades pode ser encontrado no modelo de Potts de dez estados ($q = 10$), onde as simulações de Monte Carlo ⁽⁷⁹⁾ não revelaram a histerese na energia interna, que caracteriza a transição de primeira ordem e na qual se enquadra o referido modelo.

A necessidade de classificar a ordem das transições de uma forma mais precisa, aparece também em sistemas com interações multispin. Modelos de Ising bidimensionais com interações desse tipo se constituem em $m(> 2)$ spins interagindo na direção espacial (horizontal) e a interação de Ising usual de dois spins na direção temporal (vertical). Analogamente ao parâmetro q no modelo de Potts, que serve, também, para classificar a ordem das transições, pode-se estudar a evolução do comportamento crítico do sistema com o parâmetro m . A analogia com o modelo de Potts vem da observação da degenerescência do estado fundamental desse e dos modelos com interação multispin. Isto pode ser melhor entendido observando a hamiltoniana que descreve esses modelos.

$$-\beta H_m = \sum_{i,j} [K_r S(i,j)S(i+1,j) + K_s \prod_{k=0}^{m-1} S(i,j+k)] \quad (4.15)$$

onde K_r é o acoplamento usual de Ising ($K_r = \frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$) e K_s acopla m spins na horizontal.

Conforme o trabalho de Turban ⁽⁷⁹⁾ a hamiltoniana (4.15) é auto-dual para qualquer valor de m . A temperatura crítica para o caso isotrópico ($K_s = K_r$), assumindo que a transição é única, é dada por $K_s = K_r = \frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$, que é o valor do Ising usual.

A hamiltoniana (4.15) mostra uma invariância por reversão de spins, o que torna o estado fundamental degenerado 2^{m-1} vezes, que é o número de configurações diferentes do estado fundamental com o mesmo valor de $\beta H m$. Esse tipo de degenerescência segue que esses modelos pertençam à mesma classe de universalidade que o modelo de Potts de $q = 2^{m-1}$ estados ⁽⁸⁰⁾. Por exemplo, para $m = 3$ o modelo deve pertencer à mesma classe de universalidade do modelo de potts de quatro estados ($q = 4$), na qual está também o modelo de Baxter-Wu ⁽⁸¹⁾.

A comprovação dessas conjecturas passa, sem dúvida, pela determinação precisa da ordem das transições, questão essa que discutiremos a partir daqui, para os valores de $m = 3$ e $m = 4$. As primeiras tentativas de determinar a ordem da transição, para esses valores de m , foram feitas usando teoria de campo médio ⁽⁷⁹⁾ e teoria de escala para sistemas finitos ⁽⁸⁰⁾, esforço que não foi conclusivo para decidir a ordem da transição. Nesse sentido contribuíram o trabalho de Marifan et al ⁽⁸²⁾, que aperfeiçoaram o modelo de campo médio e o trabalho de Alcaraz ⁽⁸³⁾ que realizou simulações de Monte Carlo em redes de dimensões até 132×132 para $m = 2, 3$ e 4 . Diferenças entre as energias internas das duas fases foram detectadas, claramente para $m = 4$ caracterizando uma transição de primeira ordem.

Nossa proposta consiste em utilizar o método de Monte Carlo com evolução no espaço de parâmetros, para calcular uma grandeza cujo valor mínimo determina a ordem da transição. Essa grandeza é um cumulante de quarta ordem e como mostra Binder et al ⁽²⁶⁾, está intimamente relacionada com a ordem das transições, como veremos a seguir.

Uma transição de primeira ordem é caracterizada pela coexistência de duas fases, cujas energias internas por sítio designamos por E_+ e E_- , respectivamente as energias

internas, na transição, das fases de alta e baixa temperaturas. A distribuição de probabilidades $P_L(E)$ para a energia interna por sítio (E) numa rede $L \times L$ se constitui numa superposição de duas Gaussianas centradas em E_+ e E_- ,

$$P_L(E) \propto Q_+ e^{-Q_L \beta^2 (E - E_+)^2} + Q_- e^{-b_L \beta^2 (E - E_-)^2}, \quad T = T_c \quad (4.16)$$

onde $\beta = 1/kT$, Q_L e b_L são proporcionais ao volume L^d tal que (4.16) transforma-se em uma soma de deltas para $L \rightarrow \infty$. Num pequeno intervalo ΔT , em torno da transição, esse comportamento permanece e designando por C_+ e C_- os calores específicos das duas fases tem-se

$$P_L(E) \propto Q_+ e^{-Q_L \beta^2 [E - (E_+ + C_+ \Delta T)]^2} + Q_- e^{-b_L \beta^2 [E - (E_- + C_- \Delta T)]^2} \quad (4.17)$$

Com as expressões de $P_L(E)$ podemos calcular médias de E que entram na grandeza chamada cumulante expressa por

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (4.18)$$

Muito longe da transição (grandes valores de ΔT) somente uma das Gaussianas do lado direito de (4.17) irá comparecer e estará centrada em $U_+ = E_+ + C_+ \Delta T$ (ou $U_- = E_- + C_- \Delta T$). No limite termodinâmico tem-se uma função δ e as médias $\langle E^2 \rangle$, $\langle E^4 \rangle$ são

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \int E^2 \delta(E - U_{\pm}) dE = U_{\pm}^2 \\ \langle E^4 \rangle &= \int E^4 \delta(E - U_{\pm}) dE = U_{\pm}^4 \end{aligned} \quad (4.19)$$

que substituídos em (4.17) resulta

$$V_L = 1 - \frac{U_{\pm}^4}{3U_{\pm}^4} = \frac{2}{3}, \quad L \rightarrow \infty, \quad T \neq T_c \quad (4.20)$$

Se a transição for de segunda ordem, haverá apenas uma função δ para $P_L(E)$ no limite termodinâmico e $T = T_c (\Delta T = 0)$ centrada numa única energia U . Por isso o limite $V_L \rightarrow \frac{2}{3}$ para $L \rightarrow \infty$ e $T = T_c$ continua valendo por uma transição de segunda

ordem. Isso não ocorre para uma transição de primeira ordem, pois as duas deltas de (4.16) no limite termodinâmico fornecem (supondo $Q_+ = Q_-$)

$$V_L/min = 1 - \frac{2(E_+^4 + E_-^4)}{3(E_+^2 + E_-^2)^2}, \quad L \rightarrow \infty, \quad T = T_c(L) \quad (4.21)$$

onde V_L/min é um limite não trivial e é menor (mínimo) que os $2/3$ para $T = T_c(L)$.

Obviamente, se a transição for de segunda ordem $E_+ = E_-$ e (4.21) é novamente $2/3$.

Finalmente o que necessitamos para calcular V_L/min consiste em obter a distribuição de probabilidades $P_L(E)$ para diversos valores de L , seguida da extrapolação de V_L para o limite termodinâmico. Para L variando de 12 até 36, fizemos o histograma de (4.15) para $m = 3$ e 4. Os valores de K_r e K_s foram fixados em $\frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$, que é o valor do Ising usual. Guardamos separadamente, no histograma, as configurações das linhas acopladas por K_r e das colunas acopladas três a três (ou quatro a quatro) por K_s . A evolução das médias no espaço de parâmetros foram feitas variando-se os valores de K_s em torno de $\frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$. Poderíamos também ter feito K_r e K_s variar, uma vez que guardamos

$$P_L(\sum_{i,j} S(i,j)S(i+1,j), \sum_{i,j} \prod_{K=0}^{m-1} S(i,j+K)) \quad (4.22)$$

Os dados das simulações que permitiram a obtenção de histogramas do tipo (4.22) estão na tabela (4.2)

Tabela 4.2 - Monte Carlo com evolução para histogramas de sistemas com interação multispin ($m = 3$ e 4), $K_s = K_r = \frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$. Passos de Monte Carlo ou 10^3 .

Dimensão da rede(L)	12	16	18	20	24	28	30	32	36
Passos M.C.	510	510	415	415	420	420	425	430	430
Pas.desc.eq.	10	10	15	15	20	20	25	30	30
Tempo CPU	5 h	8.8 h	9 h	11 h	16 h	21.5 h	25 h	28 h	36 h

Uma ilustração desses histogramas pode ser vista nas figuras 10 e 11, para $P_L(\sum_{i,j} S(i,j)S(i+1,j))$ com $L = 36$ e $m = 4, 3$. A figura 10 para $m = 4$ mostra a presença de dois picos na distribuição de probabilidades já indicando uma transição de primeira ordem,

situação diferente da figura 11 na qual apenas um pico comparece sugerindo transição de segunda ordem. Vamos, a seguir, definir, com mais precisão, a ordem dessas transições.

Figura 10: Distribuição de probabilidades $P(E)$ contra E , onde $E = \sum_{i,j} S(i,j)S(i+1,j)$ para 4 spins acoplados na horizontal. A presença de duas gaussianas indica transição de primeira ordem.

Figura 11: Distribuição de probabilidades $P(E)$ contra E para 3 spins acoplados na horizontal. Apenas um pico na distribuição indica transição de segunda ordem.

De posse dos histogramas, que são aproximadamente as distribuições de probabilidades, podemos calcular médias de E^2 e E^4 com $E = \sum_{i,j} \prod_{K=0}^{m-1} S(i, j + K)$ e usar 4.18 para calcular os diversos valores dos cumulantes V_L . A figura 12, com $m = 3$, mostra cumulante para $L = 18, 24, 30$ e 36 como função de K .

