

Capítulo 2

Simulação em tempos curtos

Nesse capítulo são apresentados os fundamentos que serão utilizados no desenvolvimento dessa dissertação. Uma breve introdução às transições de fase e ao conceito de universalidade abre o capítulo. As relações entre os expoentes críticos decorrentes da hipótese de homogeneidade para a energia livre e o cenário criado pelo grupo de renormalização para o entendimento da universalidade (incluindo aí o papel da divergência do comprimento de correlação) são encontrados na seqüência. Finalmente, o método de simulação Monte Carlo e a sua extensão para o estudo da dinâmica crítica em tempos curtos são apresentados.

2.1 Transições de Fase

As transições de fase são caracterizadas por uma não analiticidade dos potenciais termodinâmicos, refletida em divergências de suas derivadas que, como sabemos, estão diretamente relacionadas às respostas termodinâmicas (calor específico, susceptibilidade magnética, etc). Esse comportamento singular é causado por flutuações microscópicas que atingem e persistem em escalas macroscópicas, dando origem portanto a um comportamento coletivo que fica bem caracterizado quando se investiga a correlação entre os constituintes do sistema.

O caso mais conhecido é o da transição ferromagnética, modelado por Ising¹⁵ e Lenz e resolvido por Onsager¹⁶. Nesse caso, a transição ocorre quando o campo magnético é nulo e a temperatura tem um valor único dado por $(0,5 \cdot \log(1 + \sqrt{2}))^{-1}$. Para fazer contato com o modelo microscópico, podemos lançar mão da energia livre que é proporcional ao logaritmo da função de partição canônica

$$F(T, H) = -kT \ln Z(T, H), \quad (2.1)$$

onde T é a temperatura e H é o campo magnético.

Todas as propriedades termodinâmicas macroscópicas (energia interna, entropia, magnetização, calor específico, suscetibilidade magnética, ...) podem ser obtidas a partir do conhecimento da energia livre (2.1):

$$U = \frac{1}{\mathbf{b}} \frac{\partial \ln F}{\partial \mathbf{b}}, \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_H, \quad M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T \quad (2.2)$$

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right), \quad c_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right)_T. \quad (2.3)$$

Sistemas que apresentam descontinuidade na primeira derivada da energia livre exibem transições de fase de primeira ordem, caracterizadas pela presença de calor latente. No entanto, se as primeiras derivadas forem contínuas, mas as derivadas de segunda ordem (ou maiores) apresentarem singularidade, então dizemos que o sistema sofre uma transição de fase contínua.

Um ponto crítico representa o término de uma linha de coexistência de fases ou linha de transição de primeira ordem. Como exemplo temos a curva de coexistência líquido-gás que acaba em um determinado ponto do diagrama de Clapeyron e também a linha $H = 0$ o diagrama $H - T$ de um ferromagneto. Nesse ponto as duas fases tornam-se idênticas e a transição é contínua. Um ponto tricrítico pode ser definido por analogia como sendo o término de uma linha onde três diferentes fases coexistem. Exatamente no ponto tricrítico as três fases tornam-se idênticas. Exemplos são o metamagneto e o modelo de Blume-Capel.

2.2 Expoentes Críticos

Investigando um sistema nas vizinhanças do seu ponto crítico é possível acompanhar a evolução do comportamento singular nas derivadas de segunda ordem da energia livre, como susceptibilidade ou calor específico. Do ponto de vista experimental, entretanto, isso representa uma grande dificuldade já que as flutuações de longo alcance exigem cada vez mais tempo para estabilizar o sistema a cada variação de temperatura. É esse comportamento que caracteriza o estado crítico da matéria, para o qual as famosas desigualdades para os expoentes críticos – decorrentes dos critérios de estabilidade para um sistema – são satisfeitas como igualdade¹. Na criticalidade o comprimento de correlação diverge e o sistema torna-se invariante por transformação de escala, o que leva a leis de potência do tipo:

$$\Phi(\mathbf{e}) \propto |\mathbf{e}|^V, \quad (2.4)$$

onde $\mathbf{e} = (T - T_c)/T_c$ e

$$V = \lim_{\mathbf{e} \rightarrow 0} \frac{\ln|\Phi(\mathbf{e})|}{\ln|\mathbf{e}|}. \quad (2.5)$$

