UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

COMPORTAMENTO CRÍTICO DINÂMICO DO ALGORITMO DE WOLFF NO MODELO DE ISING COM CORRELAÇÃO DE SÍTIOS E LIGAÇÕES

Paulo Roberto de Araújo Campos

USP / IFQSC / SBI
8-2-001194

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Mestre em Ciências (Física Básica)

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody*

SÃO CARLOS

1998

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Campos, Paulo Roberto de Araújo
Comportamento Crítico Dinâmico do Algoritmo de Wolff no Modelo de Ising com Correlação de Sítios e Ligações/ Paulo Roberto de Araújo Campos. - - São Carlos, 1998
67 p.

Dissertação (Mestrado) - - Instituto de Física de São Carlos, 1998.

Orientador: Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Mecânica Estatística. 2. Algoritmos.
I. Título.

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 274-3444
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE PAULO ROBERTO DE ARAÚJO CAMPOS APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 27 DE FEVEREIRO DE 1998.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody/IFSC-USP

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz/UFSCar

Prof. Dr. Carlos Eugênio Imbassahy Carneiro/IF-USP

Resumo

Estudamos o comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff no modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações (modelo SBC). Nosso objetivo principal foi estudar a performance deste algoritmo em um sistema onde além da desordem devido à presença de impurezas não-magnéticas, houvesse mais um parâmetro presente, a correlação espacial. Além disto foi possível obter o diagrama de fases para o modelo, o qual posibilita entendermos um pouco o efeito da desordem e da correlação no sistema.

Verificamos que o diagrama de fases por nós obtido está em boa concordância com os dados experimentais obtidos com o composto magnético $KNi_pMg_{1-p}F_3$, o qual foi a motivação para o modelo SBC. O estudo do comportamento dinâmico nos possibilitou entender um pouco mais como o algoritmo de Wolff se comporta quando submetido a sistemas mais complexos, como é o caso do modelo em estudo. verificamos uma melhor performance deste algoritmo à medida em que tanto a diluição quanto a correlação é aumentada. Esse comportamento é oposto àquele verificado nos algoritmos locais. Essa melhor performance do algoritmo de Wolff quando submetido a tais sistemas é bastante positivo, pois isto possibilita obtermos medidas de quantidades físicas de interesse de forma mais precisa, pois há uma redução drástica da correlação estatística entre configurações produzidas por esta dinâmica.

Abstract

We extend the Wolff Algorithm to include correlated spin interactions in diluted magnetic systems. This algorithm is applied to study the site-bond-correlated Ising model on a two-dimensional square lattice. We use a finite-size scaling procedure to obtain the phase diagram in the temperature-concentration space. Our results are in excellent agreement with the experimental data for the $KNi_pMg_{1-p}F_3$ compound. We also present the critical dynamical behavior of the Wolff algorithm for this system. We have verified that the autocorrelation time diminishes in the presence of dilution and correlation, showing that the Wolff algorithm performs even better in such situations. This behavior is completely different from those exhibited by the single spin-flips algorithms.

ESTE TRABALHO FOI FINANCIADO PELA FUNDAÇÃO DE AMPARO À PESQUISA DO ESTADO DE SÃO PAULO (FAPESP).

À minha esposa Viviane, minha mãe Jane e ao meu irmão Marcos.

Agradecimentos

À Deus, por todas as oportunidades que me foram dadas.

À minha esposa, por todo amor, carinho e dedicação. Por fazer de minha existência uma tarefa bem mais agradável, propiciando os momentos mais felizes da minha vida. Por tudo que compartilhamos a cada dia.

À minha mãe, a quem devo acima de tudo os seus ensinamentos. Agradeço também por todo o amor, carinho e apoio que nunca me faltaram. Por todos os esforços realizados visando sempre a minha formação profissional.

Ao meu irmão Marcos, pelo amor e amizade. Por todos os momentos que já compartilhamos. Agradeço também a sua colaboração na minha formação.

Ao Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody, pela orientação e amizade durante o decorrer do trabalho.

Ao Prof. Dr. Francisco G. Brady Moreira, por todo o seu apoio e incentivo desde o ínicio de minha formação acadêmica. Agradeço também pela sua sincera amizade.

Aos meus amigos Nazareno Getter, Reginaldo Zara, Carlos Alberto, Diógenes Bosquete, Ana Tereza, Luís Ramos, Eduardo Azevedo e João Vítor pelos momentos de descontração que fazem do nosso ambiente de trabalho algo bem mais agradável.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), por todo o apoio financeiro.

T.C-USP INFORMAÇÃO

E a todos os colegas, professores e funcionários do IFSC-USP, que de uma forma ou outra, colaboraram com a sua amizade.

Índice

1 Introdução **4**

2 Algoritmos de aglomerados **9**

2.1 Definição das quantidades estatisticamente relevantes 10

2.2 Algoritmo de Metropolis 12

2.3 Algoritmo de Swendsen-Wang 13

2.4 Algoritmo de Wolff 20

2.4.1 O Tempo de autocorrelação e o expoente crítico dinâmico 25

2.5 Comparação entre as performances dos algoritmos de Swendsen-Wang e Wolff 29

3 O modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações **32**

3.1 Introdução 32

3.2 Descrição do modelo SBC 33

3.2.1 Modelo AND 36

3.3 Resultados 38

3.3.1 Mapeamento de Fortuin-Kasteleyn para o modelo SBC 39

3.3.2 Diagrama de Fases do modelo SBC 41

3.4 Comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff no modelo SBC 44

3.4.1 Resultados 47

4 Conclusões e perspectivas **57**

Lista de Figuras

2-1 Tamanho médio dos aglomerados de Wolff como uma fração dos sítios da rede, medidos com uma função de $K = \frac{J}{K_B T}$. 24

3-1 A constante de interação entre os átomos magnéticos (pretos) situados nos sítios 0 e 1, não é modificada devido à presença de átomos magnéticos nos sítios 3 e 5. Entretanto, o mesmo não se aplica para a interação entre 3 e 0, devido à presença de um átomo não-magnético em 7. 35

3-2 O aglomerado a esquerda da figura é quebrado devido à presença de impurezas ao longo da linha conectando os átomos magnéticos na região do contorno tracejado. O mesmo não acontece com o aglomerado da esquerda. 37

3-3 Comportamento típico apresentado pela susceptibilidade magnética χ na região de criticalidade. 43

3-4 Diagrama de fase do modelo SBC para vários valores de α. As concentrações críticas são $p_c = 0.7405$ para $\alpha = 0$ e $p_c = 0.5927$ para $0 < \alpha \leq 1$. As linhas tracejadas são apenas um guia para os olhos. 45

3-5 Comportamento da função de autocorrelação para vários valores d

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

3-7 Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para vários valores de α e $C = 0.80$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$. Os valores obtidos para z_{passos} são em ordem crescente de α iguais a $0.26(1), 0.34(1), 0.38(1)$ e $0.40(1)$. 53

3-8 Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para vários valores de α e $C = 0.70$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$. Os valores obtidos para z_{passos} em ordem crescente de α são iguais a $0.10(2), 0.11(1), 0.33(1)$ e $0.38(1)$. 54

3-9 Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para alguns valores de α e $C = 0.60$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$. 55

3-10 Gráficos do tempo de autocorrelação τ_w versus L para $C = 0.70$ e para alguns valores de $\alpha = 0.3, 0.5$ e 1.0. Os valores de z são $0.07(1), 0.11(1)$ e $0.12(1)$ respectivamente. 56

Capítulo 1

Introdução

Quando estamos interessados em estudar as propriedades exibidas por um determinado sistema físico por meio de simulações computacionais, precisamos de um certo número de configurações que nos possibilitem estimarmos as quantidades físicas de interesse (cálculo do valor médio). Essa sequência de configurações, deve ser produzida por algoritmos que forneçam a estes sistemas uma determinada dinâmica de evolução, e que depois de um longo período de tempo (um número grande de configurações) tenhamos uma distribuição de estados que satisfaça a distribuição de probabilidade de Gibbs.

Uma coisa importante sobre essa regra é que ela deve depender apenas do estado presente do sistema, e não deve requerer qualquer conhecimento de estados anteriores. Podemos expressar essas regras na forma de um conjunto de probabilidades; onde para cada par possível de estados α e $\alpha^{'}$, existe uma probabilidade de transição associada $P(\alpha \rightarrow \alpha^{'})$ entre esses dois estados. A definição dessas probabilidades satisfazem uma regra de soma que expressa o fato que em cada passo o sistema deve evoluir para algum lugar:

$$\sum_{\alpha^{'}} P(\alpha \rightarrow \alpha^{'}) = 1. \tag{1.1}$$

Como já salientamos, estamos interessados em produzir uma sequência de estados gerados

por uma determinada regra de evolução, em que a frequência de ocorrência de cada estado α seja proporcional a sua probabilidade de Gibbs associada p_α. Para obtermos isto, é necessário que essas probabilidades de transição satisfaçam duas condições:

i) De um dado ponto inicial, deve ser possível ao sistema evoluir para *qualquer* outra configuração por meio da aplicação seguida da regra de evolução. Essa condição é denominada de ergodicidade.

ii)As probabilidades de transição devem também satisfazer o princípio de balanço detalhado:

$$p_\alpha P(\alpha \rightarrow \alpha') = p_{\alpha'} P(\alpha' \rightarrow \alpha) \tag{1.2}$$

Surge então um problema: essas dinâmicas de evolução apresentam uma dependência estatística entre as configurações sucessivas por elas produzidas. Esse problema é ainda mais agravado quando estudamos o sistema na região crítica (região onde ocorre a transição de fase), pois essa correlação entre configurações torna-se mais forte. Esse aumento na correlação estatística nas configurações é caracterizado pela divergência do tempo de autocorrelação τ no ponto crítico. O tempo de autocorrelação é uma estimativa do intervalo de tempo necessário para que uma dada dinâmica produza estados estatisticamente independentes. Empiricamente é encontrado que, na região de criticalidade, esse tempo exibe um comportamento de escala da forma $\tau \sim \xi^z$, onde ξ é o comprimento de correlação espacial e z é o expoente crítico dinâmico. Para os sistemas finitos utilizados em simulações computacionais a correlação ξ não diverge, mas aumenta com o tamanho linear do sistema $\xi \sim L$. Para os algoritmos locais (Metropolis, Glauber, etc.) $z \simeq 2$ e o tempo de autocorrelação τ cresce rapidamente com o tamanho linear do sistema. Se, no cálculo de valores médios das grandezas físicas, utilizarmos configurações que estão separadas por um intervalo menor que τ os erros estatísticos serão muito grandes, já que estas configurações não são estatisticamente independentes. Os fatos acima descritos são bem conhecidos em transições de fase de segunda ordem e caracterizam o fenômeno conhecido como *"retardamento crítico"(critical slowing down)*.

Em 1987, Swendsen e Wang [1] propuseram um novo algoritmo que se desenvolve através da construção de aglomerados. Se baseia no mapeamento de uma configuração magnética para uma configuração geométrica (um problema de percolação de ligações correlacionada) proposto por Fortuin e Kasteleyn. Neste mapeamento, spins de mesmo estado têm uma ligação ativada com uma probabilidade $p = 1 - e^{-K}$. Estes sítios conectados formam, então, aglomerados nos quais todos os spins se encontram no mesmo estado. O estado de spin desse aglomerado, na próxima etapa, é sorteado aleatoriamente com igual probabilidade para os estados possíveis do sistema. Esse algoritmo, conhecido hoje como o algoritmo de Swendsen-Wang, possibilitou reduzir enormemente o fenômeno de retardamento crítico, quebrando a universalidade dinâmica exibida pelos algoritmos locais. Em 1989 surgiu um nova variação do método proposto por Swendsen-Wang. Essa nova dinâmica hoje é conhecida por algoritmo de Wolff [2]. Wolff sugeriu um algoritmo no qual, em cada etapa, apenas um único aglomerado é construído (a partir de um sítio aleatoriamente escolhido na rede). Esse aglomerado é construído obedecendo a mesma regra de ativação de ligações utilizada no algoritmo de Swendsen-Wang. Após a construção desse aglomerado, o conjunto de sítios pertencentes ao aglomerado muda *obrigatoriamente* para um outro estado. Wolff teve o grande mérito de generalizar a dinâmica para sistemas de spins contínuos e simetria O(n). Esse algoritmo se mostrou ainda mais eficiente que o algoritmo SW para $d > 2$, pois além de reduzir ainda mais o valor do expoente crítico dinâmico para alguns sistemas, seu custo computacional é bastante reduzido. Enquanto nas outras dinâmicas toda a rede deve ser consultada, no algoritmo de Wolff o custo é proporcional ao tamanho do aglomerado construído. Uma das razões apontadas pela melhor performance do algoritmo de Wolff, é que o tamanho médio dos aglomerados construídos é significantemente maior que na de Swendsen-Wang [23].

Estas dinâmicas foram inicialmente aplicadas a sistemas menos complexos, tais como o modelo de Ising, Potts e spins contínuos e simetria O(n). Porém depois foram generalizados a outros modelos, tais como Potts antiferromagnético [3], vidros de spin [4, 5],

Potts com ligações aleatórias[6], etc.

Em quase todos os sistemas acima citados, a performance dos algoritmos de aglomerados é sempre bem superior ao exibido pelos algoritmos locais. Além disso, um trabalho desenvolvido por Hennecke et al. [7] apresentou resultados bastante animadores a respeito dessas dinâmicas em sistemas diluídos. Eles estudaram o comportamento crítico dinâmico do modelo de Ising diluído em três dimensões, e constataram uma melhora na performance dessas dinâmicas de aglomerados a medida em que a concentração de átomos magnéticos era reduzida. Ou seja, observaram uma redução do tempo de autocorrelação a medida em que o sistema tornava-se mais diluído. Esse comportamento é exatamente o oposto àquele exibido pelos algoritmos locais.

Em nosso trabalho, generalizamos a aplicação destas dinâmicas ao modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações. Este modelo foi criado na tentativa de explicar as diferenças existentes nas propriedades termodinâmicas do $KNi_pMg_{1-p}F_3$ e do composto isoestrutural $KMn_pMg_{1-p}F_3$. Verificou-se que no $KNi_pMg_{1-p}F_3$ a presença de impurezas tem efeitos adicionais, não previstos pelo simples modelo de diluição. Neste sistema a presença de uma impureza na vizinhança de um dado par de átomos magnéticos pode alterar a interação deste par, ou até mesmo suprimi-la no limite de máxima correlação.

Esse modelo tem sido extensivamente estudados por meio de diversas técnicas, tais como grupo de renormalização[12] e teoria de campo médio [43, 9, 11]. Porém o estudo do modelo através do método de Monte Carlo foi bastante tímido, já que tanto a diluição quanto a correlação introduzida no modelo conspiram no enfraquecimento da performance dos algoritmos locais. Estudamos o modelo através da generalização dos algoritmos de aglomerados. Analisamos as suas propriedades termodinâmicas, obtendo o diagrama de fases.

Nosso diagrama de fases está em ótima concordância com os resultados experimentais obtidos por meio de RMN (Ressonância Magnética Nuclear), e com os resultados teóricos apresentados pelas técnicas já citadas.

Quanto a análise do comportamento crítico dinâmico, constatamos uma melhora na performance apresentada pelo algoritmo de Wolff à medida em que tanto a diluição quanto a correlação eram aumentadas. Esse comportamento foi verificado para todos os valores de concentração e correlação simulados. Por meio da aplicação do algoritmo de Wolff foi possível simular o modelo mesmo no regime de concentrações próximas aos limiares de percolação apresentados pelo modelo. A redução do tempo de autocorrelação com o aumento da diluição vem a confirmar o mesmo cenário apresentado por Hennecke et al.; porém a diminuição do tempo de autocorrelação com o aumento da correlação é uma nova constatação.

Estimamos também os valores apresentados pelo expoente crítico dinâmico para os diversos valores de concentração e correlação. Todos os valores se situam num intervalo de valores compreendidos entre -0.04 e 0.12. Esses valores indicam uma quase que completa eliminação da manifestação do fenômeno de retardamento crítico. E demonstram a eficiência da dinâmica em sistemas onde a presença de outros efeitos tornava quase que impossível a utilização da ferramenta da simulação.