Figura 12: Curvas representando o cumulante reduzido de Binder V_L contra a temperatura K , obtidos a partir de uma única simulação. O valor extrapolado para $L \rightarrow \infty$ também é mostrado. A transição é de segunda ordem para $m = 3$.

Os valores mínimos desses cumulantes são extrapolados segundo uma expressão do tipo

$$V_L = V_\infty [1 - aL^{-b}] \quad (4.23)$$

O gráfico $V_L \times L$ bem como o valor V_∞ da extrapolação pode ser visto na figura 13.

Figura 13: Curva de V_L contra L obtida através de extrapolação segundo (4.23), o limite $V_\infty = \frac{2}{3}$ confirma transição de segunda para $m = 3$.

Os valores de K para os quais V_L é mínimo fornecem as temperaturas de transição $T_c(L)$ para as redes finitas. Analogamente a (4.23) fizemos uma extrapolação para a temperatura crítica da rede infinita T_∞

$$T_c(L) = T_c(\infty) [1 - aL^{-b}] \quad (4.24)$$

O gráfico $T_c(L) \times L$ pode ser visto na figura 14, bem como o valor extrapolado da temperatura de transição $T_c(\infty)$, cujo valor 0.44 concorda muito bem com o valor exato $\frac{1}{2}\ell n(1 + \sqrt{2})$.

Figura 14: Curva de temperatura de transição $T_c(L)$ contra L obtida através de extrapolação segundo (4.24); $m = 3$ e T_{∞} exato é 0.44069.

Repetimos todo esse processo, iniciado pelo cálculo de cumulantes da figura 12, para o caso $m = 4$. A figura 15 mostra os cumulantes para os diversos tamanhos de rede e o valor extrapolado, cuja obtenção está explicitada pela figura 16. O valor $V_\infty = 0.6485$ é um limite não trivial, característico desse modelo e difere substancialmente de $\frac{2}{3}$, caracterizando uma transição de primeira ordem. O gráfico de $T_c(L) \times L$ pode ser visto na figura 17 e o valor extrapolado 0.44, concorda, novamente, com o resultado exato.

Figura 15: Curvas de cumulante V_L contra K para $m = 4$. O valor extrapolado é representado pelo traço vertical.

Para esse caso fizemos uma estimativa do calor latente. A expressão (4.21) é válida, supondo iguais os pesos Q_+ e Q_- Gaussianos. Vemos porém na figura 12, para $L = 36$ que isto pode não ocorrer, porém um cálculo rápido mostra que $\langle E \rangle_L$ difere de $\frac{E_+ + E_-}{2}$ (a igualdade vale se $Q_+ = Q_-$) em menos de 2%, basta comparar $\langle E \rangle$ oriundo de $\Sigma EP(E)$ com a metade da soma dos dois picos E_+ e E_- da figura 12. Tomando $Q_+ \approx Q_-$ podemos escrever

Figura 16: Curva de V_L contra L , obtida através de extrapolação segundo (4.23), o limite $V_\infty \neq 2/3$ confirma transição de primeira ordem.

Figura 17: Curva de temperatura de transição $T_{c(L)}$ contra L , obtida através de extrapolação segundo (4.24); $m = 4$ e $T_{c(\infty)}$ exato é 0.44069.

$$\langle E \rangle_L \approx \frac{E_+ E_-}{2} \quad , \quad T = T_c(L) \quad (4.25)$$

e como sempre o calor latente L é

$$L = E_+ - E_- \quad (4.26)$$

Obtendo-se E_+ e E_- em função de $\langle E \rangle_L$ e L substituímos em (4.21). Usamos o valor extrapolado para $V_L/\min$ e $\langle E \rangle_L$ para $L = 36$ pois $\langle E \rangle_L$ (a energia interna por spin) não muda significativamente com L . O valor obtido por L é 0.18 ± 0.02 que compara muito bem com o valor obtido por Alcaraz ⁽⁸³⁾ que é 0.20 ± 0.05 .

Estas aplicações são em si de suficiente interesse para justificá-las, porém deve ser ressaltado que além disso elas representam um laboratório para melhor entender o método de histogramas. Com isto foi possível estendê-lo e generalizá-lo associando-o à técnica do MCRG. Isto será apresentado no capítulo 5.

C A P Í T U L O 5

MCRG COM EVOLUÇÃO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

5.A - INTRODUÇÃO

Nesse Capítulo mostramos a possibilidade de associar a técnica de histogramas ao Grupo de Renormalização, o que faz aumentar o poder do MCRG de forma surpreendente. Nas aplicações, já mencionadas, realizadas por Ferrenberg e Swendsen, o cálculo de médias se referiam a grandezas contidas na hamiltoniana, que eram calculadas em quaisquer valores dos acoplamentos via histogramas dessas grandezas. A relevância do que realizamos aqui consiste em calcular médias de grandezas que não estão contidas na expressão da hamiltoniana, pois se referem a redes diferentes da original. Isto, sem dúvida, amplia de forma significativa, os tipos de histogramas e as informações obtidas a partir desses. Por exemplo calculamos médias, para diversos valores de acoplamento, em redes 4×4 , simulando um sistema de dimensões 8×8 . O sucesso nessa tarefa permite uma rápida determinação de pontos críticos dos modelos, pois as correlações em redes de mesmo tamanho são comparadas ponto a ponto, simulando os sistemas em apenas um desses pontos. É o que fizemos no item 5.B. Também a análise do comportamento do sistema em torno do ponto crítico de uma transição contínua é de grande interesse, pois contribui para caracterizar o tipo de transição e a classe de universalidade associada. Mostramos aqui a possibilidade de obter fluxo de hamiltonianas renormalizadas em torno do ponto crítico simulando os sistemas apenas nesse ponto. Os histogramas necessários para esse objetivo estão mostrados em 5.C.

5.B - HISTOGRAMAS PARA OBTENÇÃO DE PONTOS CRÍTICOS

No capítulo 2 nos referimos ao método sugerido por Wilson para o cálculo de constantes de acoplamento críticas e renormalizadas. A igualdade entre funções de correlações em redes de mesmo tamanho porém em diferentes estágios de renormalização fornece a localização do ponto crítico. Nossa proposta consiste em utilizar o Monte Carlo com evolução representado pela equação 2.31, no método de Wilson para extrair os acoplamentos críticos do modelo de Ashkin-Teller de duas cores. A essência do método, vale lembrar, é con-

seguir esses objetivos realizando simulações num único ponto do espaço de parâmetros. Obter acoplamentos críticos do modelo de Ashkin-Teller, consistiu num dos temas do Capítulo 3. Porém, o esforço computacional para realizá-lo era proporcional ao número de constantes de acoplamento em que cada correlação era calculada. O número de simulações feitas era igual ao número de pontos da figura 5. A proposta agora é descrever a realização do mesmo objetivo, fazendo uma única simulação do sistema descrito pela hamiltoniana

$$-H = K \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j) + K_4 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j \quad (5.1)$$

cujas características já foram descritas no Capítulo 3.

Segundo a prescrição de Ferrenberg e Swendsen o histograma da hamiltoniana (5.1) deve ser feito para se calcular a média das grandezas de interesse para quaisquer valores de K e K_4 . Porém vamos manter um desses parâmetros (K) fixo e faremos K_4 variar. Com isto, o histograma da hamiltoniana se resume no arquivo dos valores de $E = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j$. Nas duas simulações usamos $K = 0.4$ e $K_4 = 0.03$ e duas redes 8×8 e 4×4 . A primeira é renormalizada a uma 4×4 e sua função de correlação

$$\langle S^{(1)} \rangle_\sigma = \langle \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(1)} S_j^{(1)} \rangle - \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i^{(1)} \rangle \langle S_j^{(1)} \rangle \quad (5.2)$$

é calculada. O superíndice (1) se refere à uma rede 4×4 que foi obtida renormalizando outra 8×8 , designada pelo subíndice G (grande), $S_i^{(1)}$ designa o spin (σ ou μ) renormalizado. A expressão (5.2) será comparada com

$$\langle S^{(0)} \rangle_p = \langle \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(0)} S_j^{(0)} \rangle - \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i^{(0)} \rangle \langle S_j^{(0)} \rangle \quad (5.3)$$

onde (0) significa a rede original 4×4 designada por p (pequena) e $S_i^{(0)}$ o spin dessa rede não renormalizada.

