

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

PROPAGAÇÃO DE DANOS EM SISTEMAS
COOPERATIVOS:
PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

ANTONIO SOARES DOS ANJOS FILHO

Orientador: **Prof. Dr. ANANIAS MONTEIRO MARIZ**

Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte como requisito parcial à obtenção do grau de **DOUTOR** em **CIÊNCIAS**.

Natal, Novembro de 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Para Pessoas Especiais:

Meus Pais

**Antonio Soares dos Anjos e
Maria Undina Sales dos Anjos**

e Meus irmãos

**Amilton Sales dos Anjos e
Maria Aparecida Sales dos Anjos.**

Agradecimentos

Ao Professor Ananias Monteiro Mariz pela orientação segura e competente;

Aos Professores Fernando Dantas Nobre e Francisco Alexandre que deram uma enorme contribuição a esta tese e a quem sou muito grato por suas influências e auxílio desde o mestrado.

Agradeço também aos Professores, Paulo Fulco, Eudenilson Lins de Albuquerque, Luciano Rodrigues da Silva, Claudionor Gomes Bezerra, Carlos Chesman, Ezequiel Silva de Souza, Nilson Sena, que deram contribuição à minha carreira científica.

Ao amigo Darlan Araujo Moreira por sua colaboração, que foi decisiva para a conclusão deste trabalho, com sua experiência computacional.

Aos colegas do Departamento de Física da UFRN em especial Fábio Ferreira, Isaias Coelho, Sharon Dantas, Armando, Edcarlos, Ijanílio, Jefferson, Leonardo, Bruno, Izan e outros, pelo companheirismo e convivência.

À Rosemary Nogueira Leão, pelo apoio, paciência, e alegre convivência em todas as etapas deste trabalho.

Aos Funcionários do PPG-Física, Celina, Lindalva, Nivânia, pelos serviços prestados.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Através de cálculos de alta precisão das funções de correlação e dos parâmetros de ordem, investigamos as propriedades críticas de vários modelos ferromagnéticos bidimensionais, a saber: (i) Potts q -estados; (ii) Ashkin-Teller isotrópico; (iii) Ising de spin-1.

Utilizamos simulações computacionais, obtidas a partir de relações analíticas exatas, conectando as quantidades acima mencionadas e certas combinações de Danos (diferenças entre duas configurações microscópicas de um modelo), que são válidas para qualquer dinâmica ergódica.

Todos os resultados encontrados (temperaturas e expoentes críticos) concordam com os valores conhecidos, em várias casas decimais, destacando-se em particular a reprodução da linha de Baxter (no caso ii) onde os expoentes variam continuamente, resultado de difícil obtenção por métodos tradicionais. Também mostramos que este método é menos sensível aos efeitos de tamanho finito que aqueles baseados no procedimento usual de simulação de Monte-Carlo. Tais fatos indicam a potencialidade desta abordagem para investigar situações ainda insuficientemente exploradas, nos modelos acima analisados e em outros semelhantes.

Abstract

High-precision calculations of the correlation functions and order parameters were performed in order to investigate the critical properties of several two-dimensional ferromagnetic systems: (i) the q -state Potts model; (ii) the Ashkin-Teller isotropic model; (iii) the spin-1 Ising model.

We deduced exact relations connecting specific damages (the difference between two microscopic configurations of a model) and the above mentioned thermodynamic quantities which permit its numerical calculation, by computer simulation and using any ergodic dynamics.

The results obtained (critical temperature and exponents) reproduced all the known values, with an agreement up to several significant figures; of particular relevance were the estimates along the Baxter critical line (Ashkin-Teller model) where the exponents have a continuous variation. We also showed that this approach is less sensitive to the finite-size effects than the standard Monte-Carlo method.

This analysis shows that the present approach produces equal or more accurate results, as compared to the usual Monte Carlo simulation, and can be useful to investigate these models in circumstances for which their behavior is not yet fully understood.

Índice

Agradecimentos	i
Resumo	ii
Abstract	iii
Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	xi
Introdução	1
1 Introdução à Mecânica Estatística das Transições de Fase	4
1.1 Introdução Geral	4
1.2 O Modelo de Ising	11
1.3 Simulação de Monte Carlo	13
2 Propagação de Danos	23
2.1 A Técnica de Propagação de Danos	23
2.2 Resumo de Resultados Conhecidos	27
2.2.1 O Modelo de Ising Ferromagnético	28
2.2.2 Aplicações do Método em Modelos Mais Complexos . . .	33
2.2.3 Resultados Analíticos	38

3	Propriedades Térmicas do Ferromagneto de Potts	46
3.1	Introdução	46
3.2	O Modelo e o Procedimento Numérico	53
3.3	Resultados e Discussões	57
4	Propagação de Danos no Ferromagneto de Ashkin-Teller	63
4.1	Introdução	63
4.2	O Ferromagneto de Ashkin-Teller em Duas Dimensões	66
4.3	Danos e Propriedades Termodinâmicas	68
4.4	Resultados e Discussões	74
5	Danos e Funções Termodinâmicas no Modelo de Ising com Spin 1	92
5.1	Introdução	92
5.2	Relações Exatas entre Danos e Funções Termodinâmicas	96
5.2.1	Uma Outra Abordagem para Obter os Parâmetros de Ordem	103
5.3	Implementação da Técnica: Resultados e Discussões	106
5.4	Conclusão	117
6	Conclusão	119
	Referências Bibliográficas	122

Lista de Figuras

2.1	Parâmetro de ordem ψ (dano médio, $\langle D \rangle$), para o modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada [29]. (a) Glauber; (b) Q2R. $k_B T_C = (2.2692\dots)J$ (Figura retirada da ref. [29]).	28
2.2	Tempo médio necessário $\langle \tau_D \rangle$ para danificar todos os sítios pelo menos uma vez. (Figura retirada da ref. [29]).	29
2.3	Diagrama de fases no plano campo-temperatura com as fases caótica e congelada para o modelo de Ising ferromagnético em $d=3$ dimensões, obtido por Le Caër, segundo a dinâmica de Glauber (Figura retirada da ref. [32]).	30
2.4	Distância de Hamming $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para danos iniciais: $D(0) = 1(\triangle)$ e $D(0) = 1/2(\blacksquare)$. Tempo = 500 passos de Monte Carlo. Modelo de Ising ferromagnético em $d=3$ dimensões, obtido por Derrida e Weisbuch, segundo a dinâmica de banho térmico (Figura retirada da ref. [42]).	31
2.5	Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle D(t) \rangle$ versus a temperatura T num tempo $t = 500$ para as condições iniciais: (a) $\{\theta_i^A\} = 0$ e $\{\theta_i^B\} = \pi$; (b) $\{\theta_i^B\} = \{\theta_i^A\} + \pi$ ($\{\theta_i^A\}$ aleatórios); (c) $\{\theta_i^A\}$ e $\{\theta_i^B\}$ aleatórios e independentes; (d) $\{\theta_i^A\}$ aleatório e $\{\theta_i^B\} = \{\theta_i^A\}$ exceto por um único spin θ_i^B oposto a θ_i^A . (Figura retirada da ref. [49])	35
2.6	Dano médio como função da temperatura escalada T/T_{CF} para a dinâmica de banho térmico, com três diferentes condições iniciais. Os resultados da atualização paralela (símbolos brancos) são comparados com os da atualização sequencial (símbolos pretos). Acima de $T^* \approx 0.3$, dois efeitos são observados: $\langle D \rangle$ deixa de depender das condições iniciais, como também do algoritmo de atualização (Figura retirada da ref. [54])	36

2.7	Log-Log da quantidade $[M(q)/M(0)]^{1/q}$ versus L para: (a) o vidro de spin de Ising $\pm J$ tridimensional, (b) o ferromagneto de Ising puro tridimensional, em $T = T_C = 4.51$. Os momentos são: M_0 (\circ), m_1 (\bullet), m_2 ($+$), m_3 (Δ), e m_4 (\times) (Figura retirada da ref. [44])	38
2.8	A função de correlação $G(r) = \sum_{ i =r} C_{oi}$ (\blacktriangle para $T = 2.6$ e Δ para $T = 3.0$, obtidas a partir de simulações de MC) e $2\bar{D}(r)(1 - m)$, onde $\bar{D}(r) = \sum_{ i =r} D_{oi}$ (\bullet para $T = 2.6$ e \circ para $T = 3.0$, obtidas a partir de simulações de PD) como função de r . (Figura retirada da ref. [56])	43
2.9	A susceptibilidade χ calculada de forma padrão (\bullet) e via danos (Δ), $\chi = 2\bar{D}(r)(1 - m)$, onde $\bar{D}(r) = \sum_{ i =r} D_{oi}$, como uma função da temperatura. (Figura retirada da ref. [56])	44
3.1	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3, \dots, 8$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 64$ amostras num intervalo de tempo $t = 2000$. O dano inicial $D(0) = 1/N$ foi aplicado na rede quadrada de tamanho $L = 50$ (Figura retirada da ref.[68]).	49
3.2	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais: (a) $D(0) = 1$; (b) $D(0) = 0,5$; (c) $D(0) = 0,05$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 64$ a cada tempo $t = 10000$. (Figura retirada da ref. [69]) . .	50
3.3	A função de correlação $C(r)$ versus r , no caso $q = 3$, para diferentes temperaturas (escalada pela correspondente temperatura crítica exata) próximo da criticalidade.	58
3.4	Gráfico Log-Log das funções de correlação $C(r)$ versus r exibidas na figura 3.3.	59
3.5	A magnetização por spin versus temperatura (em unidades da correspondente temperatura crítica exata), no caso $q = 3$. A linha cheia é só uma guia para o leitor, ao passo que a linha tracejada, em baixas temperaturas, corresponde a uma extrapolação para temperatura nula.	60

3.6	Os expoentes críticos β , obtidos a partir da presente abordagem PD (símbolos vazios) são comparados com os valores exatos (círculos cheios) para diferentes valores de q . No caso $q = 5$, três diferentes tamanhos de rede foram usados, ao passo que nos outros casos, os resultados de nossas simulações correspondem a um tamanho de rede $L = 100$	61
4.1	Diagrama de fases do ferromagneto de Ashkin-Teller em uma rede quadrada no espaço (t_1, t_2) . As três fases apresentadas são, a saber, a paramagnética (P), ferromagnética (F), e a intermediária (I). A região hachurada é não física (Figura retirada da ref.[89])	67
4.2	Ajustes lineares para a computação dos expoentes η , associados com as funções de correlação $C^{(1)}(r)$. (a) Os dados obtidos por simulações padrões de Monte Carlo (círculos pretos) e a presente abordagem de propagação de danos (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, são comparados. Vemos que os efeitos de tamanho finito são reduzidos no último procedimento. (b) Dados produzidos pela presente abordagem (PD) para tamanhos $L = 50$ (quadrados pretos) e $L = 100$ (quadrados vazios).	79
4.3	Comparação dos parâmetros de ordem do modelo Ashkin-Teller [(a) magnetização; (b) polarização] computados através de simulações padrões de MC (círculos pretos) e da presente abordagem de PD (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$. A quantidade adimensional T/T_C muda de tal modo que as coordenadas K_1 e K_2 [conforme a equação (4.27)] varia ao redor das coordenadas dos pontos X_2 , dados na tabela 4.1. Nota-se uma redução dos efeitos de tamanho finito no procedimento de PD.	81
4.4	A função de correlação $C^{(1)}(r)$ versus r , para o ponto X_2 , para três razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.998$, caso em que o gráfico $\log_{10}[C^{(1)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, conduzindo à estimativa $\eta = 0.2479 \pm 0.0057$	83

4.5	A função de correlação $C^{(2)}(r)$ versus r , para o ponto X_2 , para três típicas temperaturas T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.997$, caso em que o gráfico do $\log_{10}[C^{(2)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, resultando na estimativa $\eta_p = 0.3674 \pm 0.0067$	84
4.6	(a) Os expoentes críticos η , obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com o valor exato $\eta = 1/4$ (círculos cheios) para os pontos investigados (representados aqui em termos de suas correspondentes razões t_2/t_1) ao longo da linha de Baxter do modelo Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada. (b) Os expoentes críticos η_p , obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com os valores exatos (círculos cheios) para os mesmos pontos do caso (a). Em muitos casos os símbolos parecem superpostos, de tal modo que distinções não são vistas claramente.	86
4.7	Os parâmetros de ordem, magnetização (a) e polarização (b), para o ponto X_2 , em termos da temperatura reduzida T/T_C (pontos pretos), obtidos a partir da presente abordagem numérica, e usando a evolução do tipo (III) (ver texto). As linhas são guias para o leitor.	88
4.8	Os expoentes críticos β (a) e β_p (b), obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com os valores exatos (círculos cheios) para os pontos investigados (representados aqui em termos de suas correspondentes razões t_2/t_1) ao longo da linha de Baxter do modelo de Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada. Em muitos casos os símbolos aparecem superpostos, de tal modo que distinções não são vistas claramente.	90
5.1	Diagrama de fases do modelo BEG próximo de $L/J = -1$. Linhas sólidas (tracejadas) representam as fronteiras de fases de segunda ordem (primeira ordem). As linhas das fronteiras de fases são rotuladas pelos valores de $d = D/J$. (Figura retirada da ref.[110])	94

5.2	A função de correlação $C^{(11)}(r)$ versus r (rede quadrada de tamanho linear $L = 100$), para razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.999$, caso em que o gráfico de $\log_{10}[C^{(1)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, conduzindo à estimativa $\eta = 0.2507 \pm 0.0025$	110
5.3	A magnetização m versus T/T_C para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$. O inset mostra o gráfico de $\log_{10}(m)$ versus $\log_{10}(1 - T/T_C)$, conduzindo a estimativa $\beta = 0.1249 \pm 0.0003$	111
5.4	Ajustes lineares para a computação dos expoentes η , associados com as funções de correlação $C^{(11)}(r)$. (a) Os dados obtidos por simulações padrões de Monte Carlo (círculos pretos) e a presente abordagem de propagação de danos (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, são comparados. Vemos que os efeitos de tamanho finito são reduzidos no último procedimento. (b) Dados produzidos pela presente abordagem (PD) para tamanhos $L = 50$ (quadrados pretos) e $L = 100$ (quadrados vazios).	114
5.5	(a) A função de correlação $C^{(22)}(r)$ versus r , para razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. (b) A polarização p versus T/T_C	116

Lista de Tabelas

1.1	Definições de alguns expoentes críticos para um magneto.	9
1.2	Valores típicos para os expontes críticos mais usuais.	11
3.1	Os expoentes críticos β e η para o modelo de Potts ferromagnético bidimensional, obtidos a partir da presente abordagem numérica, são comparados com os correspondentes valores exatos [6].	62
4.1	Coordenadas dos pontos críticos mostrados no diagrama de fases da figura 4.1 em ambas variáveis (t_1, t_2) e (K_1, K_2) . Os pontos I_1, \tilde{P} , e X_1, \dots, X_5 , estão ao longo da linha de Baxter.	74
4.2	Os expoentes críticos η e η_p , para vários pontos ao longo da linha de Baxter do modelo ferromagnético de Ashkin-Teller em uma rede quadrada, como computado a partir do presente método. Seus correspondentes valores exatos podem ser calculados a partir das equações (4.25) e (4.26) [64], conduzindo a um expoente variando continuamente η_p (cujos valores nos pontos de interesse são apresentados acima), e para $\eta = 1/4$ ao longo da linha completa.	85
4.3	Os expoentes críticos β e β_p , para vários pontos ao longo da linha de Baxter do modelo de Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada, como computado pelo presente método, são comparados quantitativamente com os valores exatos calculados a partir das equações (4.23)–(4.25) [64].	89
5.1	Existem seis possíveis tipos de sítios danificados para o modelo Ising spin-1.	96
5.2	Possíveis valores da variável Π no intervalo de 10 (dez) passos de Monte Carlo.	97

Introdução

O estudo de Transições de Fases e Fenômenos Críticos (FC), isto é, mudanças qualitativas globais que ocorrem bruscamente em sistemas de muitos graus de liberdade, é um campo de pesquisa que abarca várias Ciências, como Economia, Sociologia e principalmente Física, onde FC têm sido observados em Cosmologia, Física de Partículas e, principalmente, Física da Matéria Condensada (tema de interesse no restante deste trabalho), entre outras áreas. Geralmente governados por relações não lineares, os fenômenos críticos são também intimamente conectados com modernos conceitos que vão de caos até fractais.

A não linearidade subjacente aos FC é também responsável pelas dificuldades matemáticas encontradas na obtenção de resultados analíticos exatos nos sistemas estudados, o que tem provocado o desenvolvimento de inúmeras técnicas aproximativas (Campo Médio, Expansão em Séries, Grupo de Renormalização e Simulação de Monte-Carlo entre outras) que tornaram possíveis a obtenção de uma impressionante gama de resultados que permitiram o esclarecimento das características básicas dos FC. Em geral, estes resultados são obtidos a partir de sistemas modelos, que são construções teóricas que objetivam captar, da forma mais simples possível, os aspectos fundamentais de sistemas reais. Então, técnicas padrões de Física, basicamente de Física Estatística, são usadas para extrair as propriedades físicas mensuráveis dos sistemas investigados como, por exemplo, o diagrama de fases (representando estados diferentes de equilíbrio termodinâmico) e suas caracterizações, obtidas através de grandezas termodinâmicas como os parâmetros de ordem e as funções de correlação.

Neste trabalho caracterizamos o comportamento crítico de sistemas-modelos cooperativos a partir de um método de obtenção das grandezas acima mencionadas, em duas diferentes abordagens para os modelos, a saber, de Potts q -estados, Ashkin-Teller e o modelo de Ising com spin-1, que são modelos bastante usados para descrever uma ampla variedade de sistemas reais como ligas quaternárias e magnetos complexos.

A técnica utilizada é denominada de propagação de danos, e consiste no exame e monitoração da diferença entre duas configurações microscópicas do modelo, criadas com uma pequena discrepância e que evoluem no tempo (via simulação numérica), sujeitas às mesmas condições físicas (campo, temperatura....). O interesse principal desta técnica é entender quais são os fatores responsáveis pela regressão ou ampliação da diferença inicial e suas implicações no comportamento macroscópico (termodinâmico) do sistema, em particular, no seu comportamento crítico.

Como veremos em capítulos posteriores, esta abordagem, nos modelos acima citados, permite a obtenção do comportamento das propriedades termodinâmicas (parâmetro de ordem e função de correlação) e dos seus respectivos expoentes críticos estáticos associados, com resultados bastantes precisos que em alguns casos, até onde sabemos, podem ser considerados como pioneiros no que se trata de resultados obtidos por métodos numéricos. Estes resultados são obtidos diretamente de algumas funções definidas a partir dos danos presentes nos modelos, sendo válidos para qualquer rede cristalina homogênea, em que o modelo estiver definido, bem como para qualquer método de simulação computacional empregado (desde que respeite a ergodicidade).

No Capítulo 1, fazemos um breve resumo de fenômenos críticos, do ponto de vista de Mecânica Estatística, e descrevemos também os princípios físicos e os procedimentos necessários para implementar o método de simulação de Monte-Carlo, algumas das dinâmicas usadas, bem como certas dificuldades inerentes à esta técnica, que servirão de embasamento ao material que segue.

No Capítulo 2, nós expomos a técnica de propagação de danos (que foi am-

plamente usada nesta tese), e alguns de seus resultados essenciais, em particular algumas conexões feitas em trabalhos anteriores que serviram de base para a obtenção de nossos resultados.

Os capítulos 3 e 4 são dedicados à apresentação da metodologia e dos resultados obtidos via simulações de propagação de danos através de relações exatas para os sistemas ferromagnéticos, de Potts q -estados e Ashkin-Teller, em rede quadrada. No que diz respeito ao modelo de Potts, a eficiência do método foi ilustrada através de estimativas precisas dos expoentes β e η , associados, respectivamente, com a magnetização e a função de correlação, para $q = 2, 3$, e 4 . Para o modelo Ashkin-Teller, a análise de tais quantidades foram restritas à linha de Baxter, bem conhecida por seus expoentes críticos variando continuamente. O método forneceu estimativas precisas, apesar dos tamanhos de rede serem considerados pequenos, fornecendo concordâncias dos valores computados dos expoentes críticos com os correspondentes resultados exatos dentro de quatro casas decimais. Neste último caso, além de uma significativa redução de efeitos de tamanho finito com respeito às simulações padrões de Monte Carlo, a bem conhecida quebra de universalidade ao longo da linha de Baxter foi detectada, com os resultados sugerindo variações suaves e contínuas dos expoentes críticos, que representa uma tarefa não trivial dentro das simulações de Monte Carlo.

No Capítulo 5, investigamos o modelo Ising spin-1 de interação de primeiros vizinhos através da abordagem analítica de propagação de danos. Além de derivar relações exatas entre quantidades computáveis através de simulações de propagação de danos e propriedades termodinâmicas, ilustramos o método por aplicá-lo ao modelo spin-1 ferromagnético de interação de primeiros vizinhos na rede quadrada, para testar as hipóteses de universalidade do presente modelo. Propriedades térmicas relevantes do sistema, a saber, a temperatura crítica, as funções de correlação e os parâmetros de ordem também foram estimadas.

Finalmente, apresentamos no Capítulo 6 nossas conclusões e perspectivas e/ou extensões que se abrem com a nossa tese, com a menção de trabalhos futuros (alguns em andamento) na área.

Capítulo 1

Introdução à Mecânica Estatística das Transições de Fase

Neste capítulo, faremos uma breve introdução à Mecânica Estatística aplicada à área de fenômenos críticos. Definições de parâmetro de ordem, expoentes críticos, comprimento de correlação, etc, são introduzidos, juntamente com uma caracterização qualitativa do modelo de Ising. Na sequência, uma discussão sobre procedimentos necessários para implementar o método de simulação de Monte-Carlo, que foi amplamente utilizado nesta tese, fecham o objetivo deste capítulo.

1.1 Introdução Geral

Os sistemas físicos sempre que analisados do ponto de vista macroscópico foram bem explicados pela teoria fenomenológica da Termodinâmica Clássica. Entretanto, com a aceitação da constituição atômica da matéria (no início do século XX) e com o desenvolvimento da Mecânica Quântica, a análise sobre o comportamento desses sistemas passou a exigir uma teoria mais abrangente que respondesse a muitas indagações sobre a sua composição e evolução do ponto de vista microscópico.

A Mecânica Estatística (ME) investiga a evolução global de um dado sistema

macroscópico, isto é, como suas configurações microscópicas mudam no tempo, como o mesmo atinge estados macroscópicos de equilíbrio, respeitando os vínculos internos e externos aos quais está submetido. Sua base teórica foi estabelecida com os notáveis trabalhos de Maxwell (a lei da distribuição das velocidades moleculares), de Boltzmann (hipótese ergódica, equação de transporte, o teorema H que caracteriza o estado de equilíbrio como a situação mais provável), de Gibbs (teoria dos ensembles), para finalmente se consolidar com as aplicações da radiação do corpo negro (Planck), dos cálculos de calores específicos para sólidos (Einstein e Debye), e do estudo do magnetismo (Langevin, Curie, Weiss) [1].

Por se tratar de sistemas que possuem muito graus de liberdade (tipicamente $N \sim 10^{23}$) e por seus constituintes moleculares apresentarem ingredientes probabilísticos nos seus comportamentos físicos, a ME tem como base as leis da Mecânica e os princípios da Teoria das Probabilidades[2].

Um dos resultados mais importantes desta teoria (ME), é a chamada distribuição de Gibbs[3]: um dado sistema, com número fixo de partículas N , em contato com um reservatório à temperatura T (medida em Kelvin, K), evolui para um estado de equilíbrio termodinâmico, o qual é atingido quando a probabilidade de visita à uma dada configuração microscópica α de energia E_α , é dada por:

$$p(\alpha) = \frac{\exp(-\beta E_\alpha)}{Z}, \quad (1.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, $k_B = 1.381 \times 10^{-16} \text{ergs/K}$ é a constante de Boltzmann. O fator de normalização Z é a chamada função de partição, a partir da qual as grandezas termodinâmicas, no equilíbrio, podem ser calculadas. O banho térmico acima referido caracteriza o denominado ensemble canônico. Para outros tipos de vínculos, outras distribuições são usadas para estabelecer diferentes tipos de equilíbrio (ensemble microcanônico, grã-canônico, de pressões,...).

Uma das áreas mais fascinantes da Física nas últimas décadas, abordada com sucesso pela Mecânica Estatística, talvez seja a que envolva os chamados fenômenos críticos,

caracterizados por grandes e bruscas mudanças em algumas propriedades globais do sistema, quando variam as condições externas a que são submetidos. Dentre os vários tipos destes fenômenos, a classe mais representativa são as transições de fase, que são mudanças entre diferentes estados de equilíbrio termodinâmico. As formas mais conhecidas destas transições são as transições sólido-líquido-gás, transições magnéticas (Ex: ferromagnética-paramagnética), supercondutoras e estruturais.

As primeiras idéias consistentes a respeito de transições de fase são datadas de 1873, quando em tese de doutorado, Van der Waals apresentou uma teoria que descreve a continuidade dos estados líquido e gasoso; mais tarde, os seus principais ingredientes também estariam na abordagem de Curie-Weiss para a transição ferromagnética. Ditas como clássicas [5], a teoria de Van der Waals (fluidos), Ornstein-Zernike (opalescência crítica), Langevin (paramagnetismo), Weiss (ferromagnetismo), etc, são teorias simples que esclarecem alguns aspectos essenciais (qualitativos) dos fenômenos, que serviram como ponto de partida para teorias mais consistentes para as transições de fase.

Teoricamente, estas transições de fase são caracterizadas por uma não analiticidade dos potenciais termodinâmicos, refletida em divergências (ou descontinuidades) de suas derivadas que, como sabemos, estão diretamente relacionadas às respostas termodinâmicas (calor específico, susceptibilidade magnética, etc) e que, em nível microscópico, um aspecto comum às mesmas, é o aumento da cooperatividade de seus graus de liberdade microscópicos, que se traduz por correlações espaço-temporais de grande alcance, que são responsáveis pelo surgimento de singularidades nas funções termodinâmicas.

Uma das formas de classificar estas transições é baseada na análise sobre a singularidade da energia livre, proposta por Ehrenfest [7]: sistemas que apresentam descontinuidade na primeira derivada da energia livre exibem transições de fase de primeira ordem. No entanto, se as primeiras derivadas forem contínuas, mas as derivadas de segunda ordem apresentarem singularidades a transição é dita de 2^a ordem, e assim sucessivamente. Uma classificação mais moderna, é feita baseada no calor latente que, se nulo, indica uma transição contínua, em oposição à transição descontínua (ou de 1^a ordem).

O comportamento singular (não analítico) das funções termodinâmicas nas transições de fase contínuas, fruto de flutuações microscópicas que atingem e persistem em escalas macroscópicas, quando investigado nas vizinhanças do ponto crítico, permitem identificar um conjunto de números, chamados expoentes críticos, que caracterizam a transição. Esses expoentes quando determinados caracterizam o comportamento crítico do sistema.

Um exemplo bastante conhecido, que exhibe os ingredientes qualitativos de uma transição de fase, é o de um sistema ferromagnético que apresenta magnetização espontânea (a campo magnético externo nulo) para $T < T_c$, e que perde suas características magnéticas para $T \geq T_c$. Nestes tipos de sistemas uma grandeza de grande relevância na identificação das fases é o chamado parâmetro de ordem, que varia continuamente em uma transição contínua e possui uma forma descontínua (salto) na transição de 1ª ordem. Dependendo do sistema físico, esta grandeza pode ser representada por um escalar, um vetor, número complexo, tensor, etc.

Normalmente estas transições de fase são acompanhadas por uma quebra de simetria. Por exemplo, no caso de um ferromagneto a uma temperatura acima de sua temperatura de transição, T_c , ele é simétrico, isto é não têm qualquer direção preferida (fase desordenada), com respeito à magnetização. Quando reduzimos a temperatura T abaixo de T_c , porém, uma magnetização espontânea se desenvolve em uma direção específica (fase ordenada).

Além destes, parâmetro de ordem e expoentes críticos, vale ressaltar duas outras grandezas relevantes nos estudos dos fenômenos críticos a saber, a função de correlação de dois pontos, que foi amplamente analisada neste trabalho, e o comprimento de correlação associado a tal função, para que se tenha um entendimento mais profundo do que ocorre em nível microscópico. No caso do ferromagnetismo, por exemplo, define-se a função de correlação spin-spin:

$$\Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle \quad (1.2)$$

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

$$\Gamma(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \equiv \Gamma_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2. \quad (1.3)$$

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

$$\Gamma(\vec{r}) \sim r^{-\tau} \exp(-r/\xi), \quad (1.4)$$

onde τ é uma constante e ξ define o comprimento de correlação do sistema. Já para temperaturas próximas da crítica o sistema desenvolve correlações de longo alcance ($\xi \rightarrow \infty$) e nessas condições, a equação (1.4) fica reduzida a,

$$\Gamma(\vec{r}) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (T = T_C), \quad (1.5)$$

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

A divergência do comprimento de correlação

$$\xi \propto t^{-\nu}, \quad (1.6)$$

onde

$$t = (T - T_c)/T_c, \quad (1.7)$$

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

Para caracterizarmos os principais expoentes críticos, vamos imaginar o mesmo exemplo do sistema ferromagnético, de parâmetros críticos $T = T_c$ e $H = 0$. Próximo a este ponto, definimos os expoentes pelas relações mostrados na tabela 1.1,

Magnetização	$M \sim (-t)^\beta$	$t < 0$
Calor específico	$C_H \sim (-t)^{-\alpha'}$	$t < 0$
Calor específico	$C_H \sim (t)^{-\alpha}$	$t > 0$
Susceptibilidade	$\chi_T \sim (-t)^{-\gamma'}$	$t < 0$
Susceptibilidade	$\chi_T \sim (t)^{-\gamma}$	$t > 0$
Equação de estado	$M \sim H^{1/\delta}$	$t = 0$
Comprimento de correlação	$\xi \sim (-t)^{-\nu'}$	$t < 0$
Comprimento de correlação	$\xi \sim (t)^{-\nu}$	$t > 0$
Função de correlação	$\Gamma(r) \sim r ^{-(d-2+\eta)}$	$H = t = 0$

Tabela 1.1: Definições de alguns expoentes críticos para um magneto.