A dissertação está organizada da seguinte forma:

No capítulo 2 descrevemos os algoritmos de Metropolis, Swendsen-Wang e de Wolff. Nesse mesmo capítulo discutimos um pouco sobre a evolução histórica acerca das teorias relativas ao mapeamento de configurações magnéticas para configurações geométricas, e também definimos as quantidades físicas de interesse para o trabalho.

No capítulo 3 fazemos uma explanação acerca do modelo de Ising com correlação de sítios e ligações, e também indicando e realizando comparações com alguns trabalhos divulgados na literatura científica. Apresentamos também o diagrama de fases por nós obtido e o mapeamento de Fortuin-Kasteleyn para o modelo. E na última seção apresentamos nossos resultados considerando o comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff quando aplicado ao modelo SBC.

E por fim, no capítulo 4 estão as nossas conclusões e perspectivas futuras de trabalho.

Capítulo 2

Algoritmos de aglomerados

Neste capítulo descreveremos os algoritmos de Metropolis, Swendsen-Wang e Wolff. O algoritmo de Metropolis é baseado em atualizações locais de spins e tem um contexto histórico bastante importante nas simulações computacionais. Já os algoritmos de Swendsen-Wang e Wolff foram os precursores nesta nova linha de algoritmos baseados na construção de aglomerados, e que motivaram a criação de vários outros. Por esta razão também possuem uma relevância histórica e apontam uma nova tendência nas simulações de sistemas magnéticos. Apresentamos também um pouco da evolução histórica acerca do desenvolvimento das teorias em que estas dinâmicas se baseiam. Faremos comparações sobre a performance entre elas, apresentando resultados já divulgados na literatura.

Antes de comparar a performance entre as dinâmicas aqui apresentadas, faz-se necessária a definição de algumas quantidades físicas estatisticamente relevantes no estudo do comportamento dinâmico dos algoritmos. Essas quantidades que serão aqui definidas são utilizadas constantemente no restante da dissertação.

2.1 Definição das quantidades estatisticamente relevantes

Quando estudamos o fenômeno de retardamento crítico, estamos analisando a correlação estatística existente entre configurações produzidas por uma determinada dinâmica. Esta análise nos permite saber de que forma devemos então avaliar uma sequência de estados, de modo que, a dependência entre configurações não introduza erros graves em nossas medidas.

Uma maneira de medirmos a dependência estatística entre configurações é calcularmos a função de autocorrelação normalizada $\rho(t)$, definida por

$$\rho(t) = \frac{\langle (O_j - \langle O \rangle)(O_{j+t} - \langle O \rangle) \rangle}{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2} \tag{2.1}$$

onde O_j é o valor de um dado observável na configuração j (Podendo ser este observável a energia, magnetização, susceptibilidade, etc). As médias são calculadas no espaço de configurações, isto é,

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i$$

onde N é o número de configurações geradas. A quantidade estatisticamente relevante é o tempo de autocorrelação integrado τ_{int} definido por

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{\infty} \rho(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho(t) \tag{2.2}$$

onde τ_{int} é o tempo necessário que devemos esperar para que a dinâmica forneça novamente uma configuração estatisticamente independente. Este tempo deve ser usado para definir o número equivalente de observações independentes no espaço de configurações e assim obter a variância e as barras de erro corretos para o valor médio do observável. Como nosso espaço de configurações não é infinito, e também para evitar maiores erros,

desde que a estatística não é boa para grandes valores de t, a soma (2.2) deve ser truncada em algum t_{max}. Wolff[32] desenvolveu algumas aproximações que permitem determinar τ_{int} de forma que para pequenos valores de t_{max} a soma já converge.

Truncando a soma no termo t_{max}, usamos o estimador

$$\tau(t_{\max}) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{t_{\max}-1} \rho(t) + R(t_{\max}) \tag{2.3}$$

com

$$R(t_{\max}) = \rho(t_{\max}) \frac{1}{1 - K(t_{\max})}, \qquad K(t_{\max}) = \frac{\rho(t_{\max})}{\rho(t_{\max} - 1)} \tag{2.4}$$

Nesta aproximação, o termo $R(t_{\max})$ é a soma de uma progressão geométrica infinita de razão $K(t_{\max})$, onde o primeiro termo desta progressão é $\rho(t_{\max})$.

Postulando uma forma multiexponencial para $\rho(t)$

$$\rho(t) = \sum_i a_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} \tag{2.5}$$

podemos também definir o tempo de autocorrelação exponencial $\tau_{\exp}$. Acredita-se que há apenas uma única escala de tempo relevante na dinâmica crítica, exatamente como há uma única escala de comprimento, o comprimento de correlação, no comportamento estático. Portanto o comportamento da função de autocorrelação para grandes valores de t será determinado pelo máximo valor de τ_i, $\tau_{\exp} = \max[\tau_i]$. Isto define o tempo de autocorrelação exponencial. Se a aproximação para $\rho(t)$ por uma única exponencial é válida, então ambas as definições para o tempo de autocorrelação fornecem o mesmo resultado, $\tau_{int} \approx \tau_{\exp}$.

Quando nos aproximamos da temperatura crítica, o tempo de autocorrelação passa a exibir um comportamento de escala da forma $\tau \sim \xi^z$, onde z é o expoente crítico dinâmico e ξ é o comprimento de correlação espacial. Para os sistemas finitos utilizados em simulações computacionais, ξ não diverge, mas escala com o tamanho linear do sistema, $\xi \sim L$. Portanto, na região de criticalidade, temos que $\tau \sim L^z$. Portanto de um gráfico

log-log de τ versus L, podemos determinar o valor do expoente. Para algoritmos locais $z \approx 2$[16].

Existem também algumas outras propostas para o comportamento de τ_{int} com o tamanho do sistema, como por exemplo, $\tau_{int} \propto \ln L$ [17]. Para sistemas que apresentam transição de fase de primeira ordem foi sugerido que o tempo de autocorrelação cresce com $\tau \propto L^a e^{bL}$ [18, 6]. Já para sistemas um pouco mais complexos, como no caso de sistemas diluídos em duas dimensões, existem algumas propostas sugerindo correções de escala para o comportamento de τ_{int} em regiões próximas à concentração crítica[19, 20, 21].

2.2 Algoritmo de Metropolis

Esse algoritmo foi inventado por Metropolis et al. em 1953[22]. O algoritmo de Metropolis é certamente o mais importante e mais usado algoritmo para o processo de Markov, além de possuir uma relevância histórica no processo de divulgação da simulação computacional na Física. Descreveremos agora o algoritmo.

O primeiro passo da dinâmica é gerar uma nova configuração α' a partir de uma configuração inicial α. Tomando como exemplo o modelo de Ising, essa mudança é realizada por meio da inversão do estado de um único spin, que pode ser escolhido aleatoriamente na rede. Calculamos então a diferença de energia $E_{\alpha'} - E_\alpha$ produzida por esta mudança de estado. Se esta diferença de energia for negativa então a nova configuração é automaticamente aceita. Se entretanto, ela é positiva, a nova configuração é aceita com probabilidade $P(\alpha \rightarrow \alpha') = e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)}$. Então resumidamente temos.

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} 1 & \text{se } E_{\alpha'} < E_\alpha \\ e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)} & \text{se } E_{\alpha'} > E_\alpha \end{cases} \tag{2.6}$$

. Esse mesmo processo é aplicado para cada spin s_i da rede e constitui um passo de Monte Carlo para o algoritmo. Um problema desta dinâmica é que como alteramos o estado de um único spin por passo de Monte Carlo, a correlação estatística entre configurações

sucessivas é muito forte; portanto faz-se necessário esperar um certo intervalo de tempo para que avaliemos novamente a quantidade física de interesse. Esse tempo a que nos referimos é justamente o tempo de autocorrelação τ_{int} já definido anteriormente. Para o algoritmo de Metropolis $z \approx 2$ para o Ising 2D, e isso constitue um entrave para simulações de grandes sistemas (L grande) na região de criticalidade.

2.3 Algoritmo de Swendsen-Wang

Por muito tempo se procurou relacionar os expoentes críticos (que descrevem as singularidades críticas de propriedades térmicas em transições de fase) aos expoentes críticos relacionados à distribuição dos tamanhos dos "aglomerados físicos", como são conhecidos na literatura. Sabemos que, o ordenamento espontâneo que surge abaixo da temperatura crítica T_c, está relacionado com a formação de um aglomerado infinito, ou seja, uma transição de percolação.

Inicialmente pensava-se que esses aglomerados podiam ser definidos simplesmente em termos geométricos da configuração de spins, ou seja, um grupo de sítios vizinhos de mesmo domínio magnético definiria um aglomerado físico. Porém , agora está claro que esses aglomerados geométricos não podem ser identificados como os aglomerados físicos descrevendo uma transição de fase térmica, pois os aglomerados geométricos apresentam uma transição de fase antes da temperatura crítica ser alcançada, além também de fornecer expoentes críticos relacionados à susceptibilidade, maiores que aqueles descrevendo a susceptibilidade térmica[23]. Tendo aceito o fato de que os aglomerados geométricos são em média maiores que os denominados aglomerados físicos, alguma prescrição deveria ser encontrada de forma que os aglomerados de mesmo domínio magnético sejam fragmentados e que a nova distribuição de tamanhos descreva corretamente as singularidades críticas das propriedades térmicas. A primeira construção explícita dos denominados aglomerados físicos foi proposta por Coniglio e Klein[24]. Eles sugeriram distinguir ligações ativas e inativas em um aglomerado geométrico, ativando ligações com probabilidade dada por

$$p_{at} = 1 - \exp(-\frac{2J}{K_B T}) \tag{2.7}$$

onde J é a constante de troca. Os sítios conectados por ligações ativas formam os denominados *aglomerados físicos*. Assim, um aglomerado geométrico consiste de vários aglomerados físicos, que são desconectados um dos outros.

Paralela a essa linha de pesquisa, uma outra corrente de pensamento desenvolveu-se a partir do trabalho de Fortuin-Kasteleyn [25], que introduziram o *modelo de aglomerados aleatórios*. Eles provaram identidades relacionando a função de partição e probabilidades de conectividade neste modelo a função de partição e funções de correlação do modelo de Potts de q-estados. Usando estas identidades verificaram que a susceptibilidade do modelo de Ising é igual ao tamanho médio dos aglomerados no modelo de aglomerados com $q=2$[25].

Utilizando-se dessas duas correntes de pensamento, Swendsen e Wang[1] desenvolveram um novo algoritmo para o modelo de Potts. Neste algoritmo, aglomerados de mesmo spin são crescidos e invertidos. Assim, um certo número de spins são atualizados em um simples passo de Monte Carlo, reduzindo enormemente o fenômeno de retardamento crítico.

O algoritmo de Swendsen-Wang possibilita uma maior eficiência nas simulações computacionais de grandes sistemas na região de criticalidade, devido ao fato que viola a universalidade dinâmica exibida em algoritmos locais, apresentando um valor menor para o expoente crítico dinâmico z.

Este algoritmo se baseia na construção de aglomerados por meio do mapeamento de Fortuin-Kasteleyn. Como já dissemos esse mapeamento foi primeiramente descrito para um modelo de Potts ferromagnético, e pode ser generalizado para outros modelos. Exibiremos agora o método, que é mais facilmente descrito para um modelo de Potts.

Para o modelo de Potts temos a Hamiltoniana

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i,\sigma_j} - 1) \tag{2.8}$$

$\sigma = 1, 2, \ldots, q$.

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H}{K_B T}) \tag{2.9}$$

onde Z é a função de partição.

De acordo com Fortuin-Kasteleyn, Z pode ser reformulada em termos de um modelo de percolação por ligações. Consideremos que a interação entre dois primeiros vizinhos l e m, seja removida da Hamiltoniana e então definindo

$$H_{l,m} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \neq \langle l,m \rangle} (\delta_{\sigma_i,\sigma_j} - 1) = H + J(\delta_{\sigma_l,\sigma_m} - 1)$$

logo

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m} - J(\delta_{\sigma_l,\sigma_m} - 1)}{K_B T})$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m}}{K_B T}) * \exp(\frac{J(\delta_{\sigma_l,\sigma_m} - 1)}{K_B T})$$

como

$$\exp(\frac{J(\delta_{\sigma_l,\sigma_m} - 1)}{K_B T}) = \delta_{\sigma_l,\sigma_m} + \exp(-\frac{J}{K_B T}) * (1 - \delta_{\sigma_l,\sigma_m})$$

e definindo função de partição correspondente a $H_{l,m}$, quando os spins σ_l e σ_m são iguais, diferentes ou independem (ou indiferentes)

$$Z^{same}_{\langle l,m \rangle} = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m}}{K_B T}) * \delta_{\sigma_l,\sigma_m} \tag{2.10}$$

$$Z^{diff}_{\langle l,m\rangle} = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m}}{K_B T}) * (1 - \delta_{\sigma_l,\sigma_m}) \tag{2.11}$$

$$Z^{ind}_{\langle l,m\rangle} = Z^{same}_{\langle l,m\rangle} + Z^{diff}_{\langle l,m\rangle} \tag{2.12}$$

a função de partição é reconstruída como,

$$Z = Z^{same}_{\langle l,m\rangle} + \exp(-K) * Z^{diff}_{\langle l,m\rangle} \qquad onde\ K = \frac{J}{K_B T}.$$

Então

$$Z = (1 - \exp(-K)) * Z^{same}_{\langle l,m\rangle} + \exp(-K) * Z^{ind}_{\langle l,m\rangle} \tag{2.13}$$

Desde que o primeiro termo contém a restrição que os sítios l e m tenham o mesmo spin, e o segundo termo não contém qualquer restrição (indiferente), podemos interpretar o fator $(1 - \exp(-K))$ como a probabilidade de que haja uma ligação entre estes dois sítios quando estes têm o mesmo spin. Podemos interpretar o mapeamento da seguinte forma: caso os spins σ_l e σ_m sejam iguais, haverá uma probabilidade $p_{at} = 1 - \exp(-K)$ de ativar uma ligação entre eles; e uma probabilidade igual a $1 - p_{at} = \exp(-K)$ de não haver ligação, independentemente se eles têm ou não o mesmo spin.

Repetindo este procedimento para todas as interações descritas na Hamiltoniana, teremos uma configuração de ligações, onde aglomerados de um mesmo estado de spin são formados. Teremos desta forma uma distribuição de aglomerados. O mapeamento de Fortuin-Kasteleyn nos possibilita então escrevermos uma função de partição sobre configurações de ligações definida por

$$Z = \sum_{C} p^b_{at}(1 - p_{at})^n q^{N_C} \tag{2.14}$$

onde a soma envolve todas as configurações C de ligações (que vinculam sítios vizinhos de um mesmo estado); b é o número destas ligações, n é o número de spins independentes

(não ligados) e, N_C é o número de aglomerados de spins ligados, para cada possível configuração C.

Voltemos agora a discutir o algoritmo de Swendsen-Wang. Começando de uma configuração arbitrária de estados de Potts, criamos ligações com uma probabilidade $p_{at} = 1 - \exp(-K)$ entre sítios vizinhos de mesmo spin (para o modelo de Ising $p_{at} = 1 - \exp(-2K)$, pois $J_{Potts} = 2J_{Ising}$). Utilizamos o mesmo procedimento até que toda a rede seja consultada, temos portanto uma configuração de ligações.

O próximo passo da dinâmica é atribuir um novo estado de Potts aleatoriamente a cada aglomerado, ou seja, todos os sítios pertencentes a um mesmo aglomerado terão um mesmo estado após a atualização. Realizado isto para todos os aglomerados teremos agora uma nova configuração de Potts, mapeando o sistema de volta a uma configuração de spins (Para um sistemas de Potts de q estados, cada aglomerado tem probabilidade $p = \frac{q-1}{q}$ de adquirir um novo estado de spin, e probabilidade $p = \frac{1}{q}$ de permanecer no mesmo estado). Essa dinâmica é ergódica, pois não há qualquer restrição do sistema evoluir de uma dada configuração a outra qualquer.

De forma a demonstrar que o algoritmo de Swendsen-Wang gera uma distribuição de equilíbrio, faremos abaixo uma breve revisão dos fundamentos teóricos em que esta dinâmica baseia-se.