A comparação dessas funções de correlação para vários valores de K_4 exige o armazenamento das grandezas que explicitamos a seguir. Lembrando que $S_i^{(n)}$ designa $\sigma_i^{(n)}$ ou $\mu_i^{(n)}$ e chamando $\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^{(0)} \sigma_j^{(0)} \mu_i^{(0)} \mu_j^{(0)} = E_L$, onde L significa 8 ou 4 conforme a dimensão da rede original cuja hamiltoniana está sendo simulada, fazemos o histograma das seguintes grandezas

Rede 8 x 8	Rede 4 x 4
$P_{K_4} (E_8, \Sigma S_i^{(1)} S_j^{(1)})$	$P_{K_4} (E_4, \Sigma S_i^{(0)} S_j^{(0)})$
$P_{K_4} (E_8, \Sigma S_i^{(1)})$	$P_{K_4} (E_4, \Sigma S_i^{(0)})$

Com isto todas as grandezas depois da vírgula contidas em P_{K_4} podem ser calculadas para qualquer valor K'_4 , ou seja se S é uma dessas grandezas então

$$< S >_{K_4} = \frac{\sum_{E_L, S} S P_{K_4} (E_L, S) e^{(K'_4 - K_4) E_L}}{\sum_{E_L, S} P_{K_4} (E_L, S) e^{(K'_4 - K_4) E_L}} \tag{5.4}$$

A igualdade das funções de correlação (5.2) e (5.3) fornece o valor de K_4 que torna crítica a hamiltoniana (5.1). O gráfico de ambas como função de K_4 pode ser visto na figura 18 e os dados da simulação que permitiu a obtenção dessas curvas estão na tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Monte Carlo com evolução para a determinação de acoplamentos críticos. As simulações de ambas as redes foram feitas em $K = 0.4$ e $K_4 = 0.03$.

Dimensão da rede (L)	8	4
Nº de passos Monte Carlo	300.000	300.000
Nº de passos descartados para o equlfbrio	5.000	3.000
Tempo de CPU	1.5 h	0.9 h

Figura 18: $F(L', L)$ é a função de correlação de primeiros vizinhos do modelo de Ashkin-Teller, calculada numa rede de dimensão L' obtida renormalizando outra de dimensão L , e a simulação realizada em $K = 0.4$ e $K_4 = 0.03$. O valor crítico de K_4 exato é 0.06. Do cruzamento das correlações obtém-se $K_4 = 0.065$.

5.C - HISTOGRAMAS PARA OBTENÇÃO DO FLUXO NO ESPAÇO DE PARÂMETROS

Vamos agora discutir a obtenção das constantes de acoplamento renormalizadas no modelo de Ising que formam um fluxo de hamiltonianas no espaço de parâmetros, cuja dimensão será restrita a dois : os acoplamentos de primeiros e segundos vizinhos.

Conforme já visto no Capítulo 2, o método de Wilson de simulação de duas redes serve para calcular constantes de acoplamento renormalizadas usando pequenas diferenças entre as funções de correlação (5.2) e (5.3). Detalhamos, na figura 19, o esquema de cálculo explicitando melhor as grandezas calculadas.

onde
$$D_\alpha^{(n)} = \sum_{\beta=1}^2 \frac{\partial \langle S_\alpha^{(n)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n)}} \delta K_\beta^{(n)}$$

Figura 19: Esquema de renormalização das redes para obtenção de constantes de acoplamento renormalizadas.

Duas redes 32×32 e 16×16 são simuladas e renormalizadas. Os valores das correlações nas redes são armazenadas a partir de redes de tamanho 16×16 . Da solução das equações (5.5.a) e (5.5.b) obtem-se dois pares de valores das constantes renormalizadas $(K_1^{(1)}, K_2^{(1)})$ e $(K_1^{(2)}, K_2^{(2)})$ que juntamente com o par original $(K_1^{(0)}, 0)$ formam um fluxo constituído de 3 pontos no diagrama K_1 e K_2 . Se conseguirmos evoluir o par original para outros valores próximos obteremos pares renormalizados situados próximos aos primeiros. Isto é o que chamamos fluxo de hamiltonianas propriamente dito. Veremos agora o que é necessário armazenar nas duas simulações para realizar a evolução da hamiltoniana original.

Já sabemos o que guardar para evoluir o lado esquerdo das equações (5.5.a) e (5.5.b), como foi discutido no item anterior. O lado direito das equações apresentam derivadas obtidas da rede menor, que são da forma

$$\frac{\partial \langle S_{\alpha}^{(n)} \rangle}{\partial K_{\beta}^{(n)}} = \langle S_{\alpha}^{(n)} S_{\beta}^{(n)} \rangle - \langle S_{\alpha}^{(n)} \rangle \langle S_{\beta}^{(n)} \rangle \tag{5.6}$$

onde $n = 0$ ou 1 e α e β são 1 ou 2 , lembrando que a correlação $S_1^{(0)}$ de primeiros vizinhos para $n = 0$ é justamente E_{16} . Para $n = 0$, precisamos armazenar as grandezas

$$P(E_{16}, S_1^{(0)} S_1^{(0)}), \text{ como } S_1^{(0)} = E_{16}, \text{ basta } P(E_{16})$$

$$P(E_{16}, S_1^{(0)} S_2^{(0)}), \text{ analogamente, basta } P(E_{16}, S_2^{(0)})$$

Para $n = 1$ é preciso o histograma de

$$P(E_{16}, S_1^{(1)} S_2^{(1)}),$$

aqui não há como reduzir a dimensão de P , pois $E_{16} \neq S_1^{(1)}$. É essencial tentar diminuir o número configurações armazenadas, pois essas crescem com o volume e $P(E_{16}, S_1^{(1)} S_2^{(1)})$ já tem dimensões $P(16^2, 8^2 \times 8^2)$. Mencionamos no Capítulo 2 que as derivadas podem ser obtidas da rede grande, porém isso implicaria em guardar $P(E_{32}, S_1^{(1)} S_2^{(1)})$, cujas dimensões são $P(32^2, 16^2 \times 16^2)$ tornando-se demasiadamente grande para ser armazenada.

Finalmente dispomos de todos os histogramas necessários para evoluir as médias contidas em (5.5.a) e (5.5.b) para valores de $K_1^{(0)}$ próximos ao valor usado nas simulações cujos dados estão na tabela 5.2.

Tabela 5.2 - Monte Carlo com evolução para a determinação de constantes de acoplamento renormalizadas (fluxo de hamiltonianas) simulações feitas em $K_1^{(0)} = 0.44$ e $K_2^{(0)} = 0$.

Dimensão da rede (L)	32	16
Nº de passos Monte Carlo	500.000	500.000
Nº de passos descartados para o equilíbrio	15.000	10.000
Tempo de CPU	20.3 h	5.2 h

O fluxo no espaço de parâmetros constituído por $K_{\alpha\beta}$ (primeiros vizinhos)

e K_{nnn} (segundos vizinhos) pode ser visto na figura 20. Os resultados comparam muito bem com aqueles obtidos por Swendsen ⁽⁸⁴⁾ através do método MCRG usual.

Figura 20: Fluxo de hamiltonianas renormalizadas a partir de uma única simulação feita em $K_{nn} = 0.44$ e $K_{nnn} = 0$

Concluindo, mostramos de maneira convincente a possibilidade de juntar as poderosas técnicas do MCRG com o método do histograma. Se essa nova técnica virá a ser útil ou não no estudos de sistemas mais complexos e realistas, tais como por exemplo modelo de Gauge, dependerá da capacidade de manter as necessidades de memória o menor possível, visto que estas crescem rapidamente com o aumento da complexidade do sistema.

C A P Í T U L O 6

USO DO MCRG COM EVOLUÇÃO NO MODELO DE ASHKIN-TELLER $N = 3$

6.A - INTRODUÇÃO

O estudo feito no Capítulo 3 sobre o modelo de Ashkin-Teller de duas cores será agora estendido ao caso mais geral envolvendo 3 cores e anisotropia. A expressão da hamiltoniana para qualquer número N de cores acoplados de forma simétrica é

$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha=1}^N S_i^\alpha S_j^\alpha + K_4 \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha \neq \beta}^N S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta \quad (6.1)$$

onde $S^\alpha (\alpha = 1 \dots N)$ representa spin da cor α situados em um pouco da rede bidimensional quadrada e $\langle ij \rangle$ significa soma sobre primeiros vizinhos. Um estudo da hamiltoniana (6.1) realizado por Fradkin ⁽⁸⁵⁾ mostrou que à medida que $N \rightarrow \infty$ a transição tipo Ising em $K_4 = 0$ e $[\ell n(1 + \sqrt{2})]/2$ separa uma linha de primeira ordem ($K_4 > 0$) e outra linha de segunda ($K_4 < 0$). O caso $N = 2$, já estudado no Capítulo 3, é bastante conhecido ao longo da linha autodual, porque lá o modelo pode ser mapeado no modelo de Baxter, que só apresenta transições de segunda ordem. O interesse em estudar o caso intermediário $N = 3$ é realçado num trabalho de Shankar ⁽⁸⁶⁾ onde se mostra que a transição de primeira ordem, encontrada para $N \rightarrow \infty$, permanecerá até $N = 3$. A curiosidade no trabalho de Shankar é que essa conclusão foi tirada depois de mapear o modelo em uma teoria de campos do tipo Gross-Neveu ⁽⁸⁷⁾. Nesse sentido, fica bastante natural a proposta de Goldschmidt ⁽²¹⁾ que visa quebrar a simetria entre as cores para obter um Gross-Neveu anisotrópico, que por sua vez pode ser mapeado no modelo de Sine-Gordon supersimétrico. A vantagem que se origina desse procedimento é que o fluxo ⁽⁸⁸⁾ dessa teoria, é característico de uma transição tipo Kosterlitz-Thouseless ⁽⁸⁹⁾, o que levou Goldschmidt a conjecturar um diagrama de fases do modelo anisotrópico, descrito por (6.2) e que está mostrado na figura 21.