Pode-se mostrar, a partir das definições acima juntamente com argumentos gerais da Termodinâmica e da Mecânica Estatística, que os expoentes satisfazem a um conjunto de desigualdades, tais como:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke}[8]) \quad (1.8)$$

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (\text{Griffiths}[9]) \quad (1.9)$$

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma \quad (\text{Fisher}[10]) \quad (1.10)$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \quad (\text{Josephson}[11]) \quad (1.11)$$

Teorias modernas (tais como teorias de escala de Widom e do grupo de Renormalização), que não são detalhadas neste trabalho, mostraram que as desigualdades acima, e outras relacionando os expoentes críticos, são satisfeitas como igualdades, e que os expoentes α' , γ' , e ν' são iguais respectivamente a α , γ , e ν mostrando que estes expoentes não são independentes. Na verdade basta conhecer dois deles para se obter todo o conjunto de expoentes. Adicionalmente, verificou-se através de dados experimentais e teóricos, que estes expoentes só dependem de aspectos globais (dimensionalidade espacial e simetria do parâmetro de ordem) do sistema, possibilitando que diferentes sistemas físicos pertençam à uma mesma classe de universalidade.

O primeiro resultado experimental de tal universalidade foi obtido por Guggenheim [12], que mostrou a curva de coexistência de oito fluidos diferentes em um gráfico utilizando variáveis reduzidas, T/T_c e ρ/ρ_c . O ajuste de todas as curvas em uma curva universal, requer que o expoente crítico do parâmetro de ordem seja $\beta = 1/3$.

Na tabela 1.2, apresentamos alguns valores típicos para os expoentes críticos mais usuais [13].

Modelos e Sistemas	α	β	γ	δ	ν	η
Campo Médio	0 (desc.)	$\frac{1}{2}$	1	3	$\frac{1}{2}$	0
Ising (d=2, exato)	0 (log)	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	1	$\frac{1}{4}$
Esférico (d=3, exato)	-1	$\frac{1}{2}$	2	5	1	0
Ising (d=3, numérico)	0.125	0.313	1.250	5	0.638	0.041
Heisenberg (d=3, $S = \frac{1}{2}$)	0	0.345	1.375	5	0.702	0.043
Fe (Ferromagneto)	≤ 0.17	0.35	1.33	-	0.64	0.07
Xenônio, Xe	≤ 0.2	0.35	1.26	4.4	0.57	-

Tabela 1.2: Valores típicos para os expoentes críticos mais usuais.

1.2 O Modelo de Ising

É importante frisar, neste momento, que muitos resultados importantes relativos às transições de fase basearam-se nos estudos dos chamados modelos estatísticos de sistemas cooperativos. Estes modelos sempre foram de interesse, principalmente pela luz que lançam em outros modelos mais realísticos e, por capturarem a essência do que acontece quando um sistema real sofre uma transição de fase.

Uma classe de modelos caracteriza-se por uma distribuição espacial descontínua dos seus graus de liberdade, que são fixos em pontos do espaço, ocupando “sítios” de uma dada rede em d dimensões. Sobre cada sítio (caso puro) há um constituinte microscópico caracterizado pelo seu spin (discreto ou contínuo) de dimensão $D(=1, 2, 3, \dots, \infty)$. No caso de um ferromagneto, esta dimensão do spin caracteriza o parâmetro de ordem. Por exemplo, $D = 1$ implica que s é um escalar, enquanto que $D = 2$ implica que s é um vetor ou toma valores complexos, e assim sucessivamente.

Um dos modelos mais influentes de um sistema capaz de exibir uma transição de fase, abordado pela Mecânica Estatística, é o modelo de Ising [14]. Proposto em 1920 por Wilhem Lenz [15], tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. Tal modelo consiste em

um sistema de momentos magnéticos atômicos arranjados nos sítios de uma determinada rede cristalina regular, os quais são descritos apenas por suas variáveis de spin σ_i , que podem ter apenas dois valores ($\sigma_i = \pm 1$), correspondentes às duas orientações (opostas) de um dipolo magnético (lembrando que nesse modelo as variáveis de spin σ_i comutam entre si). Entre os sítios vizinhos “ i ” e “ j ” existe uma interação via uma constante de acoplamento J_{ij} , que para um sistema magnético é a integral de troca (exchange) oriunda da repulsão coulombiana entre elétrons combinada com o princípio de exclusão de Pauli, de modo que cada par de vizinhos mais próximos contribui com uma energia de interação que pode ser escrita na forma $E_{ij} = -J_{ij}\sigma_i\sigma_j$, sendo $J_{ij} = J$ entre sítios vizinhos (mais próximos) e $J_{ij} = 0$ nos outros casos. Em baixas temperaturas, quando o termo de interação J for positivo os spins tendem a se orientar numa mesma direção (minimização da energia) e assim formar uma fase ferromagnética. Caso contrário, J negativo, a tendência é a orientação antiparalela e portanto de formar uma fase antiferromagnética.

Este modelo, foi resolvido analiticamente em uma dimensão ($d = 1$) por Ising em 1925 e tem como principal resultado a ausência de magnetização à temperaturas não nulas, e por Onsager [16] em 1944 em duas dimensões ($d = 2$) a campo nulo, apresentando-se como o primeiro caso não trivial, solúvel exatamente, em que a transição de fase é formalmente obtida. Apesar da simplicidade desse modelo, a solução exata para o caso tridimensional, e mesmo para o caso bidimensional submetido à ação de um campo magnético externo, ainda se apresenta como desafio para a Mecânica Estatística.

O modelo de Ising, desenvolvido inicialmente para magnetos uniaxiais, apresenta uma multiplicidade de interpretações que o tornam uma ferramenta ainda mais poderosa e fascinante na investigação dos diversos tipos de transições de fase. Por exemplo, as variáveis de spin deste modelo podem ser consideradas de diversas maneiras: (i) como componentes de spin dos átomos (na direção do campo externo), que podem apontar “para cima” (\uparrow) ou “para baixo” (\downarrow), (ii) como uma indicação de que o sítio i pode estar ocupado por um átomo do tipo A ou por um átomo do tipo B , como uma liga binária do tipo AB , e (iii) como um número de ocupação que assinala a presença ou ausência de uma molécula numa determinada célula de um “gás de rede”. Essa multiplicidade de interpretações já

indica o caráter universal do modelo, capaz de captar os aspectos essenciais do comportamento crítico. Seu maior mérito está no fato de o modelo permitir uma abordagem relativamente fácil, permitindo comparações com resultados obtidos de outras técnicas mais gerais, muitas vezes aproximadas, mas que podem ser aplicadas em modelos mais realísticos.

Entre as várias generalizações do modelo de Ising podemos citar: (a) uma generalização quântica chamada modelo de Heisenberg Quântico. Nesse modelo a variável σ é associada à componente S^z de um spin ($S = 1/2$), cujas componentes (S_x , S_y e S_z) não comutam entre si. (b) uma generalização clássica onde a variável σ é associada à q valores, sendo que no Hamiltoniano as partes comutam. Dentro desta generalização está o modelo de Potts [17] de q estados ($q = 2$ é o caso particular de Ising), que como Ising possui apenas 2 níveis de energia e cuja interação entre spins vizinhos é dada por $E_{ij} = -J\delta_{\sigma_i\sigma_j}$. Nos próximos capítulos desta tese, outras generalizações do modelo Ising spin-1/2 serão apresentados como objeto de estudo.

1.3 Simulação de Monte Carlo

A crescente aplicação de simulação computacional [19] aos problemas de sistemas de muitos corpos nas últimas décadas, quando houve uma notável evolução na capacidade e disponibilidade dos computadores existentes, passou a exercer uma profunda influência no progresso das pesquisas da Mecânica Estatística, como consequência das dificuldades exibidas pelos métodos tradicionais aplicados aos estudos das propriedades dos fenômenos críticos, que até o momento têm se limitado quase exclusivamente a resultados aproximados. Considerada uma ferramenta onipresente na investigação de sistemas modelos, que inclui casos, além dos limites da ME tais como Físico-Química, Física do Estado Sólido, Ciências dos Materiais, Bioquímica, Biofísica, etc, a simulação computacional é hoje a mais nova categoria de análise da Física. Somado a isto podemos em simulações alterar parâmetros físicos de forma conveniente, que dificilmente conseguiríamos experimentalmente (por exemplo, parâmetro de rede, valores de potenciais atômicos e outros ligados

à complexidade dos sistemas).

O desejo de estudar sistemas maiores e mais complicados à luz da flexibilidade de alterar os parâmetros dos sistemas tem sido o impulso por trás de muitos avanços, não só em algoritmos de computação e hardware intencionados a aumentar a velocidade de uma simulação, como também na busca de possíveis resultados que teriam sido impossíveis de examinar há poucos anos atrás.

Em Mecânica Estatística a idéia básica de tais simulações computacionais é que com um computador pode-se, desde que o sistema esteja apropriadamente construído, seguir a sua trajetória que servirá para simular o comportamento real de um ensemble de sistemas, de forma que a análise estatística desta trajetória nos permite determinar significativas predições para as propriedades do mesmo.

Existem duas classes gerais de simulações: uma é o chamado Método de Dinâmica Molecular, aplicada a modelos dinâmicos para átomos e moléculas, cuja trajetória é mapeada por integração das equações de movimento de Newton. A outra classe, que é particularmente apropriada para o estudo do comportamento termodinâmico de sistemas macroscópicos, é o método (ou simulação) de Monte Carlo (a origem do nome tem a ver com a utilização de seqüências de números aleatórios) [20, 21, 22]. Aqui, nossa discussão sobre o método de Monte Carlo focalizará em modelos de rede, o magneto de Ising, sistemas para os quais já temos alguma experiência, sendo que sua generalização pode ser feita facilmente para problemas mais complexos.

O método de Monte Carlo consiste em um conjunto de algoritmos numéricos, que faz uso de variáveis aleatórias, para escolher amostras representativas do total de configurações do sistema em equilíbrio. Fazendo uso de um gerador de números pseudo-aleatórios (um algoritmo que gera uma seqüência longa de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo entre 0 e 1), novas configurações são geradas recursivamente, a partir de uma configuração inicial, segundo uma dinâmica pré-estabelecida, que no caso de sistemas em equilíbrio conduz a estados descritos pela distribuição de Gibbs.

Em outras palavras, o método gera uma cadeia markoviana de configurações, através do espaço de fases, de tal modo que os estados criados ocorrem assintoticamente ($t \rightarrow \infty$) com uma frequência relativa proporcional ao fator de probabilidade, $\exp(-\beta E_\alpha)$, adequado no caso do ensemble canônico. O tempo nesse caso refere-se à “unidade de tempo de Monte Carlo”, que significa o tempo necessário para que, em média, todos spins da rede sejam visitados, e eventualmente atualizados, uma única vez.

Dessa sequência de configurações, que tem por objetivo fazer convergir no limite de tempos longos ($k \rightarrow \infty$) para as configurações de equilíbrio do sistema, selecionamos uma pequena fração, como estados representativos do sistema (amostragem significativa), para o fornecimento das médias das grandezas que queremos calcular. A única desvantagem desse método é que temos de realizar uma sequência muito grande de amostras de configurações para que se atinja uma boa precisão no cálculo das grandezas termodinâmicas, pois os sucessivos estados da cadeia de Markov são altamente correlacionados (um estado qualquer no tempo k depende do estado anterior no tempo $k - 1$)[6].

Da construção da cadeia markoviana, um fator de importância para cada par de estados α e α' é a chamada probabilidade de transição por unidade de tempo, $w(\alpha \rightarrow \alpha')$ do sistema evoluir do estado α para o estado α' após um passo de Monte Carlo (o tempo é tratado como variável discreta). Esta probabilidade de transição satisfaz à regra da soma, a qual expressa o fato que o sistema é não dissipativo e portanto não cria e nem destrói estados, ou seja

$$\sum_{\alpha' \neq \alpha} w(\alpha \rightarrow \alpha') = 1, \quad (1.12)$$

chamada condição de normalização. Para que a probabilidade de transição descreva de forma adequada a convergência dos estados para o estado de equilíbrio nos limites de longos tempos e termodinâmico, a mesma deve satisfazer às condições abaixo:

(i) Acessibilidade: A partir de determinado ponto de partida (configuração inicial), deve ser possível evoluir o sistema para qualquer uma de suas outras configurações aplicando a regra de evolução a um número suficientemente grande de passos

(ergodicidade)[1].

(ii) Balanceamento Detalhado ou Microreversibilidade:

$$p_{\alpha}w(\alpha \rightarrow \alpha') = p_{\alpha'}w(\alpha' \rightarrow \alpha) \quad (1.13)$$

Esta condição assegura que é a distribuição de probabilidade de Boltzmann que geramos depois de nosso sistema ter vindo ao equilíbrio, ao contrário do qualquer outra distribuição. No lado esquerdo da equação, temos a probabilidade do sistema estar em um estado α multiplicado pela probabilidade de fazer a transição daquele estado para outro. Já o lado direito é a probabilidade de o sistema estar nesse outro estado α' multiplicado pela taxa de transição inversa, informando que no equilíbrio o número de transições de $\alpha \rightarrow \alpha'$ ou na direção oposta $\alpha' \rightarrow \alpha$ é a mesma.

Se as condições (i) e (ii) são obedecidas então a grandeza $W(\alpha, n)$ definida como a probabilidade de que cada configuração α apareça no passo n de uma cadeia markoviana [7], satisfaz a duas condições: a primeira é que se $W(\alpha, n)$ é igual à probabilidade de Gibbs,

$$W(\alpha, n) = p_{\alpha}, \quad (1.14)$$

então esta igualdade permanecerá no passo $n + 1$. Em outras palavras, a cadeia de estados gerados pela aplicação das distribuições $w(\alpha \rightarrow \alpha')$ tende a ser visitada, segundo a distribuição característica do equilíbrio termodinâmico, e uma vez atingido este equilíbrio, o sistema não mais dele sairá espontaneamente, apesar de seus microestados estarem realizando transições mútuas. A segunda é que o desvio entre a probabilidade atual de ocorrência e a distribuição de Gibbs diminui ao longo do progresso da cadeia markoviana, o que caracteriza a distribuição de probabilidade de Gibbs como um ponto fixo atrator no espaço das distribuições no equilíbrio.

Podemos encontrar vários conjuntos de probabilidades de transições, que obedecem as regras dinâmicas para qualquer distribuição de Gibbs p_α . Uma escolha simples, por exemplo, é

$$w(\alpha \rightarrow \alpha') \propto e^{\frac{1}{2}\beta(E_\alpha - E_{\alpha'})}. \quad (1.15)$$

Existem, porém, muitos dos conjuntos de probabilidades de transição que não satisfazem às condições citadas acima ((i) e (ii)) e, em conseqüência não são adequadas para modelar estados na distribuição de Gibbs. Contudo, mesmo com estas condições, a indeterminação na escolha de $w(\alpha \rightarrow \alpha')$ permanece grande e conduzem a vários algoritmos que levam a diferentes definições existentes para a dinâmica empregada no método de Monte Carlo. Dinâmicas essas, que são igualmente satisfatórias para o cálculo das médias termodinâmicas, embora atinjam o equilíbrio de formas distintas, lembrando que resultados diferentes podem ocorrer para propriedades de não-equilíbrio.

Quando comparamos as dinâmicas, vemos vantagens e desvantagens na escolha de uma delas. Dependendo das propriedades que estamos interessados, decidimos por uma ou por outra. Antes de nos determos nessas dinâmicas mais comuns (descrevendo as regras dinâmicas que determinam $w(\alpha \rightarrow \alpha')$) vamos enumerar as etapas gerais utilizadas pelo Método de Monte Carlo para o cálculo das médias termodinâmicas. Considerando aqui o nosso modelo de Ising ($\sigma_i = \pm 1$) com o Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (1.16)$$

temos a seguinte “receita” [6, 7, 20]:

- (i) Produzimos uma configuração inicial no instante t : $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}$;
- (ii) Selecionamos um sítio i aleatoriamente ou sequencialmente da rede, tal que o spin σ_i sofra uma possível modificação no seu estado ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$);

- (iii) Sorteamos um número aleatório, $0 \leq x_i(t) \leq 1$;
- (iv) Calculamos a probabilidade de transição associada à modificação do spin σ_i ;
- (v) Comparamos esta probabilidade, que depende da dinâmica utilizada, com o número aleatório (x_i), a fim de aceitar ou rejeitar a modificação;
- (vi) Repetimos os passos de (ii) a (v) para todos os spins da rede. Isso é o que costuma-se denominar de um passo de Monte Carlo por spin (MCS/Spin), evoluindo o sistema do instante t para o instante $t' = t + 1$;
- (vii) Obtida a nova configuração, repetimos várias vezes os passos (ii) a (vi) até que o sistema se estabilize; este intervalo é chamado de tempo de termalização. Somente após esse intervalo calculamos as médias termodinâmicas desejadas;
- (viii) E por último para testar a robustez das medidas, escolhemos uma nova configuração inicial para uma nova realização, que seguirá todas as etapas anteriores, efetuando no final uma média sobre diferentes configurações iniciais.

Finalmente, com o objetivo de deixar mais claro como se dão estas atualizações no decorrer das modificações, que ficaram em aberto no item (v), descreveremos, agora, as dinâmicas mais utilizadas nas simulações de Monte Carlo.

Uma das mais importantes e mais frequentemente usada em sistemas de spins, foi criada para simulações em dinâmica molecular por Metropolis *et al.* em 1953 [23]. Ela estabelece que quando o sistema muda da configuração α para α' , as correspondentes energias E_α e $E_{\alpha'}$ são que definem o valor da probabilidade de transição. Se a diferença $\Delta E < 0$, isto é, se a mudança levar o sistema a um estado de menor energia, então permitimos a nova configuração automaticamente. Se $\Delta E > 0$, permitimos a nova con-

figuração com probabilidade $e^{-\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})}$, ou seja,

$$w(\alpha \longrightarrow \alpha') = \begin{cases} \frac{1}{A} & \text{se } E_{\alpha'} < E_{\alpha} \\ \frac{1}{A}e^{-\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})} & \text{se } E_{\alpha'} > E_{\alpha} \end{cases} \quad (1.17)$$

para aqueles estados α' que podem ser alcançados diretamente a partir de α (zero, para todos os outros). O A é uma constante de normalização.

A implementação do algoritmo de Metropolis é extremamente direta e isto é uma das principais razões de seu grande sucesso. Ela estabelece que o spin será mudado (passo (v) anterior) se o número aleatório sorteado for menor ou igual a probabilidade de transição, ou seja:

$$x_i(t) \leq p = \min[1, e^{-\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})}] \quad (1.18)$$

As próximas duas dinâmicas descritas a seguir, banho térmico e Glauber [24], são variantes diretas da dinâmica de Metropolis.

Na dinâmica de banho térmico (heat-bath) definimos uma probabilidade associada ao sítio i , dada por,

$$p_i(t) = [1 + \exp(-2h_i(t))]^{-1}, \quad (1.19)$$

onde

$$h_i(t) = \sum_j K_{ij}\sigma_j(t) + \beta H, \quad (1.20)$$

é o campo local atuando no sítio, no instante t e $K_{ij} \equiv \beta J_{ij}$.

A atualização do spin é feita comparando $x_i(t)$ com $p_i(t)$ seguindo a regra abaixo:

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_i(t) \leq p_i(t) \\ -1 & \text{se } x_i(t) > p_i(t) \end{cases} \quad (1.21)$$

Na dinâmica de Glauber a distribuição de probabilidade que determina os valores de $\sigma_i(t+1)$, tem a mesma seqüência da dinâmica de banho térmico, diferindo apenas a forma de atualização do spin que é determinada por:

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_i(t) \leq p_i(t) \\ -1 & \text{se } x_i(t) > p_i(t) \end{cases} \quad \text{para } \sigma_i(t) = -1 \quad (1.22)$$

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} -1 & \text{se } x_i(t) \leq 1 - p_i(t) \\ 1 & \text{se } x_i(t) > 1 - p_i(t) \end{cases} \quad \text{para } \sigma_i(t) = 1 \quad (1.23)$$

Essas duas dinâmicas (banho térmico e Glauber), produzem resultados idênticos no estudo de propriedades de equilíbrio de um sistema, como por exemplo, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética. Já com relação às propriedades dinâmicas, elas fornecem algumas diferenças em suas respostas.

Como vimos anteriormente, uma das dificuldades apresentada pelo método de Monte Carlo é que as configurações geradas pelo processo markoviano são altamente correlacionadas, conseqüência direta do fato das novas configurações dependerem de seu estado anterior, obrigando assim um número suficientemente grande de passos de MC, chamado tempo de termalização, para que o sistema atinja o equilíbrio, quando então obtemos as médias termodinâmicas.

Uma das formas de decidir o tempo suficiente de simulação, de modo que uma vez interrompida, a mesma apresente resultados confiáveis na determinação da grandeza observada X , é analisando a chamada função de auto-correlação

$$c(k) = \frac{\langle X_\alpha X_{\alpha+k} \rangle - \langle X_\alpha \rangle^2}{\langle X_\alpha^2 \rangle - \langle X_\alpha \rangle^2} \quad (1.24)$$

ao longo de sua trajetória[7] no espaço de configurações e observando-se quantos passos são necessários para que $c(k)$ decaia a zero, ou para um valor tão pequeno quanto se queira. A partir deste valor de k , onde os estados se dizem descorrelacionados e a função de auto-correlação seria desprezível, é que se calculam os valores médios das quantidades em análise.

Observa-se, na prática, que o tempo de simulação também depende da temperatura. É claro que quando nos aproximamos da temperatura crítica, T_c , o tempo característico (mais estritamente o número de passos) τ , aumenta significativamente, para que a auto-correlação diminua. Este fenômeno é conhecido como amortecimento crítico (Critical Slowing Down), pois o comprimento de correlação ξ torna-se muito grande e o sistema passa a ter ilhas de spins correlacionados cada vez maiores. Em princípio a produção estatística de configurações independentes, sem poder virar ilhas de spins em poucos passos, é um procedimento altamente improvável. Encontra-se empiricamente, que o tempo τ de termalização está relacionado ao comprimento de correlação ξ pela relação

$$\tau \sim \xi^z, \tag{1.25}$$

onde z é conhecido como o expoente crítico dinâmico [7]. Encontra-se utilizando as dinâmicas acima, no modelo de Ising que o z assume valores aproximadamente iguais a 2, numa caracterização denominada de universalidade dinâmica.

Um outro fator relevante que não pode deixar de ser frisado no procedimento de Monte Carlo, além das exigências impostas pelas dinâmicas de evolução, como ergodicidade e balanceamento detalhado, diz respeito à maneira particular na qual os spins de um dado sistema são atualizados na rede [21]. Usualmente, duas prescrições são aplicadas na atualização dos spins. São elas: a sequencial e a paralela. No primeiro caso, os spins são atualizados um de cada vez em cada instante de tempo, segundo uma sequência pré-definida ou em ordem aleatória, ou seja, o spin assume o novo estado (resultante da aplicação de uma regra dinâmica) no momento em que é visitado. Já na prescrição paralela, todos os spins são atualizados de uma única vez. Em outras palavras, ao visitar

um sítio, estabelecemos se o spin deve mudar (ou não), mas a informação fica armazenada. A atualização dos spins de uma única vez só é efetuada quando percorrida toda a rede para que nenhum spin fique sem ser atualizado.

Capítulo 2

Propagação de Danos

Este capítulo é dedicado a uma exposição sumária da técnica de propagação de danos (definição, metodologia e seus principais resultados), enfatizando seus aspectos mais instigantes, bem como sua conexão com as propriedades físicas (funções termodinâmicas e parâmetros característicos de uma transição) dos modelos estudados, incluídos alguns estudados nesta tese.

2.1 A Técnica de Propagação de Danos

Como vimos no capítulo anterior, a crescente evolução de sistemas computacionais tem, nos últimos anos, contribuído no aperfeiçoamento e introdução de muitos métodos convenientes de investigar as propriedades físicas estáticas e dinâmicas de sistemas cooperativos descritos por modelos teóricos com muitos graus de liberdade. Uma questão principal, em vários campos de pesquisa, com relação à evolução temporal desses modelos no espaço de fase, diz respeito à busca de eventuais correlações entre a amplificação temporal de pequenas perturbações iniciais na configuração microscópica e os aspectos físicos relevantes do sistema. Indagações dessa natureza, que começaram a ser discutidas mais intensamente nas últimas décadas, têm mostrado muitos aspectos interessantes considerando o comportamento temporal de duas configurações do mesmo sistema. O método que tem essa meta de analisar configurações diferentes de um sistema, nada mais é do que

uma técnica relativamente nova de simulação numérica, que chamamos de propagação de dano (PD), que foi inicialmente introduzida no contexto dos autômatos celulares por Kauffman [25], sendo posteriormente aplicada na investigação de sistemas constituídos de sub-unidades interagentes [26], usualmente empregados em Mecânica Estatística com o cunho de investigar suas propriedades dinâmicas.

Uma de suas vantagens com relação às técnicas convencionais de Monte Carlo (MC) pode ser vista nos dados relativos à magnetização, a qual com uso de MC apresenta uma cauda pronunciada acima da temperatura crítica, que somente desaparece no limite termodinâmico, enquanto que usando essa nova técnica este efeito parece ser significativamente reduzido, consequência deste método apresentar nas funções de correlação um decréscimo nas flutuações térmicas (a veracidade dessa constatação pode ser vista nos resultados obtidos pelo presente trabalho). Esta poderosa ferramenta é de extremo interesse hoje em dia por estabelecer conexões entre aspectos dinâmicos e propriedades estáticas termodinâmicas, e consiste essencialmente em monitorar simultaneamente a evolução temporal de duas configurações, que inicialmente diferenciam-se entre si por uma pequena “mutação”, que evoluem no espaço de fase sob as mesmas regras de evolução dinâmica (a mesma dinâmica de MC e mesma sequência de números aleatórios para ambas cópias do sistema), garantindo assim que a possível diferença, que surja entre as configurações no decorrer do tempo, seja devido somente ao dano inicial.

No caso de sistemas cooperativos descritos por variáveis discretas $\{\sigma_i(t), i = 1, 2, 3, \dots, N\}$, do tipo booleanas por exemplo, o dano total corresponde a uma fração de sítios de variáveis que apresentam estados diferentes nas duas configurações. Para o sítio i qualquer, o mesmo se diz danificado quando

$$\sigma_i^A(t) \neq \sigma_i^B(t). \quad (2.1)$$

Uma medida quantitativa dessa evolução é a distância de Hamming [27] (ou dano total), $D(t)$, definida como a fração de sítios que estão em estados diferentes nas duas configurações, matematicamente expressa por

$$D(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\sigma_i^A(t) - \sigma_i^B(t)|, \quad (2.2)$$

onde N é o número total de sítios da rede e a soma refere-se a todas as variáveis em cada configuração. $\{\sigma_i^A(t)\}$ e $\{\sigma_i^B(t)\}$ representam duas configurações do sistema: $\sigma_i = 0, 1$ são as variáveis booleanas que estão relacionadas às variáveis de Ising por $S_i = 2\sigma_i - 1$ como unidades interagentes do sistema.

Para ser mais específico, a técnica de propagação de dano quando aplicada a estes sistemas, de sub-unidades interagentes, em uma rede regular segue a seguinte receita:

(i) Partindo, no instante $t = 0$, com uma configuração do modelo $A = \{\sigma_i^A(0)\}$ termalizada em uma dada temperatura, criamos uma configuração $B = \{\sigma_i^B(0)\}$ com uma certa fração de sítios danificados, $D(0) = N_D/N$, quando comparados com aqueles sítios correspondentes de A , onde $0 \leq N_D \leq N$, com N_D representando o número de sítios danificados;

(ii) Fazemos ambas configurações evoluírem no tempo segundo a mesma dinâmica, isto é, a mesma regra e a mesma seqüência de números aleatórios (mesmo ruído térmico) no procedimento de MC;

(iii) Após um determinado tempo, chamado tempo de relaxação, necessário para que a cópia “danificada” também seja termalizada, monitora-se o dano por um longo tempo para calcular a média temporal do mesmo;

Se estamos interessados em examinar as propriedades de relaxação, a evolução temporal de $D(t)$ deve se estender até o limite em que D atinja o estado estacionário. Para investigar as propriedades estacionárias, devemos excluir da evolução o tempo transiente em que o dano relaxa.

(iv) Depois disto repetimos estas operações (i)-(iii), usando diferentes sequências de números aleatórios para diferentes amostras (configurações iniciais de igual distância inicial), para finalmente calcular sobre todas as evoluções o valor médio do dano $\langle D \rangle$, representando, na realidade, a realização de 2 médias estatísticas, a saber: (a) uma média temporal sobre tempos de evolução suficientemente longos; (b) depois, uma média sobre diferentes amostras estatísticas (média configuracional da evolução temporal da distância de Hamming).

É importante aqui salientar que, como em sistemas dinâmicos determinísticos, há uma correlação entre as duas cópias do sistema em evolução; uma vez que as configurações tornam-se idênticas, elas permanecerão idênticas com um dano identicamente nulo, já que representam o mesmo sistema submetido às mesmas regras de evolução temporal.

Este dano médio $\langle D \rangle$ é a principal quantidade de interesse no estudo da técnica de propagação de dano. Outras grandezas importantes na caracterização da fronteira crítica, são a probabilidade de sobrevivência,

$$P(t) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{M_D}{M} \right), \quad (2.3)$$

definida como a razão entre o número de amostras que resultam em dano médio diferente de zero (M_D) e o número total de amostras (M), e o tempo total médio $\langle \tau_D \rangle$, definido como o tempo necessário para que todos os sítios apresentem dano (ou sejam danificados) no mínimo uma vez. Esta é uma boa quantidade para distinguir a fase onde o dano propaga-se livremente (caótica) da fase onde ele é suprimido (congelada).