Expoentes do tipo V que aparecem nas singularidades críticas são chamados de expoentes críticos e podem ter o mesmo valor em problemas aparentemente tão díspares como são a transição líquido-gás e a transição ferromagnética.

Para relacionar os expoentes críticos Widom postulou e Kadanoff explorou a homogeneidade dos potenciais termodinâmicos na região crítica. Considerando-se que a energia livre para sistemas magnéticos $F(\mathbf{e}, H)$ é uma função homogênea generalizada das variáveis $\mathbf{e} = (T - T_c)/T_c$ e H , onde T_c é a temperatura crítica e H é o campo magnético, tem-se que:

$$F(\mathbf{e}, H) = \mathbf{l}F(\mathbf{l}^a \mathbf{e}, \mathbf{l}^b H), \quad (2.6)$$

onde I é um parâmetro arbitrário e a e b são dois expoentes bem definidos. Escolhendo-se $I^a e = 1$, ou seja, $I = e^{-1/a}$ pode-se escrever a equação (2.6) da seguinte forma:

$$F(e, H) = e^{-1/a} F\left(1, \frac{H}{e^{b/a}}\right) = e^{-1/a} F\left(\frac{H}{e^{b/a}}\right). \quad (2.7)$$

Tanto a entropia como a magnetização podem ser calculadas combinando-se as equações (2.2) e (2.7), que para o caso de campo magnético nulo são dadas por:

$$S(e, H = 0) = \frac{1}{aT_c} e^{-(1+a)/a} F(0) \quad (2.8)$$

$$M(e, H = 0) = -e^{-(1+b)/a} F'(0). \quad (2.9)$$

A equação (2.9) expressa o expoente crítico da magnetização em função dos parâmetros a e b :

$$b = -\frac{(1+b)}{a}. \quad (2.10)$$

Também os expoentes críticos relacionados com o calor específico e a suscetibilidade magnética podem ser expressos em função dos parâmetros a e b . Combinando-se as equações (2.3) e (2.7) tem-se:

$$C_H(e, H = 0) \propto -\frac{1}{aT_c} \left(\frac{1}{a} + 1\right) e^{2+\frac{1}{a}} F(0) \quad (2.11)$$

$$c(e, H = 0) = -e^{\frac{2b+1}{a}} F''(0) \quad (2.12)$$

de tal forma que os expoentes críticos do calor específico e a suscetibilidade magnética a e g também podem ser calculados em função de a e b :

$$a = 2 + \frac{1}{a} \quad e \quad g = \frac{2b+1}{a} \quad (2.13)$$

A partir das equações (2.10) e (2.13) chegamos à relação de escala

$$\mathbf{a} + 2\mathbf{b} + \mathbf{g} = 2, \quad (2.14)$$

conhecida anteriormente como desigualdade de Rushbrooke ($\mathbf{a} + 2\mathbf{b} + \mathbf{g} \geq 2$).