Para efeito de comparação estamos mostrando na figura 22 o diagrama obtido por Grest e Widom ⁽⁴⁸⁾ no caso $N = 3$ isotrópico, descrito por (6.1).

Figura 21: Diagrama de fases do modelo AT anisotrópico. O acoplamento V é fixo em 0.056. O ponto multicrítico de KT é mostrado em $K_c = 0.25$ e $X_W = -0.2$ ($W = -0.05$). Na fase Baxter I todos os parâmetros de ordem $\langle S^\alpha \rangle$, $\langle S^\alpha S^\beta \rangle$ se ordenam. Na fase II somente $\langle S^1 \rangle$, $\langle S^3 \rangle$ (ou $\langle S^2 \rangle$, $\langle S^3 \rangle$) e seus produtos se ordenam. Na fase III $\langle S^1 S^2 \rangle$ se ordena de forma antiferromagnética e $\langle S^3 \rangle$ de forma ferromagnética. Na fase IV somente $\langle S^1 S^2 \rangle$ tem ordem antiferromagnética. A fase V é paramagnética. Na fase VI, $\langle S^1 \rangle$, $\langle S^2 \rangle$ e o produto se ordenam de forma ferromagnética.

Figura 22: Resultados de Monte Carlo para o modelo $N = 3$ isotrópico em duas dimensões. Os pontos indicam onde as simulações foram feitas.

A hamiltoniana considerada por Goldschmidt é dada por

$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha=1}^3 S_i^\alpha S_j^\alpha + W \sum_{\langle ij \rangle} S_i^1 S_i^2 S_j^1 S_j^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^1 S_i^3 S_j^1 S_j^3 + S_i^2 S_i^3 S_j^2 S_j^3) \quad (6.2)$$

e recai no caso conhecido (isotrópico) quando $V = W = K_4$.

Nas próximas seções estaremos usando todo o arsenal de técnicas, apresentadas nesta tese para investigar esse modelo.

6.B - DIAGRAMA DE FASES

Com o objetivo de comparar nossos resultados com àqueles obtidos por Goldschmidt através de campo médio, mantivemos, na simulação, o parâmetro V em (6.2) fixo em 0.056 e construímos o diagrama de fases no plano $K - X_W$, $X_W = W/K$. A hamiltoniana (6.2) foi simulada usando o banho térmico já descrito no Capítulo 3. O novo método de Monte-Carlo com evolução no espaço de parâmetros foi empregado na obtenção de picos de calor específico e mínimos de cumulantes, ambos relacionados com a localização dos pontos críticos. O cruzamento das funções de correlação, já descrito nos Capítulos 3 e 5 decidiu sobre a ordem das transições, o que poderia ter sido obtido também através da extrapolação dos mínimos de cumulantes, que foi o procedimento adotados na determinação da ordem da transição dos modelos de Ising com interações multispin. O resultado das nossas simulações estão reunidos na figura 23.

Figura 23: Diagrama de fases do modelo de Ashkin-Teller $N = 3$ anisotrópico obtido por simulação de Monte Carlo com evolução. Os parâmetros de ordem diferentes de zero estão mostrados na figura.

Para entender como obtivemos as curvas críticas vamos descrever o procedimento para determinação da linha GIJ. Fizemos um dos histogramas do sistema perto do ponto J, armazenando as configurações $E_K = \sum_{\langle ij \rangle} S_i^1 S_j^1 + S_i^2 S_j^2 + S_i^3 S_j^3$ e $E_W = \sum_{\langle ij \rangle} S_i^1 S_j^1 S_i^2 S_j^2$, para obter $P_{K, X_W}(E_K, E_W)$. Essa distribuição permite a obtenção de outra P_{K', X'_W} como função de P , K e X_W que possibilita a evolução de P no plano $K - X_W$. Simulando o sistema pouco à direita de J, calculamos os valores do calor específico ao longo da horizontal ($K = \text{constante}$) evoluindo P como função de X_W , ou seja

$$P_{K,X'_W} = \frac{P_{K,X_W} e^{(K(X'_W - X_W)E_W)}{\sum_{E_K, E_W} P_{K,X_W} e^{K(X'_W - X_W)E_W}} \quad (6.3)$$

Ao encontrar um pico no calor específico ou um mínimo no valor do cumulante, evoluímos P_{K,X_W} na vertical ($X_W = \text{constante}$), obtendo P_{K',X_W} em função de P_{K,X_W} através de uma relação análoga à (6.3), trocando E_W por E_K e $K(X'_W - X_W)$ por $(K' - K)$. Repetindo a evolução na horizontal até encontrar um novo pico no calor específico, podemos obter seguidos pontos da linha IJ. A figura 24 mostra as curvas de calor específico e cumulantes em alguns desses pontos bem como os dados da simulação.

Figura 24: Picos de calor específico e mínimos de cumulantes para uma rede 28×28 . Numa das curvas de cumulantes destacamos a diferença entre as localizações do pico do calor específico e o mínimo do cumulante. Simulação feita em $K = 0.3$ com passo $K' - K = 0.01$ e $X_w = 0.6$ com passo $X'_w - X_w = 0.003$; 300.000 passos de Monte-Carlo e 15 h de CPU. Procedimento análogos permitiram a obtenção das demais linhas do diagrama de fases.

As localizações dos picos de calor específico e dos mínimos de cumulantes diferem algo em torno de 6% para uma rede 20×20 e 3% para uma rede 28×28 , como consequência de correções de tamanho finito. Portanto a localização precisa desses pontos, bem como a determinação da ordem das transições via cumulante, implica necessariamente na realização de extrapolações para o limite termodinâmico, tal como fizemos no Capítulo 4. Porém o esforço computacional necessário seria enorme em virtude dos vários números de linhas do diagrama e dos altos tempos de CPU para redes grandes. Notar nas curvas do cumulante que, à medida que X_W diminui, ao se deslocar de J para I , o mínimo do cumulante cresce em direção a $2/3$, que caracteriza transição de segunda ordem. Porém sem realizar extrapolações não se pode garantir a precisa localização de I .

Para a determinação da ordem das transições optamos pelo cruzamento das funções de correlação, que sempre ocorre numa transição de segunda ordem. Esse procedimento, como já vimos nos Capítulos 3 e 5 envolve redes pequenas (8×8 e 4×4) e simulações relativamente rápidas. A figura 25 mostra uma simulação realizada à direita do ponto I .

Figura 25: À direita de I o valor de X_W é fixo em 0.3 e as funções de correlação $F(S^1)$ e $F(S^3)$ são calculadas como função de K .

Pode-se notar a existência do cruzamento das correlações $F(S^3)$ na linha GH, que separa as fases $\langle S^3 \rangle = 0$ e $\langle S^3 \rangle \neq 0$. O cruzamento porém, não ocorre na linha de baixo, onde são quebrados os parâmetros $\langle S^1 \rangle$ e $\langle S^2 \rangle$, caracterizando transição de primeira ordem. Essa conclusão é reforçada pelas curvas dos respectivos parâmetros de ordem $\langle S^1 \rangle$ e $\langle S^3 \rangle$, com função K . A figura 26 mostra simulações com o Monte-Carlo usual realizadas nos pontos destacados na curva.

Figura 26: A curva à esquerda representa o parâmetro de ordem $\langle S^1 \rangle$ e da direita representa $\langle S^3 \rangle$. Os valores de K indicam, aproximadamente, a quebra de $\langle S^1 \rangle$ na linha IJ do diagrama de fases e de $\langle S^3 \rangle$ na linha GH.

A curva à esquerda que representa $\langle S^3 \rangle$ mostra uma mudança nos valores desse parâmetro de forma bem mais acentuada que a variação de $\langle S^3 \rangle$, indicando a transição de segunda ordem na quebra desse último e primeira ordem na quebra de $\langle S^1 \rangle$. O estudo do diagrama a esquerda de I revela outras características. Agora (figura 27) notamos o cruzamento de ambas as funções de correlação $F(S^1)$ e $F(S^3)$, indicando transições de segunda ordem nas linhas GI e GH.

Figura 27: À esquerda de I o valor de X_W é feito em 0.25 e as funções de correlação $F(S^1)$ e $F(S^3)$ são calculadas como função de K .

Com o objetivo de distinguir melhor entre pontos da linha GH e os da linha GI, obtivemos as curvas de calor específico usando apenas as partes singulares da energia, ou seja, na curva GI o calor específico foi calculado como a flutuação na energia $E(S^1)$ dada por $\sum_{\langle ij \rangle} S_i^1 S_j^1$ e na curva GH pela flutuação na energia $E(S^3) = \sum_{\langle ij \rangle} S_i^3 S_j^3$. O pico à esquerda na figura 28 representa o máximo valor do calor específico relacionado com $E(S^1)$ e o pico da direita se refere a $E(S^3)$.

Figura 28: À esquerda está o pico de calor específico associado a $E(S^1)$ e à direita o calor específico associado a $E(S^3)$. O valor inicial de K é 0.3 e $W = K \cdot X_W$ fixo em 0.24.