Observa-se que, evoluindo as configurações segundo a propagação de dano, após um longo período de tempo, o dano (região de sítios danificados) pode no decorrer da evolução (dependendo da temperatura) ser ampliado, manter-se estacionário ou se anular, caracterizando regimes de diferentes comportamentos: um caótico, onde o dano se propaga e as duas configurações ficam separadas no espaço de fase, e um regime congelado, na qual o dano se anula depois de algum tempo, quando as configurações se encontram. A fronteira

entre estas regiões (caótica-congelada) caracterizada por uma transição de fase dinâmica em uma determinada “temperatura de propagação” T_D , é o que tem despertado um enorme interesse por essa técnica de propagação de danos, em uma grande variedade de sistemas magnéticos, por haver indícios de correlação com as transições de fases estáticas. Uma revisão adequada de inúmeros trabalhos sobre esse assunto, pode ser encontrada na referência [28].

2.2 Resumo de Resultados Conhecidos

Desde a aplicação inicial do conceito de dano a sistemas cooperativos de variáveis de spin, vários esforços, principalmente para o modelo de Ising [29, 30, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 56], têm sido feitos para obter um melhor entendimento desta propagação. Além deste modelo, que em duas e três dimensões, como também na presença de campo magnético, foi exaustivamente investigado usando diferentes procedimentos de MC, a técnica de propagação de danos tem sido utilizada para investigar uma grande variedade de sistemas dos quais se destacam os vidros de spins [42, 43, 44, 45, 46, 47, 48], por ser amplamente discutido até os dias atuais. Nesta seção mostraremos brevemente alguns resultados obtidos, para esses sistemas de spins, a partir desses estudos por procedimentos numérico-computacionais e analíticos.

Um resultado comum, e surpreendente, a todos estes resultados é o surgimento de um fenômeno crítico dinâmico caracterizado por uma transição caótica-congelada, que é muito sensível a aspectos tais como, o dano inicial e a regra dinâmica usada para o sistema evoluir. Para as dinâmicas de Glauber e de Metropolis usualmente a fase caótica sempre existe, enquanto que na dinâmica de banho térmico esta fase (quando existe) se encontra em baixas temperaturas, dependendo ainda do dano inicial.

2.2.1 O Modelo de Ising Ferromagnético

Estudando o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada, usando as dinâmicas de Glauber e de $Q2R$, Stanley *et al.* [29] mostraram que, para um dano inicial pequeno ($D(0) = 1/N$), o parâmetro de ordem ψ (fração de sítios danificados), ou dano se aproximava nitidamente de zero a uma temperatura T_D (temperatura de propagação) próximo da temperatura crítica de Curie, T_C , caracterizando assim uma transição entre dois regimes, que em termos de temperatura se confundia com a da transição de fase estática. Por outro lado para a dinâmica $Q2R$ (dinâmica em que a nova configuração só é aceita se não houver mudança na energia, quando o spin for alterado (invertido) de sua direção original), tal parâmetro de ordem em ambas regiões de energia (alta e baixa) mostra-se sempre não nulo, ou seja, não ocorre a transição caótica-congelada (Fig. 2.1).

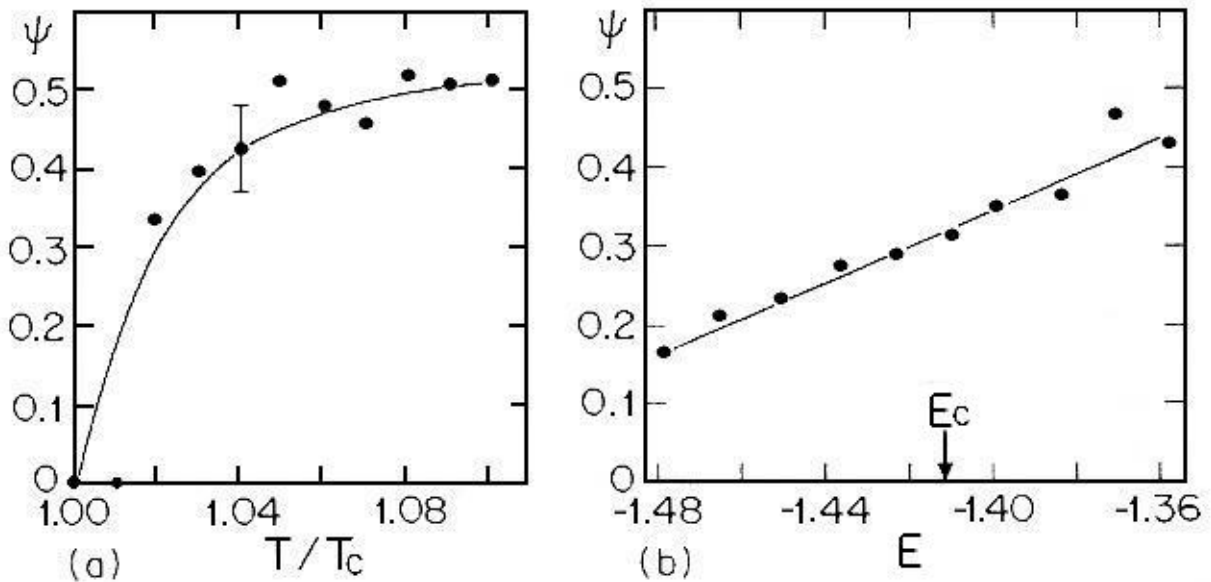


Figura 2.1: Parâmetro de ordem ψ (dano médio, $\langle D \rangle$), para o modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada [29]. (a) Glauber; (b) $Q2R$. $k_B T_C = (2.2692\dots)J$ (Figura retirada da ref. [29]).

Um estudo mais claro sobre a propagação de dano para esse modelo usando a dinâmica de Glauber foi obtido quando se investigou o tempo médio $\langle\tau_D\rangle$ necessário para danificar todos os spins da amostra no mínimo uma vez, que diverge quando T se aproxima de T_C por valores superiores; para valores abaixo da temperatura de propagação de danos, o parâmetro de ordem se anulava indicando que esta é a temperatura na qual cessa a propagação dos danos (Fig 2.2).

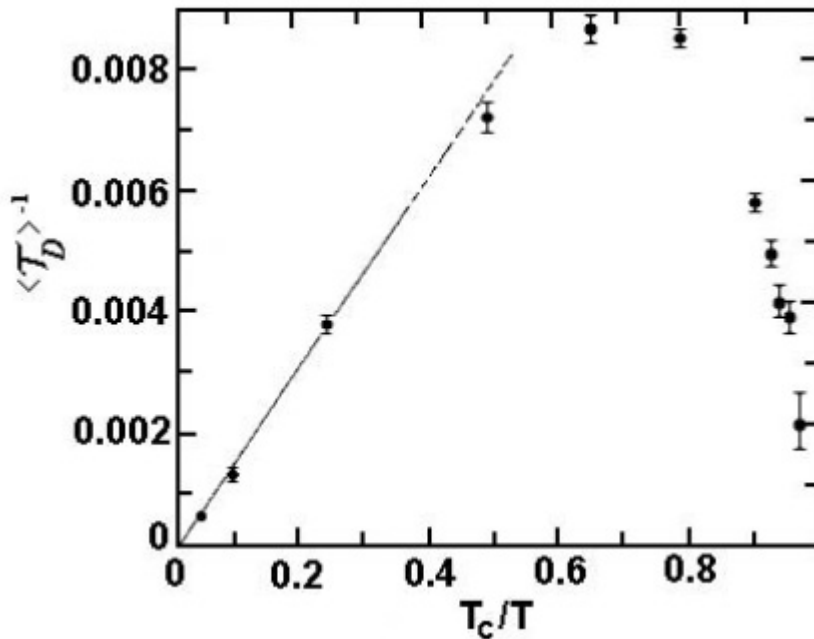


Figura 2.2: Tempo médio necessário $\langle\tau_D\rangle$ para danificar todos os sítios pelo menos uma vez. (Figura retirada da ref. [29]).

No caso tridimensional, Costa em 1987 [30], usando a dinâmica de Glauber, observou, para o problema de propagação de danos, um comportamento similar como em duas dimensões, no qual o dano se propagava acima de uma temperatura de propagação, T_D , que diferia ligeiramente por um valor de 4% da temperatura crítica T_C ($T_D \cong 0,96T_C$); o que o levou a sugerir que T_D , a temperatura de propagação de dano (a temperatura limiar entre as fases caótica e congelada), poderia estar relacionada com a temperatura crítica de percolação de sítios do modelo de Ising correlacionado, definida como a temperatura abaixo da qual existe uma ilha de sítios com spins de Ising correlacionados [31].

Posteriormente, Le Caër [32], simulando o mesmo sistema com a dinâmica de Glauber na presença de campo magnético, verificou que uma linha de transição dinâmica caótica-congelada persistia, mesmo na presença de campo magnético (ver Figura (2.3)); visto que este fenômeno não ocorre nas transições de fases estáticas ferro-paramagnética, caracterizou-se assim, definitivamente, que os dois fenômenos são de naturezas distintas. Além disso, Le Caër constatou, na extrapolação a campo nulo, um valor ainda mais baixo para a temperatura de propagação T_D ($T_D \cong 0,91T_C$), do que aquele obtido anteriormente [30]. Segundo estimativas mais recentes [33], para ambos os modelos de Ising a campo nulo, os valores mais precisos, segundo a dinâmica de Glauber, são: $T_D \cong 0,922T_C$ para $d = 2$, e $T_D \cong 0,9225T_C$ para $d = 3$. A referência [34] fornece uma explicação sobre a persistência da transição caótica-congelada encontrada por Le Caër [32] e Grassberger [33].

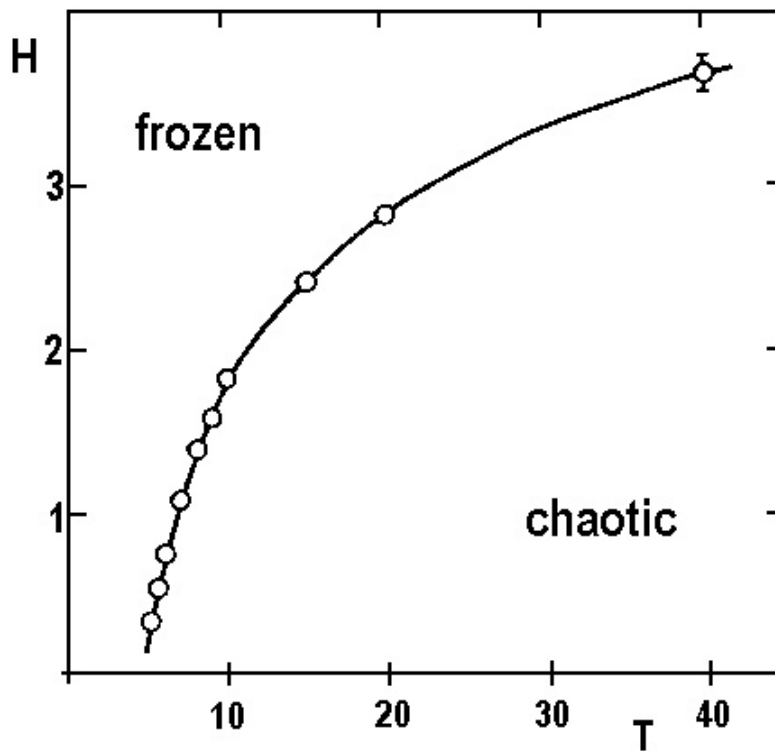


Figura 2.3: Diagrama de fases no plano campo-temperatura com as fases caótica e congelada para o modelo de Ising ferromagnético em $d=3$ dimensões, obtido por Le Caër, segundo a dinâmica de Glauber (Figura retirada da ref. [32]).

Com relação à dinâmica de banho térmico, diferentes estudos da propagação de danos no modelo de Ising em 2-dimensões e 3-dimensões, constataram um conflitante resultado para a natureza da fase a baixas temperaturas. Segundo esta dinâmica, Neumann e Derrida [35] (em 2-dimensões), e Derrida e Weisbuch [42] (em 3-dimensões), obtiveram valores de dano não nulo somente abaixo do ponto crítico T_D , ou seja, diferentemente da dinâmica de Glauber (ou de Metropolis), a propagação de dano com dinâmica de banho térmico só ocorre em baixas temperaturas. Para as temperaturas de transição, os autores [35], por extrapolação dos dados numéricos (através de uma análise de escala para tamanhos finitos), concluíram que, para o caso do ferromagneto de Ising, esta transição dinâmica ($k_B T_D \cong 2.25 \pm 0.05 J$) coincide com a temperatura crítica de Curie do modelo bidimensional.

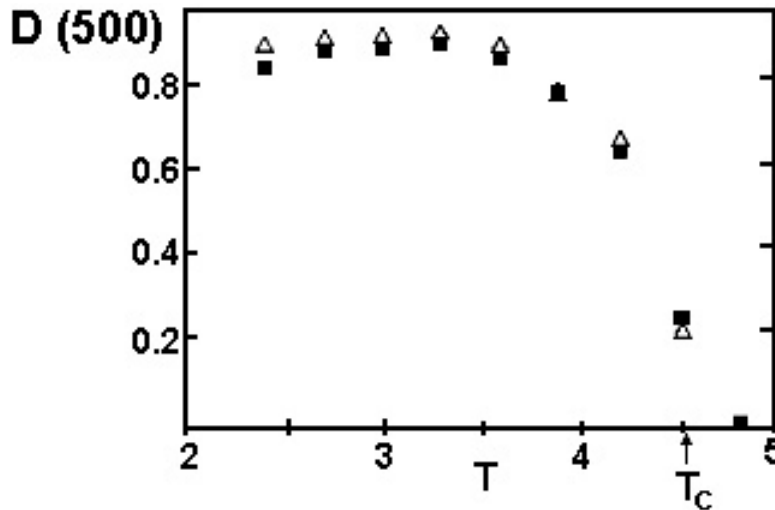


Figura 2.4: Distância de Hamming $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para danos iniciais: $D(0) = 1$ (\triangle) e $D(0) = 1/2$ (\blacksquare). Tempo = 500 passos de Monte Carlo. Modelo de Ising ferromagnético em $d=3$ dimensões, obtido por Derrida e Weisbuch, segundo a dinâmica de banho térmico (Figura retirada da ref. [42]).

Fazendo um estudo comparativo entre várias dinâmicas de evolução (Glauber, Metropolis e banho térmico) para o modelo de Ising na rede quadrada, Mariz *et al.* [36] mostraram que, a campo magnético nulo, os danos produzidos (nas mesmas condições ini-

ciais) pela dinâmica de banho térmico são sempre menores que os obtidos pelas dinâmicas de Glauber e Metropolis, e que os resultados destas duas últimas, são indistinguíveis dentro dos limites das flutuações estatísticas. Mariz *et al.* [36, 37], concluíram também que, além da inversão da fase congelada (Glauber ou Metropolis) para caótica (banho térmico), esta última fase quando existe na dinâmica de banho térmico depende ainda da perturbação inicial (ver ref. [37]). Tal discrepância, vista também também em sistemas vidros de spins [46], foi explicada posteriormente por Almeida [38] que demonstrou existir uma equivalência entre estas dinâmicas através da introdução de um sentido para o ruído térmico atuando sobre os spins.

Para o modelo de Ising puro na rede triangular, segundo a dinâmica de Glauber, Nobre *et al.* [39] constataram uma radical discordância entre os resultados preditos pelas formas de atualização dos “spins” do tipo seqüencial e paralela, nas propriedades críticas dinâmicas [39] (propagação de danos) e estáticas [40] (estimativas de T_C). Segundo os autores [39], quando implementada a prescrição seqüencial, o modelo ferromagnético apresenta uma transição de fase dinâmica em uma temperatura de dano T_D muito próxima à T_C (temperatura de Curie do modelo), e para o modelo antiferromagnético, observa-se que o regime caótico persiste em todo intervalo de temperatura finita (não-nula). Resultados que sugerem uma forte correlação entre a transição dinâmica caótica-congelada e a transição de equilíbrio, já que este modelo com interações negativas sobre uma rede triangular não exhibe nenhuma transição de fase em temperatura finita. Entretanto, na prescrição paralela, divergências foram observadas por esta forma de atualização que, além de detectar uma transição caótica-congelada, em ambos os sistemas, por não distinguir o sinal das interações entre os spins da rede triangular (acoplamentos ferro-antiferromagnéticos), em uma temperatura T_D muito abaixo de T_C , mostrou-se também inadequada para o cálculo da temperatura crítica do modelo [40, 41].

2.2.2 Aplicações do Método em Modelos Mais Complexos

A técnica de propagação de danos quando aplicada em sistemas mais complexos, do tipo, vidros de spins tridimensional definido em termos de uma distribuição para os acoplamentos simétrico [42, 43, 44, 45, 46] e não simétrico [47, 48], modelo XY bidimensional [49, 50], relógio com p-estados [51], modelo de Heisenberg [52], modelo de Ising com frustrações [53, 54], modelo de Ising diluído [55], e outros, tem se mostrado como um método útil que define novas transições de fases dinâmicas que em alguns casos podem estar relacionados com as propriedades estáticas dos sistemas em questão. Aqui, citaremos brevemente os resultados mais importantes em relação à conexão com as transições de fase do sistema em equilíbrio.

Como exemplo de resultado interessante, observado na maioria das vezes no quadro da dinâmica de banho térmico, podemos citar a divisão da fase caótica em duas regiões (uma, onde o dano $\langle D \rangle$ depende do seu valor inicial $D(0)$, e outra, para valores mais altos de T , na qual $\langle D \rangle$ não varia com $D(0)$) em vários destes sistemas [42, 43, 44, 45, 49, 51, 52, 53, 54]. No caso dos vidros de spins de Ising $\pm J$ em três dimensões (tridimensional), quando investigados segundo o algoritmo de banho térmico [42, 43, 44, 45], os resultados obtidos deixam claro a presença de três fases dinâmicas: Uma fase a altas temperaturas ($T > T_1$), onde o dano se anula sempre, uma fase de temperaturas intermediárias ($T_2 < T < T_1$), na qual o dano existente não depende das condições iniciais e uma terceira de temperaturas $T < T_2$, onde o dano se propaga e depende das condições iniciais (apresenta efeitos de memória). Com relação às temperaturas, os autores [42, 44], constatam que T_2 (onde se dividem as fases caóticas) e T_1 (onde começa a fase congelada) coincidem respectivamente, dentro da precisão dos resultados, com a temperatura de transição da fase de vidro de spins e da fase de Griffiths (onde as correlações decaem de forma mais lenta que uma exponencial e mais rápida que uma lei de potência). Entretanto, como observado por da Cruz *et al.* [46], quando a dinâmica utilizada é a de Glauber, é comum, em seus diagramas de fases, observar apenas uma temperatura bem característica, que é associada à

transição de fase magnética estática, dividindo assim, o diagrama de fases dinâmico para os vidros de spins de Ising $\pm J$, em três dimensões, somente em dois regimes.

Comportamento similar aos do vidro de spins, em que o diagrama de fases dinâmico apresenta três diferentes fases, foi verificado para o modelo XY bidimensional (segundo a dinâmica de Metropolis). Nesse modelo, os autores Golinelli e Derrida [49] constataram que, a partir da distância relativa entre as configurações, $\langle D \rangle$, e argumentos de escala para tamanhos finitos (finite-size scaling), a temperatura da transição dinâmico entre as fases de regime caótico é consistente com a sua equivalente estática (a temperatura de transição de Kosterlitz-Thouless, $T_2 \approx T_{KT} \simeq 0.9J/k_B$), e que a temperatura da segunda transição possa estar relacionada com alguma propriedade de equilíbrio do sistema, como efeito de memória ou um ponto de desordem.

Repetindo basicamente os mesmos procedimentos para o problema acima, tendo modificado apenas a dinâmica e a definição do dano para preservar a simetria rotacional do modelo, não respeitada por [49], Chiu e Teitel [50] puderam mostrar que o modelo XY bidimensional além de possuir apenas duas fases dinâmicas, não apresenta nenhum efeito de memória com relação às condições iniciais e que a temperatura de transição do dano concorda, dentro da precisão dos resultados, com o valor da temperatura crítica $T_{KT} \approx 0.90J/k_B$ do modelo XY na rede quadrada. Segundo os autores [50], a fase que não possui equivalente termodinâmico no trabalho de Golinelli e Derrida [49] é apenas um resultado artificial gerado por uma escolha da dinâmica e da definição do dano que não respeita uma simetria básica do sistema físico estudado.

A título de ilustração, apresentamos um diagrama de fases do modelo XY bidimensional obtido por Golinelli *et al.* [49], segundo o algoritmo de Metropolis. As melhores estimativas para as temperaturas de transição são $T_1 = 1.61 \pm 0.1$ e $T_2 = 0.95 \pm 0.05$.

Além dos resultados similares aos dos modelos acima citado (da existência de um

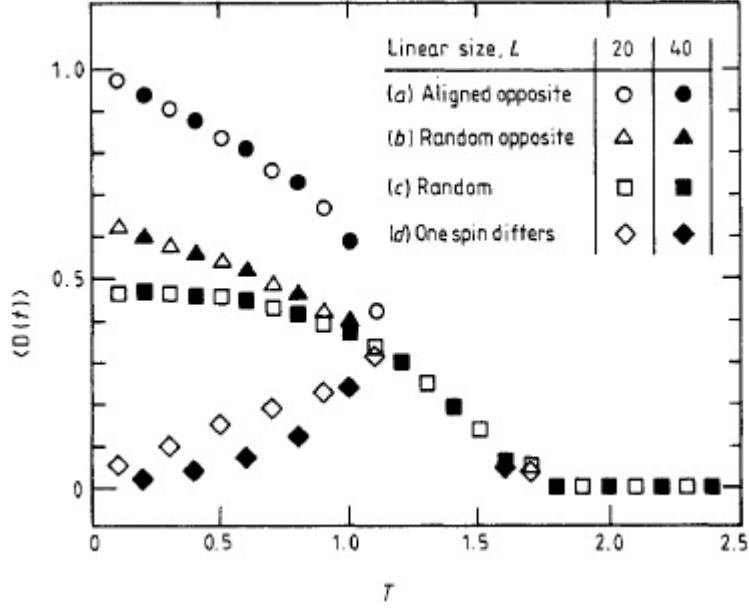


Figura 2.5: Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle D(t) \rangle$ versus a temperatura T num tempo $t = 500$ para as condições iniciais: (a) $\{\theta_i^A\} = 0$ e $\{\theta_i^B\} = \pi$; (b) $\{\theta_i^B\} = \{\theta_i^A\} + \pi$ ($\{\theta_i^A\}$ aleatórios); (c) $\{\theta_i^A\}$ e $\{\theta_i^B\}$ aleatórios e independentes; (d) $\{\theta_i^A\}$ aleatório e $\{\theta_i^B\} = \{\theta_i^A\}$ exceto por um único spin θ_i^B oposto a θ_i^A . (Figura retirada da ref. [49])

regime dinâmico de dano $\langle D \rangle$ não-nulo, independente do dano inicial $D(0)$, obtidos segundo a dinâmica de banho térmico, dois resultados curiosos, para o modelo de Ising sobre uma rede quadrada totalmente frustada, foram observados pelos autores Nobre e A. Junior, em dois trabalhos [53, 54], através das receitas de Glauber e banho térmico. O primeiro, diz respeito a sobrevivência do dano para todas temperaturas finitas, segundo a dinâmica de Glauber (mesmo para um dano inicial infinitesimal [29]), que supostamente está correlacionada com a transição estática. Este resultado está de acordo com o fato do modelo de Ising na rede quadrada totalmente frustado não apresentar transição de fase magnética a temperatura finita.

O segundo, por sua vez mais surpreendente, está associado as similaridades dos resultados independentes do tipo de atualização dos spins utilizada, sequencial ou paralela. Tal semelhança torna-se mais clara (dinâmica de banho térmico), acima de um certo valor de temperatura $T^* = T/T_{CF} \approx 0.3$, como mostra a figura abaixo, onde os resultados de ambas atualizações são superpostos.

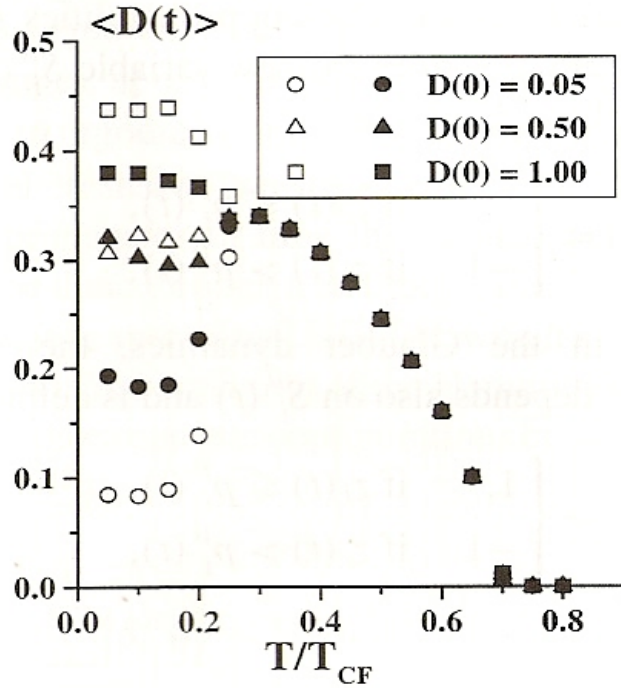


Figura 2.6: Dano médio como função da temperatura escalada T/T_{CF} para a dinâmica de banho térmico, com três diferentes condições iniciais. Os resultados da atualização paralela (símbolos brancos) são comparados com os da atualização sequencial (símbolos pretos). Acima de $T^* \approx 0.3$, dois efeitos são observados: $\langle D \rangle$ deixa de depender das condições iniciais, como também do algoritmo de atualização (Figura retirada da ref. [54])

Segundo os autores Nobre e A. Junior [54], este último resultado vai de encontro com os resultados obtidos para o modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular [39], onde o algoritmo paralelo produziu resultados muito distintos do sequencial. O que leva a sugerir que as restrições para o uso do algoritmo paralelo estejam mais relacionadas à topologia da rede, do que a efeitos de frustação.

Um resultado importante, observado nos vidros de spin de Ising $\pm J$ tridimensional nos trabalhos de Arcangelis *et al.* [44, 45], que pode ser útil para listar modelos com comportamento de vidro de spin, foi terem sido encontradas propriedades de escalas multifractais nos momentos da distribuição de probabilidades para um sítio ir de uma

configuração “desdanificada” (curada) para uma configuração danificada no início da fase caótica, $T_1 \approx T_C$ (temperatura crítica do ferromagneto de Ising puro).

Exemplificando: Durante um longo intervalo de tempo, tendo fixado o sítio central de uma das configurações para cima, cada sítio “ i ” é danificado e “desdanificado” muitas vezes, sendo caracterizado por uma frequência f_i de danos, a partir da qual pode-se construir uma distribuição de probabilidade $P(f)$, isto é, o número de sítios que tem uma certa frequência f e analisar os momentos desta distribuição, dada por,

$$M_q = \sum_f f^q P(f), \quad (2.4)$$

que normalizados segundo a expressão $m_q = (M_q/M_0)^{1/q}$, escala-se com o tamanho do sistema L da seguinte forma,

$$m_q \propto L^{x_q}, \quad (2.5)$$

onde se tem propriedades de multifractal quando x_q varia com q , significando uma variedade de expoentes de escala. Os resultados de Arcangelis *et al.* [44, 45], mostram tal comportamento quando comparado com os do ferromagneto de Ising puro na temperatura crítica T_C . Vale ressaltar que esse comportamento só foi verificado para esse modelo de vidro de spins de Ising $\pm J$ tridimensional no início da fase caótica. Já na temperatura $T_2 = T_{SG}$ para o vidro de spin tridimensional, e no vidro de spin bidimensional, os resultados são semelhantes ao do ferromagneto de Ising tridimensional em T_C (Figura 2.7).