De fato, todos os expoentes críticos podem ser expressos em termos dos parâmetros a e b , e portanto apenas dois expoentes críticos são necessários para a determinação de todos os demais. Várias relações de escala como a apresentada na equação (2.14) são conhecidas e funcionam como argumentos importantes na obtenção dos diversos expoentes críticos:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} + \mathbf{b}(1 + \mathbf{d}) &= 2 \\ \mathbf{d}\mathbf{n} + \mathbf{a} &= 2 \\ \frac{\mathbf{d}(\mathbf{d} - 1)}{\mathbf{d} + 1} + \mathbf{h} &= 2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

Mais recentemente mostrou-se que, em duas dimensões, a invariância conforme restringe ainda mais o número de expoentes críticos independentes. Na realidade, todos os índices críticos podem ser obtidos a partir do número de anomalia conforme \mathbf{c} (carga central da álgebra de Virasoro) que vale 0.5 para o modelo de Ising, 0.8 para o modelo de Potts com 3 estados e 0.7 para o Ising tricrítico. A situação, no entanto, fica bem mais difícil quando $\mathbf{c} = 1$ o que deixa indeterminadas as dimensões anômalas dos diversos operadores e portanto os expoentes críticos. Esse valor da carga central é exibido por modelos que têm expoentes críticos não universais (Ashkin-Teller, 8-vértices)¹⁹ e por outros modelos bem conhecidos (Potts com 4 estados e Ising com interações de 3 spins em uma direção). Em todos os casos, porém, está presente um operador marginal, que tem dimensão de escala igual à dimensão da rede onde está embebido⁴⁷.

2.3 Comprimento de Correlação

Variáveis físicas como a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética são propriedades macroscópicas da matéria e fazem parte da descrição termodinâmica de uma amostra. No entanto, já mencionamos anteriormente que um entendimento ainda mais profundo sobre os fenômenos críticos exige considerações em nível microscópico da matéria. Torna-se indispensável, por exemplo no caso do ferromagnetismo, observar o comportamento da função de correlação spin-spin:

$$\Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle, \quad (2.16)$$

onde \vec{r}_i é a posição do spin i e $\langle \dots \rangle$ denota média termodinâmica. Se o sistema for invariante diante de uma transformação de translação, ou seja, $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle$ e a função Γ depender apenas da distância $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, então tem-se:

$$\Gamma(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \equiv \Gamma_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2. \quad (2.17)$$

De acordo com a equação anterior, quando $r \rightarrow \infty$ a função de correlação decai a zero, ou seja, longe do ponto crítico os spins tornam-se cada vez mais descorrelacionados à medida que se aumenta a distância entre eles. Um decaimento exponencial descreve esse comportamento de acordo com a expressão:

$$G(|\vec{r}|) \approx r^{-s} \exp^{-r/\xi}, \quad (2.18)$$

onde s é uma constante e x define o comprimento de correlação do sistema. Já para temperaturas próximas da temperatura crítica o sistema desenvolve correlações de longo alcance ($x \rightarrow \infty$) e nessas condições, a equação (2.18) fica reduzida a:

$$\Gamma(|\vec{r}|) \propto \frac{1}{r^{d-2+h}}, \quad (2.19)$$

que apresenta um decaimento polinomial, onde h é um expoente crítico. Em outras palavras, fora da criticalidade, um sistema físico de muitos corpos apresenta correlações entre seus elementos, que decaem exponencialmente com a distância, limitadas por um comprimento característico de correlação. Na criticalidade, as correlações decaem de forma muito mais lenta e sem nenhum comprimento característico (perdem a escala).

A divergência do comprimento de correlação

$$x \propto e^{-n}, \quad (2.20)$$

é a fonte primária de todos os fenômenos associados à criticalidade. Nas vizinhanças da temperatura crítica, o sistema apresenta correlações de longo alcance (no caso de sistemas finitos o comprimento máximo ξ_{\max} , corresponde ao tamanho do sistema) embora as flutuações de curto alcance não possam ser descartadas.

2.4 Universalidade, scaling e grupo de renormalização

As Hamiltonianas que descrevem sistemas que exibem transição de fase podem ser bastante complicadas e geralmente envolvem muitos parâmetros. No entanto, a idéia básica de “universalidade” introduzida por Kadanoff em 1966 reside no fato de que o comportamento crítico desses sistemas não depende de todos os parâmetros envolvidos nessa Hamiltoniana. Quando o comprimento de correlação do sistema tende a infinito, os expoentes críticos e o comportamento de escala observados dependem apenas de alguns parâmetros fundamentais como a dimensão do espaço d e a dimensionalidade do parâmetro de ordemⁱ. Assim, tem-se que modelos completamente diferentes podem apresentar o mesmo tipo de comportamento críticoⁱⁱ.