Dada um sistema de Potts, com $\sigma_i = 1, 2, ..., q$ e definindo uma nova variável de ligação n_{ij}, onde $n_{ij} = 1$ (caso exista uma ligação entre dois spins vizinhos) e $n_{ij} = 0$ caso contrário: podemos definir a probabilidade conjunta de uma certa realização de configuração de Potts e variáveis de ligação como

$$P(\sigma, n) = Z^{-1} \prod_{\langle i,j \rangle} \left[(1 - p_{ij})\, \delta_{n_{ij},0} + p_{ij} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \delta_{n_{ij},1} \right] \tag{2.15}$$

com

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{n} \prod_{\langle i,j \rangle} \left[(1 - p_{ij})\, \delta_{n_{ij},0} + p_{ij} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \delta_{n_{ij},1} \right] \tag{2.16}$$

onde $p_{ij} = 1 - e^{-K_{ij}}$, $\sigma = \{\sigma_i\}$ e $n = \{n_{ij}\}$.

Somando sobre todas as possíveis configurações de ligações temos,

$$P(\sigma) = \sum_n P(\sigma, n) \tag{2.17}$$

$$P(\sigma) = Z^{-1} \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{n_{ij}=0}^{1} \left[(1 - p_{ij})\, \delta_{n_{ij},0} + p_{ij} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \delta_{n_{ij},1} \right]$$

$$P(\sigma) = Z^{-1} \prod_{\langle i,j \rangle} \left[(1 - p_{ij}) + p_{ij} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \right]$$

$$P(\sigma) = Z^{-1} \exp \left[- \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} (1 - \delta_{\sigma_i,\sigma_j}) \right]$$

$$P(\sigma) = Z^{-1} \exp \left[- \frac{H(\sigma)}{K_B T} \right] \tag{2.18}$$

com

$$Z = \sum_\sigma \exp \left[- \frac{H(\sigma)}{K_B T} \right] \tag{2.19}$$

onde $H(\sigma)$ é a Hamiltoniana do modelo de Potts, e eq. (2.18) é a distribuição de probabilidade de Gibbs. Por outro lado, podemos calcular também a soma sobre todas as configurações de ligações e obtermos

$$P(n) = \sum_\sigma P(\sigma, n) \tag{2.20}$$

$$P(n) = Z^{-1} \sum_\sigma \left[\prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=1} p_{ij} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right]$$

Na última expressão todos os termos na soma com ligações presentes $n_{ij} = 1$ entre spins em estados diferentes devem se anular, então se denotarmos por σ^n uma configuração de spin compatível com a restrição de que dois spins com $n_{ij} = 1$ estejam no mesmo estado, obtemos

$$P(n) = Z^{-1} \sum_{\sigma^n} \left[\prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=1} p_{ij} \prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right]$$

os termos na soma agora são independentes da configuração de spins. Dado uma configuração de ligações, a soma restringe-se a contar o número de configurações de spins compatíveis. Se nós então definirmos como um aglomerado o conjunto de spins conectados, obtemos

$$P(n) = Z^{-1} \prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=1} p_{ij} \prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) q^{c(n)} \tag{2.21}$$

com q o número de possíveis orientações, e $c(n)$ o número de aglomerados de uma dada configuração geométrica. Equivalentemente,

$$Z = \sum_{n} \left[\prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=1} p_{ij} \prod_{\langle i,j \rangle, n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) q^{c(n)} \right] \tag{2.22}$$

que é justamente a função de partição do *modelo de aglomerados aleatórios* introduzido por Fortuin-Kasteleyn.

Para toda probabilidade conjunta temos as identidades

$$P(\sigma, n) = P(\sigma|n)P(n) = P(n|\sigma)P(\sigma) \tag{2.23}$$

que implicam a *condição de microreversibilidade*. Podemos agora calcular as probabilidades condicionais de se obter a partir de uma configuração de ligações uma configuração de spins e vice-versa:

$$P(n|\sigma) = \frac{P(\sigma,n)}{P(\sigma)} = \prod_{\langle i,j\rangle,\sigma_i=\sigma_j} \left[(1-p_{ij})\delta_{n_{ij},0} + p_{ij}\delta_{n_{ij},1}\right] \prod_{\langle i,j\rangle,\sigma_i\neq\sigma_j} \delta_{n_{ij},0} \tag{2.24}$$

é a probabilidade de obter uma configuração de ligações n dada a configuração de spins σ. Para a probabilidade $P(\sigma|n)$ de se obter uma configuração de spins σ dada a configuração de ligações n, temos portanto

$$P(\sigma|n) = \frac{P(\sigma,n)}{P(n)} = q^{-c(n)} \prod_{\langle i,j\rangle,n_{ij}=1} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \tag{2.25}$$

.

O algoritmo de Swendsen-Wang nada mais é que a aplicação repetida dessas duas probabilidades de transição. Portanto temos,

$$P(\sigma') = \sum_{\sigma} T_{\sigma'\sigma} P(\sigma) \tag{2.26}$$

com

$$T_{\sigma'\sigma} = \sum_{n} P(\sigma'|n) P(n|\sigma) \tag{2.27}$$

descrevendo uma cadeia de Markov. Com relação à notação empregada anteriormente $T_{\sigma'\sigma} = P(\sigma \to \sigma')$.

2.4 Algoritmo de Wolff

Ulli Wolff propôs em 1989, um elegante algoritmo de Monte Carlo não-local muito similar ao algoritmo de Swendsen-Wang. Em cada passo de Monte Carlo, o algoritmo reverte o estado de um único aglomerado de spins, todos com o mesmo estado. Esse aglomerado é construído a partir de um sítio semente escolhido aleatoriamente na rede, e então novos sítios são agregados caso eles (a) sejam adjacentes ao aglomerado e (b) se possuem o

mesmo estado dos sítios já pertencentes. Spins que satisfazem esses dois critérios são acrescentados com probabilidade $p_{at} = 1 - \exp(-K)$. Esse processo de crescimento é finalizado quando todos os possíveis candidatos para adição tiverem sido consultados. Cessado o crescimento, o próximo passo da dinâmica é atribuir obrigatoriamente um novo estado aos spins pertencentes ao aglomerado.

Podemos resumir precisamente o algoritmo de Wolff da seguinte forma:

i) *Escolhe-se aleatoriamente um sítio i na rede.*

ii) *Visitam-se todos os sítios vizinhos j ao sítio i, e agrega-se o sítio j ao aglomerado contendo i com probabilidade* $p_{at} = 1 - \exp(-K)$, *caso eles tenham o mesmo spin.*

iii) *Repete-se iterativamente ii) à nova vizinhança do aglomerado até que não existam mais sítios disponíveis para agregação.*

iv) *Revertemos então todos os spins contidos neste aglomerado.*

Este procedimento satisfaz o critério de acessibilidade, pois há sempre uma probabilidade não-nula do aglomerado conter apenas um único spin e reverter uma sequência de aglomerados de tamanho um, permitindo o sistema alcançar qualquer outra configuração. O princípio de balanço detalhado é também satisfeito pela dinâmica: consideremos duas configurações de spins α e α', em que os spins tomam valores $\{s_i\}$ e $\left\{s_i'\right\}$ e que podem ser transformados um no outro revertendo um único aglomerado de spins, que denotamos por C. A razão das probabilidades de transição em direções opostas é

$$\frac{P(\alpha \to \alpha')}{P(\alpha' \to \alpha)} = \prod_{(i \in C, j \notin C)} \frac{1 - p_{at}(s_i, s_j)}{1 - p_{at}(s_i', s_j')} \tag{2.28}$$

$$\frac{P(\alpha \to \alpha')}{P(\alpha' \to \alpha)} = \exp\left[- \sum_{(i \in C, j \notin C)} K(\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - \delta_{\sigma_i', \sigma_j'}) \right]$$

$$\frac{P(\alpha \to \alpha')}{P(\alpha' \to \alpha)} = \exp\left[-\beta\left(E_{\alpha'} - E_{\alpha}\right)\right] \tag{2.29}$$

Onde usamos a invariância da Hamiltoniana sob a inversão de um par de spins intera-

IFSC-USP

gentes. Desta forma, apenas os spins que estão na fronteira do aglomerado contribuem para uma variação de energia.

A tarefa de inversão do aglomerado de Wolff é bem menos trabalhosa que no caso de Metropolis e de Swendsen-Wang. Como podemos verificar, o algoritmo utiliza um tempo proporcional ao tamanho do aglomerado formado: enquanto que no Metropolis e Swendsen-Wang toda a rede deve ser consultada. Um outro aspecto que deve ser levado em conta, pois torna computacionalmente menos eficiente o algoritmo SW, é a necessidade de rotulação dos aglomerados nele construídos. Essa rotulação é realizada por meio do algoritmo de Hoshen-Kopelman[27].

Na Figura 2-2 exibimos uma série de estados gerados pelo algoritmo em três valores de temperatura, uma acima de T_c ,uma em T_c , e outra abaixo. Spins para cima e para baixo são representados por sítios pretos e brancos respectivamente. No topo da figura, o conjunto de estados situa-se a uma temperatura próxima a T_c . Se examinarmos os quatro estados, não é díficil reconhecer que aglomerados foram revertidos em cada passo. Verificamos também que grandes áreas de spins são movidas pela dinâmica. No caso $\dot{T} > T_c$, é muito mais díficil reconhecer as mudanças ocorridas entre um estado e outro. A razão para isto é que nesta temperatura p_{at} tem um valor bastante reduzido, resultando no crescimento de pequenos aglomerados. Por isso, a dificuldade em identificar os aglomerados revertidos. Mas isto é exatamente o que o algoritmo deveria realizar nesse regime de temperatura, pois o comprimento de correlação nesse regime também é pequeno, e não seria natural esperar que a dinâmica revertesse uma grande região de spins simultaneamente. Na Figura 2-1, mostramos o tamanho médio dos aglomerados movidos pelo algoritmo de Wolff como uma função da temperatura. E como podemos verificar, o tamanho médio realmente torna-se bastante reduzido em altas temperaturas. Quando a temperatura torna-se suficientemente alta, praticamente todos os aglomerados são de tamanho 1. Em outras palavras, o sítio semente de cada aglomerado é invertido com probabilidade 1 em cada passo, porém nenhum de seus vizinhos é agregado, e consequentemente também não são invertidos. Entretanto, isto é exatamente o que o algoritmo

local de Metropolis realiza a esta temperatura. Quando a temperatura é elevada, a razão de aceitação do Metropolis é aproximadamente igual a 1. Portanto no regime de altas temperaturas, os algoritmos de Wolff e Metropolis tornam-se praticamente iguais.

Vamos agora analisar o algoritmo no regime de baixas temperaturas. Como podemos observar na parte inferior da Figura 2-2, a ação do algoritmo é mais ou menos óbvia— quase todos os spins da rede são invertidos a cada passo de Monte Carlo. A razão para isto é muito clara. Quando estamos bem abaixo da temperatura crítica, praticamente todos os spins da rede estão com a mesma orientação. E muito provavelmente, o sítio semente do algoritmo será do mesmo estado que a maioria da rede. Além do mais, a probabilidade p_{at} é grande para essa faixa de temperatura, logo praticamente todos os vizinhos devem ser agregados ao aglomerado de Wolff. E posteriormente todos são invertidos. Mais uma vez os algoritmos de Wolff e Metropolis desempenham papel semelhante para essa região de temperaturas. A razão para isto, é que para produzir um novo estado em cada passo de Monte Carlo, ele terá o custo de visitar praticamente todos os spins da rede, o que é exatamente o que o Metropolis realiza.

Portanto podemos concluir que, próxima a temperatura crítica o desempenho do algoritmo de Wolff deve ser bem superior ao do Metropolis, por mover uma massa maior de spins a cada passo de Monte Carlo. Já nos regimes de altas e baixas temperaturas, o desempenho de ambos é bem semelhante.

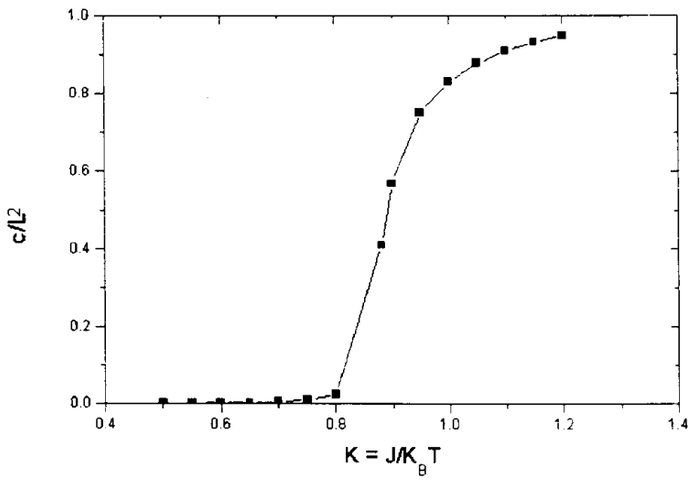

Figura 2-1: Tamanho médio dos aglomerados de Wolff como uma fração dos sítios da rede, medidos com uma função de $K = \frac{J}{K_B T}$.

2.4.1 O Tempo de autocorrelação e o expoente crítico dinâmico

Antes de medirmos o tempo de autocorrelação do algoritmo de Wolff, precisamos saber exatamente como ele pode ser definido. Se nosso objetivo é comparar os tempos de autocorrelação de alguns algoritmos próximo à transição de fase (com o objetivo de decidirmos qual destes é o mais eficiente nesta região), alguns cuidados na definição desses tempos devem ser tomados. Não seria razoável comparar a dinâmica de Wolff com outras, como Swendsen-Wang e Metropolis, em função do número de passos de Monte Carlo. Como foi explicado anteriormente, o custo computacional de um passo na dinâmica de Wolff é proporcional ao número de spins c no aglomerado, onde esse aglomerado cobre uma fração c/L^d da rede inteira. Em média cada passo de Monte Carlo utilizará um tempo de CPU comparável a $\langle c \rangle / L^d$ varreduras da rede usando o Metropolis ou o Swendsen-Wang. Portanto, a maneira correta de definirmos o tempo de autocorrelação para o algoritmo de Wolff é escrevê-lo como

$$\tau_w = \tau_{passos} \frac{\langle c \rangle}{L^d} \tag{2.30}$$

onde τ_{passos} é o tempo de autocorrelação medido em unidade de passos de Monte Carlo.

Em estudos da dinâmica de Wolff para o modelo de Ising em 2D, não fazemos uso da eq. (2.30) para calcular τ_w. Se nós medirmos o tempo em unidade de passos de Monte Carlo, podemos definir o expoente crítico dinâmico correspondente z_{passos} em termos do tempo de autocorrelação τ_{passos}. Assim,

$$\tau_{passos} \sim \xi^{z_{passos}}. \tag{2.31}$$

O expoente z_{passos} é relacionado ao expoente crítico dinâmico real por meio da relação

$$z = z_{passos} + \frac{\gamma}{\nu} - d \tag{2.32}$$

onde γ e ν são os expoentes críticos governando a divergência da susceptibilidade mag-

nética e o comprimento de correlação. Se conhecermos os valores de γ e ν, como é o caso do modelo de Ising em 2D, podemos utilizar a equação (2.32) para calcular z sem estimar o tamanho médio dos aglomerados no algoritmo, e elimina-se uma possível fonte de erro na medida.

De forma a demonstrar equação (2.32), é necessário provar um outro resultado importante, no que diz respeito à susceptibilidade magnética χ. Para temperaturas $T > T_c$, a susceptibilidade magnética é relacionada ao tamanho médio $\langle c \rangle$ dos aglomerados produzidos pela dinâmica de Wolff por

$$\chi = \beta \langle c \rangle . \tag{2.33}$$

A demonstração da equação (2.33) é realizada da seguinte forma. Ao invés de implementarmos o algoritmo de Wolff da maneira usual já descrita nesta seção, faremos de uma forma diferente. Suponha que em cada passo nós consultamos toda a rede, e então a cada par de spins vizinhos de mesmo estado, ativamos uma ligação entre eles com probabilidade $p_{at} = 1 - \exp(-2K)$ (Ising), que é a probabilidade de ativação já descrita anteriormente. Depois de consultada toda a rede, temos agora uma configuração de ligações, onde aglomerados de diversos tamanhos estão presentes. Sendo cada um destes, exatamente um aglomerado de Wolff. O próximo passo é escolher aleatoriamente um sítio semente na rede, e então revertemos o aglomerado ao qual o spin escolhido pertence. Ou seja, o algoritmo de Wolff corresponderia a utilizarmos todos os passos da dinâmica de SW, porém no momento da atualização dos aglomerados, apenas um único é escolhido e obrigatoriamente todos os spins pertencentes a este aglomerado adquire um novo de estado de spin. Salientando que esta é apenas uma conexão entre os dois algoritmos, já que na dinâmica de Wolff não há qualquer necessidade da formação dos demais aglomerados. Esta conexão entre estes dois algoritmos nos possibilitará então entendermos a equação (2.33).