Repetindo todos esses procedimentos, ou seja, picos de calor específico, mínimos de cumulante, curvas de mudanças no parâmetro de ordem e cruzamento de correlações, obtivemos o diagrama da figura 23, que apresenta sensíveis diferenças em relação ao diagrama de fases de campo médio obtido por Goldschmidt, não só nas posições das linhas como na determinação da ordem das transições. Desde já afirmamos que as posições dos pontos F , G e I carecem de uma investigação mais precisa, envolvendo extrapolações para o limite termodinâmico. A fase II de Goldschmidt que no diagrama de campo médio sugere $\langle S^2 \rangle \neq 0$ ou $\langle S^1 \rangle \neq 0$ não concorda com as nossas simulações, que forneceram apenas $\langle S^3 \rangle \neq 0$. A linha CGH que no diagrama de campo médio aparece com transições de segunda e primeira ordem separadas pelo ponto multicrítico (MCP), mostrou comportamento de segunda ordem em toda sua extensão, com incerteza em torno de G , que como já dissemos é uma região que merece mais atenção, o mesmo ocorrendo em torno do ponto C à esquerda, ou seja não podemos afirmar baseado nas simulações que a linha AC encontra CD exatamente em C . Podemos garantir que as fases são as mostradas no diagrama, através de curvas semelhantes às da figura 26. Os pontos onde a ordem das transições mudam é que necessitam maior investigação.

6.C - DETERMINAÇÃO DE EXPOENTES CRÍTICOS

Determinado o diagrama de fases e a ordem das transições vamos, em seguida, encontrar a classe de universalidade das linhas críticas em que as transições são contínuas, realizando nessas linhas a análise por MCRG tal como feito no Capítulo 3 para o caso do Ashkin-Teller de duas cores.

Vamos começar a análise pela linha BCGH que é caracterizada pela quebra do parâmetro de ordem $\langle S^3 \rangle$ e que é de segunda-ordem em toda sua extensão. Na hamiltoniana (6.2) nota-se que S^1 e S^2 estão dispostos de forma simétrica o que não ocorre com S^3 . O diagrama de fases mostra quebras de simetria simultâneas em S^1 e S^2 ou somente de S^3 como ocorre na linha BCGH. Em virtude disso vamos construir uma base de operadores simétrica em S^1 e S^2 adicionando-se a esta os operadores contendo S^3 . Chamando S^1 de σ , S^2 de μ e S^3 de ζ , teremos como base truncada a que já foi usada no Capítulo 3, mostrada na tabela (3.2) mais os operadores contendo $S^3 = \zeta$. Reproduzimos a tabela (3.2) e mostramos os novos elementos da base formados por ζ , na tabela 6.1.

Tabela 6.1 - Notação para os operadores formados por ζ

Setor Impar	Setor Par
$S_7 = \sum_i \zeta_i$ $S_9 = \sum_i \sigma_i \zeta_i + \mu_i \zeta_i$	$S_{20} = \sum_{nn} \zeta_i \zeta_j$ $S_{22} = \sum_{nnn} \zeta_i \zeta_j$ $S_{24} = \sum_{ i-j =\sqrt{2}} \zeta_i \zeta_j$ $S_{26} = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j \zeta_i \zeta_j + \mu_i \mu_j \zeta_i \zeta_j)$ $S_{28} = \sum_{nnn} (\sigma_i \sigma_j \zeta_i \zeta_j + \mu_i \mu_j \zeta_i \zeta_j)$ $S_{30} = \sum_{ i-j =\sqrt{2}} (\sigma_i \sigma_j \zeta_i \zeta_j + \mu_i \mu_j \zeta_i \zeta_j)$

Escolhemos um ponto entre C e G cuja posição é dada por $X_W = -1.0$ e $K = 0.4$ e implementamos o MCRG nesse ponto com operadores da tabela 6.1, reproduzindo o procedimento descrito no Capítulo 3. O resultado para o expoente térmico Y_T

Tabela 3.2 Notação para os operadores formados por σ e μ .

SETOR IMPAR	SETOR PAR	
$S_1 = \sum_i (\sigma_i + \mu_i)$	$S_2 = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$	$S_3 = \sum_{nnn} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$
$S_3 = \sum_i \sigma_i \mu_i$	$S_6 = \sum_{ i-j =2} (\sigma_i \sigma_j - \mu_i \mu_j)$	$S_8 = \sum_{ i-j =\sqrt{5}} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j)$
$S_5 = \sum_i (\sigma_{i \pm x} \sigma_i \sigma_{i \pm y} + \mu_{i \pm x} \mu_i \mu_{i \pm y})$	$S_{10} = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$	$S_{12} = \sum_{nnn} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$
	$S_{14} = \sum_{ i-j =2} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$	$S_{16} = \sum_{ i-j =\sqrt{5}} (\sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j)$
	$S_{18} = \sum_{nn} (\sigma_i \sigma_j - \mu_i \mu_j)$	

está mostrado na tabela 6.2.

Tabela 6.2 - Autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H , para $K = 0.4$ $X_W = -1.0$ e $V = 0.056$. NR é o estágio de renormalização ; S_a é o tipo de operador incluído na base truncada; L é a dimensão da rede não renormalizada.

NR	S_a	Y_T	$L = 16$	Y_H
1	S_{20}	0.91(2)		1.868(5)
	S_{22}	0.96(2)		
	S_{24}	0.96(1)		
	S_7			
2	S_{20}	0.90(2)		1.848(6)
	S_{22}	0.95(1)		
	S_{24}	0.95(2)		
	S_7			

Enquanto o autovalor magnético está próximo ao valor de Ising, 1.875, pelo menos após $NR = 1$, o autovalor térmico Y_T mostra uma distância maior do valor exato 1.0. A análise do MCRG num ponto distante do primeiro fornece um resultado parecido, mostrado na tabela (6.3).

Tabela 6.3 - Autovalores térmicos Y_T magnéticos Y_H , para $K = 0.34$, $X_W = 0.6$ e $V = 0.056$.

NR	S_a	Y_T	$L = 16$	Y_H
1	S_{20}	0.92(1)		1.879(6)
	S_{22}	0.95(2)		
	S_{24}	0.94(2)		
	S_7			
2	S_{20}	0.94(2)		1.873(4)
	S_{22}	0.98(2)		
	S_{24}	0.98(2)		
	S_7			

Os dados da simulação que permitiram a obtenção das tabelas 6.2 e 6.3 reunidos na tabela 6.4.

Tabela 6.4 - Uso do método MCRG para cálculo de calores específicos generalizados. Modelo de Ashkin-Teller $N = 3$. Dados coletados a cada 5 passos de Monte Carlo.

Dimensão da rede (L)	16
Nº de passos Monte Carlo	220.000
Nº de passos descartados	20.000
Tempo de CPU	2 h

Os resultados das tabelas 6.2 e 6.3 mostram grande semelhança entre si apesar de terem sido obtidos em pontos muito distantes. A conclusão mais provável é a de que a linha é realmente universal e incluída na classe de universalidade do modelo de Ising. Dois motivos podem ser citados para justificar a distância dos valores de Y_T do valor exato. Primeiramente, a localização precisa dos pontos críticos exige a extrapolação para o limite termodinâmico dos mínimos dos cumulantes e em segundo lugar, na análise por MCRG, empregamos um reduzido número de operadores, em virtude de termos usado rede relativamente pequena, o que, por sua vez impede um maior número de renormalizações, necessário para uma boa aproximação do ponto fixo.

Vamos em seguida usar o MCRG para estudar o comportamento dos expoentes críticos na linha ACD caracterizada pela quebra do parâmetro de ordem $\langle S^1 S^2 \rangle$ ou $\langle \sigma \mu \rangle$. Aqui a transição é antiferromagnética e a renormalização do sistema deve ser feita através de suas subredes, o sítio de uma subrede possui um vizinho localizado na

outra subrede. Isto é necessário para preservar a simetria de subredes. O uso da regra da maioria para renormalizar o sistema destrói a simetria de um estado ordenado caso a rede e não a subrede seja renormalizada. No setor ímpar deve-se ter o cuidado de realizar a soma sobre os operadores apenas nas subredes, caso contrário o resultado da soma é sempre nulo. Definindo a variável produto $\sigma\mu$ em cada sítio da rede, faremos a renormalização do sistema nessa variável. Os resultados para os autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H em dois pontos distintos da linha ACD estão nas tabelas 6.5. e 6.6.

Tabela 6.5 - Autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H , para $K = 0.33$, $X_W = -1.7$ e $V = 0.056$.

NR	S_α	Y_T	$L = 16$	Y_H
1	S_{10}	0.90(2)		1.807(6)
	S_{12}	0.91(2)		
	S_{14}	0.90(3)		
	S_3			
2	S_{10}	1.10(2)		1.848(5)
	S_{12}	1.10(2)		
	S_{14}	1.03(2)		
	S_3			

Tabela 6.6 - Autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H , para $K = 0.51$, $X_W = -1.38$ e $V = 0.056$.

NR	S_α	Y_T	$L = 16$	Y_H
1	S_{10}	0.90(2)		1.788(8)
	S_{12}	0.90(2)		
	S_{14}	0.88(2)		
	S_3			
2	S_{10}	1.03(2)		1.816(8)
	S_{12}	1.04(3)		
	S_{14}	0.98(3)		
	S_3			

Nota-se que, apesar da grande distância entre os dois pontos na linha ACD, os expoentes não se alteram de forma significativa e se mantêm relativamente próximos aos valores de Ising. Reafirmamos que a necessidade de valores mais precisos implica no uso de redes 32×32 e 64×64 o que permitiria maior aproximação do ponto fixo da transformação, bem como diminuição dos efeitos de tamanho finito.