Kadanoff mostrou que propriedades de escala em sistemas termodinâmicos próximos ao ponto crítico podem ser explicados considerando que as interações efetivas que governam o sistema não seriam qualitativamente alteradas caso vários graus de liberdade fossem agrupados e tomados como uma única entidade na descrição matemática. Em outras palavras, todos os detalhes das interações microscópicas são eliminados em favor das grandes flutuações observadas no ponto crítico, e portanto nada mudaria do ponto de vista qualitativo se o sistema fosse substituído por outro com menos graus de liberdade.

Pouco tempo depois, as idéias de Kadanoff tornaram-se a base para a engenhosa construção desenvolvida por Wilson e Fisher, conhecida como “grupo de renormalização”²⁰, para a compreensão dos fenômenos críticos. Uma

ⁱ O parâmetro de ordem é a grandeza que é diferente de zero na fase ordenada e igual a zero na fase desordenada.

ⁱⁱ Isso imediatamente ilustra o poder e a vantagem da aplicação de modelos simples na descrição do comportamento crítico.

vez que na criticalidade as propriedades de um dado sistema permanecem inalteradas frente a dilatações, pode-se considerar uma contração do sistema por um fator b nos comprimentos e um possível fator c na magnitude dos spins sem que a função de partição sofra qualquer alteração. Tal transformação conduz a um novo Hamiltoniano $H' = \mathfrak{R}H$, onde o operador \mathfrak{R} decresce os graus de liberdade do sistema de N para N' com o fator de escala

$$b^d = N/N' . \quad (2.21)$$

No entanto, uma vez que ambos os Hamiltonianos possuem a mesma estrutura a menos dos novos parâmetros H' e e' pode-se esperar que as funções termodinâmicas dos modelos sejam similares. Pode-se, portanto, escrever a seguinte relação de escala para a energia livre por spin:

$$F(e', H') = b^d F(e, H) . \quad (2.22)$$

Aplicando-se a hipótese de similaridade também para a temperatura e o campo magnético, tem-se que:

$$e' = b^{j_1} e \quad e \quad H' = b^{j_2} H \quad (2.23)$$

onde j_1 e j_2 são dois expoentes críticos. A partir daí pode-se definir a relação de escala:

$$F(b^{j_1} e, b^{j_2} H) = b^d F(e, H) . \quad (2.24)$$

Após seguidas aplicações do grupo de renormalização, eliminam-se os aspectos irrelevantes do Hamiltoniano inicial e eventualmente atinge-se um ponto fixo H^* da transformação, tal que:

$$H^* = \mathfrak{R}H^* . \quad (2.25)$$

Lineariando-se o Hamiltoniano H em torno de H^* e aplicando-se n vezes a transformação do grupo de renormalização tem-se:

$$H^{(n)} = H^* + \sum_j h_j b^{nI_j} Q_j , \quad (2.26)$$

onde $\{Q_j\}$ é um conjunto de operadores de base e $\{h_j\}$ é o conjunto de valores que parametriza a Hamiltoniano original. As sucessivas iterações do grupo de renormalização definem linhas de fluxo no espaço dos parâmetros e os valores de I_j definem a importância do operador Q_j no Hamiltoniano. Quando $I_j > 0$ o operador Q_j é chamado de operador relevante e é responsável por conduzir o Hamiltoniano para longe do ponto fixo. Por outro lado, quando $I_j < 0$, após repetidas iterações do grupo de renormalização, o sistema move-se em direção ao ponto crítico independentemente da sua condição inicial. Nesse caso o operador Q_j é chamado de operador irrelevante.