Podemos escrever a magnetização total M da rede da seguinte forma:

$$M = \sum_i S_i c_i \tag{2.34}$$

onde i rotula os diferentes aglomerados, c_i seus tamanhos e $S_i = \pm 1$ dependendo se os spins do $i-ésimo$ aglomerado têm estado *para cima* ou *para baixo*, e portanto contribuindo positivamente ou negativamente para a magnetização M. O valor quadrático médio da magnetização é então igual a

$$\left\langle M^2 \right\rangle = \left\langle \sum_i S_i c_i \sum_j S_j c_j \right\rangle = \left\langle \sum_{i \neq j} S_i S_j c_i c_j \right\rangle + \left\langle \sum_i S_i^2 c_i^2 \right\rangle. \tag{2.35}$$

Desde que a média da magnetização (não do valor absoluto) é zero no uso do algoritmo de Wolff (isto é verdade mesmo para $T < T_c$, pois o algoritmo reverte a maioria dos spins da rede em cada passo), o primeiro termo na expressão (2.35) é uma média de quantidades que são aleatoriamente positivas ou negativas e que portanto na média tendem a zero. Já o segundo termo é uma quantidade estritamente positiva e portanto não se cancela. Portanto podemos escrever

$$\left\langle M^2 \right\rangle = \left\langle \sum_i c_i^2 \right\rangle \tag{2.36}$$

ou alternativamente, em termos da magnetização por spin da rede m:

$$\left\langle m^2 \right\rangle = \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_i c_i^2 \right\rangle \tag{2.37}$$

onde N é o número de spins da rede. Consideremos agora o tamanho médio $\langle c \rangle$ dos aglomerados que são revertidos no algoritmo de Wolff. O que não é a mesma coisa que o tamanho médio $\langle c_i \rangle$ dos aglomerados na rede inteira. Quando escolhemos aleatoriamente um sítio semente na rede, significa que escolhemos com probabilidade p_i um particular aglomerado i, e esta probabilidade é proporcional ao seu tamanho,

$$p_i = \frac{c_i}{N}. \tag{2.38}$$

O tamanho médio dos aglomerados na algoritmo de Wolff é portanto dado pela média da probabilidade do aglomerado ser escolhido vezes o tamanho deste aglomerado:

$$\langle c \rangle = \left\langle \sum_i p_i c_i \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i c_i^2 \right\rangle = N \left\langle m^2 \right\rangle . \tag{2.39}$$

Sabendo que

$$\chi = N\beta \left(\left\langle m^2 \right\rangle - \langle m \rangle^2 \right) \tag{2.40}$$

e dado que $\langle m \rangle = 0$ para $T \geq T_c$, temos que

$$\chi = \beta \langle c \rangle . \tag{2.41}$$

Podemos agora rescrever equação (2.30) da seguinte forma

$$\tau_w = \tau_{passos} \frac{\chi}{\beta L^d} \tag{2.42}$$

que implica em

$$\xi^z \sim \xi^{z_{passos}} \xi^{\gamma/\nu} L^{-d}. \tag{2.43}$$

Como próximo ao ponto crítico $\xi \sim L$, temos

$$L^z \sim L^{z_{passos}} L^{\gamma/\nu} L^{-d} \tag{2.44}$$

o que resulta em

$$z = z_{passos} + \frac{\gamma}{\nu} - d \tag{2.45}$$

como mostrado anteriormente.

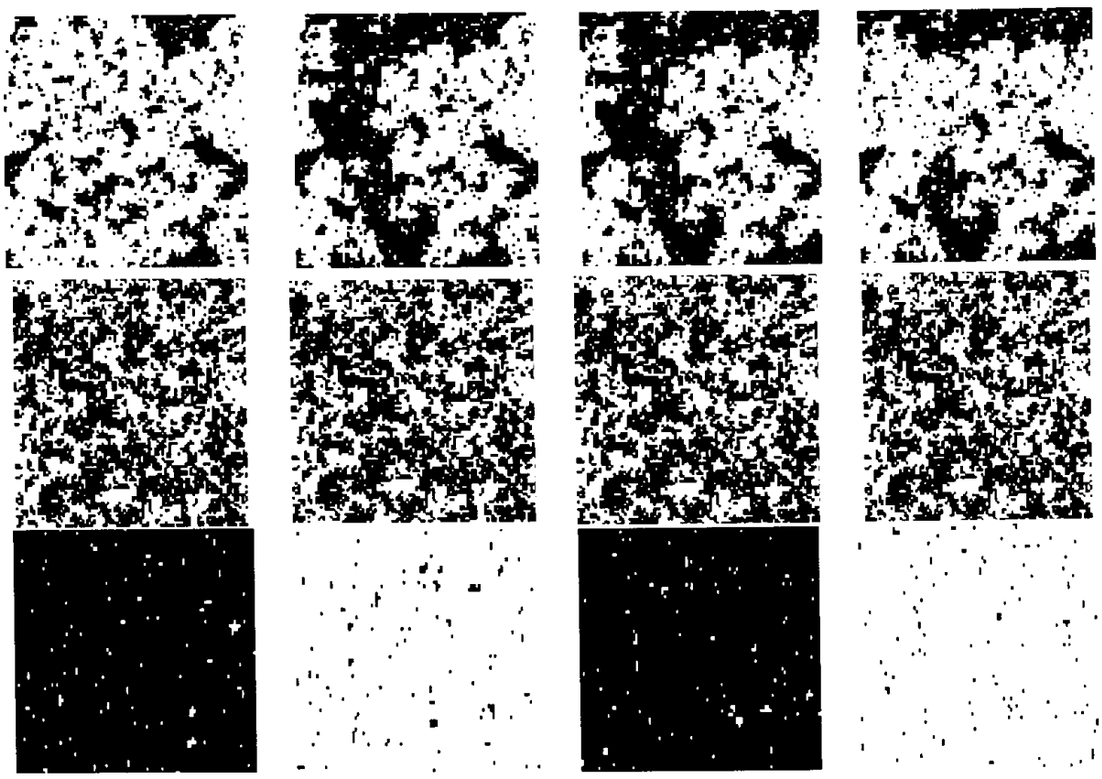

Figura 2-2: Estados consecutivos do modelo de Ising de uma rede 100 $\times$ 100 produzidos usando o algoritmo de Wolff. Os quatro estados no topo da figura estão a uma temperatura próxima a T_c. Na segunda linha o sistema está a uma temperatura $T>T_c$. E na linha inferior o sistema está a uma temperatura $T<T_c$.

2.5 Comparação entre as performances dos algoritmos de Swendsen-Wang e Wolff

É indiscutível a superioridade dos algoritmos de aglomerados com relação ao algoritmos locais, tais como Metropolis, Glauber, etc. Os algoritmos locais apresentam para o modelo de Ising em 2D expoente crítico dinâmico $z \simeq 2$ e isto constitui o que chamamos de universalidade dinâmica dos algoritmos locais. Os algoritmos de aglomerados têm o mérito de reduzir bastante esse valor apresentado por z.

Depois de várias análises realizadas, ficou constatado que os algoritmos de aglomerados de Swendsen-Wang e Wolff reduzem drasticamente o fenômeno de *retardamento crítico* em simulações computacionais, e assim aumentam enormemente a sua eficiência. Seus resultados são estatisticamente mais confiáveis. Existe ainda pouco entendimento teórico sobre a dinâmica destes algoritmos. Em particular, pouco se sabe porque eles diminuem o fenômeno de retardamento crítico. Não existe qualquer teoria que calcule a priori o valor do expoente crítico dinâmico z de um algoritmo. Existe, porém, um rigoroso limite de z para o algoritmo SW aplicado ao modelo de Potts[29]. Li e Sokal obtiveram o seguinte limite inferior

$$z_{sw} \geq \frac{\alpha}{\nu} \tag{2.46}$$

onde α é o expoente crítico do calor específico. Este limite é muito inferior àquele apresentado pelos algoritmos locais quando aplicados ao modelo de Ising puro, onde foi provado que[16, 30]

$$z_{local} \geq \frac{\gamma}{\nu} \tag{2.47}$$

onde γ é o expoente crítico da susceptibilidade magnética.

Um outro problema que não é bem entendido é o porquê os algoritmos SW e Wolff têm valores similares de z para o modelo de Potts 2D, mas apresentam comportamentos extremamente diferentes para outros modelos, como o modelo de Ising em redes de dimensionalidade maior que 2 ($d > 2$) [23, 15]. A medida do expoente crítico dinâmico é notoriamente díficil, pois é necessário uma boa estatística. No modelo de Ising, um bom número de diferentes medidas fornecem resultados conflitantes. Em 2D, resultados iniciais sugeriam $z \approx \frac{1}{3}$ para as duas dinâmicas [1, 23]. Outro trabalho [15] propôs $z \approx \frac{1}{4}$, e posteriormente foi mostrado que os dados eram consistentes com uma divergência logarítmica, sugerindo $z = 0$ [17]. Resultados recentes demonstram que é bastante díficil distinguir entre uma lei logarítmica e uma lei de potência com expoente de valor reduzido

[31].

Medidas no modelo de Ising em 3D mostraram valores de z para o algoritmo SW variando de 0.339(4) a 0.75(1) [15, 32, 31]. Para o algoritmo de Wolff, Tamayo et al.[23] obtiveram 0.44(10), enquanto Wolff encontrou $z = 0.28(2)$. Para o Ising em 4D, apenas um único resultado era conhecido $z = -0.05(15)$ para o algoritmo de Wolff [23].

Todo essa evolução em torno dos valores referentes aos expoentes críticos dinâmicos das dinâmicas SW e de Wolff, caracterizam a dificuldade em se estimar esse expoente. Além do mais, esse histórico acima apresentado, se refere apenas a um dos mais simples modelos utilizados em simulações computacionais, que é o modelo de Ising. As dificuldades em se estudar o comportamento dinâmico tornam-se ainda maiores quando modelos um pouco mais complexos são analisados.

Por fim apresentamos na tabela 2-1, os valores estimados para os expoentes críticos dinâmicos apresentados por Coddington e Baillie[34] para o modelo de Ising. Esses valores são tidos hoje como os mais precisos e confiáveis na literatura, pois eles realizaram uma estatística bastante apurada para a obtenção desses resultados.

Tabela 2-1: Valores obtidos por Coddington e Baillie para o expoente crítico dinâmico no modelo de Ising em 2, 3 e 4 dimensões. Os símbolos z_{sw} e z_w se referem aos resultados obtidos quando aplicado os algoritmos de Swendsen-Wang e Wolff, respectivamente.

dimensão	z_{sw}	z_w
2	0.25(1)	0.25(1)
3	0.54(2)	0.33(1)
4	0.86(2)	0.25(1)

Capítulo 3

O modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações

3.1 Introdução

Sistemas magnéticos diluídos aleatoriamente têm sido extensivamente investigados tanto no contexto teórico quanto no experimental [35, 36]. Particular atenção tem sido dada no que diz respeito à maneira com que a temperatura crítica é reduzida à medida em que abaixamos a concentração de átomos magnéticos no sistema. A concentração crítica em que o ordenamento magnético deixa de existir também é de interesse considerável. A dependência da temperatura crítica com a concentração é governada pelas propriedades topológicas da rede e pela simetria da Hamiltoniana de interação.

Na mais simples descrição de um sistema magnético diluído, os sítios ocupados na rede correspondem aos átomos magnéticos e os sítios vazios são associados com a presença de átomos não-magnéticos (impurezas). As interações entre estes átomos são de curto alcance, e o valor da constante de interação entre dois sítios magnéticos vizinhos não é afetado pela vizinhança deste par. Em $T = 0$, a estrutura dos aglomerados de sítios magnéticos é bem descrita pela percolação ordinária de sítios.

A Hamiltoniana de interação para o sistema acima especificado é dada por

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$H = -\sum_{i,\delta} J(\sigma_i \sigma_{i+\delta} - 1) \tag{3.1}$$

onde $\sigma_i = \pm 1$, $\boldsymbol{\delta}$ é o vetor posição dos primeiros vizinhos, e J é a constante de interação do modelo de Ising usual. Se os sítios i ou $i + \boldsymbol{\delta}$ forem ocupados por átomos não-magnéticos então $J = 0$. Este simples modelo de diluição tem sido de grande utilidade na discussão da aleatoriedade em muitos sistemas magnéticos desordenados reais.

Entretanto, outros modelos de diluição de sítios têm sido propostos, motivados principalmente pela verificação que, em alguns materiais magnéticos, a introdução de espécies não-magnéticas tem efeitos adicionais não previstos pelo modelo usual de diluição. Exemplos de modelos alternativos de diluição são o *modelo de percolação "bootstrap"*[37] e o modelo com *correlação de sítios e ligações*[8, 9], conhecido também como modelo SBC (*site-bond-correlated model*). As motivações físicas que caracterizam estes modelos estão descritas nos trabalhos originais [37, 8, 9], aqui citaremos apenas alguns poucos aspectos referentes a estes. No "*bootstrap*" a presença de impurezas não-magnéticas na vizinhança de um dado átomo magnético pode anular seu momento magnético. Já no modelo SBC, a presença de impurezas não-magnéticas na vizinhança de um dado par de átomos magnéticos vizinhos pode modificar o valor da constante de interação entre estes dois átomos ou até mesmo suprimi-la. Este é o modelo que será alvo de nosso estudo.

3.2 Descrição do modelo SBC

Uma análise de RMN no magneto diluído $KNi_xMg_{1-x}F_3$ e no composto isoestrutural $KMn_xMg_{1-x}F_3$ (onde x é a concentração) mostrou diferenças consideráveis em suas propriedades [8]. À medida em que a concentração é reduzida, a temperatura de transição decai mais rapidamente para o composto $KNi_xMg_{1-x}F_3$ que no sistema isoestrutural contendo Mn^{2+}. Além do mais, a curva crítica (temperatura crítica versus concentração de átomos magnéticos) para $KNi_xMg_{1-x}F_3$ exibe uma curvatura para cima, enquanto que o oposto é observado no $KMn_xMg_{1-x}F_3$. Os resultados experimentais também

mostram que o limiar de percolação no $KMn_xMg_{1-x}F_3$ é consistente com o modelo de diluição usual. Entretanto, o modelo falha para o $KNi_xMg_{1-x}F_3$ cuja curva crítica mostra uma tendência em direção a um maior valor para essa concentração crítica.