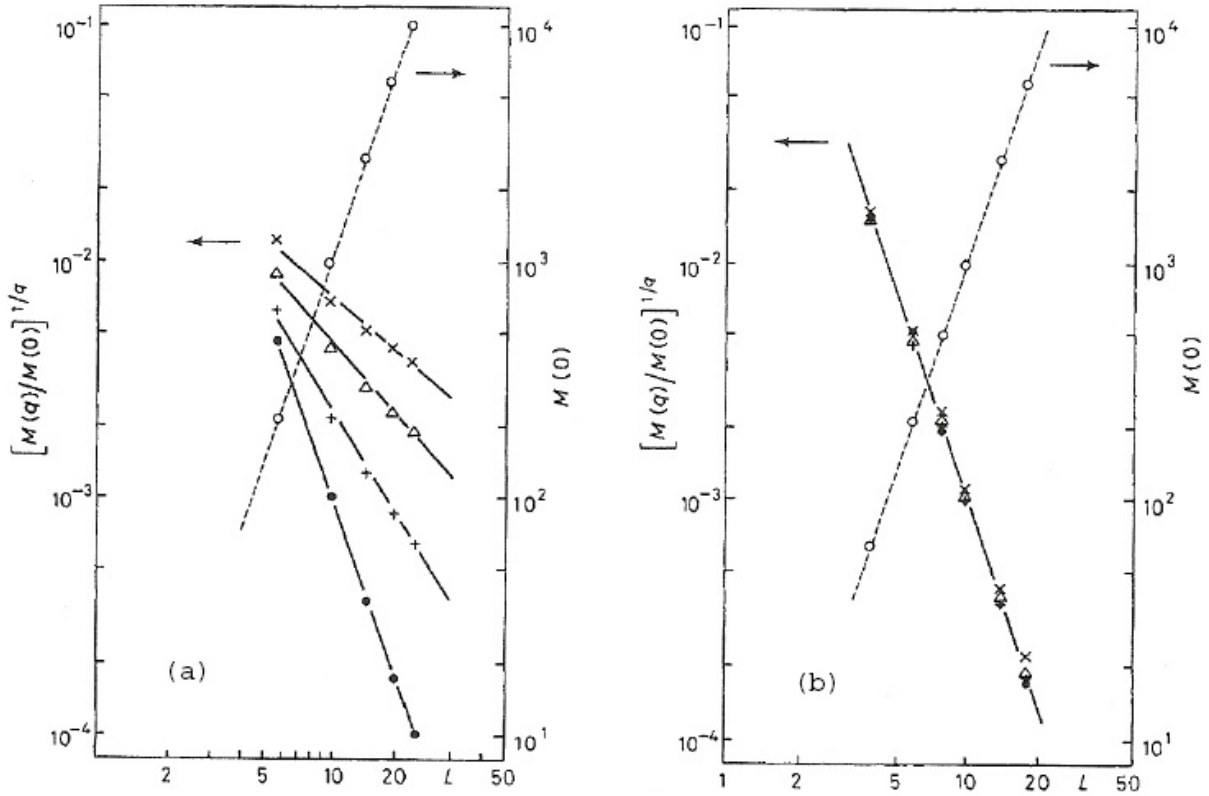


Figura 2.7: Log-Log da quantidade $[M(q)/M(0)]^{1/q}$ versus L para: (a) o vidro de spin de Ising $\pm J$ tridimensional, (b) o ferromagneto de Ising puro tridimensional, em $T = T_C = 4.51$. Os momentos são: M_0 (\circ), m_1 (\bullet), m_2 ($+$), m_3 (Δ), e m_4 (\times) (Figura retirada da ref. [44])

2.2.3 Resultados Analíticos

Além dos resultados até aqui apresentados e de muitos outros obtidos por simulações numéricas, seguindo a metodologia “padrão” da técnica de propagação de danos, com o propósito de responder diferentes questões da área, tais como: o quanto uma pequena perturbação afeta o comportamento da evolução de um sistema físico; até que ponto a evolução de um sistema depende de seu estado inicial; se existe qualquer conexão entre o dano e propriedades térmicas do sistema, entre outras, um importante desenvolvimento no estudo do dano e sistemas térmicos ocorreu quando Coniglio *et al.* [56] perceberam que uma importante quantidade, que será considerada por essa abordagem, é a diferença entre os valores dos possíveis danos existentes e não o dano total.

Nesse notável trabalho, Coniglio e colaboradores [56] mostraram que é possível associar, através de relações exatas, grandezas relacionadas ao dano com as propriedades térmicas do sistema em equilíbrio, tais como a função de correlação, a magnetização e a susceptibilidade magnética. É que a grandeza definida como a diferença entre danos independe da dinâmica ergódica usada (Glauber, banho térmico, ou outras) para a obtenção das propriedades termodinâmicas do sistema, resolvendo assim, um aparente dilema que intrigava muitos pesquisadores da área, pela falta de um consenso sobre a dinâmica apropriada para obter um melhor entendimento desta propagação.

Faremos, agora, apenas uma breve revisão sobre as relações analíticas obtidas, inicialmente para o modelo de Ising, segundo essa vertente de propagação de danos. Uma revisão detalhada sobre os principais pontos dessa abordagem podem ser encontrados na referência [57] e no presente trabalho, onde são feitas extensões a modelos mais gerais e sua verificação numérica.

Considere um sistema de spin, de variáveis de Ising $\sigma_i = \pm 1$, que pode ser expresso em termos de variáveis binárias $\Pi_i = (1 + \sigma_i)/2 = 0, 1$. Comparando duas configurações (A e B) desse modelo, é possível que num sítio específico, sua variável de spin seja $\sigma_i = +1$ na cópia A e $\sigma_i = -1$ na cópia B , e denotamos este dano de tipo d_i^{+-} . É também possível, que o inverso ocorra, ou seja, $\sigma_i^A = -1$ e $\sigma_i^B = +1$, descrito pelo dano tipo d_i^{-+} .

Queremos discutir o dano entre as configurações $\{\sigma_A\}$ e $\{\sigma_B\}$ e para produzir um pequeno dano, fixamos um estado para a variável do sítio central da configuração $\{\sigma_B\}$, a ser sempre,

$$\sigma_0 = -1. \tag{2.6}$$

A condição acima constitui uma fonte de dano permanente. Após um longo período de tempo, quando o equilíbrio térmico for alcançado, as probabilidades de ocorrências dos possíveis danos no sítio i , serão dadas por:

$$d_{0i}^{+-} = \langle \Pi_i^A (1 - \Pi_i^B) \rangle_t \quad d_{0i}^{-+} = \langle (1 - \Pi_i^A) \Pi_i^B \rangle_t \quad (2.7)$$

onde $\langle \dots \rangle_t$ representa a média temporal sobre a trajetória no espaço de fase. Então, definindo a diferença entre as probabilidades dos danos por,

$$\Gamma_{0i} = d_{0i}^{+-} - d_{0i}^{-+} = \langle \Pi_i^A \rangle_t - \langle \Pi_i^B \rangle_t \quad (2.8)$$

onde usamos as equações (2.7). Com o objetivo de expressar o dano por quantidades termodinâmicas definidas sobre um sistema, sem nenhum vínculo, no equilíbrio termodinâmico, a condição (2.6) permanece satisfeita usando uma probabilidade condicional para a cópia B , e usando ergodicidade, podemos passar de médias temporais para médias térmicas,

$$\langle \Pi_i^A \rangle_t = \langle \Pi_i \rangle_T \quad \langle \Pi_i^B \rangle_t = \frac{\langle \Pi_i (1 - \Pi_0) \rangle_T}{\langle (1 - \Pi_0) \rangle_T}, \quad (2.9)$$

onde $\langle \dots \rangle_T$ denota uma média térmica. Substituindo as equações (2.9) na equação (2.8) encontramos, já nas variáveis originais de Ising,

$$\Gamma_{0i} = \frac{\langle \sigma_i \sigma_0 \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_0 \rangle}{2(1 - \langle \sigma_0 \rangle)} = \frac{C_{0i}}{2(1 - m)}, \quad (2.10)$$

onde $C_{0i} = \langle \sigma_i \sigma_0 \rangle - \langle \sigma_0 \rangle^2$ e $m = \langle \sigma_0 \rangle$ são, respectivamente, a função de correlação estática spin-spin e a magnetização por spin do sistema em equilíbrio. Repetindo o mesmo raciocínio, exceto por fixar também o sítio central da configuração A , a saber $\sigma_0^A = +1$, é fácil obter uma função Γ'_{0i} (análoga à função Γ_{0i}), que satisfaz a seguinte relação,

$$\Gamma'_{0i} = \frac{C_{0i}}{(1 - m^2)}. \quad (2.11)$$

As equações (2.10) e (2.11) mostram que a grandeza $\Gamma_{0i} = d_{0i}^{+-} - d_{0i}^{-+}$ (definida como a diferença entre os danos), sujeita a certos vínculos, relaciona-se com as funções de

correlação e com a magnetização de um sistema no equilíbrio térmico. Deve-se ressaltar que estas relações ((2.10) e (2.11)) são numericamente exatas, para qualquer sistema de variáveis booleanas com distribuições arbitrária de ligações ferromagnéticas (de curto ou longo alcance), em uma rede homogênea. Elas, também, independem da dinâmica ergódica e do número aleatório, portanto, são de uma validade muito geral.

No caso de interações ferromagnéticas, com as configurações (A e B) evoluindo com a mesma seqüência de números aleatórios, Coniglio e colaboradores, constataram que a diferença entre os danos, Γ_{0i} , computada a partir das dinâmicas de Metropolis e banho térmico, era a mesma; porém somente um tipo de dano ocorria com a de banho térmico, a saber: d^{+-} . Este é um resultado importante, que provou que a soma, D_{0i} , e a diferença, Γ_{0i} , dos danos são idênticos neste caso. Mais especificamente, a probabilidade de um sítio “ i ” (com $\sigma_0^B = -1$) ser danificado, D_{0i} , definido como,

$$D_{0i} = d_{0i}^{+-} + d_{0i}^{-+} = d_{0i}^{+-} = \Gamma_{0i}. \quad (2.12)$$

Resumindo, assim, os principais resultados encontrados por Coniglio e colaboradores, de que é possível obter relações exatas entre cálculos de danos e propriedades termodinâmicas, que no contexto da dinâmica de banho térmico satisfazem as seguintes equações,

$$D_{0i} = \frac{C_{0i}}{2(1-m)}, \quad D'_{0i} = \frac{C_{0i}}{(1-m^2)}. \quad (2.13)$$

Somando sobre todos os sítios i , obtemos as relações entre a susceptibilidade χ e o dano total,

$$\chi = 2(1-m) \sum_i D_{0i} = (1-m^2) \sum_i D'_{0i}, \quad (2.14)$$

onde $\chi = \sum_i C_{0i}$ é a susceptibilidade magnética do sistema.

Segundo os autores [56], um modo mais direto de associar o dano e a magnetização é considerando a influência de um campo magnético H , opostamente orientado, sobre as cópias (A e B) do sistema de Ising; em (A), fixa-se H para cima, em (B), para baixo. Por conveniência, inicia-se com todos os spins da cópia A para cima e todos para baixo em B . Após o equilíbrio térmico ter sido alcançado, tem-se de forma análoga à equação (2.8),

$$\Gamma_i = d_i^{+-} - d_i^{-+} = \langle \Pi_i^A \rangle_t - \langle \Pi_i^B \rangle_t \quad (2.15)$$

onde d_i^{+-} (d_i^{-+}) é probabilidade de encontrar um dano $(+-)$ ($(-+)$), sem qualquer vínculo imposto sobre os sítios da rede.

Comparando com um outro sistema de “spin” $\{\Pi_i\}$ com o campo magnético (H) para cima, teremos no equilíbrio termodinâmico,

$$\langle \Pi_i^A \rangle_t = \langle \Pi_i \rangle_T, \quad \langle \Pi_i^B \rangle_t = \langle (1 - \Pi_i) \rangle_T. \quad (2.16)$$

Computando numericamente os autores da referência [56] verificaram que, segundo a dinâmica de banho térmico, $d_i^{-+} = 0$, e que desta forma a probabilidade do sítio i ser danificado será:

$$D_i = d_i^{+-} + d_i^{-+} = d_i^{+-} = \Gamma_i, \quad (2.17)$$

o que levar a concluir a partir das equações (2.15) e (2.16) que,

$$D_i = \langle (2\Pi_i - 1) \rangle_T = m_i, \quad (2.18)$$

onde m_i é a magnetização no sítio i . Somando sobre todos os sítios, temos

$$M = \sum_i D_i, \quad (2.19)$$

onde $M = mL^d$ é a magnetização. Em particular, no limite termodinâmico e $H \rightarrow 0^+$ com $T < T_C$, a equação (2.19) relaciona o dano à magnetização espontânea.

Complementando a análise, Coniglio *et al.* [56], testaram numericamente seus resultados (equações (2.13), (2.14) e (2.19)), para verificar a eficiência dessa abordagem na obtenção das propriedades termodinâmicas. Dois desses resultados são mostrados nas figuras (2.8) e (2.9), para o caso do modelo de Ising na rede quadrada.

Essas figuras mostram que as relações (2.13) e (2.14) são satisfatoriamente verificadas com barras de erros, independentemente do tamanho do sistema. Quando comparadas com o método convencional de Monte Carlo, verifica-se que método de propagação de danos permite resultados substancialmente melhores. Os autores [56] concluíram que o método de propagação de danos representa uma técnica mais eficiente de avaliar as funções de correlação, do que o Monte Carlo usual.

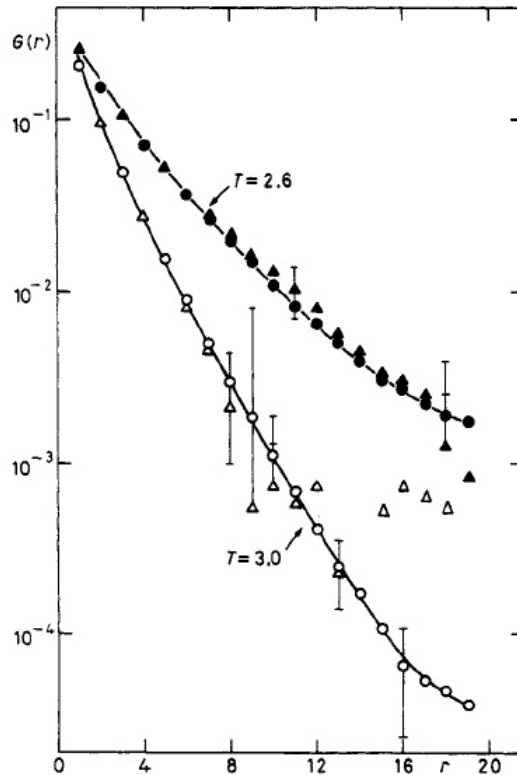


Figura 2.8: A função de correlação $G(r) = \sum_{|i|=r} C_{oi}$ (\blacktriangle para $T = 2.6$ e \triangle para $T = 3.0$, obtidas a partir de simulações de MC) e $2\bar{D}(r)(1 - m)$, onde $\bar{D}(r) = \sum_{|i|=r} D_{oi}$ (\bullet para $T = 2.6$ e \circ para $T = 3.0$, obtidas a partir de simulações de PD) como função de r . (Figura retirada da ref. [56])

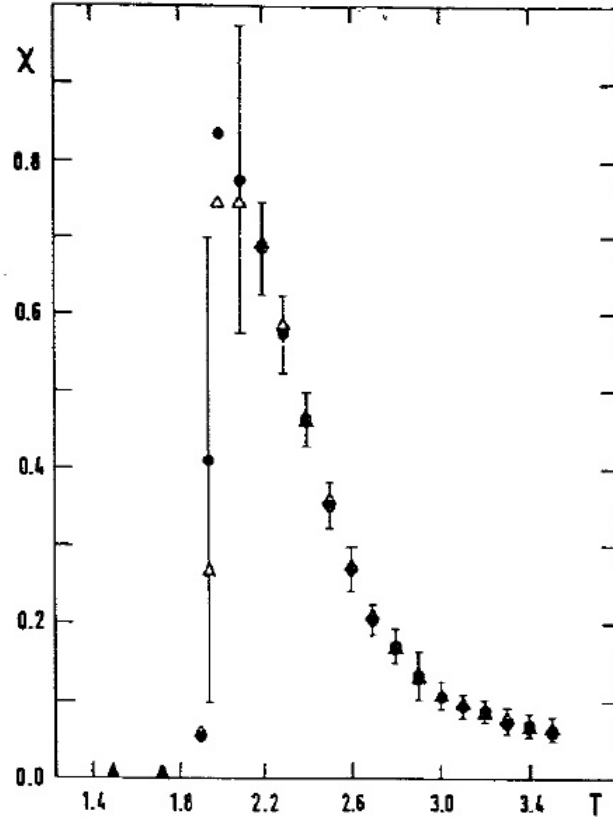


Figura 2.9: A susceptibilidade χ calculada de forma padrão (\bullet) e via danos (Δ), $\chi = 2\bar{D}(r)(1 - m)$, onde $\bar{D}(r) = \sum_{|i|=r} D_{oi}$, como uma função da temperatura. (Figura retirada da ref. [56])

Os autores [56] também constataram a partir da equação (2.19) que os aglomerados de sítios danificados visualizam as flutuações críticas da magnetização (ou dos spins); representando os aglomerados de spins que são efetivamente correlacionados. Para confirmar este quadro, a determinação numérica da dimensão fractal dos aglomerados danificados para o modelo de Ising ferromagnético bidimensional, na temperatura crítica, revelou o valor $d_f = 1.87 \pm 0.02$, em boa concordância com o valor exato $d_f = d - \frac{\beta}{\nu} = 1.875$, da dimensão fractal dos aglomerados de Ising crítico.

Resultados posteriores [58, 59, 60], tem mostrado que a dimensão fractal dos aglomerados de sítios danificados, segundo a dinâmica de banho térmico, parecem estar de acordo

com os valores $d - \frac{2\beta}{\nu} = 1.75$ para o modelo de Ising bidimensional e $d - \frac{2\beta}{\nu} \simeq 1.96$ para o modelo de Ising tridimensional. Entretanto, a convergência para a esperada dimensão fractal $d_f = d - \frac{\beta}{\nu}$, pode ser explicada, ou por uma correção logarítmica, ou por um prefator logarítmico [59].

Não sendo nosso objetivo, aqui destacar todos os resultados conhecidos por essa técnica de propagação de danos, que a priori são inúmeros, e também para não prejudicar a exposição do restante do trabalho, encerramos este capítulo, relatando que, posteriormente ao trabalho de Coniglio *et al.* [56], extensões dessa abordagem analítica do dano, foram deduzidas para modelos mais gerais, a saber, a primeira por Mariz [61] para os ferromagnetos de Potts (q -estados) e Ashkin-Teller, e posteriormente, por Mariz *et al.* para os modelos N -Vetorial discreto [62] e (N_α, N_β) [63]; em todos os sistemas analisados, os autores [61, 62, 63] foram capazes de obter relações exatas entre certas combinações específicas de dano e quantidades termodinâmicas, como funções de correlação e parâmetros de ordem desses sistemas.

Nos próximos capítulos, o presente trabalho terá como objetivo verificar numericamente por simulações de propagação de danos, relações exatas entre dano e quantidades térmicas de equilíbrio, já obtidas para alguns dos modelos citado acima, como também generalizá-las para o caso do modelo de Ising com spin-1 e mostrar sua eficiência na obtenção de resultados que caracterizam as diferentes transições de fases que se desenvolvem nesses sistemas estatísticos.

Capítulo 3

Propriedades Térmicas do Ferromagneto de Potts

A maior parte do conteúdo deste capítulo corresponde ao artigo “*Damage-spreading simulations through exact relations for the two-dimensional Potts ferromagnet*”, por A. S. Anjos, D. A. Moreira, A. M. Mariz and F. D. Nobre, Phys. Rev. E, **74**, 16703 (2006).

3.1 Introdução

Entre os vários modelos de Mecânica Estatística empregados para estudar sistemas cooperativos, um dos mais úteis é o modelo de Potts, desenvolvido como uma generalização do modelo de Ising e apropriado para descrever muitos sistemas reais. Neste modelo, os sítios de uma rede são ocupados por variáveis idênticas $\sigma_i(t)$ $\{i = 1, 2, 3, \dots, N\}$, cada uma tendo q estados possíveis, com um Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \delta(\sigma_i, \sigma_j), \quad (3.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ denota a soma sobre todos os pares de sítios vizinhos distintos mais próximos da rede, J_{ij} é a constante de acoplamento, e $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ é a função delta de Kronecker (onde $\delta(\sigma_i, \sigma_j) = 1$ se $\sigma_i = \sigma_j$ e zero (0) se forem diferentes), com $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$.

Na rede quadrada, o modelo ferromagnético uniforme ($J_{ij} = J > 0$) apresenta uma transição de fase na temperatura $k_B T_C(q)/J = 1/(\ln(1 + \sqrt{q}))$ [64], onde k_B é a constante de Boltzmann. Um dos aspectos físicos interessantes do modelo de Potts é o fato de existir uma mudança na ordem da transição, que é contínua para $q \leq q_C$ e descontínua quando $q > q_C$, com $q_C = 4$ em duas dimensões [65]. Para $q = 2$ este modelo se reduz ao modelo de Ising.

Do ponto de vista experimental, o modelo de Potts possui relação com diversos modelos em física estatística como, por exemplo, o modelo de vértices com regra de gelo, percolação, redes de resistores, etc [66]. Outras aplicações podem ser vistas em sistemas de adesão celular, modelos de espumas, etc.

Como poucos resultados exatos são conhecidos, em duas e três dimensões, vários métodos tem sido aplicados no estudo deste modelo como, por exemplo, o grupo de renormalização, expansões em série, e simulações numéricas do tipo Monte Carlo (MC) [66, 67]. A última abordagem (MC), conforme vimos anteriormente, lida com uma única cópia do sistema, onde cada variável dinâmica (que pode ser definida sobre os sítios de redes regulares) ou é visitada aleatoriamente, ou numa seqüência bem definida, a ser atualizada posteriormente de acordo com certas regras dinâmicas. A sua principal desvantagem, já que simulamos sistemas finitos onde efeitos de tamanho finito estão sempre presentes, está no grande esforço computacional exigido quando se tenta extrapolar os resultados para o desejado limite termodinâmico a fim de obter resultados mais seguros.

Um outro tipo de simulação de MC que tem provado ser muito efetiva nos estudos das dinâmicas de modelos estatísticos é a denominada técnica de “Propagação de Danos” (PD). Esta consiste, essencialmente, em seguir a evolução temporal da distância de Hamming entre duas cópias (originalmente idênticas) de um dado sistema, sujeitas ao mesmo ruído térmico, dado que uma perturbação (ou dano) é introduzido em uma delas no instante inicial.

Esta abordagem (PD), por ser menos sensível a flutuações estatísticas quando com-

parada ao método convencional de Monte Carlo, e por apresentar inúmeros resultados interessantes em sistemas de spins (conforme vimos anteriormente), tem despertado algumas pesquisas acerca do comportamento dinâmico do modelo de Potts [61, 68, 69, 70, 71]. Considerados como resultados mais expressivos a partir da PD “padrão”, listamos brevemente, os de Bibiano *et al.* [68], e da Silva *et al.* [69] por estarem mais relacionados com as propriedades de equilíbrio do sistema.

No que diz respeito à dinâmica de evolução, no espaço de fase, do modelo de Potts com q estados na rede quadrada, usando o método de propagação de danos com a dinâmica de Glauber, Bibiano *et al.* [68] observaram, para todos os valores de $q \geq 3$, uma transição de fase do dano ocorrendo a uma temperatura de transição T_D cujo valor se aproxima razoavelmente da temperatura crítica do modelo [64] $k_B T_C / J = 1 / \ln(1 + \sqrt{q})$, e que a fase congelada ($D(t) = 0$) ocorre para $T < T_D$ e a fase caótica para $T \geq T_D$ onde o dano assume o valor $D(T \rightarrow \infty) = (q - 1) / q$ (ver figura 3.1).

Os autores [68], também, observaram que a fase caótica apresenta uma região para $T_D < T < T^*(q)$, onde o dano depende das condições iniciais e uma outra para $T^*(q) < T$, na qual o dano médio possui o mesmo valor $(q - 1) / q$, para todos os valores do dano inicial. Definindo o intervalo $\Delta(q) = T^*(q) - T_D(q)$, que converge para zero com o aumento de q , os autores conjecturam que o caso $\Delta(q) = 0$, é uma “assinatura” da transição descontínua, e encontraram um valor para $q_C (\approx 7)$, sendo a diferença do valor exato ($q_C = 4$), atribuída ao pequeno tamanho do sistema simulado ($L = 50$).

Usando a dinâmica de banho térmico, da Silva *et al.* [69] constataram que, além do diagrama de fases dinâmico do ferromagneto de Potts com 3 estados ser bastante similar ao dos sistemas mais complexos, apresentando uma estrutura com três diferentes regimes de danos [42, 49, 51, 54], a inesperada fase caótica que aparece acima da temperatura crítica do Potts estático, $T_2 = T_C(q = 3)$ e, abaixo da temperatura de Curie do Ising, $T_1 = T_C(q = 2)$ ($T_2 < T_1$), tem características raras (ver figura 3.2).

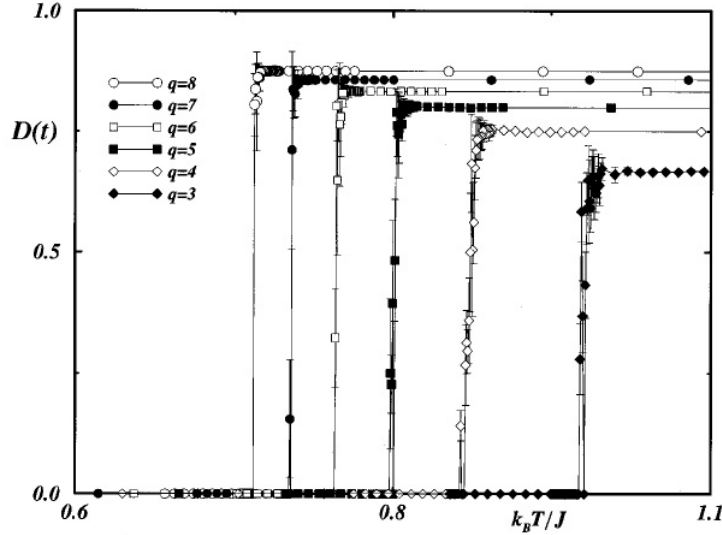


Figura 3.1: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3, \dots, 8$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 64$ amostras num intervalo de tempo $t = 2000$. O dano inicial $D(0) = 1/N$ foi aplicado na rede quadrada de tamanho $L = 50$ (Figura retirada da ref.[68]).

Um fato interessante destacado por da Silva *et al.* [69] desse diagrama de fases dinâmico, encontra-se na fronteira superior da fase caótica de dano médio independente das condições iniciais $D(0)$, ou seja, nas vizinhanças da temperatura T_1 . Segundo os autores [69], esta temperatura T_1 , apesar de estar surpreendentemente muito próxima da temperatura estática do ferromagneto de Ising bidimensional ($T_C \approx 1.135$), quando analisada pelo comportamento do dano médio como uma função do tipo lei de potência no tempo ($\langle D(t) \rangle \sim t^{-\delta}$), fornece um $\delta = 0,46 \pm 0,03$, compatível com o expoente crítico dinâmico referente à transição de percolação direcionada em dimensão $2+1$, de acordo com a conjectura de Grassberger [33], que diz basicamente que toda transição de dano que não coincide com uma transição termodinâmica, está na classe de universalidade da percolação direcionada. Segundo Luz *et al.* [70], o mesmo valor para o expoente δ foi encontrado para o modelo de Potts $q = 3$ estados com a dinâmica de agregados (cluster) de Swendsen-Wang.

Conforme mencionamos no capítulo anterior, relações exatas envolvendo quantidades termodinâmicas, tipo magnetização, susceptibilidade magnética, como também as funções

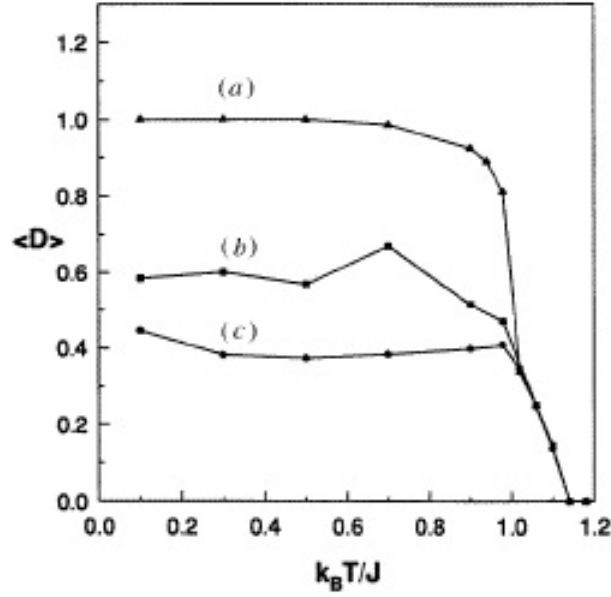


Figura 3.2: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais: (a) $D(0) = 1$; (b) $D(0) = 0,5$; (c) $D(0) = 0,05$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 64$ a cada tempo $t = 10000$. (Figura retirada da ref. [69])

de correlação de dois “spins”, com diferenças de certos tipos de dano foram encontradas, para modelos de Ising translacionamente invariante [56], e posteriormente estendidas para modelos mais complicados, como Potts [61], Ashkin-Teller [61], modelos N -vetorial discreto [62], e o modelo (N_α, N_β) [63]. Aqui, resumimos os resultados obtidos por Mariz [61], segundo esta abordagem para o modelo de Potts, que será verificado numericamente na próxima seção, como um dos objetivos do presente trabalho.

Considerando duas cópias do modelo de Potts ($\{\sigma_i^A\}$ e $\{\sigma_i^B\}$), Mariz [61], analisou dois tipos de danos, a saber,

$$(1, \bar{1})_i \equiv \{\sigma_i(A) = 1; \sigma_i(B) \neq 1\} \quad \text{e} \quad (\bar{1}, 1)_i \equiv \{\sigma_i(A) \neq 1; \sigma_i(B) = 1\} \quad (3.2)$$

(a escolha do estado 1 é arbitrária).

Após um longo tempo, quando o equilíbrio térmico for alcançado, as respectivas probabilidades dos danos aparecer no sítio i serão dadas por:

$$d_i^{1\bar{1}} = \langle \delta(\sigma_i(A), 1)(1 - \delta(\sigma_i(B), 1)) \rangle_t \quad e \quad d_i^{\bar{1}1} = \langle (1 - \delta(\sigma_i(A), 1))\delta(\sigma_i(B), 1) \rangle_t \quad (3.3)$$

onde $\langle \dots \rangle_t$ representa a média temporal sobre a trajetória no espaço de fases.

Definindo a diferença entre as probabilidades de ocorrência dos danos por,

$$\Gamma_i = d_i^{1\bar{1}} - d_i^{\bar{1}1} = \langle \delta(\sigma_i(A), 1) \rangle_t - \langle \delta(\sigma_i(B), 1) \rangle_t. \quad (3.4)$$

Para expressar o dano através de quantidades termodinâmicas definidas sobre um sistema ideal, no limite termodinâmico, danos permanentes em uma das cópias ou em ambas são necessários.

Impondo um vínculo na cópia B , $\sigma_0(B) \neq 1$, para ($t \geq 0$), e usando ergodicidade nas cópias A e B , temos,

$$\langle \delta(\sigma_i(A), 1) \rangle_t = \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle_T \quad e \quad \langle \delta(\sigma_i(B), 1) \rangle_t = \frac{\langle (1 - \delta(\sigma_0, 1))\delta(\sigma_i, 1) \rangle_T}{\langle 1 - \delta(\sigma_0, 1) \rangle_T} \quad (3.5)$$

onde uma probabilidade condicional foi usada na cópia B ; $\langle \dots \rangle_T$ representa a média térmica.