Se I_j for igual a zero então o operador Q_j é dito marginal e termos de ordem superior tornam-se importantes na expressão (2.26). Quando um operador marginal está presente no Hamiltoniano, os expoentes críticos podem variar continuamente em função do acoplamento.

2.5 O Método Monte Carlo

Depois que Metropolis e seus colaboradores²⁵ publicaram seu trabalho sobre discos duros em duas dimensões, o método de simulação conhecido como Monte Carlo ganhou uma importância ímpar na investigação de sistemas em diversos campos da física, particularmente na física estatística.

A partir de uma configuração inicial o método gera recursivamente novas configurações de acordo com uma dinâmica pré-estabelecida que, no caso de sistemas em equilíbrio, conduz à distribuição de Gibbs. Em outras palavras, gera-se uma cadeia de Markov através do espaço de fases tal que a frequência em que uma dada configuração do sistema é amostrada corresponde à adequada probabilidade (dada pelo fator de Boltzmann no caso do ensemble canônico). A seqüência de estados construída por esse processo, segue uma trajetória no espaço das configurações. O tempo nesse caso refere-se ao “tempo de Monte Carlo”, o que significa o tempo necessário para que na média cada spin seja visitado e eventualmente atualizado uma vez. Pode-se escrever a equação mestra para $P_n(t)$ que é a probabilidade de o sistema ser encontrado no estado n num dado instante de tempo t como:

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_{n \neq m} [P_m(t)W_{m \rightarrow n} - P_n(t)W_{n \rightarrow m}] , \quad (2.27)$$

onde $W_{n \rightarrow m}$ é a taxa de transição do estado n para o estado m ($n \rightarrow m$). No equilíbrio $\partial P_n(t)/\partial t = 0$, e para isso é suficiente (mas não necessário) que

$$P_n(t)W_{n \rightarrow m} = P_m(t)W_{m \rightarrow n} . \quad (2.28)$$

Qualquer taxa de transição que satisfaça o balanço detalhado, expresso na equação (2.28), pode ser considerada em uma simulação de Monte Carlo. É por isso que diferentes dinâmicas (Metropolis, banho térmico, Glauber) têm sido amplamente empregadas em mecânica estatística.

Os erros estatísticos são inerentes às simulações, uma vez que a simulação trata apenas um número finito e pequeno de amostras. Além disso, as transições de fase só ocorrem em sistemas infinitos, o que significa que há necessidade de uma teoria que transfira as informações dos sistemas finitos para o limite termodinâmico. Na verdade, sistemas finitos apresentam reminiscências da transição de fase e estudos sistemáticos em função do tamanho do sistema podem levar a resultados para a transição de fase que se deseja estudar.

Na década de 70, Fisher⁴⁸ e colaboradores desenvolveram uma teoria de escala para sistemas finitos. Tal teoria é muito útil para guiar a extrapolação para o limite termodinâmico dos resultados obtidos por simulações de Monte Carlo ou através da diagonalização da matriz de transferência⁴⁹ de sistemas finitos. De acordo com essa teoria, a energia livre em função das variáveis T e H de um sistema finito é dada pela função homogênea:

$$F(L, T) = L^{-(2-a)/n} F(eL^{1/n}), \quad (2.29)$$

onde a e n e F é uma função universal que envolve apenas a combinação $eL^{1/n}$ com $e = (T - T_c)/T_c$. A escolha para a variável de escala é motivada pela observação de que a divergência do comprimento de correlação, à medida que o sistema aproxima-se da transição de fase, é limitada pelo tamanho da rede L . Derivando-se apropriadamente a energia livre tem-se a forma de escala para várias funções termodinâmicas:

$$\begin{aligned} M &= L^{-b/n} M(eL^{1/n}) \\ c &= L^{g/n} c(eL^{1/n}) \\ C &= L^{a/n} C(eL^{1/n}) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Esse é um resultado importante, porque permite obter os expoentes críticos a partir de simulações em sistemas finitos, realizadas na temperatura crítica ($\varepsilon = 0$).