Finalmente faremos a análise do MCRG na linha FGI que separa diferentes valores dos parâmetros de ordem $\langle S^1 \rangle$, $\langle S^2 \rangle$ e $\langle S^1 S^2 \rangle$ ou $\langle \sigma \rangle$, $\langle \mu \rangle$ e $\langle \sigma \mu \rangle$ respectivamente. Vamos usar a base de operadores mostrada na tabela (3.2) em dois pontos distintos da referida linha. Os resultados dos expoentes críticos podem ser vistos nas tabelas 6.7 e 6.8.

Tabela 6.7 - Autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H para $K = 0.41$, $X_W = -0.2$ e $V = 0.056$. Y_M é o autovalor associado aos operadores S_{10} e S_{12} .

NR	S_α	Y_T	$L = 16$	Y_H	Y_M
1	S_2	0.84(2)			-0.09(1)
	S_{10}	0.84(2)			
	S_4	0.89(1)			
	S_{12}	0.88(2)			
	S_1			1.875(6)	0.08(2)

Tabela 6.8 - Autovalores térmicos Y_T e magnéticos Y_H para $K = 0.34$, $X_W = 0.28$ e $V = 0.056$. Y_M é o autovalor associado aos operadores S_{10} e S_{12} .

NR	S_α	Y_T	$L = 16$	Y_H	Y_M
1	S_2	1.12(2)			-0.08(2)
	S_{10}	1.14(2)			
	S_4	1.15(2)			
	S_{12}	1.16(2)			
	S_1			1.883(6)	-0.12(2)

Aqui fizemos apenas uma iteração do grupo de renormalização, pois os efeitos de tamanho finito mostraram-se acentuados na rede 4×4 , após a segunda renormalização. Nota-se grande diferença entre os expoentes do setor par nos dois pontos da linha em estudo, sugerindo não universalidade. Comprova esse comportamento dos expoentes críticos pares o cálculo do autovalor Y_M associado aos operadores de quatro spins S_{10} e S_{12} , cujos valores são próximos de zero, indicando ser estes, componentes de um operador marginal, cuja característica é ser o responsável pelo comportamento não universal dos expoentes críticos. Goldschmidt sugeriu, no seu diagrama, que expoentes não universais estivessem presentes ao longo da linha horizontal de segunda ordem e que esta termina num ponto multicrítico do tipo Kosterlitz-Thouless. A linha do expoentes críticos variáveis que obtivemos não é horizontal e tampouco nossa análise é conclusiva sobre a existência ou não do ponto multicrítico. Acreditamos ser necessário melhor investigação nessa região do espaço de parâmetros antes de concluir sobre a precisão do diagrama de fases proposto por Goldschmidt.

A P Ê N D I C E A

O ALGORÍTMO DE METRÓPOLIS

Seguem, aqui, mais comentários sobre o que foi dito no capítulo 2 a respeito do método de Monte Carlo, mais especificamente sobre a convergência da distribuição $P_{i \rightarrow f}$, gerada pelo algoritmo de Metrópolis, para a distribuição canônica $f(H(x))$, dada por (2.9),

$$f(H(x_i)) = \frac{e^{-\beta H(x_i)}}{Z} \quad (A.1)$$

Para que isto ocorra impõe-se o princípio do balanço detalhado

$$f(H(x_i))P_{i \rightarrow f} = f(H(x_f))P_{f \rightarrow i} \quad (A.2)$$

Seja N_i e N_f o número de sistemas nos estados Ω_i e Ω_f com energias E_i e E_f , $E_f > E_i$. Usando números aleatórios, pode realizar transições $\Omega_i \rightarrow \Omega_f$ com probabilidades $P_{i \rightarrow f} = P_{f \rightarrow i}$ dados "a priori" e que não obedecem (A.2). Realizando transições, de acordo com o algoritmo de Metrópolis, tem-se

$$P_{i \rightarrow f} = P_{if} e^{-(E_f - E_i)/KT} = P_{if} e^{-\beta \Delta E} \quad (A.3)$$

e

$$P_{f \rightarrow i} = P_{fi} = P_{if} \quad (A.4)$$

O número total de transições $\Omega_i \rightarrow \Omega_f$ é $N_i \rightarrow f$, com

$$N_{i \rightarrow f} = N_i P_{i \rightarrow f} = N_i P_{if} e^{-\beta \Delta E} \quad (A.5)$$

e para o processo inverso

$$N_{f \rightarrow i} = N_f P_{f \rightarrow i} = N_f P_{if} \quad (A.6)$$

O número líquido de transições de $\Omega_f \rightarrow \Omega_i$ é

$$\Delta N_{i \rightarrow f} = N_{i \rightarrow f} - N_{f \rightarrow i} = N_i P_{if} \left(e^{-\beta \Delta E} - \frac{N_f}{N_i} \right) \quad (A.6)$$

Se $N_f/N_i < e^{-\beta \Delta E}$, ou seja poucas partículas no estado Ω_f , então $\Delta N_{i \rightarrow f}$ é maior que zero, ou seja a transição líquida $\Omega_i \rightarrow \Omega_f$ aumenta, e cresce o valor de N_f/N_i . E vice-versa, se $N_f/N_i > e^{-\beta \Delta E}$, ΔN é negativo e o número N_f/N_i diminui até que a diferença em A.6 se anule, ou seja, N_f/N_i tendo ao valor canônico $e^{\beta \Delta E}$.

A P Ê N D I C E B

TEMPO DE CORRELAÇÃO

Descreveremos, abaixo, uma forma de obter τ , através de uma simulação Monte Carlo.

Seja E_i a energia de um estado Ω_i da cadeia de Markov, gerada pelo algoritmo de Metrópolis e E_{i+k} a energia do estado Ω_{i+k} , obtido a partir de Ω_i após K passos de Monte Carlo. Definimos a função de autocorrelação $C(K)$, que mede a correlação entre as energias dos estados Ω_i e Ω_{i+k} , da seguinte forma :

$$C(K) = \frac{\langle E_i E_{i+k} \rangle - \langle E_i \rangle^2}{\langle E_i^2 \rangle - \langle E_i \rangle^2} \quad (B.1)$$

onde $\langle \rangle$ significa média segundo (2.14), ou seja,

$$\langle E_i E_{i+k} \rangle = \frac{1}{N-K} \sum_{i=1}^{N-K} E_i E_{i+k} \quad (B.2)$$

Da expressão (2.15) vemos que $C(0) = 1$, que é o maior valor de $C(K)$. À medida que K aumenta a correlação diminui até que E_i seja praticamente independente de E_{i+k} .

Nesse caso $\langle E_i E_{i+k} \rangle = \langle E_i \rangle \langle E_{i+k} \rangle = \langle E_i \rangle^2$ e $C(K) = 0$.

O valor de τ , é o número K de passos Monte Carlo que faz a correlação cair para $C(K) = 1/e \simeq 0.368$.

A expressão para a energia do modelo de Ashkin-Teller de duas cores (ver capítulo 3) é :

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j + \frac{K_4}{K_2} \sigma_i \sigma_j \mu_i \mu_j \right] \quad (B.3)$$

Usando a expressão acima na simulação, cujos dados estão na tabela B.1, para obter médias segundo (B.2).

Tabela B.1 - Monte Carlo para cálculo de tempos de correlação

Tamanho da rede	L=16
Passos descartados para o equilíbrio térmico	20.000
Passos de Monte Carlo	600.000
Tempo de CPU	5.5 h

Fixando o valor de K_2 em 0.4, calculamos o tempo de correlação τ , para

oito valores diferentes de K_4 , a fim de observar de que forma cresce τ , à medida que nos aproximamos do ponto crítico, que nesse caso é $K_4 = 0.059$. A figura 29 mostra esses resultados.

Figura 29: Função de autocorrelação no modelo de Ashkin-Teller para alguns valores de K_4 e $K = 0.4$. Valor crítico de K_4 é 0.06. As unidades de k estão em 5 passos de Monte Carlo

Os valores de τ , que saem dessas curvas estão agrupados na tabela abaixo.

Valores de τ , em função de K_4 para $K = 0.4$. As unidades de τ , estão em passos de Monte Carlo (MCS).

K_4	τ
0.04	147
0.05	171
0.06	152
0.09	75
0.10	53
0.14	22
0.20	12

Os dois maiores valores de τ , são encontrados para $K_4 = 0.05$ e 0.06 . O valor de T_c (exato) é 0.059 . Nota-se claramente um pico para τ , próximo ao valor da temperatura crítica, que já pode ser estimada, de análises como esta.

Outra análise, semelhante a esta, perto do ponto Potts de quatro estados, cuja localização exata é $K = K_4$. Para K fixo em 0.28 , os dois maiores valores de τ , foram 272 e 225 para $K_4 = 0.264$ e $K_4 = 0.24$, respectivamente. O primeiro desses é o valor exato de K_4 para $K = 0.28$. Nota-se a grande diferença entre τ , longe do Potts (171) contra τ , perto do Potts (272). A figura 30 ilustra essa diferença, nesse caso, as configurações estão mais correlacionadas, e um número maior (pelo menos 60% a mais) de passos de Monte Carlo é necessário à análise nessa região do diagrama de fases.