Substituindo as equações (3.5), na função Γ_i , (equação (3.4)), encontramos,

$$\Gamma_i \equiv \Gamma_{0i} = \frac{C_{0i}}{(1 - \xi)} \quad (3.6)$$

onde C_{0i} e ξ são, respectivamente, a função de correlação “spin-spin” e o parâmetro de ordem do modelo de Potts, dadas por,

$$C_{0i} = \langle \delta(\sigma_i, 1)\delta(\sigma_0, 1) \rangle_T - \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle_T \langle \delta(\sigma_0, 1) \rangle_T \quad e \quad \xi = \langle \delta(\sigma_0, 1) \rangle_T. \quad (3.7)$$

Repetindo o procedimento, com outro tipo de vínculo, a saber: $\sigma_0(A) = 1$ e $\sigma_0(B) \neq 1$, para todo $t \geq 0$, e usando ergodicidade e probabilidade condicional em ambas as cópias A e B , resulta para a função Γ'_{0i} (análoga à função Γ_{0i}), a seguinte relação:

$$\Gamma'_{0i} = \frac{C_{0i}}{\xi(1 - \xi)} \quad (3.8)$$

As equações (3.6) e (3.8), são os principais resultados obtidos por Mariz [61], segundo esta abordagem de propagação de dano, para o modelo de Potts (q -estados). Estas relações independem da dinâmica ergódica escolhida, e seu possível uso em simulações foi ilustrado para o caso do ferromagneto de Ising bidimensional, onde propriedades termodinâmicas foram obtidas, através de simulações de propagação de danos (PD), com uma significativa redução de efeitos de tamanho finito [56].

No presente capítulo, nós retomamos este problema [72] fazendo uso das relações exatas válidas para os modelos de Potts translacionamente invariantes, para computar a magnetização e a função de correlação de spin-spin do ferromagneto de Potts q -estados na rede quadrada, por simulações de PD. O poder e a confiabilidade do método é confirmada aqui. Em particular, a função de correlação, que é geralmente uma quantidade difícil de ser estimada através de simulações padrões de MC, devido a grandes flutuações, é computada, precisamente, dentro do presente procedimento numérico de PD. Apesar de redes de tamanhos relativamente pequenos, o expoente η , associado com o decaimento lei de potência da função de correlação no ponto crítico, é estimado em alguns casos, até com uma concordância de quatro dígitos com os valores exatos bem conhecidos. Para $q \geq 5$, nossos resultados para o expoente β da magnetização são consistentes com a esperada transição de fase de primeira ordem. Na próxima seção, definimos o procedimento numérico e na seção 3.3, apresentamos e discutimos nossos resultados.

3.2 O Modelo e o Procedimento Numérico

Vamos considerar o ferromagneto de Potts q -estados na rede quadrada de dimensão linear L ($N = L^2$ é o número total de “spins”), definido pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j). \quad (3.9)$$

onde $J > 0$, a soma $\sum_{\langle i,j \rangle}$ aplica-se somente aos pares de spins vizinhos mais próximos, e $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ representa a delta de Kronecker.

O problema será examinado através da técnica PD, a qual, como já dissemos em seções anteriores, consiste na investigação da evolução temporal de duas configurações do sistema ($\{\sigma_i^A\}$ e $\{\sigma_i^B\}$), para uma dada temperatura T , sujeitas à mesma dinâmica e mesma seqüência de números aleatórios.

Para a atualização das variáveis de spins, em cada configuração, usamos o procedimento de Monte Carlo em que todos os sítios da rede são visitados de forma sequencial, e cada spin $\sigma_i^\mu(t)$ ($\mu = A, B$), no tempo t , é atualizado segundo a dinâmica de Glauber, que segue as seguintes regras:

(i) Um possível estado novo $\sigma_i^\mu(t+1)$ é escolhido ao acaso, com $\sigma_i^\mu(t+1) \neq \sigma_i^\mu(t)$, a partir do qual calcula-se a mudança na energia $\Delta\mathcal{H}^\mu = \mathcal{H}^\mu(t+1) - \mathcal{H}^\mu(t)$.

(ii) Define-se, então, a probabilidade

$$p_i^\mu(t) = [1 + \exp(\beta\Delta\mathcal{H}^\mu)]^{-1} \quad [\beta = 1/(k_B T)] \quad (3.10)$$

(iii) Introduzindo um número aleatório $z_i(t)$, uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1]$, executa-se a mudança se $z_i(t) < p_i^\mu(t)$; caso contrário, o spin $\sigma_i^\mu(t)$ não é atualizado.

Inicialmente, criamos uma configuração $\{\sigma_i^A\}$ e a deixamos evoluir por um processo de termalização (equilíbrio), durante t_{eq} passos de MC (um passo de Monte Carlo corresponde uma varredura completa da rede); isto é conferido por observar pequenas flutuações no tempo em quantidades termodinâmicas, como magnetização e energia. Em

seguida, definimos o tempo $t = 0$, e uma cópia do sistema A é criada, que corresponde a segunda configuração ($\{\sigma_i^B\}$).

É importante notar que em nossas simulações, as configurações identicamente termalizadas ($\{\sigma_i^A(0)\} = \{\sigma_i^B(0)\}$) no instante $t = 0$, passarão a evoluir sob uma abordagem de PD ligeiramente diferente da sua forma comumente empregada, que tem como principal quantidade mensurável a distância de Hamming (ou dano médio); na sua forma “padrão” é comum, após a introdução do dano inicial em uma das cópias, submeter novamente ambas as cópias a um novo processo de equilibração, denominado de relaxação do dano.

Na presente abordagem, seguimos o seguinte procedimento:

(i) Introduzimos uma “fonte de dano”, somente no sítio central da rede, por impor vínculos em seu spin associado para todos os instante $t \geq 0$. Tais vínculos podem ser fixados a uma das cópias (A ou B), ou a ambas; todos os demais spins da rede, em ambas as cópias, são permitidos a evoluir livremente seguindo o procedimento dinâmico previamente definido. Neste caso, em $t = 0$, as cópias A e B diferem somente no sítio central; portanto, não há necessidade para um segundo processo de termalização.

(ii) Após isto, começamos a computar as médias sobre o tempo, por um intervalo de tempo t_{av} . Para reduzir os possíveis efeitos de correlação no tempo, só consideramos em nossas médias temporais, dados a cada intervalo de 5 passos de MC. Portanto, cada média temporal consiste em uma média sob $t_{av}/5$ medidas.

(iii) Repetimos o procedimento para M amostras (isto é, M conjuntos diferentes de números aleatórios), fornecendo médias sob amostras, para reduzir os efeitos nas seqüências de números aleatórios. Para assegurar que qualquer diferença entre as cópias, seja devido exclusivamente a esta fonte de dano, ambas as cópias devem evoluir sempre sob a mesma dinâmica e mesma seqüência de números aleatórios para $t \geq 0$.

Para explorar numericamente as relações exatas (3.6) e (3.8), definidas anteriormente, dois tipos de evolução serão considerados.

(a) Nós impomos $\sigma_0^B(t) \neq 1$ (a escolha do estado 1 é arbitrária), para todo $t \geq 0$, enquanto todos os outros spins em ambas as cópias são deixados livres a evoluir sob o procedimento dinâmico acima. Segundo esta evolução, estamos computando numericamente a função Γ_{0i} da equação (3.6), a saber:

$$\Gamma_{0i} = \frac{C_{0i}}{1 - \xi}, \quad (3.11)$$

onde

$$\Gamma_{0i} = \langle \delta(\sigma_i^A, 1) \rangle_t - \langle \delta(\sigma_i^B, 1) \rangle_t. \quad (3.12)$$

(b) Impomos, agora, $\sigma_0^A(t) = 1$ e $\sigma_0^B(t) \neq 1$ (novamente a escolha do estado 1 é arbitrária), para todo $t \geq 0$; todos os spins restantes em ambas as cópias deverão evoluir sob o procedimento dinâmico acima. Para esta evolução, a função a ser computada é o Γ'_{0i} da equação (3.8), a saber:

$$\Gamma'_{0i} = \frac{C_{0i}}{\xi(1 - \xi)}, \quad (3.13)$$

onde Γ'_{0i} é determinado novamente pela mesma equação (3.12), mas que deverá ser computado com um processo de evolução diferente.

Portanto, após o processo de equilibração da cópia A (no tempo $t = 0$), esta configuração ($\{\sigma_i^A(0)\}$) é armazenada como uma nova cópia A_0 que permanecerá intacta; então, a evolução temporal descrita em (a) é seguida para as cópias A e B , de tal modo que se obtem, após t_{av} passos de MC, Γ_{0i} . Agora, recuperando a cópia $A_0 = \{\sigma_i^A(0)\}$, criamos novamente as cópias A e B que evoluirão de acordo com a segunda evolução, para obter Γ'_{0i} . A partir destas duas quantidades, usando as equações (3.11) e (3.13), obtem-se C_{0i} e ξ .

A quantidade C_{0i} , como vimos na equação (3.7), representa a função de correlação dois-spins, do spin no sítio central da rede, σ_0 , e um spin num sítio arbitrário i , σ_i , separados por uma distância r .

É importante notar que sobre uma rede quadrada, na maioria dos casos, existem quatro spins σ_i com a mesma distância r do sítio central. Na realidade, há algumas exceções a esta declaração, para os quais mais do que quatro spins apresentam a mesma distância de σ_0 ; como exemplo, se assumirmos um espaçamento de rede unitário, temos oito spins cuja distância a σ_0 é $\sqrt{5}$, e doze spins cuja distância a σ_0 é 5. Porém, sempre é possível definir a função de correlação $C(r)$ como um valor médio,

$$C(r) = \frac{1}{4} \sum_{i(r)} C_{0i}, \quad (3.14)$$

onde $\sum_{i(r)}$ corresponde a uma soma sobre quatro sítios com a mesma distância r do sítio central; nos casos excepcionais onde existem mais do que quatro sítios com a mesma distância r do sítio central, os spins restantes não são levados em conta na média da equação (3.14).

O parâmetro ξ (equação (3.7)) está diretamente relacionado com a magnetização por spin do sistema. Note que $\xi = 1$ a temperatura zero, mas para altas temperaturas, onde todos os estados são igualmente prováveis, obtém-se $\xi = 1/q$. Portanto, vamos definir a magnetização por spin como:

$$m = \frac{1}{q-1}(q\xi - 1) = \frac{1}{q-1}[q\langle\delta(\sigma_0, 1)\rangle_T - 1]. \quad (3.15)$$

Na próxima seção, nós apresentamos e discutimos os resultados obtidos para a magnetização por spin m e para a função de correlação $C(r)$, para diferentes valores de q .

3.3 Resultados e Discussões

Estudamos o ferromagneto de Potts com q estados na rede quadrada de tamanho linear $L = 100$, através do procedimento numérico de PD explicado acima. Condições de contorno periódicas foram sempre usadas e a função de correlação $C(r)$ foi medida com respeito ao sítio central, localizado nas coordenadas $(L/2, L/2)$. Nós sempre começamos com a cópia A com todos spins da rede no estado $\sigma_i^A = 1$ ($\forall i$); Após isto, o sistema evoluiu para o equilíbrio, por um tempo de termalização $t_{\text{eq}} = 10^4$ passos de MC. As médias térmicas foram desenvolvidas sob $t_{\text{av}} = 2.5 \times 10^5$ passos de MC, com medidas tomadas a cada intervalo de tempo de 5 passos de MC, que forneceram um total de 5×10^4 medidas para cada média térmica. Além disso, cada simulação foi repetida para $M = 50$ amostras diferentes, para melhorar as estatísticas, como também para reduzir possíveis dependência sobre seqüências de números aleatórios. Como uma referência, nossas temperaturas foram medidas em unidades da temperatura crítica deste modelo que é exatamente conhecida, para um valor arbitrário q , $k_B T_C / J = 1 / [\ln(1 + \sqrt{q})]$.

Na figura 3.3 exibimos a função de correlação $C(r)$ versus r para três valores diferentes de temperatura próximo da criticalidade, no caso $q = 3$. Nosso critério para a determinação da “temperatura crítica” (associada com o tamanho finito do sistema considerado) consiste em procurar pela temperatura na qual a função $C(r)$ apresenta o decaimento mais lento com r . A partir da figura 3.3, nota-se que, apesar do tamanho do sistema usado ser relativamente pequeno, o decaimento mais lento ocorre para uma temperatura que coincide, com 3 algarismos significativos, com a temperatura crítica exata. Aqui, ressaltamos que varreduras foram realizadas com incrementos na temperatura (escalado pela correspondente temperatura crítica exata), de 0.001 em torno da criticalidade, embora, por motivo de clareza, a figura 3.3 apresente dados de somente três temperaturas típicas.

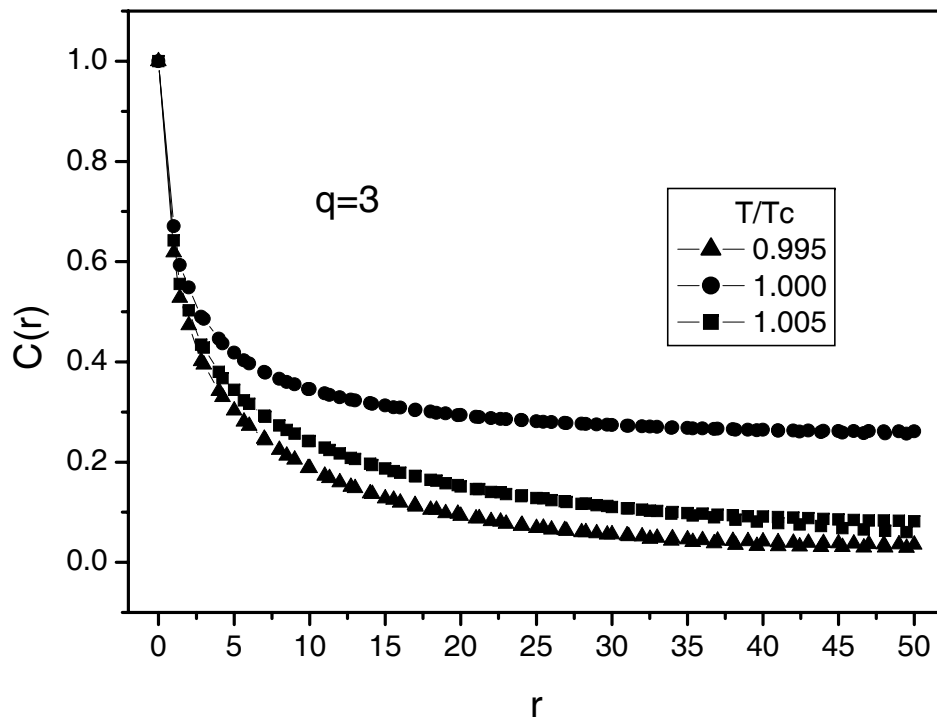


Figura 3.3: A função de correlação $C(r)$ versus r , no caso $q = 3$, para diferentes temperaturas (escalada pela correspondente temperatura crítica exata) próximo da criticalidade.

O gráfico Log-Log da função de correlação $C(r)$ versus r , referente aos dados da figura 3.3, é apresentado na figura 3.4, onde se verifica que o melhor comportamento de lei de potência,

$$C(r) \sim r^{-\eta} \quad (r \rightarrow \infty), \quad (3.16)$$

é obtido para $T = T_C$ [recordemos que, para uma rede de dimensão d , devemos ter $C(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$ em $T = T_C$ [5, 6]]. A melhor estimativa para o expoente crítico η , a partir da figura 3.4, é dado na tabela 3.1.

O comportamento exibido nas figuras 3.3 e 3.4 foi verificado para vários valores de q , a saber, $q = 2, 3, 4, 5$ e 6 . Em todos os casos, a temperatura crítica estimada coincide com

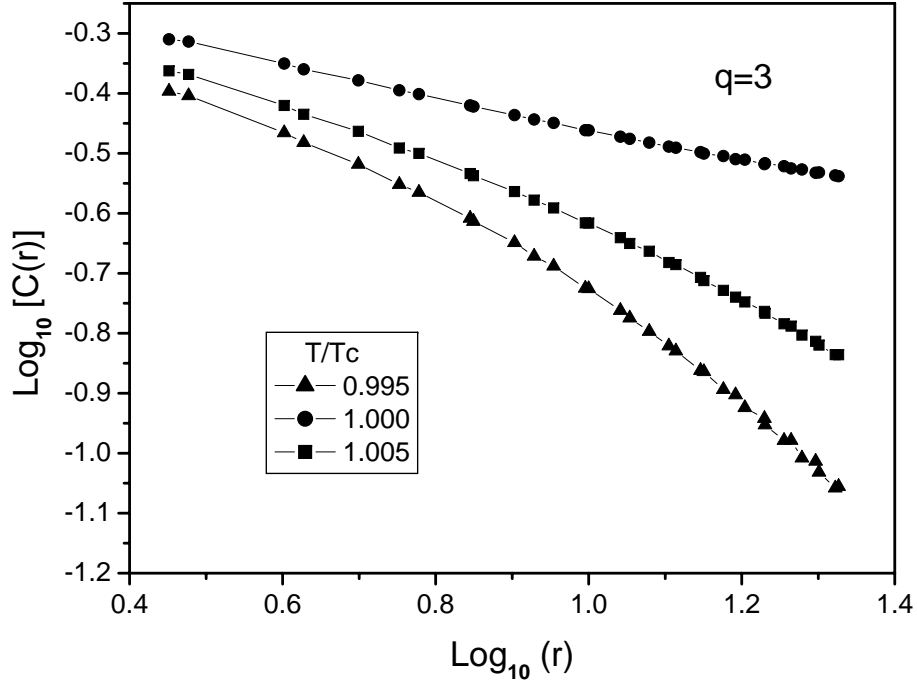


Figura 3.4: Gráfico Log-Log das funções de correlação $C(r)$ versus r exibidas na figura 3.3.

os valores exatos, até uma precisão relativa de 0.001, isto é, o decaimento mais lento na função de correlação $C(r)$ foi obtido para uma temperatura

$$\frac{k_B T_c^{(L)}(q)}{J} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q})} \pm 0.001, \quad (3.17)$$

onde $T_c^{(L)}(q)$ representa a “temperatura crítica” para o sistema de tamanho finito L . É importante recordar que o comportamento de lei de potência da figura 3.4 não é esperado para $q = 5$ e 6 , no limite termodinâmico, onde uma bem conhecida transição de fase de primeira ordem se desenvolve. Nós atribuímos tais resultados contraditórios aos efeitos de tamanho finito, embora para tamanhos de redes maiores investigados ($L = 200$), não termos encontrado nenhuma mudança significativa neste comportamento.

Na figura 3.5 exibimos a magnetização por spin como uma função da temperatura (escalada em unidades da correspondente temperatura crítica exata), obtida pelo proce-

dimento numérico acima mencionado, para o caso $q = 3$. Apesar do tamanho de rede considerado pequeno, observa-se uma completa curva suave - mesmo próximo da criticidade - com efeitos de tamanho finito irrelevantes; isto representa uma das vantagens das presentes simulações de PD.

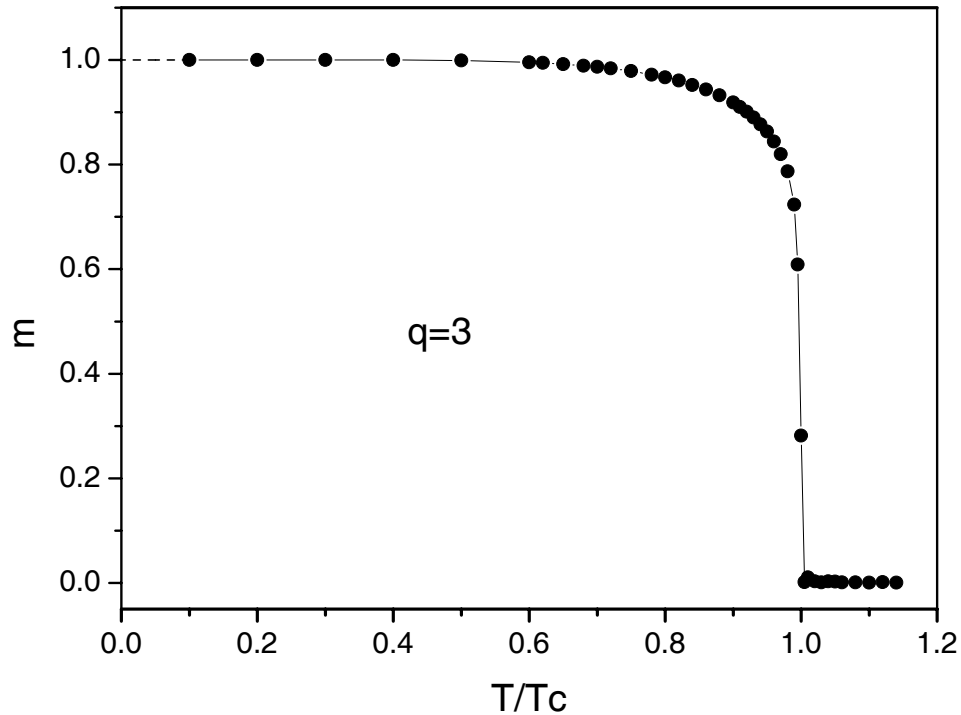


Figura 3.5: A magnetização por spin versus temperatura (em unidades da correspondente temperatura crítica exata), no caso $q = 3$. A linha cheia é só uma guia para o leitor, ao passo que a linha tracejada, em baixas temperaturas, corresponde a uma extrapolação para temperatura nula.

Uma simples análise de $\log_{10} m$ versus $\log_{10}(1 - T/T_c)$ fornece o expoente crítico β associado à magnetização do sistema (ver tabela 3.1). Análises similares foram encontradas para outros valores de q , a saber, $q = 2, 3, 4, 5$, e 6. Como esperado para uma transição de fase de primeira ordem, deveríamos obter $\beta = 0$, para $q \geq 5$, sinalizando uma descontinuidade no parâmetro de ordem. Entretanto, encontramos nos casos $q \geq 5$, um expoente

crítico β que se aproxima de zero, muito lentamente, para redes de tamanho crescente. Isto é exibido na figura 3.6, onde três tamanhos diferentes de rede foram considerados na análise do expoente β , para $q = 5$; neste caso, obtemos $\beta = 0.0725 \pm 0.0013$ ($L = 50$), $\beta = 0.0679 \pm 0.0009$ ($L = 100$) e $\beta = 0.0649 \pm 0.0010$ ($L = 200$).

Tal convergência lenta para o limite termodinâmico reflete o "crossover" suave, nas propriedades termodinâmicas, que ocorre próximo de $q_c = 4$, quando se passa de uma transição de fase contínua para a de primeira ordem [65]. Embora as estimativas do expoente β para o caso $q = 5$ (símbolos vazios na figura 3.6) estejam distantes do valor exato (círculo cheio), as outras estimativas de β na figura 3.6 ($q = 2, 3$ e 4) parecem essencialmente sobrepostos nos correspondentes valores exatos.

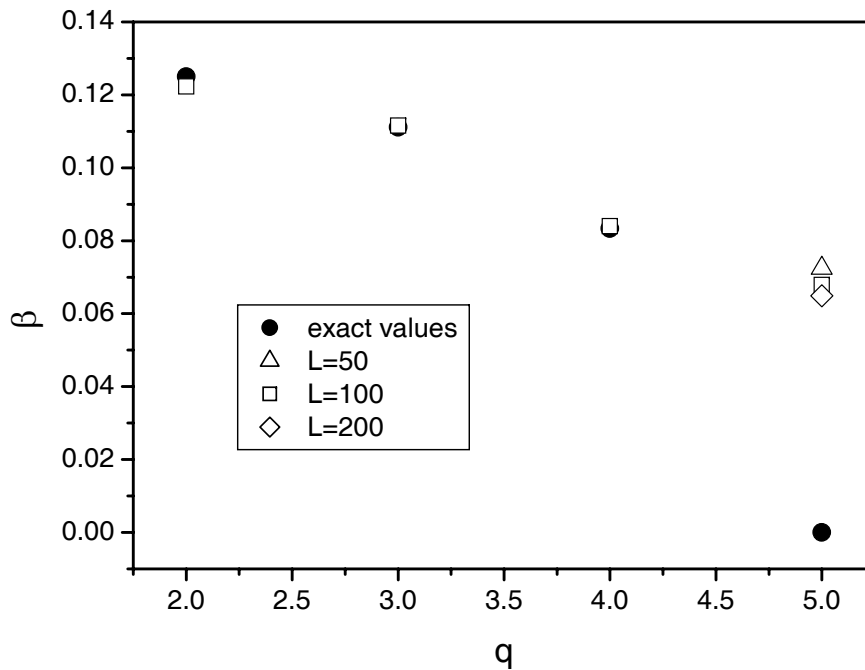


Figura 3.6: Os expoentes críticos β , obtidos a partir da presente abordagem PD (símbolos vazios) são comparados com os valores exatos (círculos cheios) para diferentes valores de q . No caso $q = 5$, três diferentes tamanhos de rede foram usados, ao passo que nos outros casos, os resultados de nossas simulações correspondem a um tamanho de rede $L = 100$.

Expoente	$q = 2$	$q = 3$	$q = 4$
β (exato)	$1/8 = 0.125$	$1/9 = 0.1111\dots$	$1/12 = 0.0833\dots$
β (presente trabalho)	0.1223 ± 0.0032	0.1115 ± 0.0040	0.0840 ± 0.0009
η (exato)	$1/4 = 0.25$	$4/15 = 0.2666\dots$	$1/4 = 0.25$
η (presente trabalho)	0.2501 ± 0.0014	0.2667 ± 0.0023	0.2518 ± 0.0023

Tabela 3.1: Os expoentes críticos β e η para o modelo de Potts ferromagnético bidimensional, obtidos a partir da presente abordagem numérica, são comparados com os correspondentes valores exatos [6].

Na tabela 3.1, nós listamos nossos resultados quantitativos para os expoentes β e η , para $q = 2, 3$, e 4 , comparados com os correspondentes valores exatos. Os valores obtidos são notáveis, considerando o tamanho da rede usada ($L = 100$). Em todos os casos da tabela 3.1, temos uma concordância (dentro das barras de erro) até a quarta casa decimal com os valores exatos.

Para concluir, testamos um método computacional importante para obter funções de correlação em sistemas magnéticos, baseados em simulações de PD, investigando o ferromagneto de Potts q -estados na rede quadrada. A função de correlação, que é geralmente uma quantidade difícil de estimar por simulações padrões de MC, devido as grandes flutuações que apresenta, tem sido computada precisamente por este método.

Nós usamos relações termodinâmicas exatas, envolvendo simulações de PD com quantidades mensuráveis como a função de correlação de dois-spin e a magnetização. Embora este método tenha sido introduzido há alguns anos para o modelo de Ising, ele não tem sido explorado suficientemente na literatura. Nós mostramos aqui sua eficiência, mesmo com o emprego de pequenos tamanhos de rede, onde os resultados produzidos por simulações convencionais são relativamente imprecisos.

Capítulo 4

Propagação de Danos no Ferromagneto de Ashkin-Teller

A maior parte do conteúdo deste capítulo corresponde ao artigo “*Using exact relations in damage-spreading simulations: The Baxter line of the two-dimensional Ashkin-Teller model*”, por A. S. Anjos, D. A. Moreira, A. M. Mariz, F. D. Nobre and F. A. da Costa, Phys. Rev. E, **76**, 41137 (2007).

4.1 Introdução

Passados seis décadas de sua introdução, o modelo de Ashkin-Teller, proposto originalmente para descrever a transição de ordem-desordem de ligas quaternárias, tem sido extensivamente estudado por uma variedade de métodos. Tal interesse é devido à riqueza e complexidade exibidas por suas propriedades críticas, revelados por seus diagramas de fases em duas e três dimensões, e também por ser uma generalização de modelos mais simples, servindo de modelo-protótipo para o desenvolvimento de técnicas na investigação e compreensão de modelos mais gerais.

Na sua versão original, os autores J. Ashkin e E. Teller (1943) [73], generalizam o modelo de Ising para o caso onde cada sítio da rede bidimensional pode ser ocupado por um dos quatro tipos diferentes de átomos, A, B, C, D. Restringindo as interações

somente entre os primeiros vizinhos (de intensidade ε_0 para os pares AA, BB, CC, DD ; ε_1 para os pares AB, CD ; ε_2 para AC, BD ; e ε_3 para AD, BC), eles foram capazes de, usando argumentos de Kramers-Wannier(1941) [74] e a suposição de uma única transição, localizar a temperatura de transição no caso especial de interações entre átomos idênticos tendo uma energia ε_0 e átomos diferentes com energia de interação $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon$, com $\varepsilon_0 < \varepsilon$.

Adaptado por C. Fan (1972) [75] para a linguagem magnética, por associar aos diferentes átomos ocupantes na rede, estados representados por dois spins de Ising $\sigma = \pm 1$ e $\tau = \pm 1$, da seguinte maneira $A = (+, +)$, $B = (+, -)$, $C = (-, +)$, $D = (-, -)$, este modelo de Ashkin-Teller (daqui por diante referido por AT) pode ser considerado como dois modelos de Ising de primeiros vizinhos que são acoplados via interações 4-spins. Nessa representação, denotando por $\langle i, j \rangle$ um par de sítios de primeiros vizinhos, o hamiltoniano descrevendo o modelo AT pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} [J_\sigma \sigma_i \sigma_j + J_\tau \tau_i \tau_j + L \sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j] \quad (\sigma_i, \tau_i = \pm 1) \quad (4.1)$$

onde os J_σ (J_τ) são as constantes de acoplamento entre os spins vizinhos σ (τ) e L é a intensidade da interação de quatro-spins; com $J_\sigma = (\varepsilon_0 + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3)/4$, $J_\tau = (\varepsilon_0 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \varepsilon_3)/4$ e $L = (\varepsilon_0 + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2)/4$. Uma boa realização física para este modelo é o composto de Selênio adsorvido sobre a superfície de Níquel (Ni) [76]. Quando $J_\sigma = J_\tau$ o modelo AT é chamado isotrópico e no caso contrário, anisotrópico. Se o acoplamento $L = 0$, o modelo AT se reduz a dois modelos de Ising independentes.