2.6 Dinâmica de Tempos Curtos

Durante muito tempo acreditou-se não haver um comportamento universal nos sistemas críticos dinâmicos não termalizados, ou seja, quando as configurações do sistema ainda não obedecem à distribuição de Boltzmann. E por isso os expoentes críticos eram calculados numericamente somente a partir da geração de configurações no equilíbrio. O problema é que, nas vizinhanças da temperatura crítica, as correlações são muito intensas o que torna cada vez mais oneroso obter as configurações descorrelacionadas para fazer as médias termodinâmicas. Esse foi um dos principais motivos para o interesse pelos trabalhos de Huse³⁵ e Janssen *et al.*³⁴ que descobriram um comportamento universal muito antes que o sistema pudesse atingir o equilíbrio. Tudo se passa como se o tempo funcionasse como o comprimento, na teoria de escala para sistemas finitos. Esse novo enfoque, que tem sido chamado na literatura de simulação em tempos curtos, abriu um leque de alternativas antes não disponíveis para o estudo das propriedades dinâmicas. Um exemplo é a determinação do expoente crítico dinâmico z , tão difícil de obter por outros métodos que, no caso do modelo de Potts com 4 estados, tem estimativas publicadas⁵⁰ variando entre 2 e 4. Entretanto, as informações contidas nos primeiros passos das simulações têm revelado outras particularidades. Esse é o caso do expoente θ , associado ao crescimento anômalo (mas polinomial) da magnetização remanescente, no caso de sistemas bruscamente resfriados para a temperatura crítica.

Pode-se dizer que o sistema sofre um tipo de “efeito da magnetização inicial finita” e por isso mesmo os primeiros trabalhos nessa área julgavam que a preparação das amostras era indispensável para a observação desse fenômeno. Mais tarde, Tomé e de Oliveira⁵¹ mostraram que o efeito de memória pode ser acompanhado estudando-se a correlação temporal da magnetização das amostras, o que tornou a obtenção numérica do expoente associado a esse fenômeno menos custosa e mais eficiente.

Esse crescimento anômalo da magnetização é descrito por uma lei de potências universal dada por:

$$M(t) \propto m_0 t^q, \quad (2.31)$$

onde m_0 é a magnetização inicial e q é o novo expoente crítico dinâmico. Depois que a magnetização atinge o seu valor máximo ela passa a decrescer de acordo com o conhecido comportamento universal do regime de tempos longos. Primeiramente um decaimento de leis de potências,

$$M(t) \propto t^{-b/nz}, \quad (2.32)$$

onde b e n são expoentes estáticos e z é o expoente crítico dinâmico; e em seguida um decaimento exponencial:

$$M(t) \propto \exp(-t/x_t), \quad (2.33)$$

onde x_t é o comprimento de correlação temporal. A figura abaixo ilustra essa evolução temporal da magnetização.