Na tentativa de explicar essas diferenças, de Aguiar, Engelsberg e Guggenheim[8] propuseram um modelo de diluição que é bastante diferente do modelo usual de diluição. Neste modelo, que é esperado ser mais apropriado para o $KNi_xMg_{1-x}F_3$, a constante de acoplamento entre dois íons Ni^{2+} depende direcionalmente da ocupação magnética de seus vizinhos. Tendo por objetivo implementar esse comportamento no modelo, um parâmetro α foi então introduzido. Esse parâmetro é uma medida da correlação da interação entre o par de átomos magnéticos com a ocupação magnética dos seus vizinhos ao longo da linha que os conecta. Por essas idéias acima citadas o modelo foi batizado como **modelo com correlação de sítios e ligações.**

Uma Hamiltoniana para o modelo que leva em consideração todas essas idéias foi introduzida [9]. A Hamiltoniana é então definida por

$$H = -\sum_{i,\delta} J_{i,i+\delta}(\sigma_i\sigma_{i+\delta} - 1) \tag{3.2}$$

onde novamente $\sigma_i = \pm 1$, $\boldsymbol{\delta}$ é o vetor posição dos primeiros vizinhos. A constante de interação $J_{i,i+\delta}$ é definida por

$$J_{i,i+\delta} = J\varepsilon_i\varepsilon_{i+\delta}\left[(1-\alpha)\,\varepsilon_{i-\delta}\varepsilon_{i+2\delta} + \alpha\right] \tag{3.3}$$

onde J é a constante de interação para o Ising usual, sendo $J > 0$ para sistema ferromagnético. As variáveis ε_i podem adquirir valores: 1 com probabilidade C, e 0 com probabilidade 1-C. Portanto C é a concentração de átomos magnéticos. O parâmetro α $(0 \leq \alpha \leq 1)$ correlaciona a interação entre os sítios i e $i + \boldsymbol{\delta}$ com a ocupação magnética de $i - \boldsymbol{\delta}$ e $i + 2\boldsymbol{\delta}$. O modelo de Ising diluído sem correlação é re-obtido no limite $\alpha = 1$. Para $0 < \alpha < 1$, a interação entre i e $i+\boldsymbol{\delta}$ é apenas enfraquecida pela ausência de átomos magnéticos em $i - \boldsymbol{\delta}$ e $i + 2\boldsymbol{\delta}$. O limite $\alpha = 0$ corresponde à máxima correlação, isto

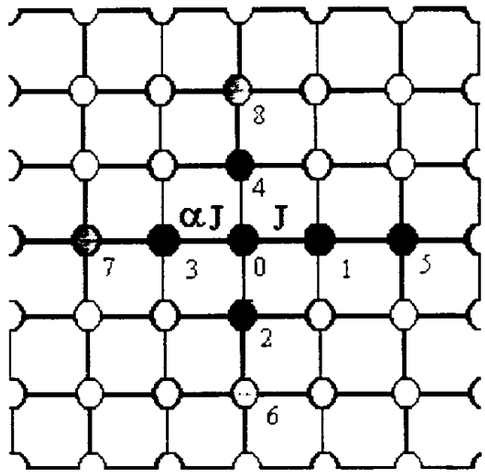

Figura 3-1: A constante de interação entre os átomos magnéticos (pretos) situados nos sítios 0 e 1, não é modificada devido à presença de átomos magnéticos nos sítios 3 e 5. Entretanto, o mesmo não se aplica para a interação entre 3 e 0, devido à presença de um átomo não-magnético em 7.

é, dois átomos magnéticos vizinhos têm sua interação ativada apenas se seus vizinhos ao longo da linha que os conecta estiverem presentes. Observe que, para a Hamiltoniana apresentada, a ausência de átomos no sítio é equivalente a presença de impurezas não-magnéticas.

A Figura 3-1 traz uma ilustração do modelo. Embora não especificada na figura, as constantes de interação entre os átomos magnéticos 0 e 4, e entre os átomos em 0 e 2 são também modificadas devido à ausência de átomos magnéticos em 8 e 6 respectivamente.

Para que tenhamos uma maior clareza no entendimento do modelo, algumas considerações devem ser levantadas sobre a forma de $J_{i,i+\delta}$. Caso tenhamos $C = 1$ em nosso sistema, então $J_{i,i+\delta} = J$ e o modelo SBC se reduz ao modelo de Ising usual sem diluição, e não faz sentido falar em correlação espacial. Já para $C < 1$, temos duas possibilidades (considerando os sítios i e $i + \boldsymbol{\delta}$ ocupados por átomos magnéticos):

i) Os sítios $i - \delta$ e $i + 2\boldsymbol{\delta}$ são também magnéticos. Neste caso, $J_{i,i+\delta} = J$, e a interação não é alterada.

ii)Pelo menos um dos sítios $i - \boldsymbol{\delta}$ e $i + 2\boldsymbol{\delta}$ é não-magnético. Neste caso, $J_{i,i+\delta} = \alpha J$.

Para $\alpha = 1$, o modelo se reduz ao modelo de Ising usual com diluição. Já para $\alpha = 0$, temos o limite de correlação máxima, e neste caso, a interação entre i e $i+\boldsymbol{\delta}$ é anulada na presença de uma impureza em $i - \boldsymbol{\delta}$ ou $i + 2\boldsymbol{\delta}$. Este caso limite define um novo problema de percolação em $T = 0$, cujo modelo é denominado na literatura por modelo AND [38].

Então resumidamente, temos as seguintes situações para $C < 1$ e $\varepsilon_i\varepsilon_{i+\delta} = 1$ no modelo SBC:

$$\begin{cases} J_{i,i+\delta} = J & \text{se} \quad \varepsilon_{i-\delta}\varepsilon_{i+2\delta} = 1 \\ J_{i,i+\delta} = \alpha J & \text{se} \quad \varepsilon_{i-\delta}\varepsilon_{i+2\delta} = 0 \end{cases} \tag{3.4}$$

3.2.1 Modelo AND

Como já foi dito anteriormente, o caso $\alpha = 0$ para o modelo SBC corresponde ao máximo limite de correlação. Neste limite, a manifestação magnética entre dois átomos magnéticos é totalmente aniquilada devido à presença de uma impureza na sua vizinhança (apenas ao longo da direção da ligação considerada). Esse efeito de direcionalidade constitue uma marcante diferença entre o modelo SBC e outros modelos de diluição correlacionados. Esse caso especial define um novo problema de percolação correlacionada, e hoje é denominado de modelo AND de percolação. Os outros valores de correlação espacial $0 < \alpha \leq 1$ não definem nenhum novo problema de percolação. A razão para isto consiste no fato que, para estes valores a ligação entre dois átomos magnéticos é apenas alterada (reduzida), não sendo completamente aniquilada, como acontece para $\alpha = 0$. Portanto, não há nenhuma quebra de ligação, e as propriedades topológicas dos aglomerados de domínios magnéticos é precisamente bem descrita pelo modelo de percolação ordinária de sítios, apresentando valor de concentração crítica $p_c = 0.5927$ [39].

O modelo AND é descrito então da seguinte forma:
Como na percolação ordinária de sítios, no modelo AND cada sítio é ocupado com probabilidade p e consequentemente não ocupados com probabilidade $q = 1 - p$. Entretanto,

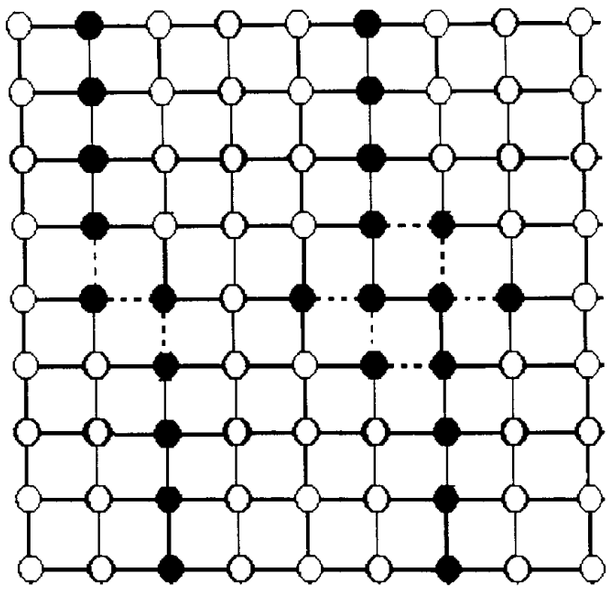

Figura 3-2: O aglomerado a esquerda da figura é quebrado devido à presença de impurezas ao longo da linha conectando os átomos magnéticos na região do contorno tracejado. O mesmo não acontece com o aglomerado da esquerda.

para que uma ligação entre dois sítios vizinhos ocupados seja ativada, ou seja, para que ambos pertençam ao mesmo aglomerado, é necessário que seus primeiros vizinhos ao longo da linha que os conecta sejam também ocupados. A Figura 3-2 traz uma boa ilustração deste modelo de percolação. Observe que, no caso do modelo de percolação usual ambos os aglomerados estariam percolando a rede; entretanto não é o que acontece para o modelo AND, onde apenas o postado do lado direito da figura está realmente percolando.

Neste modelo, o número médio de aglomerados de tamanho um por sítio da rede é dado por

$$n_1(p) = p(q^2 + 2pq + p^2q^2)^2 \tag{3.5}$$

enquanto que na percolação ordinária este valor é

$$n_1(p) = pq^4. \tag{3.6}$$

Um estudo detalhado sobre a distribuição de aglomerados neste modelo foi recentemente realizado[38]. Por meio da observância das singularidades críticas, foi verificado que o modelo apresenta concentração crítica $p_c = 0.7405(5)$, que é consideravelmente maior que aquela verificada na percolação usual. Também foi constatado que os expoentes críticos apresentam os mesmos valores (dentro da faixa de erros) que os exibidos pela percolação ordinária, indicando que ambos são da mesma classe de universalidade. Esse é um resultado bastante importante, pois este comportamento é o oposto ao que acontece em outros modelos de percolação correlacionada, onde há uma quebra de universalidade.

3.3 Resultados

As propriedades térmicas do modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações (modelo SBC) têm sido extensivamente estudadas por meio de muitas técnicas: teoria de campo médio [9], teoria de campo-efetivo Honmura-Kaneyoshi [11, 40], grupo de renormalização [13, 12] e grupo de renormalização de Monte de Carlo [42]. Todas essas técnicas levam praticamente ao mesmo cenário físico com a exceção do modelo SBC definido numa rede de Bethe [43], onde existem alguns aspectos inesperados que parecem ser devidos às propriedades topológicas da rede. Além desses trabalhos, existem outros apresentando estudos das características dos aglomerados e sua conexão com problemas de percolação.

Estudo das propriedades térmicas do modelo por meio de simulações computacionais é verificado apenas na referência [14]. Neste artigo, o modelo é estudado com o parâmetro α restrito a $\alpha = 0$ e a regiões de altas concentrações. O algoritmo utilizado foi o tradicional Metropolis. Como já foi comentado anteriormente, a simulação na região de criticalidade torna-se bastante díficil devido à manifestação do fenômeno de *retardamento crítico*.

No modelo SBC este efeito torna-se ainda mais pronunciado desde que a diluição juntamente com a correlação conspiram no enfraquecimento do algoritmo de Metropolis. A razão para este efeito será dada na próxima seção. Felizmente, para os algoritmos de aglomerados a diluição tem efeito contrário ao exibido pelos algoritmos locais. A diluição torna os algoritmos de aglomerados cada vez mais eficientes à medida em que reduzimos a concentração de átomos magnéticos no sistema. Hennecke et al. [7] verificaram um decréscimo do tempo de autocorrelação quando a diluição era incrementada no modelo de Ising 3D; comportamento este oposto ao verificado pelos algoritmos locais, onde se observa um aumento neste tempo.

Essa nova constatação foi a nossa maior motivação física para este trabalho. O nosso interesse em princípio era realmente constatar se esse comportamento era novamente verificado para outros sistemas diluídos, que é o caso do modelo SBC. Um outro aspecto interessante é que a aplicação de uma dessas dinâmicas de aglomerados ao modelo, nos permite verificar o comportamento desses algoritmos na introdução de mais um parâmetro, a correlação espacial. Auxiliando-nos a entender um pouco mais o comportamento desses algoritmos. Uma outra razão seria a obtenção das propriedades térmicas do modelo SBC por meio de simulações, e a comparação dos resultados obtidos com os já existentes na literatura por meio de outras técnicas.

3.3.1 Mapeamento de Fortuin-Kasteleyn para o modelo SBC

O primeiro passo para a aplicação da dinâmica de Wolff ao modelo SBC é generalizar o mapeamento de Fortuin-Kasteleyn. O mapeamento irá permitir relacionar uma configuração de spins do modelo a uma configuração geométrica. O procedimento utilizado por nós para a obtenção do mapeamento é o mesmo utilizado anteriormente na seção 2.3 para o modelo de Potts, e não traz nenhuma dificuldade. De forma a enfatizar a técnica ela será aqui repetida e aplicada ao modelo.

Temos que a Hamiltoniana para o modelo SBC é definida por

$$H = -\sum_{i,\delta} J_{i,i+\delta}(\sigma_i\sigma_{i+\delta} - 1)$$

com $\sigma_i = \pm 1$, e

$$J_{i,i+\delta} = J\varepsilon_i\varepsilon_{i+\delta}[(1-\alpha)\varepsilon_{i-\delta}\varepsilon_{i+2\delta} + \alpha] \tag{3.7}$$

Repetindo o procedimento utilizado para o modelo de Potts descrito anteriormente, e novamente retirando da Hamiltoniana a interação entre dois sítios vizinhos σ_l e σ_m podemos definir

$$H_{l,m} = -\sum_{\langle i,\delta\rangle \neq \langle l,m\rangle} J_{i,i+\delta}(\sigma_i\sigma_{i+\delta} - 1) = H + J_{l,m}(\sigma_l\sigma_m - 1)$$

e

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m} - J_{l,m}(\sigma_l\sigma_m - 1)}{K_BT})$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m}}{K_BT}) \exp(\frac{J_{l,m}(\sigma_l\sigma_m - 1)}{K_BT})$$

passando o termo $(\sigma_l\sigma_m + 1)$ para uma representação em delta de Kronecker temos

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{H_{l,m}}{K_BT}) \exp(\frac{2J_{l,m}(\delta_{\sigma_l,\sigma_m} - 1)}{K_BT})$$

e utilizando as mesmas definições já empregadas, temos que

$$Z = Z^{same}_{\langle l,m\rangle} + \exp(-\frac{2J_{l,m}}{K_BT}) * Z^{diff}_{\langle l,m\rangle}$$

logo

$$Z = (1 - \exp(-\frac{2J_{l,m}}{K_B T})) * Z^{same}_{\langle l,m \rangle} + \exp(-\frac{2J_{l,m}}{K_B T}) * Z^{ind}_{\langle l,m \rangle} \tag{3.8}$$

Portanto a probabilidade de existir uma ligação entre dois spins paralelos no SBC é igual a $p_{i,i+\delta} = 1 - \exp(-\frac{2J_{i,i+\delta}}{K_B T})$. Devido a forma apresentada por $J_{i,i+\delta}$ conforme eq. (3.3), o mapeamento para o modelo é descrito por três possíveis valores de $p_{i,i+\delta}$; ao contrário do modelo simples de diluição, onde existem dois valores possíveis:

$$\begin{cases} 0, & \text{para } \sigma_i \neq \sigma_{i+\delta} \text{ ou } \varepsilon_i \varepsilon_{i+\delta} = 0; \\ 1 - \exp(-\frac{2J}{K_B T}), & \text{para } \sigma_i = \sigma_{i+\delta}. \end{cases} \tag{3.9}$$

O mapeamento do modelo é então descrito por:

$$\begin{cases} 0, & \text{para } \sigma_i \neq \sigma_{i+\delta} \text{ ou } \varepsilon_i \varepsilon_{i+\delta} = 0; \\ 1 - \exp(-\frac{2J}{K_B T}), & \text{para } \sigma_i = \sigma_{i+\delta} \text{ e } \varepsilon_{i-\delta} \varepsilon_{i+2\delta} = 1; \\ 1 - \exp(-\frac{2\alpha J}{K_B T}), & \text{para } \sigma_i = \sigma_{i+\delta} \text{ e } \varepsilon_{i-\delta} \varepsilon_{i+2\delta} = 0. \end{cases} \tag{3.10}$$

A definição dessas probabilidades da ativação garantem corretamente a aplicabilidade das dinâmicas de aglomerados e constituem o mapeamento de Fortuin-Kasteleyn para o modelo.

3.3.2 Diagrama de Fases do modelo SBC

Nós simulamos o modelo SBC para vários valores de concentração C e correlação α em redes quadradas de tamanhos $L = 50, 100, 150$ e 300. Sobre cada configuração geométrica congelada (disposição fixa dos átomos magnéticos e não-magnéticos na rede),

configurações de spins são geradas a partir de uma dada configuração inicial. Podendo ser esta de forma aleatória, e no nosso caso escolhemos 60% dos spins para cima e a outra porção dos spins magnéticos para baixo. As configurações de spins são então geradas por meio do algoritmo de Wolff utilizando as probabilidades de ativação definidas anteriormente. A cada sequência de *construção do aglomerado + mudança de estado de spin do aglomerado + medida de magnetização* definimos como uma iteração, ou como usualmente descrito, passo de Monte Carlo. Por meio do pico exibido pela susceptibilidade magnética

$$\chi = \frac{N}{K_B T}(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2).$$

localizamos o ponto crítico para cada tamanho de rede simulada, e então extrapolamos para o limite termodinâmico $L \to \infty$ por meio do algoritmo BST [45, 46]. O BST é um algoritmo usado para extrapolar grandezas físicas que convergem com a lei de potência

$$F(L) = F(L \to \infty) + AL^{-\theta}. \tag{3.11}$$

Em mecânica estatística, tal comportamento corresponde a sistemas críticos. O ponto crítico é determinado variando o valor de K $(= \frac{J}{K_B T})$ de forma a encontrar $K_{\max}$ onde a susceptibilidade é máxima. O número de iterações e realizações necessárias para reduzir o erro de $K_{\max}$ para ~ 0.01 é mostrada na tabela abaixo.