Figura 30: Função de autocorrelação no modelo de Ashkin-Teller em regiões perto do Ising ($K = 0.4$, $K_4 = 0.06$) e perto do Potts ($K = 0.28$, $K_4 = 0.264$).

A P Ê N D I C E C

O MAPEAMENTO DE WEGNER

O modelo de Ashkin-Teller

O modelo de Ashkin-Teller ⁽⁴⁷⁾ foi proposto em 1943, como uma generalização do modelo de Ising, para descrever um sistema de quatro estados por sítio da rede, designados por A, B, C e D. As energias de interação entre sítios vizinhos são definidas de tal forma que ϵ_0 é a energia de pares no mesmo estado (AA, BB, CC ou DD) ; ϵ_1 é a energia de pares do tipo AB ou CD; ϵ_2 se os pares forem do tipo AC ou BD e ϵ_3 para pares do tipo AD ou BC.

Esse modelo tem uma representação de Ising proposta por Fan ⁽⁶¹⁾, na qual os quatro componentes A, B, C e D são substituídas pelas configurações de dois spins de Ising (σ, μ) . A convenção é a que segue abaixo :

$$A \equiv (+, +) \quad B \equiv (+, -) \quad C \equiv (-, +) \quad D \equiv (-, -)$$

Considerando J_1 o acoplamento entre spins σ , J_2 entre spins μ e J_4 entre produtos $\sigma\mu$, a ação que descreve o modelo é da forma

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} K_0 + K_1 \sigma \sigma' + K_2 \mu \mu' + K_4 \sigma \sigma' \mu \mu' \quad (C.1)$$

onde $K_i = \beta J_i$ e $\beta = 1/kT$

e

$$J_0 = -\frac{1}{4}(\epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)$$

$$J_1 = -\frac{1}{4}(\epsilon_0 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3)$$

$$J_2 = -\frac{1}{4}(\epsilon_0 - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3)$$

$$J_3 = -\frac{1}{4}(\epsilon_0 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3) \quad (C.2)$$

Os valores de ϵ_i em função de $K_i = \beta J_i$ dão os pesos abaixo:

$$\omega_0 = e^{\beta \epsilon_0} = e^{K_0 + K_1 + K_2 + K_4}$$

$$\omega_1 = e^{-\beta \epsilon_1} = e^{K_0 + K_1 - K_2 - K_4}$$

$$\omega_2 = e^{-\beta \epsilon_2} = e^{K_0 - K_1 + K_2 - K_4}$$

$$\omega_3 = e^{-\beta \epsilon_3} = e^{K_0 - K_1 - K_2 + K_4} \tag{C.3}$$

Escolhendo K_0 de forma que $\omega_0 = 1$ tem-se

$$\omega_1 = e^{-2K_2 - 2K_4}$$

$$\omega_2 = e^{-2K_1 - 2K_4}$$

$$\omega_3 = e^{-2K_1 - 2K_2} \tag{C.4}$$

Figura 31 Representação do Ising do modelo de Ashkin-Teller

A representação introduzida por Fan (figura 31) mostra a semelhança com a representação do Ising do modelo de oito vértices (8-V) (figura 32) resolvido de forma exata por Baxter ⁽⁴⁾ com a diferença que neste último há apenas um spin por ponto da rede, enquanto A.T. é um modelo de dois spins (σ e μ) por sítio.

Wegner ⁽⁵⁹⁾ eliminou essa diferença utilizando-se de uma transformação de dualidade em apenas uma classe de spins (μ por exemplo). Isto faz com que a rede de spins

Figura 32 Representação de Ising do modelo de oito vértices descrito pela hamiltoniana $-H = K_1\sigma_1\sigma_2 + K_2\sigma_3\sigma_4 + \lambda\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$

μ seja substituída por uma nova rede (dual) de spins , sem alterar a função de partição, porém o acoplamento é alterado na forma

$$e^{K\mu\mu'} \rightarrow e^{K^*\gamma\gamma'}$$

onde os novos spins γ interagem via K^* .

O novo sistema formado por uma rede de spins σ e pela rede dual de spins γ é a super rede do A.T.

A super rede do A.T.

A transformação de μ para γ vem acompanhada por uma alteração dos acoplamentos

$$e^{K_0 + K_1 \sigma \sigma' + K_2 \mu \mu' + K_3 \sigma \sigma' \mu \mu'} \longrightarrow e^{K_0^* + K_1^* \sigma \sigma' + K_2^* \gamma \gamma' + K_3^* \sigma \sigma' \gamma \gamma'}$$

onde

$$K_0^* = \frac{1}{4} \ln[pq/rs]$$

$$K_1^* = \frac{1}{4} \ln[pq/rs]$$

$$K_2^* = \frac{1}{4} \ln[pq/rs]$$

$$K_3^* = \frac{1}{4} \ln[pq/rs] \quad (C.5)$$

e

$$p = 1 + e^{-2K_2 - 2K_4}$$

$$q = 1 - e^{-2K_2 - 2K_4}$$

$$r = e^{-2K_1 - 2K_4} + e^{-2K_1 - 2K_2}$$

$$s = e^{-2K_1 - 2K_4} - e^{-2K_1 - 2K_2} \quad (C.6)$$

Pode-se observar o surgimento de um modelo de vértices girando a super-rede do A.T. de 45 °

Os spins σ acoplados por K_1^* e os γ por K_2^* fazem surgir uma alternância de acoplamentos em diagonais paralelas, o que não ocorre no modelo de Baxter (8-V) normal. Vamos desenhar os vértices A e B e seus possíveis pesos de acordo com a convenção : seta para a direita (esquerda) se os spins de ambos os lados da seta apontarem para cima (baixo) e seta para cima (baixo) se os spins apontarem para cima (baixo).

Sub-Rede (Medial) A

Sub-Rede (Medial) B

$$a^A = e^{K_0^* + K_1^* + K_2^* + K_4^*}$$

$$a^B = e^{K_0^* + K_1^* + K_2^* + K_4^*}$$

$$b^A = e^{K_0^* - K_1^* - K_2^* + K_4^*}$$

$$b^B = e^{K_0^* - K_1^* - K_2^* + K_4^*}$$

$$c^A = e^{K_0^* - K_1^* + K_2^* - K_4^*}$$

$$c^B = e^{K_0^* + K_1^* - K_2^* - K_4^*}$$

$$d^A = e^{K_0^* + K_1^* - K_2^* - K_4^*}$$

$$d^B = e^{K_0^* - K_1^* + K_2^* - K_4^*}$$

A mencionada alternância dos pesos aos subredes A e B se deve ao fato de que $K_1^* \neq K_2^*$. Fazendo $K_1^* = K_2^* = K^*$ obtém-se o 8-V normal e lembrando que escolhemos $\omega_0 = 1$ obtém-se em termos dos acoplamentos originais

$$e^{-2K_2-2K_4} + e^{-2K_1-2K_4} + e^{-2K_1-2K_2} = 1$$

ou

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1 \quad (C.7)$$

A equação acima define um plano onde o A.T. é um 8-V não alternado.

Na região $K_4 > K_1 = K_2$ a transição não pode ser única, porque se assim fosse ela teria que acontecer na continuação da linha Baxter, que acidentalmente é a linha auto dual ⁽⁶⁵⁾ do modelo. Na continuação o sistema não é crítico, daí haverá mais de uma transição.

Na região $K_4 < K_{1,2}$ queremos saber qual 8-V crítico corresponde ao A.T. também crítico. Para isto fazemos $\omega_1 = \omega_2$ em (C.7) ou $K_1 = K_2 = K$. Isto resulta em

$$e^{-2K_4} = \sinh 2K \quad (C.8)$$

$$\lambda = K_4^* = \frac{1}{4} \ln(ps/qr) \quad (C.9)$$

que é o mesmo que

$$e^{-4\lambda} = \frac{1}{1 - 2 \tanh(2K_4)} \quad (C.10)$$

ou

$$\tanh 2\lambda = \frac{\tanh 2K_4}{\tanh(2K_4) - 1} \quad (C.11)$$

Relações entre os operadores do A.T. e 8-V.

Vamos escrever o fator de Boltzmann do A.T. na forma

$$A^{\frac{K_1+K_2}{2}(\sigma\sigma'+\mu\mu')+(\frac{K_1-K_2}{2})(\sigma\sigma'-\mu\mu')+K_2\sigma\sigma'\mu\mu'}$$

Ao fazer $K_1 = K_2$ anulamos o coeficiente do operador que quebra a simetria entre σ e μ ($CR = \sigma\sigma' - \mu\mu'$). No modelo de vértices correspondente isso significa anular o coeficiente da densidade de energia ($\sigma\sigma' + \mu\mu'$). Isto vem do caso não alternado em que $K_1 = K_2$ e $K_1 - K_2\alpha(T - T_c)|_{8V}$ (conjugado da energia de 8-V).