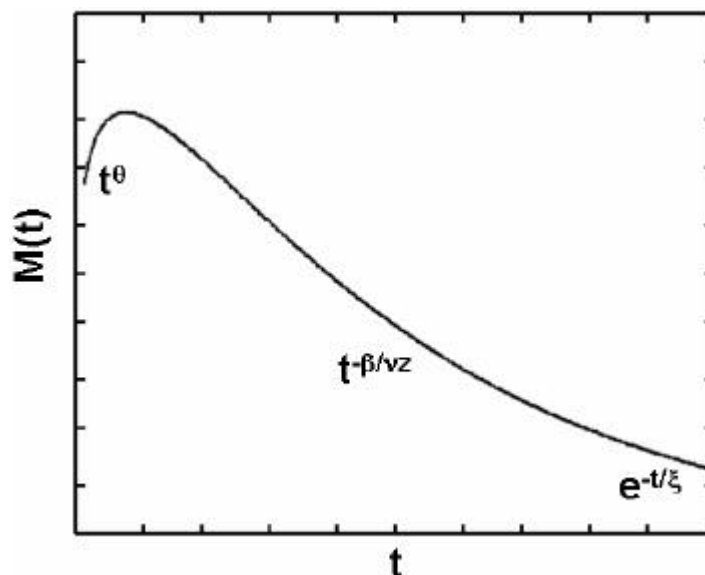


Fig. 2.1: Comportamento qualitativo da evolução temporal da magnetização partindo de um valor não nulo na criticalidade.

Sabe-se que sistemas dinâmicos em regime de tempos longos, ou seja, sistemas em equilíbrio termodinâmico, apresentam invariância de escala na temperatura crítica. Para sistemas magnéticos, como o modelo de Ising, a seguinte forma de escala dinâmica é conhecida para uma dada quantidade física O :

$$O(t, \mathbf{e}, L) = b^{-x} O(b^{-z}t, b^{1/n}\mathbf{e}, b^{-1}L), \quad (2.34)$$

onde t é o tempo, \mathbf{e} é a temperatura reduzida, L é o tamanho da rede do sistema considerado e b é o fator de escala. Os expoentes n e x são expoentes críticos estáticos e z é o expoente dinâmico, que caracteriza o comportamento “slowing down” do sistema próximo à temperatura crítica, relacionando as correlações temporal e espacial de acordo com a expressão:

$$\chi_t \propto \chi^z. \quad (2.35)$$

É importante ressaltar que essa relação de escala dinâmica (2.34), embora válida em regimes de tempos longos, apresenta-se independente das condições iniciais e por isso não é capaz de descrever o comportamento dos sistemas longe do equilíbrio térmico.

Uma relação de escala generalizada para o regime de tempos curtos foi derivada por Janssen *et al* em uma análise do grupo de renormalização até segunda ordem em ε para sistemas de tamanho finito. Ela se escreve:

$$M^{(k)}(t, \mathbf{e}, L, m_0) = b^{-kb/n} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/n}\mathbf{e}, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (2.36)$$

onde $M^{(k)}$ refere-se ao k ésimo momento da magnetização, b e n são expoentes estáticos, z é o expoente dinâmico, m_0 é a magnetização inicial e x_0 é a dimensão anômala da magnetização inicial, capaz de descrever a dependência do comportamento de escala com as condições iniciais do sistema. De acordo com a expressão (2.36) o operador m_0 possui uma dimensão de escala x_0 diferente da dimensão da magnetização no equilíbrio,

que é dada por $x_s = \mathbf{b}/\mathbf{n}$. De fato, x_0 é um novo expoente crítico *independente* que não pode ser expresso em termos das relações de escala entre os expoentes estáticos e o expoente dinâmico z , mas está diretamente relacionado com o expoente \mathbf{q} da seguinte forma:

$$x_0 = \mathbf{b}/\mathbf{n} + z\mathbf{q} . \quad (2.37)$$

Por outro lado, a análise do grupo de renormalização apresenta não somente $m_0 = 0$ como ponto fixo da transformação, mas também $m_0 = 1$. Ambos os pontos revelam comportamentos de escala, e particularmente no caso $m_0 = 1$, quando $e = 0$ e $L \rightarrow \infty$ recupera-se o comportamento descrito na equação (2.32).

Com o crescente conhecimento adquirido sobre os novos expoentes críticos dinâmicos, é possível afirmar que o estudo dinâmico em tempos curtos tem ampliado o entendimento do fenômeno crítico, além de proporcionar uma nova alternativa para o cálculo do expoente crítico dinâmico⁵² z e também para os outros expoentes críticos estáticos⁵³.