Tabela 3-1: Número de amostras N_s e número de iterações N_i utilizados para cada tamanho de rede L.

L	N_s	N_i
50	20-150	3000-5000
100	05-50	3000-5000
150	05-50	3000-5000
300	05-50	3000-10000

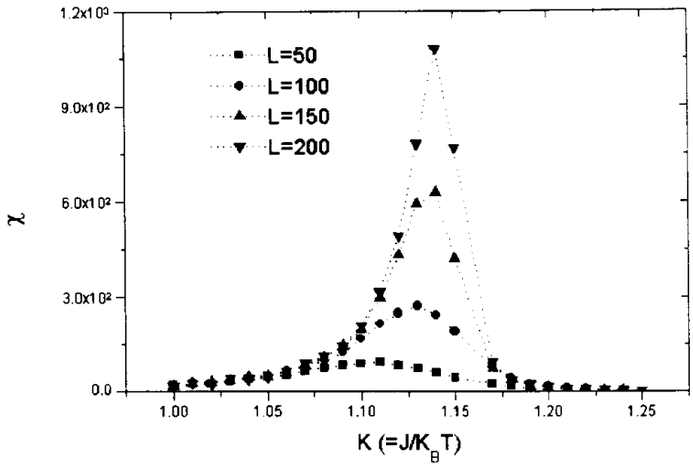

Figura 3-3: Comportamento típico apresentado pela susceptibilidade magnética χ na região de criticalidade.

Estes intervalos de configurações e amostras exibidos na Tabela 3-1, devem-se ao fato que à medida em que reduz-se a concentração de átomos magnéticos no sistema, ou seja aumentamos a diluição, as dificuldades em estimarmos a temperatura crítica tornam-se cada vez maiores, devido a maiores flutuações apresentados pelas quantidades físicas de interesse. Na Figura 3-3 mostramos o comportamento típico apresentado pela susceptibilidade magnética na região de criticalidade. Observe que, quanto maior o tamanho linear do sistema, mais bem definido se torna o valor de $K_{\max}$. Para valores de concentração menores, o pico apresentado por χ torna-se cada vez mais largo, e um maior número de medidas deve ser realizado.

O diagrama de fases é mostrado na Figura 3-4. Verificamos que a derivada inicial $(1/T_c)(dT_c/dC)|_{C=1}$ aumenta com o grau de correlação, o que é sustentado pelos resultados teóricos [9, 11, 14] e experimentais [8]. Em $T = 0$, obtemos dois limiares de percolação: um para $\alpha = 0$ e um outro para $\alpha \neq 0$. Essa verificação já era esperada e a

razão para isto fora explicado anteriormente (seção 3.2.1).

Como pode ser visto na figura, as curvas para valores intermediários de correlação $0 < \alpha < 1$ têm uma curvatura para cima (não presente nos casos extremos $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$) em plena concordância com os resultados experimentais para o composto $KNi_xMg_{1-x}F_3$ [8]. Nossos resultados demostram este comportamento de maneira bem clara. Além do mais, nossa localização da concentração (em $T = 0$) é bem precisa, e em boa concordância com resultados anteriores no contexto de teoria de percolação [38].

3.4 Comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff no modelo SBC

Nesta seção mostramos os resultados por nós obtidos sobre o comportamento crítico dinâmico do algoritmo de Wolff para o modelo com correlação de sítios e ligações. Esse estudo é de crucial importância para um entendimento mais apurado desse algoritmo, pois nos permite entendermos qual o efeito produzido pela diluição e correlação espacial.

Para o estudo do comportamento dinâmico realizamos simulações para valores de concentração $C = 0.90, 0.80, 0.70$ e 0.60, e para cada valor de concentração simulamos o modelo SBC para valores de correlação espacial $\alpha = 0.0, 0.1, 0.3, 0.5$ e 1.0. Os números de amostras e configurações utilizadas em nossas simulações se encontram na Tabela 3-2. Esses valores para os números de configurações e amostras foram escolhidos de forma a obtermos um erro no tempo de autocorrelação τ da ordem de 1 a 2%. Além disto, a estimativa da função de autocorrelação $\rho(t)$ requer um espaço de configurações razoavelmente grande, de forma que a estatística não se torne tão pobre mesmo para valores pequenos de t (onde t, é a distância entre configurações em unidades de passos de Monte Carlo). Verificamos grandes flutuações dos dados obtidos, que foram reduzidas quando um número maior de amostras diluídas foram utilizadas. Essas flutuações são bastante comuns no estudo de sistemas desordenados. Pois além das flutuações referentes às pro-

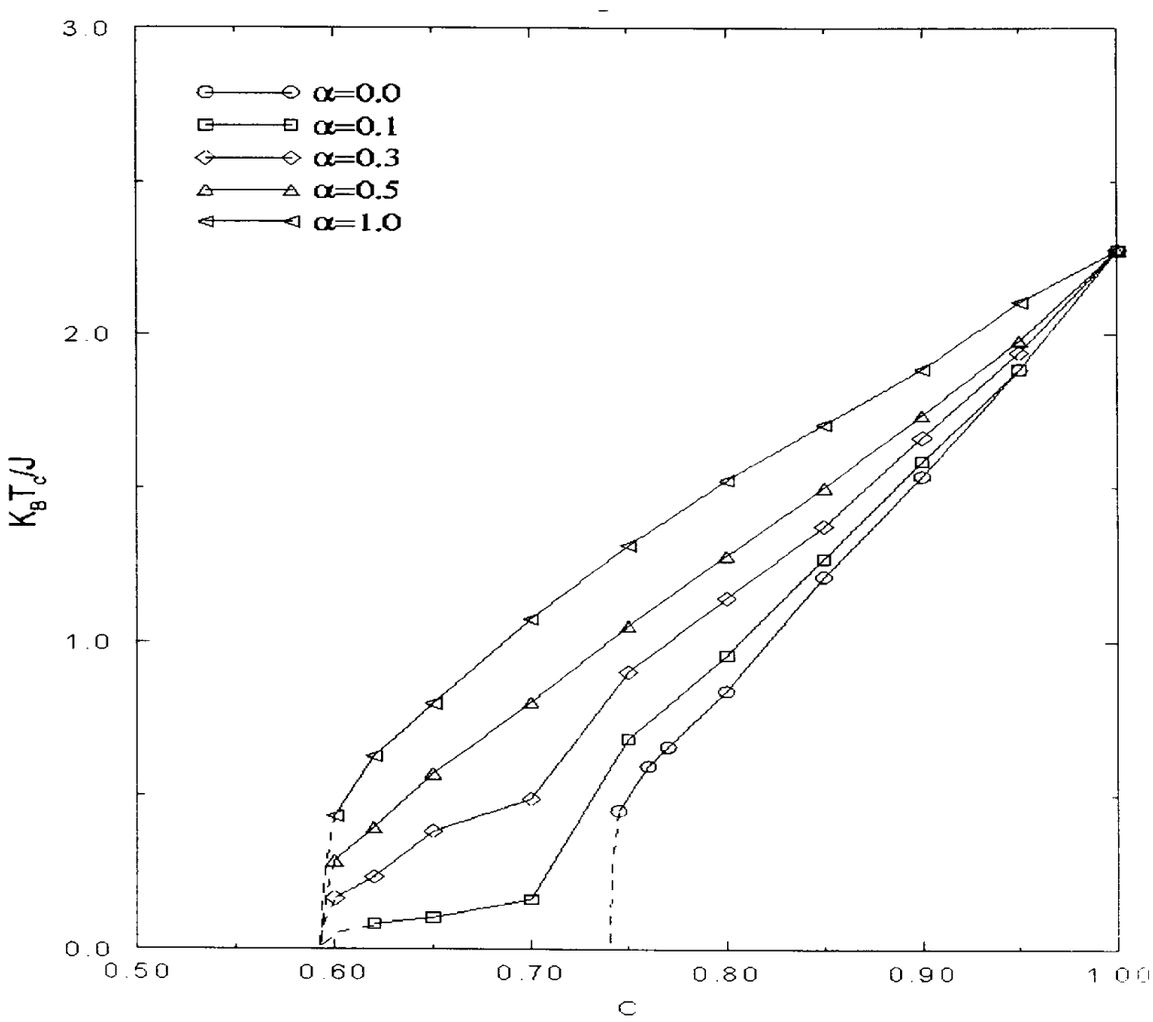

Figura 3-4: Diagrama de fase do modelo SBC para vários valores de α. As concentrações críticas são $p_c = 0.7405$ para $\alpha = 0$ e $p_c = 0.5927$ para $0 < \alpha \leq 1$. As linhas tracejadas são apenas um guia para os olhos.

priedades termodinâmicas estarem sempre presentes em estudos de sistemas estocásticos. a aleatoriedade da disposição das impurezas vem a contribuir para o seu aumento.

Tabela 3-2: Número de amostras N_s e número de iterações N_i utilizados para cada tamanho de rede L.

L	N_i	N_s
16	40000	400
32	50000	300
64	80000	200
128	80000	200

Como definidas anteriormente (seção 2.1), as quantidades físicas relevantes para a nossa análise são a função de autocorrelação $\rho(t)$ e o tempo de autocorrelação τ. Em nossa análise, a quantidade física estimada a cada passo de Monte Carlo para o cálculo de $\rho(t)$ foi a magnetização. Onde algumas configurações foram eliminadas do espaço de configurações para que fosse permitido ao sistema alcançar sua termalização. Utilizando a definição de $\rho(t)$ na equação (2.1), estimamos a função de autocorrelação para cada configuração diluída. De acordo com a equação (2.2) estimativas de τ_{int} para cada amostra diluída foram calculadas, e então médias são tomadas sobre o número total de amostras diluídas. Porém pequenas mudanças foram realizadas na forma de estimar τ_{int}, a soma na equação (2.1) é truncada quando a função $\rho(t)$ cruza a abcissa. Verificamos que ambas aproximações levam a bons resultados. Porém, quando o decaimento de $\rho(t)$ é rápido, que é o que acontece no regime de baixas concentrações, fica muito díficil obter valores que convergem por meio das aproximações desenvolvidas por Wolff [15], e o valor apresentado por τ_{int} é muito dependente do valor de $t_{\max}$. Para cada amostra diluída também é estimado o valor da massa média de Wolff (tamanho médio dos aglomerados gerados e revertidos), cujo valor é necessário para o rescalonamento do tempo de autocorrelação. Uma única modificação é requerida na equação (2.30) quando esta dinâmica é aplicada

para sistemas diluídos. A forma correta de rescalar o tempo de autocorrelação é dada por [47]

$$\tau_w = \tau_{passos} \frac{\langle c \rangle}{CL^d} \tag{3.12}$$

onde C é a concentração de átomos magnéticos no sistema, e consequentemente CL^d é a massa magnética total . Na seção seguinte apresentamos os resultados por nós obtidos, e toda a análise do comportamento crítico dinâmico do algoritmo de Wolff quando aplicado ao modelo com correlação de sítios e ligações.

3.4.1 Resultados

Na Figura 3-5, mostramos o comportamento da função de autocorrelação $\rho(t)$ para alguns valores de concentração e correlação espacial fixas $\alpha = 0.5$ e 1.0. Como pode ser observado, em ambos os casos constatamos uma descorrelação mais rápida a medida em que reduzimos a concentração de átomos magnéticos no sistema. Esse resultado é o mesmo obtido para o modelo de Ising desordenado 3D conforme foi encontrado por Hennecke et al. [7]. Esse mesmo comportamento é então verificado para o modelo SBC bi-dimensional, e generalizado para todos os valores de correlação espacial α. Como podemos observar na figura, para pequenos valores de t, a função de autocorrelação rapidamente decai para valores bastante reduzidos.

Na Figura 3-6, exibimos o comportamento de $\rho(t)$ para vários valores de correlação e concentrações fixas $C = 0.70$ e $C = 0.90$. Como pode ser visto, observamos um decaimento mais rápido para a função de autocorrelação à medida em que aumentamos a correlação espacial (reduzimos o parâmetro α) no modelo. Esta tendência se torna mais expressiva à medida em que aumentamos a concentração de impurezas. Para $C = 0.70$ é facilmente verificada a diferença na função $\rho(t)$ para os diferentes valores de α. Já para $C = 0.90$, o efeito da correlação numa descorrelação estatística mais rápida não é ainda claramente manifestada.

De forma a quantizar os comportamentos acima colocados, exibimos nas Figuras 3-7 e 3-8 os valores do tempo de autocorrelação integrado τ_{int} para valores de concentrações $C = 0.80$ e 0.70. Dessas figuras é possível ter uma idéia numérica da eficiência da dinâmica de Wolff à medida em que aumentamos tanto a diluição quanto a correlação espacial. Os valores do expoente crítico dinâmico z_{passos} relacionado ao tempo de autocorrelação em unidade de passos de Monte Carlo τ_{passos} estão colocados nas legendas das figuras. Como podemos notar, existe sempre uma tendência para o aumento deste expoente quando aumentamos o parâmetro α. Esse comportamento não é verificado para o valor de concentração $C = 0.90$.

Dos resultados e comportamentos exibidos em parte nessas figuras, concluimos que o tempo de autocorrelação decresce com a diluição para todos os valores de α e com a correlação para todos os valores de C. Esses comportamentos são completamente opostos aos exibidos pelos algoritmos *locais*. Por exemplo, no algoritmo de Metropolis a probabilidade de reverter um único spin, depende exponencialmente da razão do incremento da energia (produzido pela mudança de estado) e a temperatura. Isto quer dizer que, uma temperatura crítica menor leva a uma menor taxa de aceitação de mudança de estado desfavoráveis energeticamente. Já para os algoritmos de aglomerados, esse comportamento é completamente antagônico. Na verdade, a probabilidade de ativação (equação 3.10) aumenta quando a temperatura crítica é reduzida. Possibilitando o crescimento de aglomerados cada vez maiores, e desta forma temos configurações sucessivas cada vez menos correlacionadas estatisticamente. Esse argumento é completamente válido quando para um valor fixo de correlação α variamos apenas o valor da concentração C. Entretanto, a constatação do decréscimo do tempo de autocorrelação com o aumento da correlação não é tão direta, pois existe uma competição entre a temperatura e a correlação α. Ambos os parâmetros aparecem no expoente (equação 3.10) na forma de $\sim \frac{\alpha}{T_c}$ no caso onde $\varepsilon_{i-\delta}\varepsilon_{i+2\delta} = 0$. Ao contrário do que acontece com a temperatura, um aumento na correlação espacial (redução de α) tende a provocar uma redução no valor desta probabilidade. Porém, na região de baixas concentrações C, a redução da temperatura

crítica com a correlação é muito acentuada, o que pode ser constatado no diagrama de fases. Como resultado desta competição, os valores assumidos por $p_{i,i+\delta}$ tornam-se bastante elevados na redução de α. Esse comportamento não é válido para $C = 0.90$, pois para esse valor de concentração a variação da temperatura crítica com α é muito pouco pronunciada, devido a quase nula manifestação da correlação no sistema. Por esta razão, esse comportamento diferenciado em relação aos demais valores de C.

Como pode ser observado na Figura 3-9, Constatamos que para valores de concentrações C próximos ao valor do limiar de percolação $p_c = 0.5927$, a lei de potência $\tau \sim L^z$ não é satisfeita, e que possíveis correções de escala devam ser analisadas. Na figura temos $C = 0.60$. Comportamentos diferenciados para o tempo de autocorrelação na região do limiar de percolação já foram verificados anteriormente para alguns sistemas [19, 21]. Existem algumas correções propostas na literatura, porém nenhuma delas é válida para o nosso problema.

Nenhuma tentativa foi realizada para a obtenção do tempo de autocorrelação exponencial τ_{exp}, pois para isto, teríamos que examinar o comportamento de $\rho(t)$ para cada amostra magnética e médias seriam tomadas sobre todas elas. O que tornaria esta tarefa bastante árdua, devido ao grande número de amostras utilizadas.