Aqui, chamamos a atenção que no estudo que se segue (próxima seção), estudaremos somente a situação isotrópica, em que o modelo é isomorfo ao modelo $Z(4)$ [77], cujo diagrama de fases é revisado na próxima seção. As propriedades críticas, na rede quadrada, do modelo neste subespaço são de interesse especial, já que ele tem uma linha de pontos críticos, ao longo da qual os expoentes variam continuamente, e tem sido determinados analiticamente, interpolando entre os expoentes de Ising e Potts 4-estados.

Embora tenha sido proposta (e sugerida inicialmente por Fan [78] ao analisar as propriedades de simetria do modelo AT e do modelo 8-vértices (8-v), cogitando que ambos modelos estariam relacionados de alguma maneira) uma transformação de dualidade por Wegner [79] entre o presente modelo AT e o modelo oito-vértices alternado resolvido exatamente por Baxter [64, 80], até o momento uma solução exata do modelo AT bidimensional não tem sido encontrada, a não ser somente uma linha crítica no diagrama de fases do modelo AT isotrópico conhecida exatamente graças a dualidade encontrada por Fan [78]. Usando resultados exatos do modelo 8-v e sua relação com o modelo AT, Wu e Lin (1974) [81] foram capazes de propor uma forma para a superfície crítica do modelo AT, de onde conjecturaram que o modelo AT, na sua forma anisotrópica, deve ter duas transições de fases, com exceção dos casos $J_\sigma = J_\tau > L$.

Não sendo o nosso objetivo destacar exaustivamente todos os inúmeros resultados conhecidos (exatos ou aproximados) sobre o modelo AT, e também para não prejudicar a exposição de nosso trabalho, ressaltamos que a complexidade do presente modelo AT deve-se a presença de interações multi-spin [82] quando definido em termos de spins. Portanto, desde sua introdução, este modelo Ashkin-Teller tem atraído atenção de muitos pesquisadores; a versão predominantemente investigada tem sido o modelo ferromagnético em uma rede quadrada (ver, para isto, as referências [64, 80, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90]). Uma das características mais notáveis deste modelo ocorre ao longo da chamada linha de Baxter [64, 80], onde a universalidade é quebrada, isto é, alguns expoentes críticos podem mudar continuamente por uma simples variação dos parâmetros do sistema, tipo temperatura e acoplamentos. A dependência destes expoentes críticos sob tais parâmetros foi determinada analiticamente para a linha completa [64, 83, 91], que inclui dois pontos bem conhecidos, a saber, os pontos Ising e Potts 4-estados. Portanto, a linha de Baxter representa um local muito apropriado para testar a precisão de qualquer método proposto para computar expoentes críticos numericamente.

No presente capítulo, investigamos o modelo Ashkin-Teller ferromagnético através de simulações de PD [98], usando relações exatas derivadas na referência [61] e generalizadas por nós em trabalho anterior [99]. Nossa análise está restrita à linha de Baxter; a eficiência

do método foi confirmada aqui por precisas estimativas dos expoentes críticos associados com os parâmetros de ordem do sistema, como também com suas funções de correlação. Na próxima seção revisamos o modelo bidimensional na rede quadrada e algumas de suas propriedades críticas no diagrama de fases, e na seção 4.3, apresentamos a abordagem implementada de PD. Finalmente, na seção 4.4 discutimos nossos resultados.

4.2 O Ferromagneto de Ashkin-Teller em Duas Dimensões

O modelo Ashkin-Teller [73] pode ser definido em termos de duas variáveis de Ising em cada sítio de uma rede regular. No presente trabalho, consideraremos o ferromagneto de Ashkin-Teller em uma rede quadrada de dimensão linear L ($N = L^2$ é o número total de spins), definido pelo Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} [-J_1(\sigma_i \sigma_j + \tau_i \tau_j) - 2J_2 \sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j] \quad (\sigma_i, \tau_i = \pm 1) \quad (4.2)$$

com $J_1 \geq 0$, e $J_1 + 2J_2 \geq 0$, e a soma $\sum_{\langle ij \rangle}$ varre todos os pares de sítios vizinhos. Dois casos particulares podem ser obtidos facilmente a partir do Hamiltoniano acima, isto é, $J_2 = 0$ (dois modelos de Ising independentes) e $J_1 = 2J_2$ (modelo de Potts 4-estados).

O diagrama de fases deste modelo tem sido bastante estudado através de várias investigações teóricas [64, 80, 81, 84, 85, 86, 87, 89, 92]; Na figura 4.1, em termos das transmissividades térmicas (t_1, t_2) [89],

$$t_1 = \frac{1 - \exp(-4K_1)}{1 + 2 \exp[-2(K_1 + 2K_2)] + \exp(-4K_1)} \quad (4.3)$$

e

$$t_2 = \frac{1 - 2 \exp[-2(K_1 + 2K_2)] + \exp(-4K_1)}{1 + 2 \exp[-2(K_1 + 2K_2)] + \exp(-4K_1)}, \quad (4.4)$$

onde $K_1 = J_1/(k_B T)$ e $K_2 = J_2/(k_B T)$. Linhas sólidas representam fronteiras críticas separando as três possíveis fases do modelo, que são definidas em termos dos parâmetros de ordem relevantes – isto é, as magnetizações $\langle \sigma \rangle$ e $\langle \tau \rangle$, como também a polarização $\langle \sigma \tau \rangle$, conforme descrito abaixo [de fato, devido a simetria do Hamiltoniano de equação (4.2), este modelo é caracterizado por somente dois parâmetros de ordem, já que $\langle \sigma \rangle = \langle \tau \rangle$].

(a) Paramagnética (**P**): A temperatura é suficientemente alta de tal modo que não existe nenhum ordenamento – isto é, $\langle \sigma \rangle = \langle \tau \rangle = \langle \sigma \tau \rangle = 0$.

(b) Ferromagnética (**F**): Os acoplamentos são suficientemente fortes, conduzindo a parâmetros de ordem não nulos, $\langle \sigma \rangle = \langle \tau \rangle \neq 0$; $\langle \sigma \tau \rangle \neq 0$.

(c) Intermediária (**I**): Este tipo de ordenamento é caracterizado por $\langle \sigma \rangle = \langle \tau \rangle = 0$ e $\langle \sigma \tau \rangle \neq 0$.

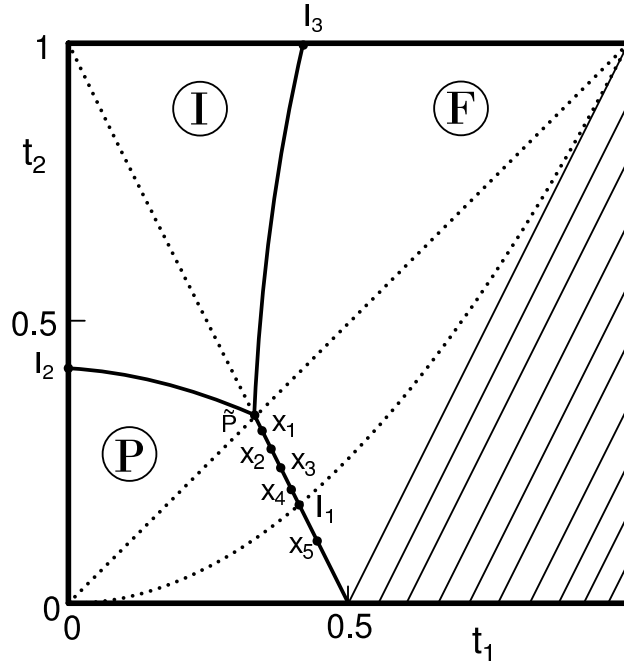


Figura 4.1: Diagrama de fases do ferromagneto de Ashkin-Teller em uma rede quadrada no espaço (t_1, t_2) . As três fases apresentadas são, a saber, a paramagnética (**P**), ferromagnética (**F**), e a intermediária (**I**). A região hachurada é não física (Figura retirada da ref.[89])

As linhas pontilhadas $t_2 = t_1^2$ ($J_2 = 0$) e $t_1 = t_2$ ($J_1 = 2J_2$) correspondem a subespaços especiais, associados com dois modelos de Ising independentes e o modelo de Potts 4-estados, respectivamente. A linha reta pontilhada $t_2 = 1 - 2t_1$ é auto-dual, e parte dela constitui a fronteira crítica separando as fases **P** e **F**. A intersecção das linhas Ising e Potts 4-estados com a fronteira crítica **P-F** fornece os pontos críticos Ising (I_1) e Potts 4-estados (\tilde{P}), como mostrado na figura 4.1. No ponto crítico Potts, a fronteira crítica **P-F** bifurca em duas fronteiras críticas, separando as fases **F** e **I**, como também **P** e **I**. As fronteiras críticas **P-I** e **I-F** estão relacionadas entre si por dualidade e pertencem a classe de universalidade do Ising [87, 89, 92], dominada por seus respectivos pontos terminais, I_2 and I_3 . No diagrama da figura 4.1, a fronteira crítica **P-F** é conhecida como a linha de Baxter [64, 80, 91], caracterizada por expoentes críticos variando continuamente.

A título de conhecimento, informamos as outras características que fizeram desse modelo um dos mais estudados durante esses anos, uma delas fruto de várias especulações diz respeito às localizações exatas das demais linhas críticas tipo-Ising no diagrama de fases [81, 92, 93, 94], mesmo em duas dimensões, como também a existência de novas fases observadas em redes tridimensionais [93, 95] (na região de interações antiferromagnéticas do modelo), que foram também confirmadas recentemente para o modelo AT anisotrópico [96, 97] em duas e três dimensões por aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo.

4.3 Danos e Propriedades Termodinâmicas

A presente análise objetiva a computação dos expoentes críticos associados com funções de correlação e parâmetros de ordem para vários pontos ao longo da linha de Baxter, usando simulações de PD e relações exatas [98]. A técnica PD consiste na investigação da evolução temporal de cópias do mesmo sistema, para uma determinada temperatura T , sujeitas ao mesmo ruído térmico e mesmo conjunto de números aleatórios. Para o modelo Ashkin-Teller, estas cópias (denotadas aqui por A and B) são representadas em termos

de duas variáveis de Ising em cada sítio da rede, $\{\sigma_i^A, \tau_i^A\}$ e $\{\sigma_i^B, \tau_i^B\}$. Na simulação PD, primeiramente, permitimos que uma cópia (isto é, $\{\sigma_i^A, \tau_i^A\}$), evolua por t_{eq} passos de MC para o equilíbrio; como usual, nossa unidade de tempo (1 passo de MC) consiste em uma completa varredura na rede. Nós assumimos que o estado de equilíbrio é atingido quando se observa pequenas flutuações no tempo em quantidades termodinâmicas, tipo magnetização e energia; em adição a isto, nós temos também checado tal estado de equilíbrio por uma comparação de algumas quantidades PD, a ser definidas abaixo. Então, define-se o tempo inicial ($t = 0$), na qual a segunda cópia (cópia B) é criada por replicar a cópia A ; neste instante, introduz certas modificações na cópia B , correspondendo ao dano inicial. As cópias A e B , portanto, evoluirão no tempo segundo alguma dinâmica ergódica, sujeitas a certas condições de fronteiras, como impostas pelas correspondentes relações exatas a serem usadas. Tais relações envolvem certas médias temporais computáveis a partir de simulações numéricas PD e propriedades termodinâmicas do modelo Ashkin-Teller [61]. É importante mencionar que estas relações valem para qualquer dinâmica ergódica aplicada a sistemas translacionalmente invariantes.

Vamos definir, portanto, as quantidades PD,

$$\Gamma_i^{(1)} = \frac{1}{2} \langle 1 + \sigma_i^A \rangle_t - \frac{1}{2} \langle 1 + \sigma_i^B \rangle_t \quad (4.5)$$

$$\Omega_i^{(1)} = \frac{1}{2} \langle 1 + \tau_i^A \rangle_t - \frac{1}{2} \langle 1 + \tau_i^B \rangle_t \quad (4.6)$$

$$\Gamma_i^{(2)} = \frac{1}{2} \langle 1 + \sigma_i^A \tau_i^A \rangle_t - \frac{1}{2} \langle 1 + \sigma_i^B \tau_i^B \rangle_t \quad (4.7)$$

onde $\langle \dots \rangle_t$ representa médias temporais sobre trajetórias no espaço de fase. Deve-se salientar que, devido à simetria do Hamiltoniano dado pela equação 4.2, após um longo tempo de simulação numérica (que representa a situação física de interesse no presente trabalho) espera-se obter $\Gamma_i^{(1)} = \Omega_i^{(1)}$; de fato, nós temos também usado esta condição como um

critério adicional para checar a aproximação para o estado de equilíbrio. Portanto, a partir daqui, nós estaremos interessado somente com as quantidades $\Gamma_i^{(1)}$ e $\Gamma_i^{(2)}$.

Para obter as relações exatas envolvendo as quantidades das equações (4.5) e (4.7) e as funções de correlação, como também os parâmetros de ordem, do modelo de Ashkin-Teller, nós devemos impor certos vínculos (isto é, condições de contorno), em uma das cópias (A ou B), ou a ambas. Tais relações são derivadas por fazer uso das probabilidades condicionais que depende do vínculo particular usado [61]; portanto, condições de contorno diferentes conduzirão a diferentes evoluções temporais e, conseqüentemente, no limite de tempo longo, elas corresponderão a relações exatas distintas, como descrito abaixo.

(I.a) Primeiro, consideramos uma condição de fronteira para a variável σ_i^B no sítio central da rede, $\sigma_0^B = -1$, para todos os instantes $t \geq 0$. Esta representa uma “fonte de dano” no sítio central; todos os spins restantes da rede, em ambas as cópias, são livres a evoluir segundo o correspondente procedimento dinâmico. Neste caso, podemos definir a variável binária [61], $\Pi_i^\sigma = [(1 + \sigma_i)/2]$, de tal modo que

$$\langle \Pi_i^{\sigma,A} \rangle_t = \langle \Pi_i^\sigma \rangle_T \quad (4.8)$$

$$\langle \Pi_i^{\sigma,B} \rangle_t = \frac{\langle (1 - \Pi_0^\sigma) \Pi_i^\sigma \rangle_T}{\langle 1 - \Pi_0^\sigma \rangle_T} \quad (4.9)$$

e agora, $\langle \dots \rangle_T$ representa médias térmicas. Nas equações acima, $\langle \Pi_i^{\sigma,A} \rangle_t$ representa a probabilidade para a variável σ_i^A apresentar o valor +1 com nenhum vínculo, enquanto $\langle \Pi_i^{\sigma,B} \rangle_t$ é a probabilidade condicional para encontrar a variável $\sigma_i^B = 1$, dado que $\sigma_0^B = -1$. Em adição a isto, nós assumimos que nosso sistema é translacionalmente invariante e que evolui no tempo sob uma dinâmica ergódica. Já que

$$\Gamma_i^{(1)} = \langle \Pi_i^{\sigma,A} \rangle_t - \langle \Pi_i^{\sigma,B} \rangle_t \quad (4.10)$$

obtem-se

$$\Gamma_i^{(1)} = \frac{C_{0i}^{(1)}}{2(1 - m)} \quad (4.11)$$

em que

$$C_{0i}^{(1)} = \langle \sigma_i \sigma_0 \rangle_T - \langle \sigma_i \rangle_T \langle \sigma_0 \rangle_T, \quad (4.12)$$

e

$$m = \langle \sigma_0 \rangle_T. \quad (4.13)$$

Já que impomos invariância translacional, as quantidades acima representam quantidades termodinâmicas padrões, a saber, a função de correlação dois-spins e a magnetização por sítio, respectivamente.

(I.b) Agora, se usarmos uma condição de contorno para os sítios centrais de ambas cópias A e B , isto é, $\sigma_0^A = 1$, $\sigma_0^B = -1$, para todos os instantes $t \geq 0$, obtemos que

$$\Gamma_i'^{(1)} = \frac{C_{0i}^{(1)}}{1 - m^2} \quad (4.14)$$

É importante ressaltar que $\Gamma_i^{(1)}$ e $\Gamma_i'^{(1)}$ são ambas determinadas pela mesma expressão da equação (4.5), embora elas devem ser computadas por procedimentos de evolução diferentes.

Portanto, após o processo de equilíbrio da cópia A (tempo $t = 0$), esta configuração é armazenada (como uma nova cópia A_0), que permanecerá intacta; então, a evolução temporal com o vínculo (I.a) é executada para as cópias A e B , de tal modo que se obtem, após t_{av} passos de MC, $\Gamma_i^{(1)}$. Agora, recuperando a configuração A_0 , que tornará a configuração A para a evolução temporal com a restrição (I.b), executa-se tal evolução para obter $\Gamma_i'^{(1)}$. A partir destas duas quantidades, usando as equações (4.11) e (4.14), obtem-se $C_{0i}^{(1)}$ e m .

Relações similares também valem para a quantidade que envolve os dois spins, σ e τ , isto é, $\Gamma_i^{(2)}$, como descrito abaixo.

(II.a) Considerando a condição de contorno $\sigma_0^B = -\tau_0^B$ ($t \geq 0$), obtem-se

$$\Gamma_i^{(2)} = \frac{C_{0i}^{(2)}}{2(1 - p)} \quad (4.15)$$

onde

$$C_{0i}^{(2)} = \langle \sigma_i \tau_i \sigma_0 \tau_0 \rangle_T - \langle \sigma_i \tau_i \rangle_T \langle \sigma_0 \tau_0 \rangle_T \quad (4.16)$$

$$p = \langle \sigma_0 \tau_0 \rangle_T. \quad (4.17)$$

Novamente, supondo invariância translacional, a quantidade $C_{0i}^{(2)}$ representa uma função de correlação de dois spins diferentes do modelo de Ashkin-Teller, enquanto o parâmetro de ordem p é geralmente denominado a “polarização” [91].

(II.b) As condições de contorno, $\sigma_0^A = \tau_0^A$ e $\sigma_0^B = -\tau_0^B$ ($t \geq 0$), fornecem

$$\Gamma_i^{(2)} = \frac{C_{0i}^{(2)}}{1 - p^2} \quad (4.18)$$

onde as funções, $\Gamma_i^{(2)}$ e $\Gamma_i^{\prime(2)}$, como antes, são determinadas pela mesma expressão [conforme a equação (4.7)], porém devem ser computadas com diferentes condições de contorno. Considerando as duas evoluções temporais segundo, respectivamente, os vínculos especificados em (II.a) e (II.b), procedimentos similares ao descrito para os casos (I.a) e (I.b) podem ser aplicados para obter $C_{0i}^{(2)}$ e p .

Em contraste com os resultados da referência [56], as relações exatas acima não representam a “distância de Hamming” entre as duas configurações, e são escritas em termos das quantidades que são independentes da regra dinâmica particular; portanto, estas relações valem para qualquer procedimento dinâmico ergódico. Aqui, nós desenvolvemos simulações, para cada configuração visitando todos os sítios da rede em um modo sequencial, com as variáveis de spin $\sigma_i^\mu(t)$ e $\tau_i^\mu(t)$ ($\mu = A, B$), no instante t , atualizadas segundo o conjunto de regras dinâmicas descrito abaixo.

(i) Uma possível inversão na variável $\sigma_i^\mu(t+1)$ é considerada, isto é, $\sigma_i^\mu(t+1) = -\sigma_i^\mu(t)$, a partir da qual calculamos a mudança na energia, $\Delta\mathcal{H}^\mu = \mathcal{H}^\mu(t+1) - \mathcal{H}^\mu(t)$.

(ii) Então, definimos a probabilidade,

$$p_i^\mu(t) = \frac{1}{1 + \exp(\beta\Delta\mathcal{H}^\mu)}, \quad [\beta = 1/(k_B T)]. \quad (4.19)$$

(iii) Introduzindo um número aleatório $z_i^{(\sigma)}(t)$, uniformemente distribuído no intervalo $[0,1]$, executa-se a mudança se $z_i^{(\sigma)}(t) < p_i^\mu(t)$; caso contrário, o spin $\sigma_i^\mu(t)$ não é atualizado. Deve ser notado que, neste passo, o mesmo número aleatório $z_i^{(\sigma)}(t)$ é usado para a atualização da variável $\sigma_i^\mu(t)$ em ambas as cópias A e B .

(iv) Os passos (i)–(iii) são repetidos para a variável $\tau_i^\mu(t)$, agora usando um número aleatório diferente, $z_i^{(\tau)}(t)$.

(III) Finalmente, existe um modo alternativo para obter os parâmetros de ordem, m e p , por considerar as cópias A e B na presença de campos magnéticos externos, $h_{i\sigma}^\mu$ e $h_{i\tau}^\mu$ ($\mu = A, B$); estes são quantidades adimensionais, isto é, $h_{i\sigma}^\mu = H_{i\sigma}^\mu/(k_B T)$ e $h_{i\tau}^\mu = H_{i\tau}^\mu/(k_B T)$. Neste caso, após a equilibração da cópia A , começa-se no instante $t = 0$ por definir a cópia B de tal modo que $\sigma_i^A = -\sigma_i^B$ e $\tau_i^A = \tau_i^B$ ($\forall i$). Portanto, todos os spins estão livres para evoluir no tempo sob a presença dos seguintes campos magnéticos, $h_{i\sigma}^A = -h_{i\sigma}^B = h$ e $h_{i\tau}^A = h_{i\tau}^B = h$. Neste caso, os parâmetros de ordem do modelo Ashkin-Teller podem ser obtidos diretamente a partir das quantidades de propagação de danos $\Gamma_i^{(1)}$ e $\Gamma_i^{(2)}$ [61],

$$m = \langle \sigma_i \rangle_T = \Gamma_i^{(1)} \quad p = \langle \sigma_i \tau_i \rangle_T = \Gamma_i^{(2)} \quad (4.20)$$

Neste caso, o procedimento de atualização do spin é similar ao descrito acima, mas agora, a mudança na energia, $\Delta \mathcal{H}^\mu = \mathcal{H}^\mu(t+1) - \mathcal{H}^\mu(t)$ deve ser considerada por tomar o Hamiltoniano da equação (4.2) na presença dos correspondentes campos magnéticos.

As funções de correlação de dois spins nas equações (4.12) e (4.16) levam em conta o sítio central da rede e um sítio arbitrário i , a uma distância r . Deve ser salientado que, em uma rede quadrada, existem quatro sítios i com a mesma distância r a partir do sítio central (com algumas exceções, isto é, se assumirmos um espaçamento de rede unitário, temos oito spins cuja distância a σ_0 é $\sqrt{5}$, e doze spins para os quais esta distância é 5). Portanto, é sempre possível definir funções de correlação como os valores médio,

$$C^{(1)}(r) = \frac{1}{4} \sum_{i(r)} C_{0i}^{(1)} ; \quad C^{(2)}(r) = \frac{1}{4} \sum_{i(r)} C_{0i}^{(2)} \quad (4.21)$$

onde $\sum_{i(r)}$ corresponde a uma soma sobre os quatro sítios com a mesma distância r do

Ponto	t_{1C}	t_{2C}	K_{1C}	K_{2C}
I_1	$\sqrt{2} - 1$	$(\sqrt{2} - 1)^2$	$-\frac{1}{4} \ln(3 - 2\sqrt{2})$	0
I_2	0	$\sqrt{2} - 1$	0	$-\frac{1}{4} \ln(\sqrt{2} - 1)$
I_3	$\sqrt{2} - 1$	1	$-\frac{1}{4} \ln(\sqrt{2} - 1)$	∞
\tilde{P}	1/3	1/3	$\frac{1}{4} \ln 3$	$\frac{1}{8} \ln 3$
X_1	8/23	7/23	$\frac{1}{4} \ln(23/7)$	$\frac{1}{4} \ln[(\sqrt{161})/8]$
X_2	4/11	3/11	$\frac{1}{4} \ln(11/3)$	$\frac{1}{4} \ln[(\sqrt{33})/4]$
X_3	8/21	5/21	$\frac{1}{4} \ln(21/5)$	$\frac{1}{4} \ln[(\sqrt{105})/8]$
X_4	2/5	1/5	$\frac{1}{4} \ln 5$	$-\frac{1}{4} \ln[(2\sqrt{5})/5]$
X_5	4/9	1/9	$\frac{1}{4} \ln 9$	$\frac{1}{4} \ln(3/4)$

Tabela 4.1: Coordenadas dos pontos críticos mostrados no diagrama de fases da figura 4.1 em ambas variáveis (t_1, t_2) e (K_1, K_2) . Os pontos I_1 , \tilde{P} , e X_1, \dots, X_5 , estão ao longo da linha de Baxter.

sítio central; nos casos excepcionais onde existem mais do que quatro sítios com a mesma distância r do sítio central, os sítios restantes não são levados em conta nas médias da equação (4.21).

Nesta próxima seção, apresentamos e discutimos os resultados obtidos para a magnetização m e polarização p por sítio, como também para as funções de correlação $C^{(1)}(r)$ e $C^{(2)}(r)$, ao longo da linha de Baxter do modelo Ashkin-Teller.

4.4 Resultados e Discussões

Nós investigamos o ferromagneto de Ashkin-Teller na rede quadrada de dimensão linear $L = 50$ e 100 , segundo a abordagem de propagação de danos descrito acima. Condições de contorno periódicas foram usadas e as funções de correlação, na distância r , $C^{(1)}(r)$ and $C^{(2)}(r)$, foram medidas com respeito ao sítio central, localizado nas coordenadas $(L/2, L/2)$. Sete pontos diferentes ao longo da linha de Baxter foram investigados, a saber, os pontos de Ising (I_1) e de Potts 4-estados (\tilde{P}), como também os cinco pontos adicionais,

isto é, X_1, \dots, X_5 (ver figura 4.1 e a tabela 4.1). Nós sempre iniciamos na cópia A com todos os spins $\sigma_i^A = \tau_i^A = 1$ ($\forall i$); portanto, esta cópia foi deixada evoluir para o equilíbrio por t_{eq} passos de monte carlo. Após isto, a segunda cópia (cópia B) foi criada. No caso da evolução do tipo (III), onde campos magnéticos externos são necessários, nós temos atribuído pequenos números positivo para a quantidade adimensional h ; para achar seu valor apropriado, esta quantidade foi sucessivamente diminuída, de tal modo a minimizar a dependência da escolha particular dos campos magnéticos em nossos resultados, levando em conta as barras de erro. Nas presentes simulações, consideramos $h = 0.0001$. Para a evolução de equilíbrio, alguns pontos investigados exigiram maiores tempo de equilibração, e os tempos máximos de equilibração usados foram $t_{\text{eq}} = 1 \times 10^4$ ($L = 50$) e $t_{\text{eq}} = 4 \times 10^4$ ($L = 100$) passos de monte carlo. Em todas as simulações consideradas, estes tempos foram suficientes para as condições de equilíbrio descrito acima, isto é, pequenas flutuações na magnetização e na energia, como também na igualdade $\Gamma_i^{(1)} = \Omega_i^{(1)}$. Na computação das funções de correlação, as médias térmicas foram desenvolvidas sob tempos $t_{\text{av}} = 7.5 \times 10^5$ ($L = 50$) e $t_{\text{av}} = 3 \times 10^6$ ($L = 100$) passos de monte carlo, enquanto no cálculo dos parâmetros de ordem [evolução do tipo (III)] tempos menores foram necessários, isto é, $t_{\text{av}} = 7.5 \times 10^4$ ($L = 50$) e $t_{\text{av}} = 3 \times 10^5$ ($L = 100$) passos de monte de carlo. É importante salientar que, devido a grandes flutuações, os tempos t_{av} considerados aqui são muito maiores do que aqueles usados em modelos ferromagnéticos mais simples [56, 72]. Para reduzir os possíveis efeitos de correlações no tempo, nós somente consideramos, nas médias temporais, dados em cada intervalo temporal de 3 passos de monte carlo. Portanto, cada média temporal consiste em uma média sob $t_{\text{av}}/3$ medidas. Em adição a isto, cada simulação foi repetida para $M = 20$ amostras diferentes, para melhorar as estatísticas, como também para reduzir as possíveis dependências nas seqüências de números aleatórios.

A linha de Baxter [64, 80, 91], que coincide com a fronteira crítica **P-F** no diagrama de fases da figura 4.1, é bem conhecida por seus expoentes críticos variando continuamente, assim como sua dependência em termos dos parâmetros do diagrama de fases (ver, a ref. [91] por sua dependência em K_1 , ou ref. [64] para os expoentes em termos de K_2). Abaixo, nós escrevemos sua dependência em termos de K_2 ; para o expoente crítico do

calor específico, tem-se que

$$\alpha = \frac{2 - 2y}{3 - 2y} \quad (4.22)$$

enquanto para aqueles expoentes associados com os parâmetros de ordem, magnetização e polarização, tem-se, respectivamente,

$$\beta = \frac{2 - y}{8(3 - 2y)} \quad (4.23)$$

e

$$\beta_p = \frac{1}{4(3 - 2y)} \quad (4.24)$$

onde

$$y = \frac{2}{\pi} \cos^{-1} \left\{ \frac{1}{2} [\exp(8K_2) - 1] \right\} \quad (4.25)$$

Usando relações de escala envolvendo os pares de expoentes α e β , como também α e β_p , obtém-se que,

$$\eta = \frac{1}{4} ; \quad \eta_p = \frac{1}{2(2 - y)} \quad (4.26)$$

onde η e η_p são os expoentes críticos da função de correlação de dois spins, associadas, respectivamente, aos parâmetros de ordem, magnetização e polarização. Curiosamente, o expoente η não muda ao longo da linha de Baxter, ao contrário do que acontece com sua contrapartida η_p . Os valores exatos dos expoentes acima, nos pontos investigados, são dados nas tabelas 4.2 e 4.3.