A estimativa numérica do expoente z a partir do estudo dinâmico em tempos curtos^{54,55} pode ser feita investigando-se o comportamento do quarto cumulante de Binder dependente do tempo, na temperatura crítica, com $m_0 = 0$:

$$U(t, \mathbf{e} = 0, L) = 1 - \frac{M^{(4)}}{3(M^{(2)})^2} . \quad (2.38)$$

As equações (2.36) e (2.38) fornecem a seguinte relação de escala para sistemas finitos na temperatura crítica:

$$U(t, L) = U(b^{-z}t, b^{-1}L) \quad (2.39)$$

e o expoente z é facilmente obtido a partir do ajuste de escala, ou seja, ajustando-se o fator de escala temporal b^z de modo que os dois lados da

expressão (2.39) colapsem. Em outras palavras, o cumulante pode ser escrito por uma função de escala do tipo:

$$U(t, L) = f(t/L^z). \quad (2.40)$$

Da mesma forma pode-se obter outras duas funções de escala:

$$M^{(2)}(t, 0, L) = L^{-2b/n} g^{(2)}(t/L^z) \quad (2.41)$$

$$\partial_e \ln M^{(2)}(t, \mathbf{e}, L)|_{\mathbf{e}=0} = L^{1/n} h(t/L^z) \quad (2.42)$$

e uma vez conhecido o valor de z pode-se obter b/n e n (re)escalando-se respectivamente as funções (2.41) e (2.42) para diferentes tamanhos de rede.

O estudo do comportamento do segundo momento da magnetização também é uma ferramenta bastante importante na investigação de sistemas em regime de tempos curtos. Na temperatura crítica tem-se que:

$$M^{(2)}(t, L) \propto L^{-d}, \quad (2.43)$$

onde d é dimensão do sistema, e a partir da relação de escala para sistemas finitos deduz-se que essa grandeza exhibe um comportamento em lei de potências dado pela expressão:

$$M^{(2)}(t) \propto t^{(d-2b/n)/z}. \quad (2.44)$$

Nesse caso, quando o valor de z é conhecido não são necessários dois tamanhos de rede diferentes e a obtenção dos expoentes estáticos é feita diretamente pela inclinação da curva $M^{(2)}(t)$ em função do tempo ($\log M^{(2)} \times \log t$).

O cálculo dinâmico dos expoentes estáticos também pode ser feito no estado ordenado ($m_0 = 1$), caso em que as flutuações são bem menores. A forma de escala para esse caso é simplesmente:

$$M^{(k)}(t, \mathbf{e}, L) = b^{-kb/n} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/n} \mathbf{e}, b^{-1}L) \quad (2.45)$$

e na temperatura crítica quando $L \rightarrow \infty$ o decaimento em leis de potência da magnetização de acordo com a equação (2.32) já é observado mesmo longe do equilíbrio. Também a derivada da equação (2.45) apresenta uma lei de potências que permite estimar a razão $1/n z$:

$$\partial_{\mathbf{e}} \ln M(t, \mathbf{e})|_{\mathbf{e}=0} = t^{1/(nz)} \partial_{\mathbf{e}'} \ln F(\mathbf{e}')|_{\mathbf{e}'=0} . \quad (2.46)$$

Numericamente, a evolução temporal de $M(t)$ e $M^{(2)}(t)$ é calculada da seguinte maneira:

$$M(t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i(t) \right\rangle \quad (2.47)$$

$$M^{(2)}(t) = \frac{1}{N^2} \left\langle \left(\sum_i S_i \right)^2 \right\rangle \quad (2.48)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre amostras e não sobre estados de Gibbs. Isso é feito evoluindo uma amostra por vez, armazenando em vetores convenientes a contribuição para cada variável que está sendo mediada.

Ao longo da dissertação, utilizaremos outras formas de obtenção de z e θ . Não vale a pena, porém, chegar a esse nível de detalhe em um capítulo que só tem a pretensão de situar o leitor no contexto em que o trabalho se desenvolve.