Quanto aos valores referentes ao expoente crítico dinâmico z determinado quando o rescalonamento do tempo de autocorrelação integrado com a massa dos aglomerados de wolff é considerada, todos os valores de z se situam entre -0.04 e 0.12. Não sendo observado nenhuma tendência de acréscimo ou decréscimo com a diluição ou correlação. Esses valores demonstram mais uma vez, que o fenômeno de *retardamento crítico* é praticamente eliminado. Novamente temos um comportamento totalmente antagônico àquele verificado nos algoritmos locais. Na Figura 3-10 apresentamos os dados para $C = 0.70$. Todos os valores se situam dentro do intervalo acima citado. Esses valores bastante reduzidos são verificados para todos os valores de concentrações e correlações. O surgimento de valores negativos para z, deve-se unicamente a correção do tempo de autocorrelação com a massa média dos aglomerados construídos.

A importância desses resultados aqui obtidos, é evidenciada pelo aspecto da complexidade intrínseca exibida pelos sistemas desordenados bi-dimensionais. Esses sistemas vêm sido alvo de diversas análises no que diz respeito às suas propriedades termodinâmicas e mesmo dinâmicas. Várias predições visualizadas em sistemas desordenados de dimensionalidade maior que 2, não são constatados nesses sistemas. Como por exemplo, os comportamentos de escala verificados em outros sistemas, não são claramente obedecidas pelos sistemas bi-dimensionais, sendo necessária a utilização de algumas correções de escala [70, 71] . A outra questão de grande relevância, é se há ou não, uma quebra de universalidade desses sistemas em relação ao caso puro. Existem várias propostas na literatura porém nenhuma delas apresenta dados conclusivos.

Com os resultados apresentados aqui , constatamos uma melhor performance do algoritmo de Wolff em sistemas cada vez mais diluídos. Acreditamos que a aplicação dessa dinâmica a tais sistemas venha a colaborar para um melhor entendimento dos sistemas desordenados bi-dimensionais.

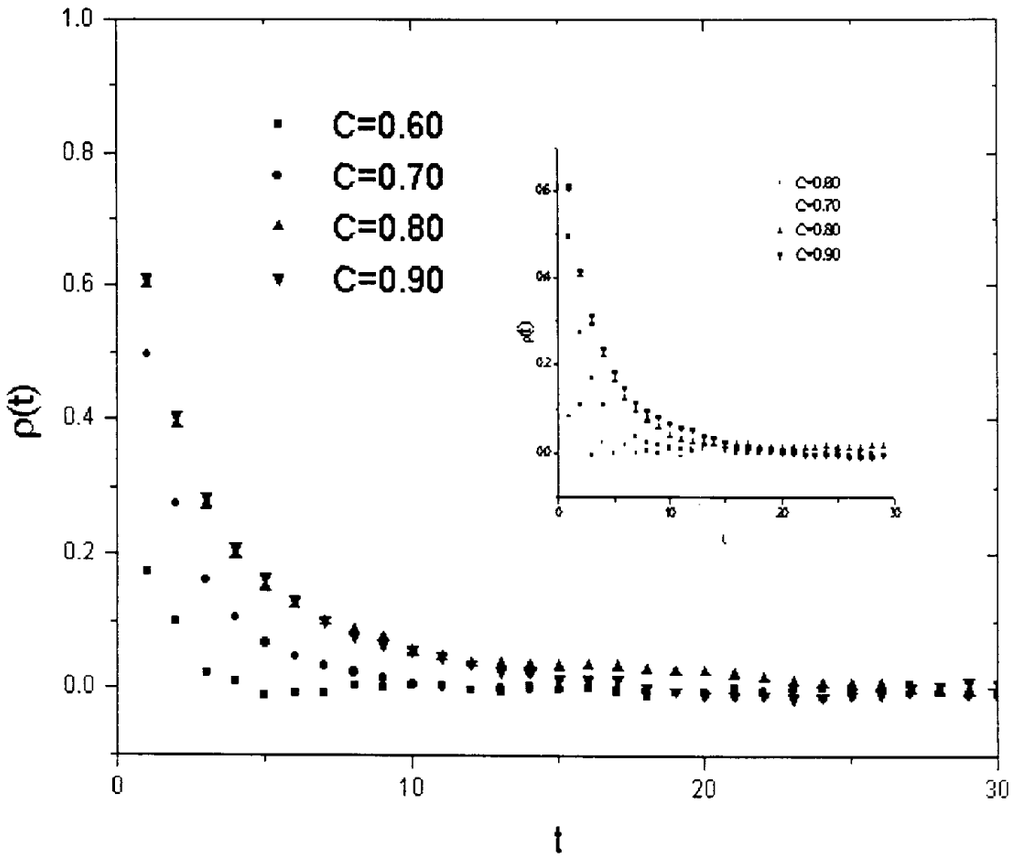

Figura 3-5: Comportamento da função de autocorrelação para vários valores de concentração C. Os valores de correlação são $\alpha = 0.5$ e $\alpha = 1.0$ (no quadro interior). $L = 128$.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA

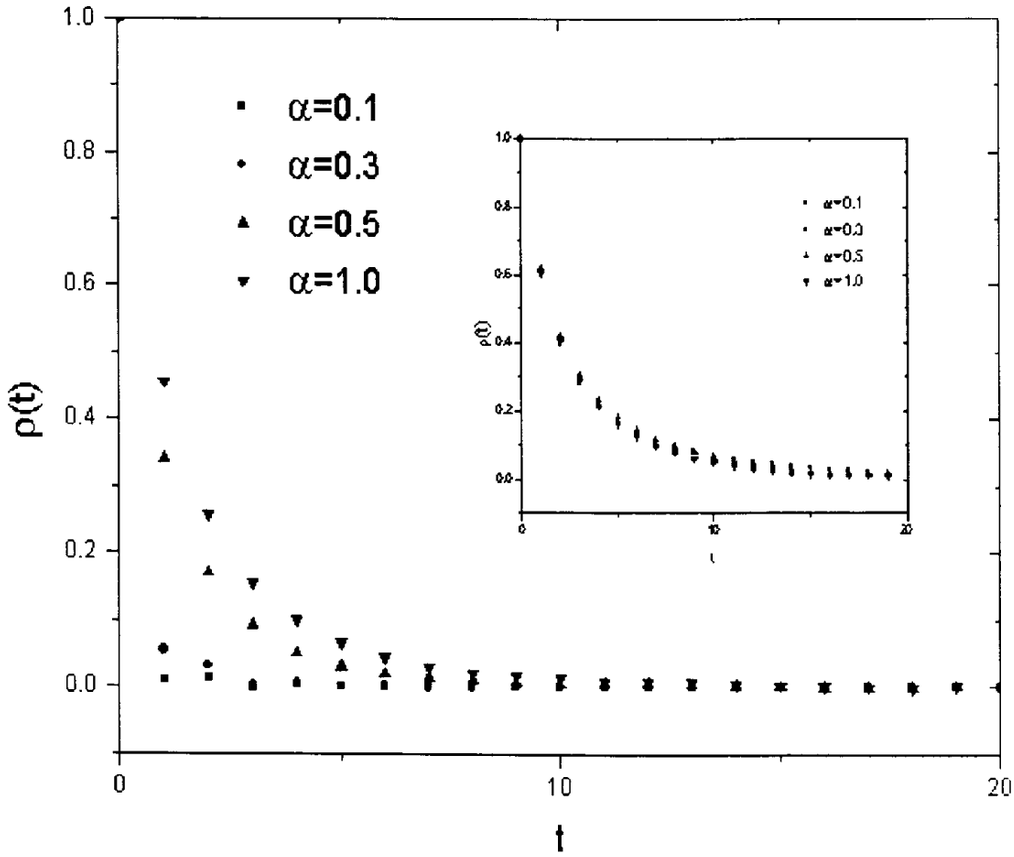

Figura 3-6: Comportamento da função de autocorrelação $\rho(t)$ para vários valores de correlação α. Os valores de concentração são $C = 0.70$ e $C = 0.90$ (no quadro interior). $L = 128$.

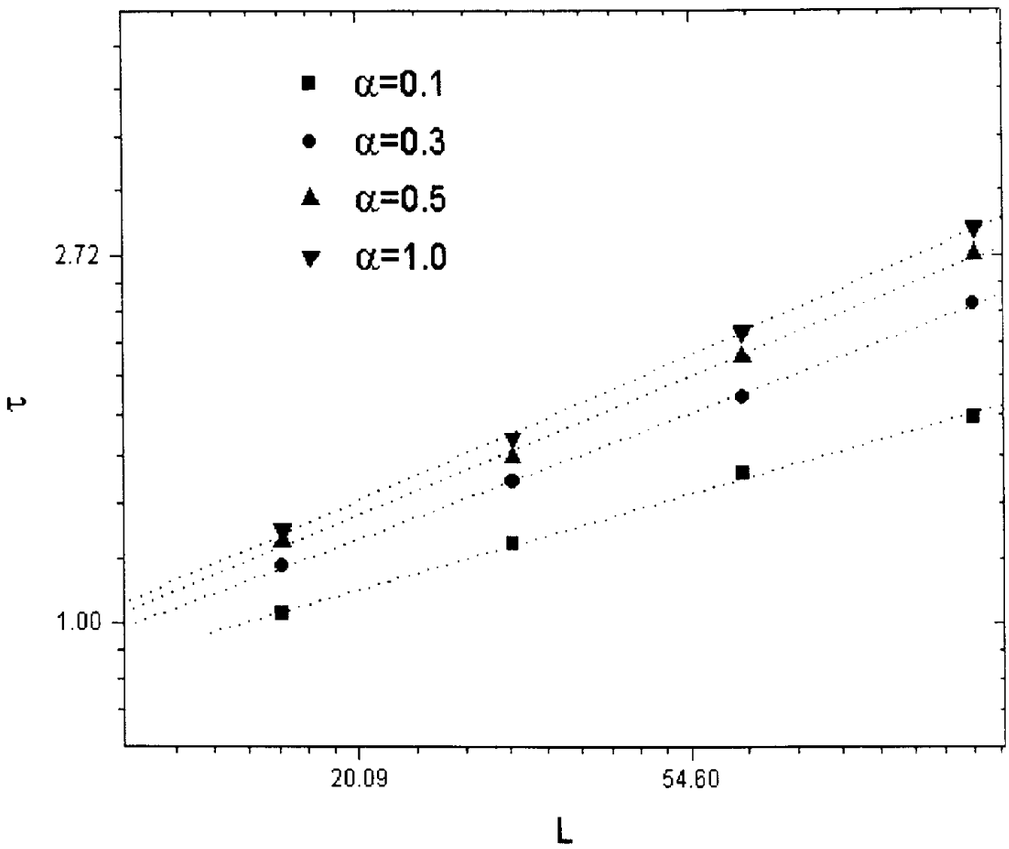

Figura 3-7: Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para vários valores de α e $C = 0.80$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$. Os valores obtidos para z_{passos} são em ordem crescente de α iguais a $0.26(1), 0.34(1), 0.38(1)$ e $0.40(1)$.

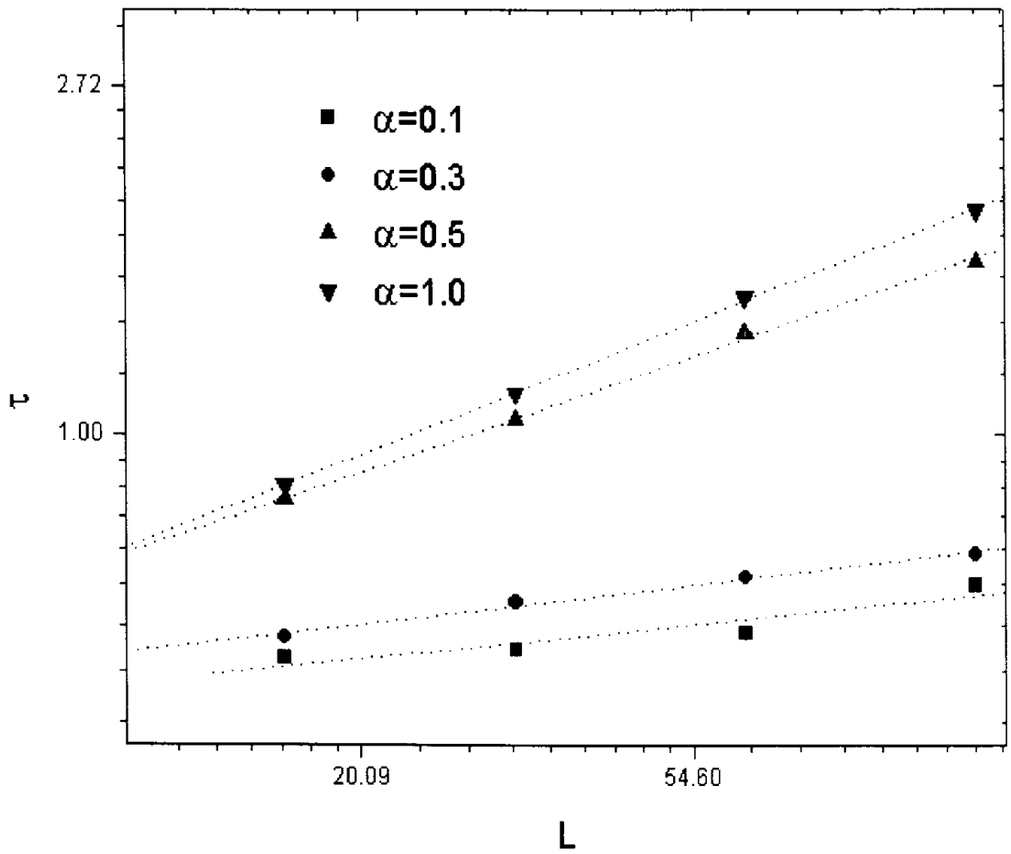

Figura 3-8: Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para vários valores de α e $C = 0.70$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$. Os valores obtidos para z_{passos} em ordem crescente de α são iguais a $0.10(2), 0.11(1), 0.33(1)$ e $0.38(1)$.

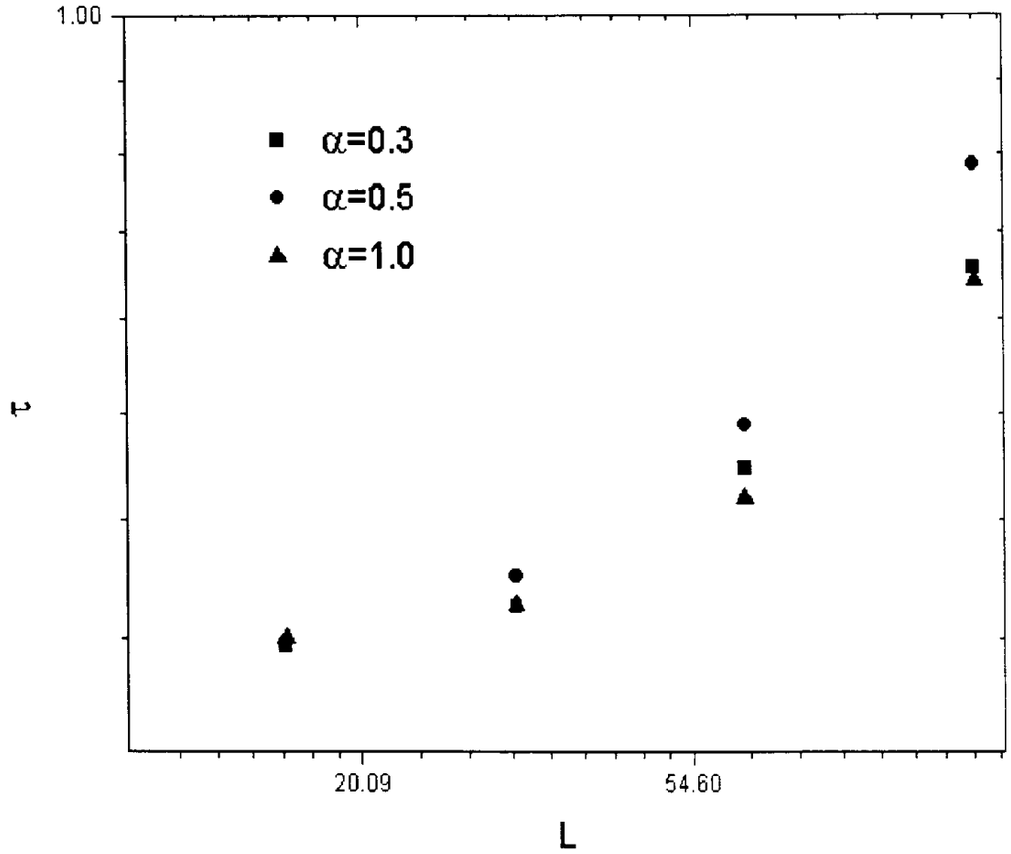

Figura 3-9: Gráficos do tempo de autocorrelação τ versus L, para alguns valores de α e $C = 0.60$. Os tamanhos de rede usados são $L = 16, 32, 64, 128$.