Na computação das funções de correlação $C^{(1)}(r)$ e $C^{(2)}(r)$, nos aproximamos dos pontos investigados variando

$$K_1 \equiv \left(\frac{J_1}{k_B T_C} \right) \left(\frac{1}{T/T_C} \right) = K_{1C} \left(\frac{1}{T/T_C} \right) ; \quad K_2 \equiv \left(\frac{J_2}{k_B T_C} \right) \left(\frac{1}{T/T_C} \right) = K_{2C} \left(\frac{1}{T/T_C} \right) \quad (4.27)$$

e considerando pequenas mudanças ao redor de suas coordenadas exatas, (K_{1C}, K_{2C}) (dadas na quarta e quinta coluna da tabela 4.1, respectivamente), flutuando T/T_C ao redor da unidade, com variações de 0.001.

Nas figuras a seguir, exibimos nossos resultados para um dos pontos ao longo da linha de Baxter, a saber, o ponto X_2 , que está entre os pontos Potts e Ising. Inicialmente, nós apresentamos os resultados obtidos para o menor tamanho linear, isto é, $L = 50$. Neste caso, comparamos os resultados produzidos por uma simulação convencional de MC, onde uma única cópia do sistema é analisada, com aqueles da presente abordagem numérica de PD. No que diz respeito às funções de correlação, nosso critério para localizar as “coordenadas críticas” de cada ponto investigado (associado com o tamanho finito do sistema considerado) consiste em procurar as razões de temperatura T/T_C em que as funções $C^{(1)}(r)$ e $C^{(2)}(r)$ apresentam decaimento mais lento com a distância r . Em tais casos, espera-se os comportamentos de lei de potência,

$$C^{(1)}(r) \sim r^{-\eta} ; \quad C^{(2)}(r) \sim r^{-\eta_p} , \quad (r \rightarrow \infty) \quad (4.28)$$

O comportamento de lei de potência acima é verificado para a função de correlação $C^{(1)}(r)$ na figura 4.2 onde apresentamos o gráfico de $C^{(1)}(r)$ versus r , em escala logarítmica, com os dados obtidos a partir de uma simulação padrão de Monte Carlo e do presente procedimento de PD. O dado exibido corresponde, em cada caso, para o decaimento mais lento da função de correlação $C^{(1)}(r)$, encontrado a partir de uma varredura em T/T_C ao redor de seu valor exato com incrementos de 0.001, como mencionado acima, e usando os mesmos parâmetros de simulação para cada tamanho linear L (isto é, t_{eq} e t_{av}).

Na figura 4.2(a), nós comparamos o resultado de simulação padrão de MC com aqueles da técnica de PD, para um tamanho linear $L = 50$; nota-se uma significativa redução de efeitos de tamanho finito na última abordagem, com respeito a primeira, mostrado através das seguintes características: (i) A razão T/T_C , associada com o decaimento mais lento da função de correlação $C^{(1)}(r)$, está muito limitada ao valor exato na técnica de PD [$(T/T_C) = 0.999$], do que no método de MC [$(T/T_C) = 0.995$]; (ii) O ajuste linear, obtido no Log-Log dos resultados de PD é mais real, no sentido que ele cobre um alcance maior

de valores de r . Porém, se restringirmos a análise, em cada caso, àqueles conjuntos de pontos associados com os melhores ajustes lineares, obtem-se essencialmente as mesmas estimativas (dentro das barras de erros) para o expoente η em ambas as técnicas, isto é, $\eta = 0.2457 \pm 0.0082$ (ajuste linear considerando cinco pontos obtidos do procedimento de MC) e $\eta = 0.2492 \pm 0.0048$ (ajuste linear com nove pontos obtidos a partir do método PD), em concordância com o valor exato bem conhecido ($\eta = 1/4$). Para valores maiores de r , os efeitos de tamanho finito tornam-se pronunciados, como esperado, conduzindo a pontos fora do regime linear; isto ocorre tipicamente para $r > 4$ ($r > 6$) na abordagem de MC (PD). Portanto, para este caso, os efeitos de tamanho finito são mais fracos na técnica de PD, conduzindo a um aumento da ordem de 50% nos valores de r que se ajusta dentro do comportamento da lei de potência da equação (4.28).

Na figura 4.2(b) exibimos os resultados de PD para os dois tamanhos lineares analisados, a saber, $L = 50$ e $L = 100$. Observa-se que este método produz dados para o tamanho menor que são tão bons quanto aqueles do tamanho maior, mostrando a eficiência da técnica PD, no sentido que pode-se obter estimativas precisas de expoente crítico a partir de tamanhos de rede pequena; as duas estimativas para o expoente η , mostrados na figura 4.2(b), coincidem, dentro das barras de erros. Incidentalmente, na figura 4.2(b) vemos que os dados de $L = 50$ parecem cair no ajuste linear até mesmo melhor do que aqueles do tamanho linear $L = 100$. Nós atribuímos a este curioso comportamento as seguintes razões: (i) O tamanho $L = 50$ já é suficiente para uma boa avaliação de expoentes críticos; (ii) as flutuações usuais próximo da criticalidade tem, de algum modo, favorecido o tamanho $L = 50$ na varredura de temperatura considerada, no sentido de localizar uma melhor estimativa para a temperatura crítica de tamanho finito $T_C(L)$. O decaimento mais lento da função de correlação $C^{(1)}(r)$ ocorreu em $T/T_C = 0.999$ para o tamanho linear $L = 50$, em contraste ao valor $T/T_C = 0.998$ encontrado para o tamanho linear $L = 100$; certamente, esta última estimativa da temperatura de tamanho finito pode ser melhorada, e até mesmo um decaimento mais lento de $C^{(1)}(r)$ pode ser encontrado neste caso para alguma razão ligeiramente mais alta, $0.998 < (T/T_C) < 0.999$, que tem provavelmente não foi considerada na presente varredura na temperatura.

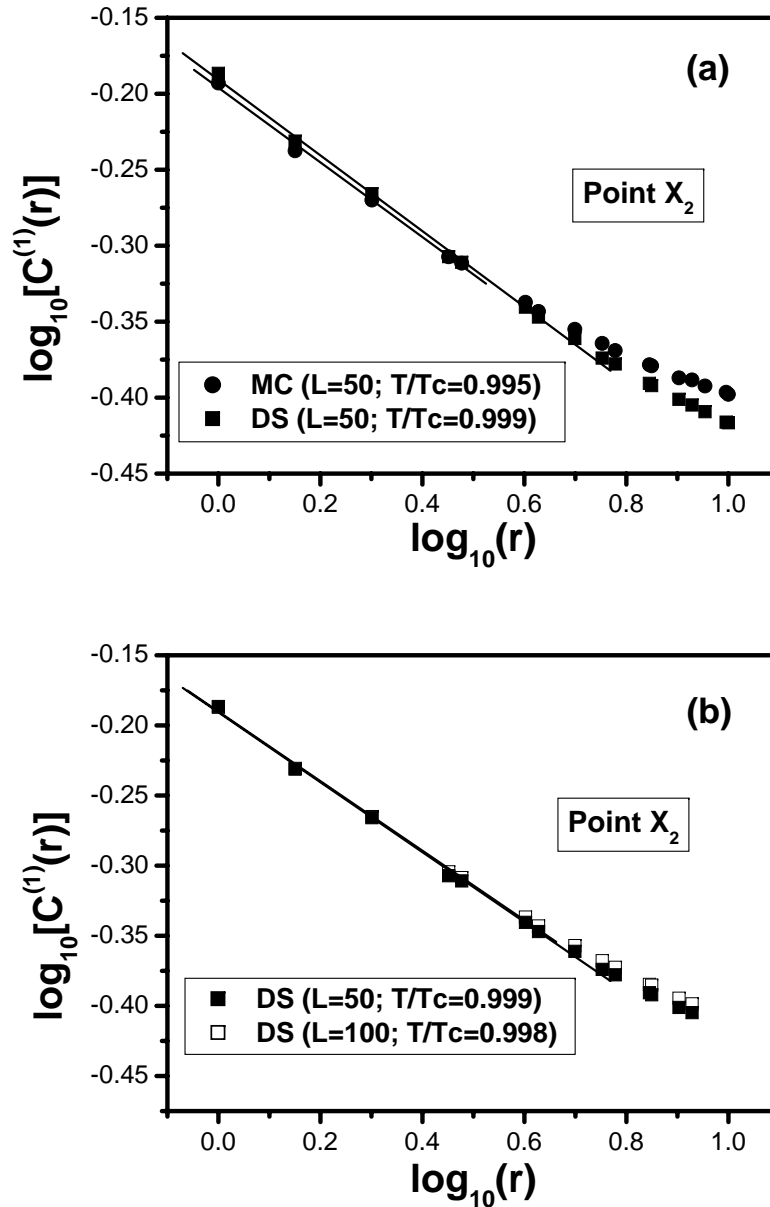


Figura 4.2: Ajustes lineares para a computação dos expoentes η , associados com as funções de correlação $C^{(1)}(r)$. (a) Os dados obtidos por simulações padrões de Monte Carlo (círculos pretos) e a presente abordagem de propagação de danos (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, são comparados. Vemos que os efeitos de tamanho finito são reduzidos no último procedimento. (b) Dados produzidos pela presente abordagem (PD) para tamanhos $L = 50$ (quadrados pretos) e $L = 100$ (quadrados vazios).

Na figura 4.3 apresentamos os parâmetros de ordem do modelo Ashkin-Teller computados através de simulações padrões de MC e da presente abordagem de PD, para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, usando os valores de t_{eq} e t_{av} mencionados acima e usando em ambas as técnicas. Mais uma vez, nota-se uma redução dos efeitos de tamanho finito no procedimento de PD com respeito ao método de MC, que produz caudas mais pronunciadas nos parâmetros de ordem para $T > T_C$. Os expoentes críticos associados podem ser computados através dos gráficos do Log-Log dos dados exibidos na figura 4.3, de tal modo que se obtém $\beta = 0.0948 \pm 0.0008$ (método MC) e $\beta = 0.0983 \pm 0.0021$ (técnica PD), enquanto que $\beta_p = 0.1392 \pm 0.0019$ (método MC) e $\beta_p = 0.1412 \pm 0.0039$ (técnica PD). Os expoentes críticos β e β_p , estimados pela abordagem de PD, estão em melhores concordâncias com os correspondentes valores exatos, $\beta = 0.098983\dots$ e $\beta_p = 0.145933\dots$, do que aqueles computados a partir do método de Monte Carlo.

A eficiência da presente abordagem PD, e sua vantagem com respeito às simulações convencionais de MC, foi ilustrada acima por comparar dados obtidos a partir de ambos métodos usando os mesmos parâmetros de simulação. Tal melhora é evidente para redes menores, como o caso analisado acima ($L = 50$), para os quais os efeitos de tamanho finito são notavelmente mais fracos na técnica PD. A partir de agora, nós nos restringiremos nos resultados produzidos pela abordagem PD para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$.

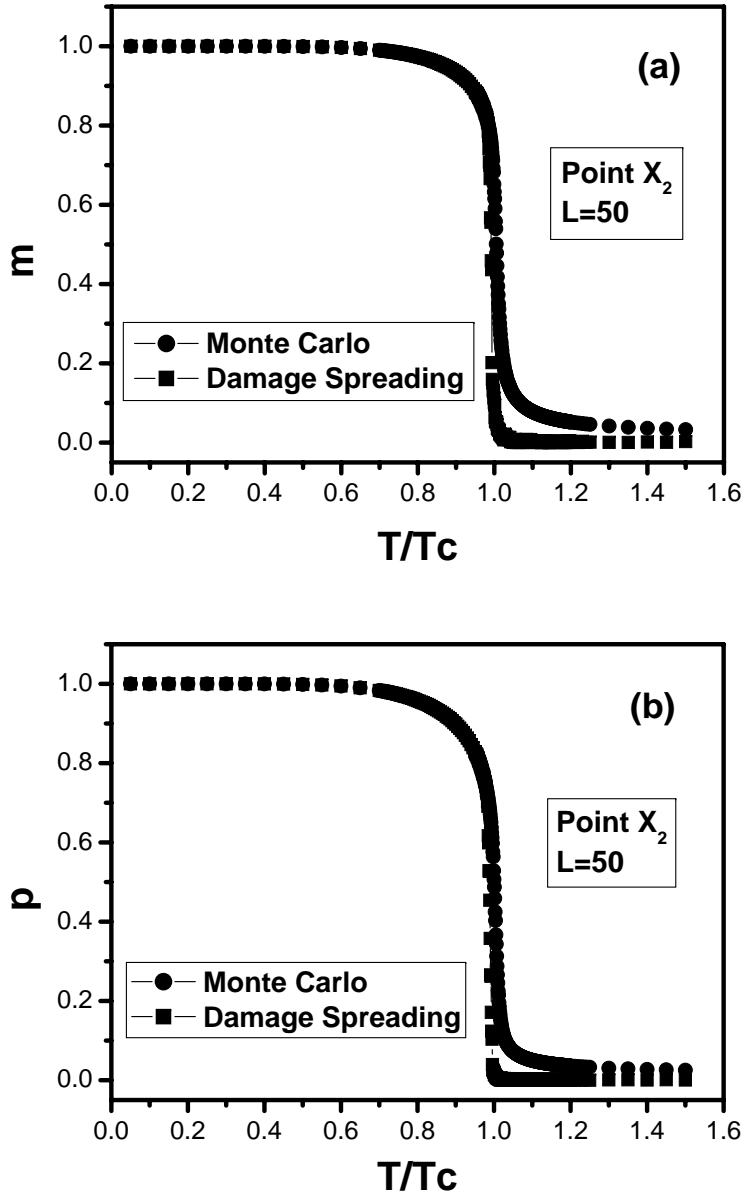


Figura 4.3: Comparação dos parâmetros de ordem do modelo Ashkin-Teller [(a) magnetização; (b) polarização] computados através de simulações padrões de MC (círculos pretos) e da presente abordagem de PD (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$. A quantidade adimensional T/T_C muda de tal modo que as coordenadas K_1 e K_2 [conforme a equação (4.27)] varia ao redor das coordenadas dos pontos X_2 , dados na tabela 4.1. Nota-se uma redução dos efeitos de tamanho finito no procedimento de PD.

Nas figuras 4.4 e 4.5, nós mostramos as funções de correlação $C^{(1)}(r)$ e $C^{(2)}(r)$ versus r , respectivamente. Por motivo de clareza, apresentamos em cada caso somente as funções de correlação associada com três diferentes razões T/T_C , incluindo a de decaimento mais lento, embora nós tenhamos investigado outros valores de temperatura. Os comportamentos de lei de potência da equação (4.28) são verificados nos “insets” das figuras 4.4 e 4.5, com os associados expoentes críticos, $\eta = 0.2479 \pm 0.0057$ e $\eta_p = 0.3674 \pm 0.0067$, respectivamente. As relativas discrepâncias associadas com as coordenadas críticas obtidas para o ponto X_2 , quando comparadas com os valores exatos da tabela 4.1, são 0.002 ± 0.001 para K_1 , e 0.003 ± 0.001 para K_2 . Esta estimativa para o expoente η , considerando uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$ coincide, dentro das barras de erros, com o resultado obtido para o tamanho linear $L = 50$, descrito acima. Isto sugere que o tamanho linear $L = 100$ é suficiente, pelo menos no que diz respeito a técnica PD, para estimativas confiáveis de expoentes críticos.

Um procedimento similar foi aplicado para os outros pontos investigados, e os expoentes resultantes η e η_p são apresentados na tabela 4.2. Considerando barras de erro, boas concordâncias com os resultados exatos – dentro de quatro casas decimais – foram encontrados. Em todos os casos, as relativas discrepâncias em nossas estimativas das coordenadas críticas, quando comparadas com os valores exatos apresentados na tabela 4.1, não foram maiores do que 0.003 ± 0.001 . Tais discrepâncias são atribuídas aos efeitos de tamanho finito, e esperamos que elas diminuam para redes de tamanhos maiores. Uma comparação de nossas estimativas para os expoentes críticos η e η_p com os resultados exatos é também apresentada na figura 4.6, onde os pontos investigados são representados em termos de suas correspondentes razões de coordenadas t_2/t_1 . Com tais variáveis, estes expoentes parecem apresentar uma simples dependência em suas coordenadas, isto é, na figura 4.6(b), nota-se que o expoente η_p decresce quase linearmente com t_2/t_1 , quando se move ao longo da linha de Baxter a partir do ponto X_5 para o ponto Potts (\tilde{P}), sugerindo uma variação suave e contínua neste expoente.

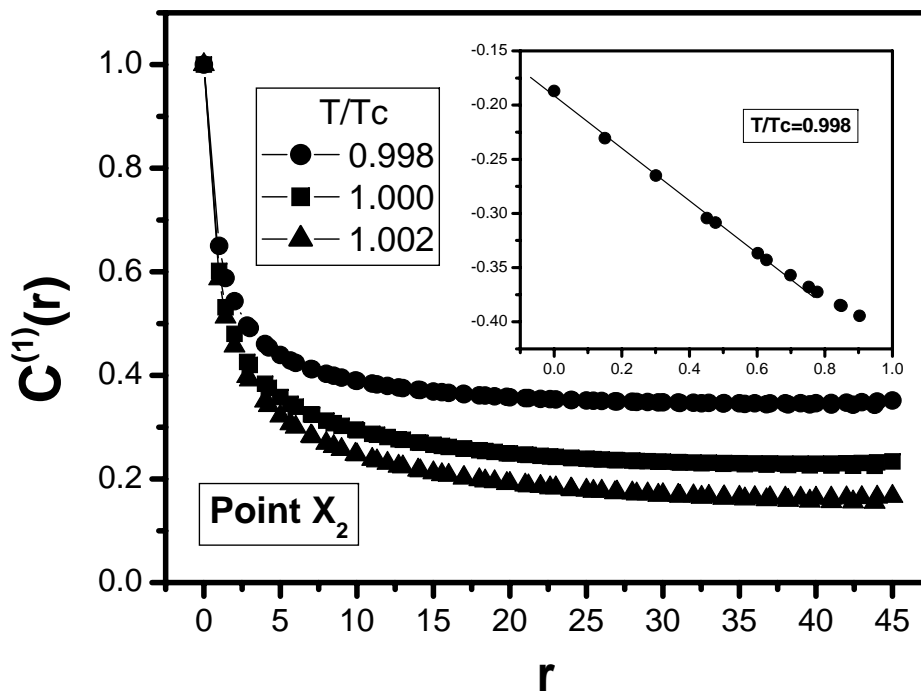


Figura 4.4: A função de correlação $C^{(1)}(r)$ versus r , para o ponto X_2 , para três razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.998$, caso em que o gráfico $\log_{10}[C^{(1)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, conduzindo à estimativa $\eta = 0.2479 \pm 0.0057$.

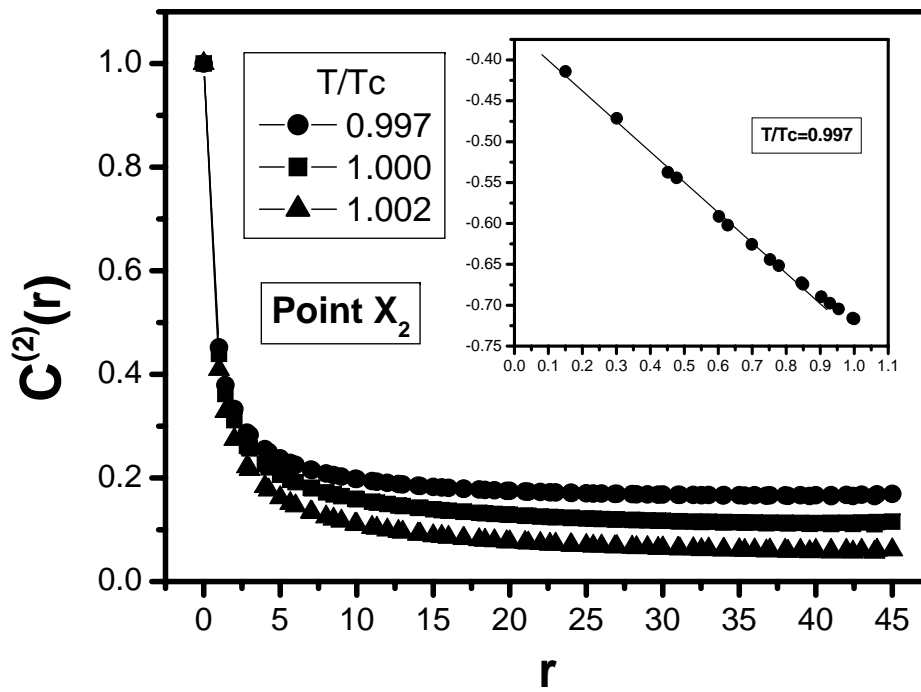


Figura 4.5: A função de correlação $C^{(2)}(r)$ versus r , para o ponto X_2 , para três típicas temperaturas T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.997$, caso em que o gráfico do $\log_{10}[C^{(2)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, resultando na estimativa $\eta_p = 0.3674 \pm 0.0067$.

Ponto	η (presente trabalho)	η_p (presente trabalho)	η_p (exato)
I_1	0.2495 ± 0.0028	0.4996 ± 0.0089	$1/2 \equiv 0.50$
\tilde{P}	0.2506 ± 0.0045	0.2504 ± 0.0055	$1/4 \equiv 0.25$
X_1	0.2497 ± 0.0054	0.3229 ± 0.0078	0.323109...
X_2	0.2479 ± 0.0057	0.3674 ± 0.0067	0.368581...
X_3	0.2510 ± 0.0029	0.4165 ± 0.0089	0.414053...
X_4	0.2509 ± 0.0034	0.4624 ± 0.0064	0.463055...
X_5	0.2528 ± 0.0029	0.5808 ± 0.0095	0.581663...

Tabela 4.2: Os expoentes críticos η e η_p , para vários pontos ao longo da linha de Baxter do modelo ferromagnético de Ashkin-Teller em uma rede quadrada, como computado a partir do presente método. Seus correspondentes valores exatos podem ser calculados a partir das equações (4.25) e (4.26) [64], conduzindo a um expoente variando continuamente η_p (cujos valores nos pontos de interesse são apresentados acima), e para $\eta = 1/4$ ao longo da linha completa.

Deve ser mencionado que, além de estimativas precisas de expoentes críticos, nós temos detectado a bem conhecida quebra de universalidade ao longo da linha de Baxter, com nossos resultados sugerindo variações suaves e contínuas dos expoentes críticos, o que representa uma tarefa não trivial dentro das simulações convencionais de Monte Carlo.

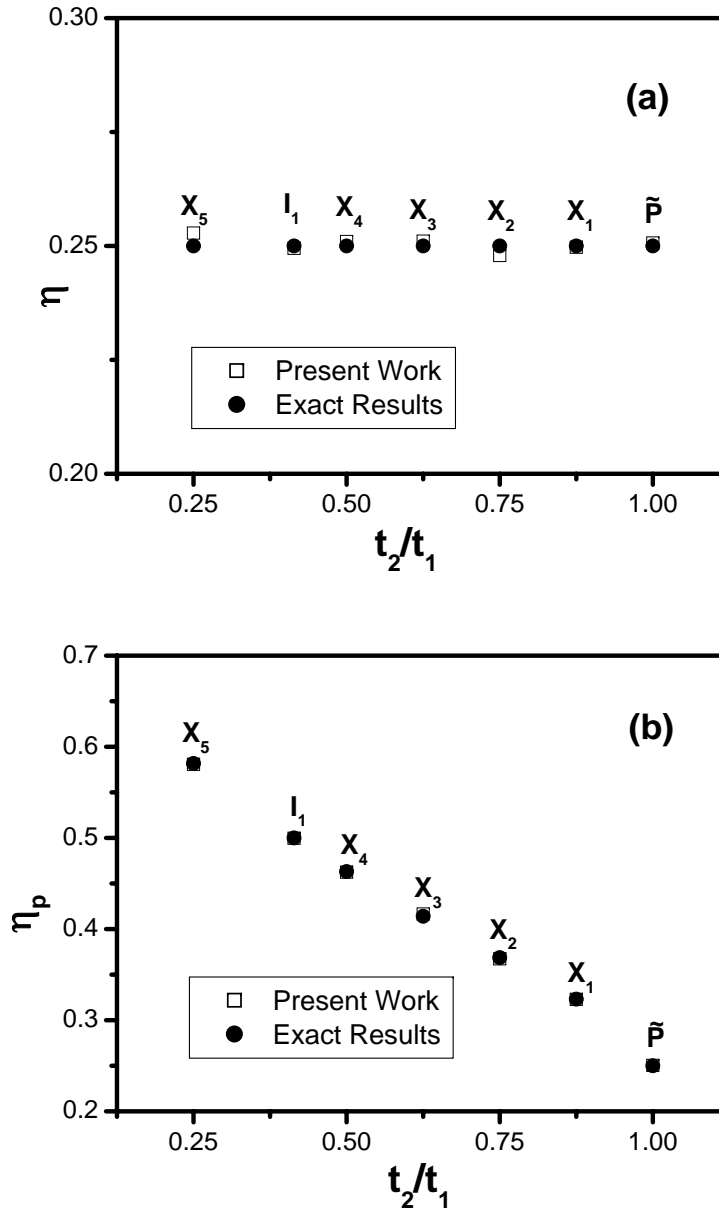


Figura 4.6: (a) Os expoentes críticos η , obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com o valor exato $\eta = 1/4$ (círculos cheios) para os pontos investigados (representados aqui em termos de suas correspondentes razões t_2/t_1) ao longo da linha de Baxter do modelo Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada. (b) Os expoentes críticos η_p , obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com os valores exatos (círculos cheios) para os mesmos pontos do caso (a). Em muitos casos os símbolos parecem superpostos, de tal modo que distinções não são vistas claramente.

Na figura 4.7, nós exibimos os parâmetros de ordem computados em termos das temperaturas reduzidas T/T_C , usando a evolução do tipo (III) com o campo magnético externo $h = 0.0001$. Neste caso consideramos grandes variações nas coordenadas da equação 4.27, para temperaturas no intervalo $T/T_C = 0.05, \dots, 1.20$. É importante mencionar que resultados similares podem também ser obtidos para os parâmetros de ordem m e p , a partir das evoluções do tipo (I) e (II), respectivamente, embora um esforço computacional maior deva ser exigido na obtenção de suas curvas para tais intervalos de temperatura (conforme referência [72]). Apesar de redes de tamanho razoavelmente pequeno considerado, observamos curvas suaves (isto é, caracterizada por uma falta de fortes flutuações) – mesmo próximo da criticalidade – com fracos efeitos de tamanho finito; isto representa uma das grandes vantagens das presentes simulações de PD.

A partir destes resultados, gráficos simples do log-log dos correspondentes parâmetros de ordem versus $\log(1 - T/T_C)$ forneceram os associados expoentes críticos $\beta = 0.0986 \pm 0.0018$ e $\beta_p = 0.1445 \pm 0.0035$ (conforme tabela 4.3). Estas estimativas do expoente crítico para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$ coincidem, dentro das barras de erros, com aqueles obtidos anteriormente pela técnica PD para o tamanho $L = 50$. Mais uma vez, estes resultados sugerem que o tamanho linear $L = 100$ é suficiente, no mínimo no que diz respeito a técnica PD, para estimativas confiáveis do expoente crítico. Gráficos similares àqueles da figura 4.7 foram encontrados para os outros pontos investigados, e os correspondentes resultados são apresentados na tabela 4.3. Em todos os casos, as relativas discrepâncias associadas com as coordenadas críticas computadas, quando comparadas com os valores exatos da tabela 4.1, foram menores do que, ou da mesma ordem, daqueles obtidos através da computação das correspondentes funções de correlação.

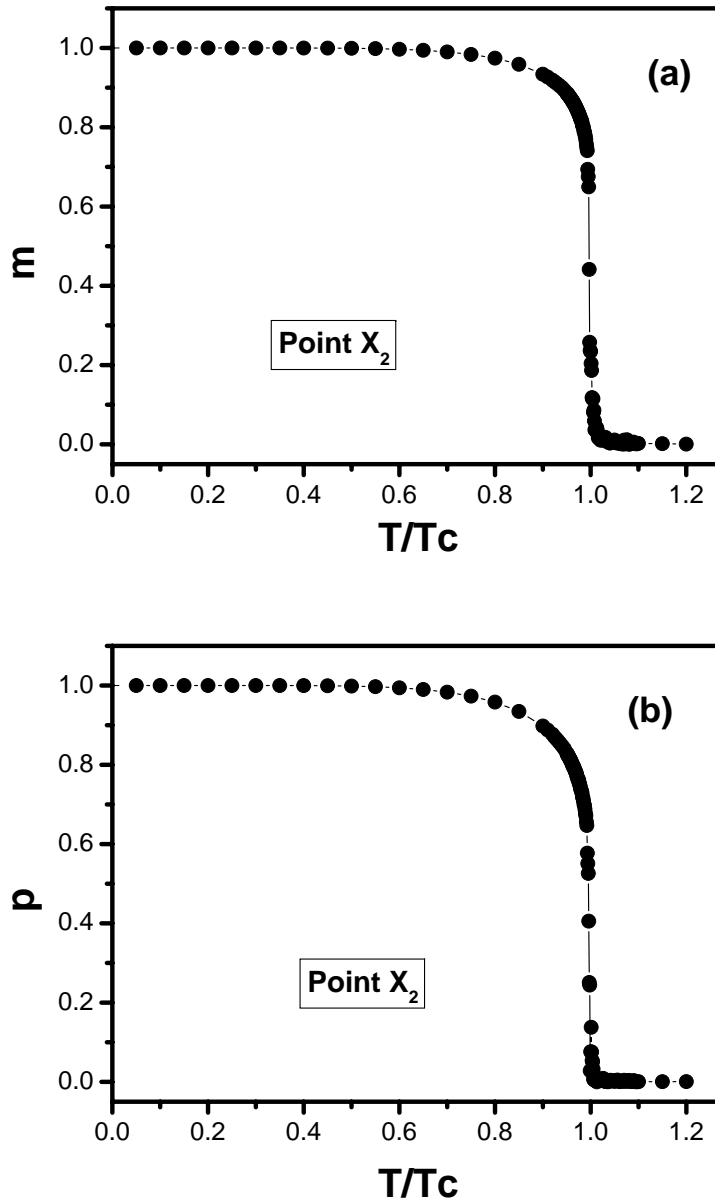


Figura 4.7: Os parâmetros de ordem, magnetização (a) e polarização (b), para o ponto X_2 , em termos da temperatura reduzida T/T_C (pontos pretos), obtidos a partir da presente abordagem numérica, e usando a evolução do tipo (III) (ver texto). As linhas são guias para o leitor.