Desta forma, o operador energia do 8-V é o quebrador de simetria ($CR = \sigma\sigma' - \mu\mu'$) do A.T. e a energia do A.T. é o quebrador de simetria do 8-V. Chamado X a dimensão anômala desses operadores, teremos

$$X_{\epsilon}^{8-V} = X_{CR}^{A.T.} \quad (C.12.a)$$

$$X_{\epsilon}^{A.T.} = X_{CR}^{8-V} \quad (C.12.b)$$

Dentro de um mesmo modelo, existem as seguintes relações ligando os expoentes críticos :

(a) - a relação de Baxter-Kelland entre a polarização e a energia

$$X_P^{A.T.} = \frac{X_{\epsilon}^{A.T.}}{4} \quad (C.13)$$

proposta por Enting ⁽⁹⁰⁾.

(b) - a relação entre X_{ϵ} e X_{CR} dentro do mesmo modelo

$$X_{\epsilon} = \frac{1}{X_{CR}} \quad (C.14)$$

sugerida por Kadanoff e Brown ⁽⁹¹⁾. Eles fizeram o mapeamento do A.T. (em $K_4 = 0$) e do 8-V (em $\lambda = 0$) no modelo Gaussiano, que possui funções de correlações conhecidas. Identificaram os operadores e desenvolveram um "formalismo de universalidade para as linhas críticas".

REFERÊNCIAS

1. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford (1971)
2. R. J. Baxter, Phys. Rev. Lett. **26**, 832 (1971)
3. N. Metrópolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
4. J. J. Erpenbeck e W. W. Wood, Statistical Mechanics (Berne, B. J. ed.) vol. 6b, pp 41 (Plenum, New York, 1977)
5. L. P. Kadanoff, Physics **2**, (1966)
6. K. G. Wilson, Phys. Rev. **B4**, 3174 (1971)
7. M. Nightingale, Physica **83A**, 561 (1976)
8. S. K. Ma, Phys. Rev. Lett. **37**, 461 (1976)
9. V. Privman e M. E. Fisher, Phys. Rev. **B30**, 322 (1984); J. Stat. Phys. **33**, 385 (1983)
10. P. A. Rirvold, K. Kashi, J. D. Gunton e M. Yalabik, Phys. Rev. **B29**, 6285 (1984)
11. A. A. Belavin, A. M. Polyakov e A. B. Zamalodchikov, J. Stat. Phys. **34**, 763 (1984); Nucl. Phys. **B241**, 333 (1984)
12. J. L. Cardy, Phase Transitions and Critical Phenomena, v. XI, editado por C. Domb e J. Leibowitz (1987)
13. R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **42**, 859 (1979)
14. K. K. Mon, Phys. Rev. Lett. **54**, 2671 (1985)
15. R. H. Swendsen e J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **57**, 2607 (1986)
16. P. W. Kasteleyn e C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26**, 11, (1986)
17. R. H. Swendsen e J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987)
18. G. Bhanot, K. M. Bitar e R. Salvador, Phys. Rev. Lett. **B188**, 246 (1987)

19. A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988)
20. F. Wegner, . Phys. C**5**, L131 (1972)
21. Y. Y. Goldschmidt, Phys. Rev. Lett. **56**, 1627 (1986)
22. J. Chahine, J. R. Drugowich de Felício, N. Caticha, J. Phys. **A22**, 1639 (1989)
23. N. Caticha, J. Chahine e J. R. Drugowich de Felício, Phys. Rev. **A40**, (1989)
24. J. Chahine, J. R. Drugowich de Felício e N. Caticha, Phys. Lett. **A139**, 360 (1989)
25. B. McCoy e J. Perk, Phys. Rev. Lett. **44**, 840 (1980)
26. M. S. S. Challa, D. P. Landau e K. Binder, Phys. Rev. **B34**, 1841 (1986)
27. J. Chahine, J. R. Drugowich de Felício e N. Caticha, a ser submetido
28. D. W. Heerman, Computer Simulation Methods in Theoretical Phys. Springer-Verlag (1986)
29. K. Binder, Topics in Current Physics, vol. 7, Monte Carlo Meth. in Statistical Physics (Springer, Berlin, 1986)
30. A. E. Ferdinand e M. E. Fisher, Phys. Rev. **185**, 832 (1969)
31. M. N. Barber e M. E. Fisher, Ann. , Phys. **77**, 1 (1973)
32. M. N. Barber, Phys. Rev. **B8**, 408 (1973)
33. M. E. Fisher em Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi", (1971) editado por M. S. Green, Course LI, pp 1, Academic Press London
34. F. J. Wegner, Phys. Rev. **B5**, 4529 (1972)
35. A. Aharony e M. E. Fisher, Phys. Rev. **B27**, 4394 (1983)
36. D. P. Landau, Phys. Rev. **B13**, 2997 (1976); Phys. Rev. **B14**, 225 (1976)
37. A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63**, 1195 (1989)
38. K. G. Wilson, Phys. Rev. **B4**, 3174 (1971)
39. K. G. Wilson e M. E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **28**, 240 (1972)

40. K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 583 (1983)
41. Th. Niemeijer e van Leeuwen em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 6, editado por C. Domb e M. S. Green (Academic, New York)
42. F. J. Wegner, *Phys. Rev.* **B5**, 4529 (1972)
43. L. P. Kadanoff e F. Wegner, *Phys. Rev.* **B4**, 3889 (1971)
44. K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975)
45. K. G. Wilson em *Lectures at Les Houches, France* (1980)
46. S. H. Shenker e Tolochnik, *Phys. Rev.* **B22**, 4462 (1980)
47. J. Ashkin e E. Teller, *Phys. Rev.* **64**, 178 (1943)
48. S. G. Grest e M. Widom, *Phys. Rev.* **B24**, 6508 (1981)
49. M. J. Martins e J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. A: Ge.* **21**, 1117 (1988)
50. R. Shankar, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 453 (1985)
51. P. M. C. Oliveira e F. C. Barreto (a ser publicado)
52. E. Fradkin, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1967 (1984)
53. R. H. Swendsen, *Real Space Renormalization (Topics in Current Physics 1982)*, editado por T. W. Burkhardt e J. M. J. van Leeuwen (Berlin, Springer)
54. R. H. Swendsen e S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 177 (1979)
55. R. H. Swendsen, D. Andelman e A. N. Berker, *Phys. Rev.* **B24**, 6732 (1984)
56. M. Novotny, D. P. Landau e R. H. Swendsen, *Phys. Rev.* **B26**, 330 (1987)
57. R. H. Swendsen, *private communication*, (1988)
58. C. Fan e F. Y. Wu, *Phys. Rev.* **B2**, 723 (1970)
59. F. J. Wegner, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, L131 (1972)
60. R. J. Baxter, *Ann. Phys. NY70*, 193 (1972)

61. C. Fan, Phys. Lett. **31A**, 136 (1972)
62. L. P. Kadanoff, Phys. Lett. **39**, 903 (1977)
63. L. P. Kadanoff, Ann. Phys. NY**120**, 39 (1979)
64. J. R. Drugowich de Felício e R. Köberle, Phys. Rev. **B25**, 511 (1982)
65. F. Alcaraz e R. Köberle, J. Phys. **A13**, L153 (1980)
66. X. Kohmoto, M. den Nijs e L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **B24**, 5229 (1981)
67. C. Fan, Phys. Rev. **B6**, 902 (1972)
68. R. Shankar, R. Gupta e G. Murthy, Phys. Rev. Lett. **55**, 1812 (1985)
69. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981)
70. P. M. C. Oliveira, J. Physique **47**, 1107 (1986)
71. P. Nightingale e H. Blote, J. Phys. **44**, 840 (1980)
72. P. M. Lam e Z. Q. Zhang, Z. Phys. **B52**, 315 (1983)
73. N. M. Suráric, J. Phys. **A16**, L171 (1983)
74. L. Turban, J. Phys. **A18**, L325 (1985)
75. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981)
76. M. E. Fisher e A. N. Beker, Phys. Rev. **B26**, 2507 (1982)
77. K. Binder e D. P. Landau, Phys. Rev. **B30**, 1477 (1984)
78. V. Privman e M. E. Fisher, J. Appl. Phys. **57**, 3327 (1985)
79. L. D. Turban e J. M. Debierre, J. Phys. A: Math. Gen. **16**, 3571 (1983)
80. K. A. Penson, R. Julien e P. Pfeuty, Phys. Rev. **B26**, 6334 (1982)
81. R. J. Baxter e F. Y. Wu, Aust. J. Phys. **27**, 357 (1974)
82. A. Maritan, A. Stella e C. Vanderzante, Phys. Rev. **B29**, 519 (1984)
83. F. C. Alcaraz, Phys. Rev. **B34**, 4885 (1986)
84. R. H. Swendsen, Phys. Rev. **B30**, 3866 (1984)

- 85. E. Fradkin, Phys. Rev. Lett. **53**, 1967 (1984)
- 86. R. Shankar, Phys. Rev. Lett. **55**, 453 (1985)
- 87. D. Gross e A. Neveu, Phys. Rev. **D10**, 3235 (1974)
- 88. Y. Y. Goldschmidt, Nucl. Phys. **B270**, 29 (1986)
- 89. J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, J. Phys. **C6**, 1181 (1973): J. M. Kosterlitz, J. Phys. **C7**, 1046 (1974)
- 90. J. Enting, J. Phys. **C10**, 1681 (1973)
- 91. L. P. Kadanoff e A. Brown, Annals of Phys. **121**, 318 (1979)