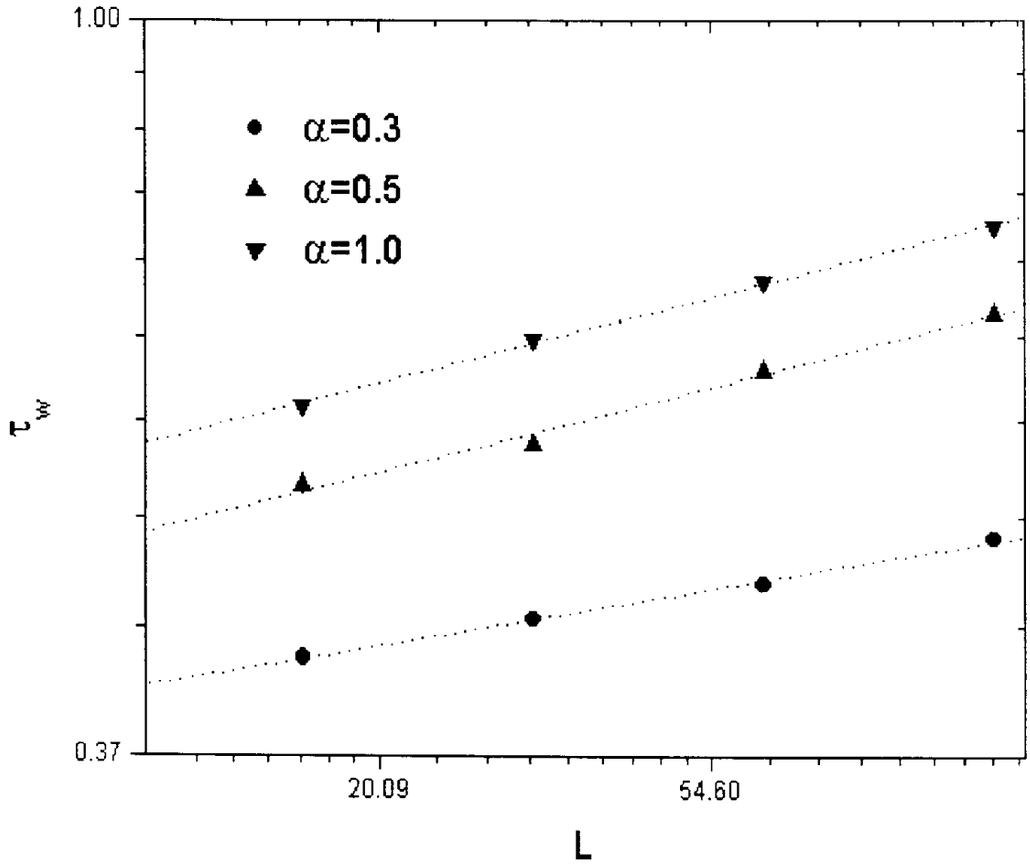

Figura 3-10: Gráficos do tempo de autocorrelação τ_w versus L para $C = 0.70$ e para alguns valores de $\alpha = 0.3, 0.5$ e 1.0. Os valores de z são $0.07(1), 0.11(1)$ e $0.12(1)$ respectivamente.

IFSC USP

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, generalizamos os algoritmos de aglomerados para sua aplicação no modelo de Ising diluído com correlação de sítios e ligações. Essa generalização é obtida pela extensão do mapeamento de Fortuin-Kasteleyn para o modelo. A técnica é bastante direta e não apresenta qualquer dificuldade. Por meio desta generalização, aplicamos a dinâmica de Wolff ao modelo e levantamos seu diagrama de fases e o comportamento crítico dinâmico. Na primeira etapa, simulamos o modelo para diversos valores de concentração C de átomos magnéticos e de correlação espacial α, inclusive para valores de concentrações muito próximos dos valores de concentrações críticas apresentados pelo modelo SBC. O algoritmo mostrou ser bastante eficiente, pois além das qualidades no que diz respeito a correlação estatística entre configurações, que será enfatizado adiante, possibilita uma redução considerável no tempo de CPU. Constatamos que esta redução é de mais ou menos 60% em comparação com outras dinâmicas.

O diagrama de fases, está em ótima concordância com o cenário exibido pelos resultados experimentais [8] e teóricos [9, 10, 11, 12, 13, 14]. Em $T = 0$, obtemos dois valores distintos de limiar de percolação, um para o caso $\alpha = 0$ e um outro para $\alpha \neq 0$. Como pode ser visto no diagrama de fases (Figura 3-4), a curva crítica para valores intermediários de correlação $0 < \alpha < 1$ apresenta uma curvatura para cima, que não está presente nos casos limites $\alpha = 0$ e $\alpha = 1.0$, em concordância com os resultados experimen-

tais para o composto magnético $KNi_xMg_{1-x}F_3$. Verificamos também um aumento do valor da derivada inicial $(1/T_c)(dT_c/dC)|_{C=1}$ com a correlação, e nossa localização da concentração crítica (em $T = 0$) é consistente com resultados anteriores [37, 38, 39, 41, 42, 44] obtidos por meio de teoria de percolação.

Estudamos também o comportamento crítico dinâmico tanto nos regimes de altas como no de baixas concentrações. Realizamos um intenso esforço computacional de forma a obter resultados onde a influência da configuração geométrica fosse reduzida ao máximo. Essa análise nos possibilita entender como o fenômeno de *retardamento crítico* se manifesta quando o algoritmo de Wolff é submetido a esse tipo de sistema físico. Constatamos uma melhora na eficiência do algoritmo à medida em que tanto a diluição quanto a correlação espacial eram aumentadas. Ou seja, observamos uma redução no tempo de autocorrelação para os casos citados. Esse comportamento é exatamente o oposto àquele exibido pelos algoritmos locais, onde existe um incremento dessa grandeza. Esse tempo nos indica o espaçamento necessário que deve ser tomado no espaço de configurações para que tenhamos estados completamente descorrelacionados. Possibilitando dessa forma, que eliminemos o efeito da correlação estatística entre configurações na estimativa de quantidades físicas de interesse. Observamos que para concentrações próximas a concentração crítica p_c, o tempo de autocorrelação não exibe o comportamento de escala $\tau \sim L^z$ verificado para outros valores de concentração, sendo necessárias algumas correções. Quanto aos valores obtidos para o expoente crítico dinâmico z para valores não muito próximos a p_c, verificamos que estes variam de $z \sim -0.04 - 0.13$. Esses valores são bastante pequenos, principalmente quando comparados ao desempenho exibido pelos algoritmos locais. Mais uma vez estes resultados vêm reforçar a idéia de que a dinâmica de Wolff praticamente elimina o fenômeno de *retardamento crítico.*

Como perspectivas, acreditamos que a aplicação dessa nova linha de algoritmos baseados na percolação por invasão e introduzido por Machta et al. [72], possa trazer resultados bastante interessantes em sistemas magnéticos desordenados. O algoritmo intitulado *algoritmo do aglomerado invasor* tem a grande vantagem de ser criticamente

auto-organizado, ou seja, o sistema evolui para a temperatura crítica T_c sem qualquer prévio ajuste desta. Resultados anteriores mostram que a autocorrelação é bastante reduzida, como também o tempo de relaxação (termalização), desde que o sistema se dirige rapidamente a T_c [72, 73]. Existem ainda várias discussões considerando a eficiência deste algoritmo na determinação de parâmetros críticos, pois o ensemble gerado por esta dinâmica embora muito próximo ao ensemble de Gibbs, não é idêntico. Por essas razões, o algoritmo tem sido alvo de discussões bastante interessantes e acreditamos que a aplicação deste a sistemas mais complexos deva trazer novas constatações.

Bibliografia

[1] R. H. Swendsen e J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).

[2] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).

[3] Jian-Sheng Wang, Robert H. Swendsen e Roman Kotecky, Phys. Rev. Lett **63**, 109 (1989).

[4] VI.S. Dotsenko, W. Selke e A. L. Talapov, Phyica A **170**, 278 (1991).

[5] Shoudan Liang, Phys. Rev. Lett. **69**, 2145 (1992).

[6] S. Chen e D. P. Landau, Phys. Rev. E **55**, 40 (1997).

[7] M. Hennecke e U. Heyken, J. Stat. Phys. **72**, 829 (1993).

[8] J. Albino O. de Aguiar, M. Engelsberg e H. J. Guggenheim. J. Magn. Magn. Mater.**54-57**,107 (1986).

[9] J. Albino O. de Aguiar, F. G. Brady Moreira e M. Engelsberg. Phys. Rev. B **33**. 652 (1986).

[10] M. Engelsberg, J. Albino O. de Aguiar, O. F. de Alcantara Bonfim e A. Franco Jr.. Phys. Rev. B **32**, 7143 (1985).

[11] A. A. P. da Silva e F. G. B. Moreira, Phys. Rev. B **40**, 10986 (1989).

[12] O. F. A. Bonfim e M. Engelsberg, Phys. Rev. B **34**. 1977 (1986).

[13] N. S. Branco, S. L. A. de Queiroz e R. R. dos Santos. Phys. Rev. B **38**. 946 (1988).

[14] A. J. F. de Souza e F. G. B. Moreira, J. Phys. (Paris) **49**, C8 (1988).

[15] Ulli Wolff, Phys. Lett. B **228**, 379 (1989).

[16] S. Wansleben e D. P. Landau, J. Appl. Phys. **61**, 3968 (1987).

[17] Dieter W. Heermann e Anthony N. Burkitt, Physica A **162**, 210 (1990).

[18] A. Billoire, R. Lacaze, A. Morel, S. Gupta, A. Irback e B. Petersson, Nucl. Phys. **B35**8, 231 (1991).

[19] S. Jain, J. Phys. A L667 (1986).

[20] Debashish Chowdhury e Dietrish Stauffer, Physica A **19**, L19 (1986).

[21] B. Biswal e Debashish Chowdhury, Phys. Rev. A **43**. 4179 (1991).

[22] Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H. e Teller E., J. Chem. Phys. **21** , 1087 (1953).

[23] P. Tamayo, R. C. Brower e W. Klein, J. Stat. Phys. **58**, 1083 (1990).

[24] A. Coniglio e W. Klein, J. Phys. A **13**, 2775 (1980).

[25] P. W. Kasteleyn e C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Japan **26** (Suppl.), 11 (1969); C. M. Fortuin e P. W. Kasteleyn, Physica **57**, 536 (1972).

[26] Marco D 'onorio de Meo, Dieter W. Heermann e Kurt Binder. J. Stat. Phys. **60**. 585 (1990).

[27] J. Hoshen e R. Kopelman, Phys. Rev. B **14**. 3438 (1976).

[28] G. T. Barkema e M. E. J. Newman, Monte Carlo Methods in Chemical Physics. D. Fergusun, J. I. Siepmann e D. G. Truhlar (eds.), Wiley, New York (1997).

[29] X.-J. Li e A. D. Sokal, Phys. Rev. Lett. **63**, 827 (1989).

[30] B. I. Hapelrin, Phys. Rev. B **8**, 4437 (1973).

[31] C. F. Baillie e P. D. Coddington, Phys. Rev . B **43**, 10617 (1991).

[32] Ulli Wolff, Nucl. Phys. **B322**, 759 (1989).

[33] Jian-Shen Wang e Robert H. Swendsen, Physica A **167**, 565 (1990).

[34] Paul D. Coddington e Clive F. Baillie, Phys. Rev. Lett. **68**, 962 (1992).

[35] R. B. Stinchcombe, in Phase Transitions and critical phenomena, editado por C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983), Vol. 7, p. 151.

[36] L. J. de Jongh, in Magnetic Phase Transitions, Proceedings of a Summer School at the Ettore MAjorana Center, Erice, Italy, July 1983, editado por M. Ausloos e R. J. Elliot, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 48 (Springer, New York, 1983), p. 172.

[37] J. Chalupa, P. L. Leath e G. R. Reich, J. Phys. C **12**, L31 (1979).

[38] P. R. A. Campos, L. F. C. Pessoa e F. G. B. Moreira, Phys. Rev. B **56**, 40 (1997).

[39] D. C. Rapaport, J. Phys. A **18**, L175 (1985).

[40] R. Honmura e T. Kaneyoshi, J. Phys. C **12**, 3979 (1979); **11**, L973 (1978).

[41] N. S. Branco, S. L. A. de Queiroz e R. R. dos Santos, Phys. Rev. B **42**, 458 (1990).

[42] N. S. Branco e K. D. Machado, Phys. Rev. B **47**, 493 (1993).

[43] S. Coutinho, J. A. O. de Aguiar, F. G. B. Moreira e J. R. L. de Almeida, Phys. Rev. B **36**, 8478 (1987).

[44] L. M. de Moura e R. R. dos Santos, Phys. Rev. B **45**, 1023 (1992).

[45] R. Bulirsch e J. Stoer, Numer. Math. **6**, 413 (1964).

[46] Malte Henkel e Gunter Schutz, J. Phys. A **21**, 2617 (1988).

[47] P. R. A. Campos e R. N. Onody, Phys. Rev. B **56**, 14529(1997).

[48] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke e T. Schweizer, Phys. Rev. Lett. **75**, 2792 (1995).

[49] C. Ruge e F. Wagner, J. Stat. Phys. **66**, 99 (1992).

[50] C. Ruge, S. Dunkelmann e F. Wagner, Phys. Rev. Lett. **69**, 2465 (1992).

[51] Wolfhard Janke, Phys. Rev. B **55**, 3580 (1997).

[52] J.-S. Wang, W. Selke, VI.S. Dotsenko e V. B. Andreichenko, Physica A **164**, 221 (1990).

[53] W. Janke, Phys. Lett. A **148**, 306 (1990).

[54] Mario Nicodemi, Physica A **238**, 9 (1997).

[55] F. Matsubara, A. Sato, O. Koseki e T. Shirakura, Phys. Rev. Lett. **78**, 3237 (1997).

[56] R. Ben-Av e G. Bhanot, Phys. Lett. B **305**, 131 (1993).

[57] Umberto Pezzella e Antonio Coniglio, Physica A **237**, 353 (1997).

[58] K. Binder, J. Stat. Phys. **24**, 69 (1981).

[59] V. Cataudella, G. Franzese, M. Nicodemi, A. Scala e A. Coniglio, Phys. Rev. Lett. **72**, 1541 (1994).

[60] Jésus Salas e Alan D. Sokal, J. Stat. Phys. **87**, 1 (1997).

[61] Meral Aydin, Yigit Gunduç e Tarik Çelik, Physica A **230**, 651 (1996).

[62] Yigit Gunduç, Tarik Çelik e Meral Aydin, Physica A **234**, 801 (1997).

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

[63] P. W. Leung e Christopher L. Henley, Phys. Rev. B **43**, 752 (1991).

[64] C. Ruge, S. Dunkelmann, F. Wagner e J. Wulf, J. Stat. Phys. **73**, 293 (1993).

[65] Lev N. Shchur e Henk W. J. Blöte, Phys. Rev. E **55**, R4905 (1997).

[66] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M. E. J. Newman, The Theory of Critical Phenomena, Oxford Science Publications (1995).

[67] F. Y. Wu, Rev. of Modern Phys. **54**(1), (1982).

[68] Jian-Sheng Wang e Debashish Chowdhury, J. Phys. **50**, 2905 (1989).

[69] H. -O. Heuer, Europhys. Lett. **12** (6), 551 (1990).

[70] F. D. Aarão Reis, S. L. A. de Queiroz e Raimundo R. dos Santos, Cond-Mat/9706202.

[71] H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi e J. J. Ruiz-Lorenzo, Cond-Mat/9707179.

[72] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer e L. V. Chayes, Phys. Rev. Lett **75**, 2792 (1995).

[73] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer e L. V. Chayes, Phys. Rev. E **54**, 1332 (1996).

[74] G. T. Barkema e J. F. Marco, Phys. Rev. Lett **71**, 2070 (1993).

[75] Ferenc Niedermayer, Phys. Rev. Lett. **61**, 2026 (1988).