Ponto	β (presente trabalho)	β (exato)	β_p (presente trabalho)	β_p (exato)
I_1	0.1241 ± 0.0025	$1/8 \equiv 0.125$	0.2489 ± 0.0074	$1/4 \equiv 0.25$
\tilde{P}	0.0836 ± 0.0006	$1/12 \equiv 0.08333\dots$	0.0833 ± 0.0012	$1/12 \equiv 0.083333\dots$
X_1	0.0924 ± 0.0023	$0.092334\dots$	0.1179 ± 0.0021	$0.119336\dots$
X_2	0.0986 ± 0.0018	$0.098983\dots$	0.1445 ± 0.0035	$0.145933\dots$
X_3	0.1060 ± 0.0027	$0.106665\dots$	0.1761 ± 0.0026	$0.176659\dots$
X_4	0.1157 ± 0.0021	$0.116399\dots$	0.2148 ± 0.0017	$0.215597\dots$
X_5	0.1484 ± 0.0017	$0.149401\dots$	0.3445 ± 0.0034	$0.347604\dots$

Tabela 4.3: Os expoentes críticos β e β_p , para vários pontos ao longo da linha de Baxter do modelo de Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada, como computado pelo presente método, são comparados quantitativamente com os valores exatos calculados a partir das equações (4.23)–(4.25) [64].

Os expoentes computados β e β_p são comparados quantitativamente com os resultados exatos na tabela 4.3, onde encontra-se uma concordância, dentro de quatro casas decimais, com os resultados exatos (levando em conta as barras de erros). Uma comparação qualitativa de tais expoentes é apresentada na figura 4.8, onde os pontos investigados são representados em termos de suas correspondentes coordenadas reduzidas t_2/t_1 . Com tais variáveis, estes expoentes apresentam decrescimentos monotonicamente suaves em suas coordenadas, quando nos movemos ao longo da linha de Baxter, a partir do ponto X_5 para o ponto Potts.

Para concluir, nós temos implementado um método computacional eficiente, para avaliar funções de correlação e parâmetros de ordem em sistemas magnéticos, para o modelo de Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada. Esta técnica é baseada em simulações de PD, e faz uso de relações termodinâmicas exatas derivadas previamente [61], envolvendo quantidades computáveis dentro de simulações de PD e as funções de correlação dois spins, como também os parâmetros de ordem do modelo Ashkin-Teller. A análise de tais quantidades foi restrita a linha de Baxter, bem conhecida por seus ex-

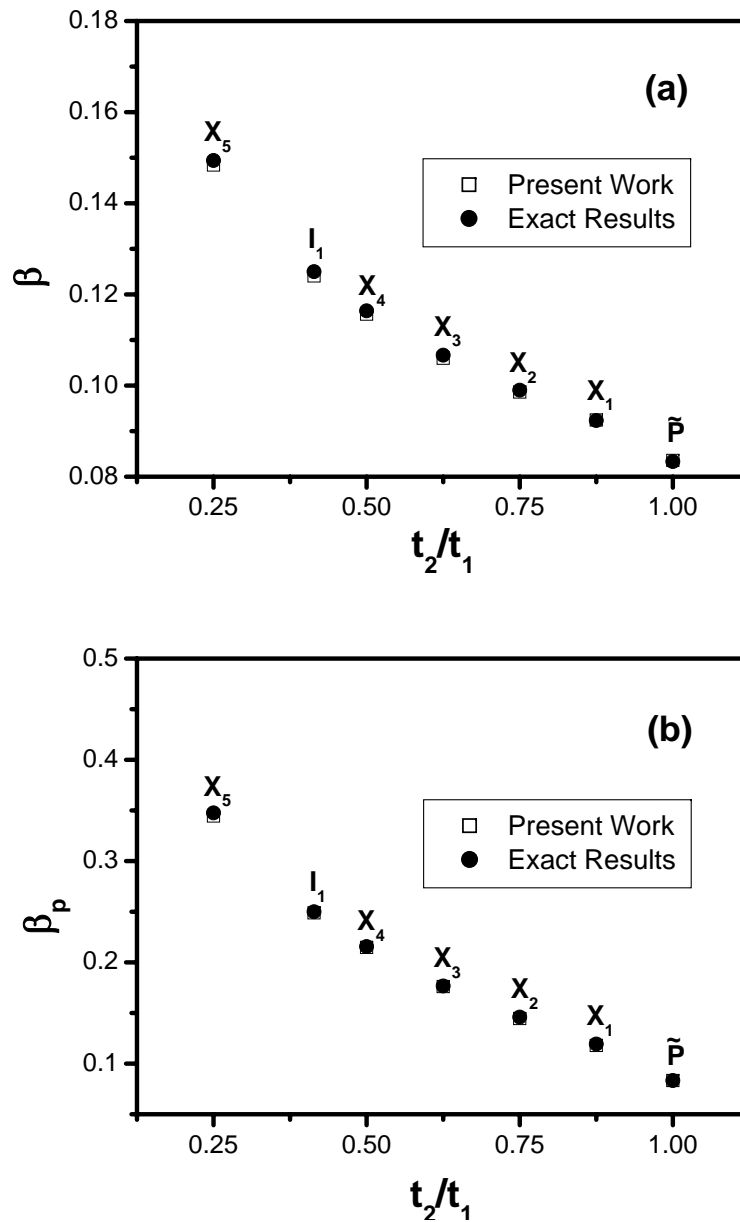


Figura 4.8: Os expoentes críticos β (a) e β_p (b), obtidos a partir da presente abordagem (símbolos vazios), são comparados qualitativamente com os valores exatos (círculos cheios) para os pontos investigados (representados aqui em termos de suas correspondentes razões t_2/t_1) ao longo da linha de Baxter do modelo de Ashkin-Teller ferromagnético em uma rede quadrada. Em muitos casos os símbolos aparecem superpostos, de tal modo que distinções não são vistas claramente.

poentes críticos variando continuamente. Foi mostrado que o método fornece resultados precisos, apesar dos tamanhos de redes considerados pequeno (os maiores tamanhos corresponderam a uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$), fornecendo concordância dos expoentes críticos computados com os correspondentes resultados exatos dentro de quatro casas decimais, levando-se em conta as barras de erros. Entre tais resultados, deve-se enfatizar aqueles associados com as funções de correlação de dois-spins do presente modelo, que representam tarefas difíceis dentro das simulações convencionais de MC, devido às grandes flutuações. Até onde sabemos, funções de correlação completas e seus associados expoentes críticos, ao longo da linha de Baxter do modelo Ashkin-Teller, não foram calculados numericamente na literatura, com uma precisão similar, e assim eles são estimados precisamente aqui, pela primeira vez, dentro das simulações de propagação de danos.

Deve ser mencionado que, além de estimativas precisas de expoentes críticos, nós temos detectado a bem conhecida quebra de universalidade ao longo da linha de Baxter, com nossos resultados sugerindo variações suaves e contínuas dos expoentes críticos, resultado não obtido facilmente nas simulações convencionais de Monte Carlo. A análise acima fornece confiabilidade para esta técnica, que já tem mostrado sua efetividade em modelos mais simples, como os ferromagnetos bidimensionais de Ising [56] e de Potts [72], conduzindo a uma redução significativa dos efeitos de tamanho finito. Os resultados apresentados aqui encorajam a aplicação do método no estudo de problemas abertos mais complicados, para os quais a necessária fundamentação teórica, isto é, as correspondentes relações exatas de PD, possam ser completamente elaboradas.

Capítulo 5

Danos e Funções Termodinâmicas no Modelo de Ising com Spin 1

A maior parte do conteúdo deste capítulo corresponde ao artigo “*The Spin-1 Ising Model: Exact Damage-Spreading Relations and Numerical Simulations*”, por A. S. Anjos, A. M. Mariz, F. D. Nobre and I. G. Araujo, Phys. Rev. E, **78**, 031105 (2008).

5.1 Introdução

Dentre as inúmeras generalizações do modelo Ising talvez a mais simples, que exhibe um complexo diagrama de fases com linhas de transição de primeira e segunda ordem e pontos tricríticos, seja a desenvolvida para sistemas de spin-1. Introduzido inicialmente pelos autores Blume, Emery e Griffiths [100], para descrever a separação de fases e ordenação superfluida nas misturas $\text{He}^3 - \text{He}^4$, este modelo agora conhecido por Blume-Emery-Griffiths (BEG) foi subsequentemente reinterpretado para descrever transições de fases em fluidos simples e multicomponentes [101], microemulsão [102], e ligas semi-condutoras [103].

Na sua versão mais geral, na presença de campo magnético externo, o hamiltoniano que descreve o modelo é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - L \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i, \quad (5.1)$$

onde os spins S_i sobre os sítios de uma dada rede regular podem assumir os valores $0, \pm 1$. Os dois primeiros termos restritos aos pares de primeiros vizinhos, descrevem, respectivamente, o acoplamento (bilinear) ferromagnético (J) e o acoplamento biquadrático (L). O terceiro termo D é o campo cristalino ou também chamado de anisotropia, e o último termo representa os efeitos de um campo magnético externo (H). Em misturas $\text{He}^3 - \text{He}^4$, o estado $S = 0$ representa um átomo He^3 enquanto os átomos He^4 são denotados pelos estados $S = \pm 1$: a transição superfluida corresponde à quebra de simetria entre os estados ± 1 [100].

Este modelo com interações biquadrática nula ($L = 0$) é chamado o modelo Blume-Capel (BC) [104, 105]. Ambos (o modelo BEG e BC) têm sido extensivamente estudados na literatura. O forte interesse nos mesmos decorre dos variados aspectos de suas transições de fases e de suas inúmeras potenciais aplicações.

Uma das principais características dos modelos Ising spin 1 é a existência de pontos tricríticos no diagrama de fases, nos quais a transição de fase muda de contínua para descontínua quando o termo de anisotropia tem o sinal oposto ao sinal (de J e L) das interações de pares de primeiros vizinhos (Figura 5.1). Teoricamente, o comportamento tricrítico desses modelos tem sido amplamente examinado pelo uso de várias técnicas tais como, a aproximação de campo médio [100, 106], técnicas do grupo de renormalização [107], método de expansões em séries [108], método de matriz transferência [109], simulações de Monte Carlo [110], teoria de campo efetivo com a técnica do operador diferencial [111], dentre outras.

O modelo Ising spin 1 definido pelo hamiltoniano acima (equação 5.1) tem dois parâmetros de ordem, a saber, o parâmetro de ordem dipolar (ou magnetização) m e o parâmetro de ordem quadrupolar (ou polarização) p (em misturas de Hélio, este último

reflete a possibilidade de separação de fases), expressos por:

$$m = \langle S_i \rangle; \quad p = \langle S_i^2 \rangle \quad (5.2)$$

Um diagrama de fases do modelo BEG ($J > 0$) no plano $(T/J, L/J)$ próximo de $L/J = -1$ é apresentado na figura 5.1, com o intuito de mostrar seus aspectos mais gerais. As linhas sólidas representam as fronteiras de transição de fases de segunda ordem e as linhas tracejadas as fronteiras de transição de fases de primeira ordem. As fronteiras de fases são rotuladas pelo parâmetro de anisotropia em unidade de J . Desse diagrama, salientamos algumas características do modelo, abaixo:

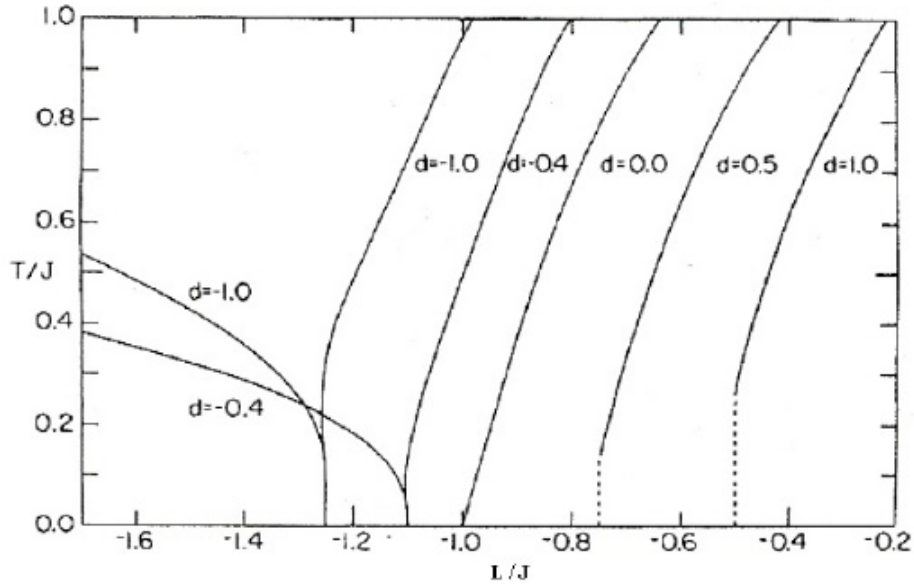


Figura 5.1: Diagrama de fases do modelo BEG próximo de $L/J = -1$. Linhas sólidas (tracejadas) representam as fronteiras de fases de segunda ordem (primeira ordem). As linhas das fronteiras de fases são rotuladas pelos valores de $d = D/J$. (Figura retirada da ref.[110])

Primeiro, para o caso de anisotropia $D = 0$, temos a fronteira de transição de fases de segunda ordem separando a fase ferromagneticamente ordenada e a fase paramagnética (desordenada). Em $L = 0$, o modelo é reduzido ao modelo de Ising spin-1 com somente a interação bilinear (com temperatura crítica $T_C/J = 1.693$ em concordância com os

resultados das expansões em séries [108]). Por esta razão, quando $L \rightarrow \infty$, o modelo é portanto equivalente ao modelo com spin-1/2.

Para os valores $D > 0$ (contrário aos sinais de J e L), uma linha de transição de fases de segunda ordem (linha crítica) junta-se com uma linha de primeira ordem no ponto tricrítico, como uma das principais características de sistemas spin-1. Para $D < 0$, uma nova fase ocorre na região $L/J < -1$, chamada fase ordenada quadrupolar. Além dessas características, segundo os autores Hoston e Berker [106], que analisaram o diagrama global do modelo em três dimensões para $L < 0$ (interação biquadrática repulsiva), constataram regiões de reintrâncias simples e duplas e fases ferrimagnéticas.

Para fazer uma caracterização adequada da criticalidade desses sistemas com spin 1, é necessário que grandezas termodinâmicas, como os parâmetros de ordem e funções de correlação sejam conhecidas. Portanto, consideramos interessante no presente trabalho mostrar que estas grandezas podem ser associadas, por meio de relações exatas, a certas combinações de danos, como uma das motivações do estudo que se segue.

Neste capítulo, usando os ingredientes da vertente analítica da técnica de propagação de dano, nós investigamos o modelo Ising de spin-1 de interação de primeiros vizinhos [112]. Aqui, além de derivar relações exatas de PD, nós testamos a hipótese de universalidade para o modelo Ising de spin-1 em uma rede quadrada. Na próxima seção, derivamos relações exatas entre quantidades computáveis através de simulações PD e propriedades termodinâmicas para o modelo Ising de spin-1. Estas relações são válidas para qualquer procedimento dinâmico ergódico aplicado em um sistema translacionalmente invariante. Na seção 5.3, nós definimos o procedimento a ser usado para implementar as simulações PD, fazendo uso de tais relações exatas, e ilustramos o método aplicando-o ao modelo de Ising spin-1 ferromagnético com interações de primeiros vizinhos em uma rede quadrada. Finalmente, na última seção, apresentamos nossas conclusões.

Cabe aqui salientar que as relações exatas derivadas para o modelo Ising spin-1, na próxima seção, são válidas para o modelo de hamiltoniano mais geral de equação (5.1),

embora sua implementação aqui seja aplicada somente ao ferromagneto de Ising spin-1 de interação de primeiros vizinhos, como um primeiro teste na investigação de suas propriedades físicas relevantes a partir da abordagem de propagação de danos.

5.2 Relações Exatas entre Danos e Funções Termodinâmicas

Para investigar as propriedades de propagação de danos (PD) do modelo Ising spin-1, consideramos duas cópias (A e B) do sistema, caracterizadas pelas variáveis $\{S_i^A\}$ e $\{S_i^B\}$, respectivamente. Para cada sítio i , em um determinado instante t , existem seis possíveis tipos de danos para o presente modelo.

n^{e}	$S_i(A)$	$S_i(B)$
1	-1	0
2	-1	+1
3	0	-1
4	0	+1
5	+1	-1
6	+1	0

Tabela 5.1: Existem seis possíveis tipos de sítios danificados para o modelo Ising spin-1.

Primeiramente, para efeitos de cálculos, definimos as seguintes variáveis binárias,

$$\Pi_i = \frac{1}{2}S_i(S_i + 1) \quad (5.3)$$

$$\Theta_i = 1 - S_i^2 \quad (5.4)$$

$$\Omega_i = \frac{1}{2}S_i(S_i - 1) \quad (5.5)$$

Para a obtenção das relações entre o dano e as propriedades termodinâmicas do sistema (descrito nessas novas variáveis), listamos abaixo, todos os seis possíveis tipos de danos associados a um determinado sítio i :

$$(1): \quad \Pi_i(A) = 1 \quad \text{e} \quad \Pi_i(B) = 0 \quad (S_i(A) = 1, S_i(B) \neq 1);$$

$$(2): \quad \Pi_i(A) = 0 \quad \text{e} \quad \Pi_i(B) = 1 \quad (S_i(A) \neq 1, S_i(B) = 1);$$

$$(3): \quad \Theta_i(A) = 1 \quad \text{e} \quad \Theta_i(B) = 0 \quad (S_i(A) = 0, S_i(B) \neq 0);$$

$$(4): \quad \Theta_i(A) = 0 \quad \text{e} \quad \Theta_i(B) = 1 \quad (S_i(A) \neq 0, S_i(B) = 0);$$

$$(5): \quad \Omega_i(A) = 1 \quad \text{e} \quad \Omega_i(B) = 0 \quad (S_i(A) = -1, S_i(B) \neq -1);$$

$$(6): \quad \Omega_i(A) = 0 \quad \text{e} \quad \Omega_i(B) = 1 \quad (S_i(A) \neq -1, S_i(B) = -1);$$

Para exemplificar a ocorrência dos danos, considere uma possível sequência desenvolvida, no decorrer do tempo (t), em que a variável binária tipo Π , no sítio “ i ”, para ambas as configurações (A e B), assumam os valores abaixo,

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\Pi_i(A)$	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0
$\Pi_i(B)$	0	1	1	0	1	1	0	1	0	0

Tabela 5.2: Possíveis valores da variável Π no intervalo de 10 (dez) passos de Monte Carlo.

os respectivos danos (1) e (2), teriam as correspondentes probabilidades $p_1 = \frac{3}{10}$ e $p_2 = \frac{4}{10}$ respectivamente. Portanto, se considerarmos as duas cópias A e B , após um longo período de tempo, quando o equilíbrio térmico for alcançado, as probabilidades dos danos acima

definidos aparecerem no sítio i são dados, respectivamente, por

$$p_1 = \langle \Pi_i(A)(1 - \Pi_i(B)) \rangle_t \quad (5.6)$$

$$p_2 = \langle (1 - \Pi_i(A))\Pi_i(B) \rangle_t \quad (5.7)$$

$$p_3 = \langle \Theta_i(A)(1 - \Theta_i(B)) \rangle_t \quad (5.8)$$

$$p_4 = \langle (1 - \Theta_i(A))\Theta_i(B) \rangle_t \quad (5.9)$$

$$p_5 = \langle \Omega_i(A)(1 - \Omega_i(B)) \rangle_t \quad (5.10)$$

$$p_6 = \langle (1 - \Omega_i(A))\Omega_i(B) \rangle_t \quad (5.11)$$

onde $\langle \dots \rangle_t$ representa uma média temporal sobre a trajetória seguida pelas cópias do sistema no seu espaço de fases, definida pela dinâmica.

Considere as funções definidas abaixo, como as diferenças entre as probabilidades de ocorrência dos danos,

$$E \equiv p_1 - p_2 = \langle \Pi_i(A) \rangle_t - \langle \Pi_i(B) \rangle_t \quad (5.12)$$

$$F \equiv p_3 - p_4 = \langle \Theta_i(A) \rangle_t - \langle \Theta_i(B) \rangle_t, \quad (5.13)$$

$$G \equiv p_5 - p_6 = \langle \Omega_i(A) \rangle_t - \langle \Omega_i(B) \rangle_t \quad (5.14)$$

Em seguida, nós mostraremos que sob algumas restrições a serem impostas para a evolução das cópias A e B , as quantidades E , F e G estarão diretamente relacionadas às

propriedades termodinâmicas. Vamos, então, considerar o tempo inicial ($t = 0$) com as duas cópias em equilíbrio térmico.

Definimos seis diferentes tipos de condições de fronteira a serem impostas sobre estas evoluções temporais para $t \geq 0$ [denotadas aqui por e_i ($i = 1, 2, \dots, 6$)].

Evolução temporal e_1 : Neste caso consideramos uma condição de fronteira para a variável S_i^B no sítio central da rede, $S_0^B \neq 1$ (isto é, $\Pi_0(B) = 0$) para todos os instantes $t \geq 0$. Isto representa uma “fonte de dano” no sítio central; todos os spins restantes da rede, em ambas as cópias, são deixados livres para evoluírem segundo o correspondente procedimento dinâmico.

Evolução temporal e_2 : As duas cópias A e B devem evoluir livremente segundo um determinado procedimento dinâmico, exceto para seus sítios centrais, que são restritos a $\Pi_i(A) = 1$ e $\Pi_i(B) = 0$, para todos os instantes $t \geq 0$.

Evolução temporal e_3 : O sítio central da cópia B está restrito a $\Theta_0(B) = 0$ para todos os instantes $t \geq 0$. Todos os sítios restantes, em ambas as cópias A e B são deixados para evoluírem livremente sob um certo procedimento dinâmico.

Evolução temporal e_4 : As duas cópias A e B devem evoluir livremente segundo um determinado procedimento dinâmico, exceto para seus sítios centrais, que são restritos a $\Theta_0(A) = 1$ e $\Theta_0(B) = 0$, para todo $t \geq 0$.

Evolução temporal e_5 : A cópia A evolui com nenhuma restrição; o sítio central da cópia B é restrito a $\Omega_0(B) = 0$ para todo $t \geq 0$.

Evolução temporal e_6 : As duas cópia devem evoluir livremente, exceto para seus sítios centrais, que são restritos a $\Omega_0(A) = 1$ e $\Omega_0(B) = 0$ para todo $t \geq 0$.

Para obter as relações exatas envolvendo as quantidades das equações (5.12)-(5.14) e funções de correlação, como também os parâmetros de ordem, nós devemos fazer uso das evoluções temporais definidas acima. Já que condições de fronteiras periódicas estão associadas a diferentes evoluções temporais, elas conduzirão, no limite de tempo longo, a distintas relações exatas, como descrito abaixo.

Considerando a evolução temporal e_1 e assumindo que as cópias A e B evoluem no tempo sob uma dinâmica ergódica, tem-se que,

$$\langle \Pi_i(A) \rangle_t = \langle \Pi_i \rangle_T \quad \text{e} \quad \langle \Pi_i(B) \rangle_t = \frac{\langle \Pi_i(1 - \Pi_o) \rangle_T}{\langle (1 - \Pi_o) \rangle_T}, \quad (5.15)$$

onde $\langle \dots \rangle_T$ representam agora médias térmicas sem nenhuma restrição. Nas equações acima $\langle \Pi_i(A) \rangle_t$ representa a probabilidade para a variável S_i^A apresentar o valor +1 sem nenhuma restrição, enquanto $\langle \Pi_i(B) \rangle_t$ é a probabilidade condicional para encontrar a variável $S_i^B = 1$, desde que $S_0^B \neq 0$.

Se nosso sistema é translacionalmente invariante, então podemos escrever

$$E(e_1) = \frac{\langle \Pi_0 \Pi_i \rangle_T - \langle \Pi_0 \rangle_T \langle \Pi_i \rangle_T}{1 - \langle \Pi_0 \rangle_T} \quad (5.16)$$

ou seja,

$$E(e_1) = \frac{C_{0i}^{(11)} + C_{0i}^{(12)} + C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)}}{2(2 - m - p)} \quad (5.17)$$

onde $C_{0i}^{(\alpha\beta)}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) são as funções de correlação,

$$C_{0i}^{(\alpha\beta)} = \langle S_0^\alpha S_i^\beta \rangle_T - \langle S_0^\alpha \rangle_T \langle S_i^\beta \rangle_T, \quad (5.18)$$

enquanto m e p são os parâmetros de ordem,

$$m = \langle S_0 \rangle_T; \quad p = \langle S_0^2 \rangle_T, \quad (5.19)$$

conhecidos como magnetização e polarização, respectivamente. Já que estamos supondo invariância translacional, as quantidades acima representam as quantidades termodinâmicas padrões, a saber, as funções de correlação ($C_{0i}^{(\alpha\beta)}$), a magnetização (m), e a polarização (p) por sítio, respectivamente.

Agora, considerando a evolução temporal e_2 , com as restrições $\Pi_0(A) = 1$ e $\Pi_0(B) = 0$ ($t \geq 0$), obtem-se,

$$\langle \Pi_i(A) \rangle_t = \frac{\langle \Pi_0 \Pi_i \rangle_T}{\langle \Pi_0 \rangle_T} \quad \text{e} \quad \langle \Pi_i(B) \rangle_t = \frac{\langle (1 - \Pi_0) \Pi_i \rangle_T}{\langle (1 - \Pi_0) \rangle_T}, \quad (5.20)$$

de tal modo que,

$$E(e_2) = \frac{\langle \Pi_0 \Pi_i \rangle_T - \langle \Pi_0 \rangle_T \langle \Pi_i \rangle_T}{\langle \Pi_0 \rangle_T (1 - \langle \Pi_0 \rangle_T)} = \frac{C_{0i}^{(11)} + C_{0i}^{(12)} + C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)}}{(m + p)(2 - m - p)} \quad (5.21)$$

Combinando as relações analíticas obtidas para a função E , (5.17) e (5.21), temos

$$m + p = 2 \frac{E(e_1)}{E(e_2)}, \quad (5.22)$$

$$C_{0i}^{(11)} + C_{0i}^{(12)} + C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)} = 4 \frac{E(e_1)}{E(e_2)} [E(e_2) - E(e_1)]. \quad (5.23)$$

Seguindo o procedimento acima, as relações entre as médias temporais e térmicas, para as evoluções temporais e_3 e e_4 , são, respectivamente:

$$(e_3) : \quad \langle \Theta_i(A) \rangle_t = \langle \Theta_i \rangle_T \quad \text{e} \quad \langle \Theta_i(B) \rangle_t = \frac{\langle (1 - \Theta_0) \Theta_i \rangle_T}{\langle (1 - \Theta_0) \rangle_T} \quad (5.24)$$

e

$$(e_4) : \quad \langle \Theta_i(A) \rangle_t = \frac{\langle \Theta_0 \Theta_i \rangle_T}{\langle \Theta_0 \rangle_T} \quad \text{e} \quad \langle \Theta_i(B) \rangle_t = \frac{\langle (1 - \Theta_0) \Theta_i \rangle_T}{\langle (1 - \Theta_0) \rangle_T} \quad (5.25)$$

que fornecem para a função definida F (equação (5.13)), segundo as evoluções temporais e_3 e e_4 , as relações,

$$F(e_3) = \frac{\langle \Theta_0 \Theta_i \rangle_T - \langle \Theta_0 \rangle_T \langle \Theta_i \rangle_T}{1 - \langle \Theta_0 \rangle_T} = \frac{C_{0i}^{(22)}}{p} \quad (5.26)$$

$$F(e_4) = \frac{\langle \Theta_0 \Theta_i \rangle_T - \langle \Theta_0 \rangle_T \langle \Theta_0 \rangle_T}{\langle \Theta_0 \rangle_T (1 - \langle \Theta_0 \rangle_T)} = \frac{C_{0i}^{(22)}}{p(1-p)}. \quad (5.27)$$

que combinadas (equações (5.26) e (5.27)) possibilita-nos determinar as relações analíticas, a saber,

$$p = \frac{F(e_4) - F(e_3)}{F(e_4)}, \quad (5.28)$$

$$C_{0i}^{(22)} = \frac{F(e_3)}{F(e_4)} [F(e_4) - F(e_3)]. \quad (5.29)$$

Procedimento similar para as evoluções temporais e_5 e e_6 , fornecem para a função G , respectivamente,

$$G(e_5) = \frac{\langle \Omega_0 \Omega_i \rangle_T - \langle \Omega_0 \rangle_T \langle \Omega_i \rangle_T}{1 - \langle \Omega_0 \rangle_T} = \frac{C_{0i}^{(11)} - C_{0i}^{(12)} - C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)}}{2(2+m-p)}; \quad (5.30)$$

$$G(e_6) = \frac{\langle \Omega_0 \Omega_i \rangle_T - \langle \Omega_0 \rangle_T \langle \Omega_i \rangle_T}{\langle \Omega_0 \rangle_T (1 - \langle \Omega_0 \rangle_T)} = \frac{C_{0i}^{(11)} - C_{0i}^{(12)} - C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)}}{(p-m)(2+m-p)}. \quad (5.31)$$

que por comparação (equações (5.30) e (5.31)), permite as relações abaixo,

$$p - m = 2 \frac{G(e_5)}{G(e_6)}, \quad (5.32)$$

$$C_{0i}^{(11)} - C_{0i}^{(12)} - C_{0i}^{(21)} + C_{0i}^{(22)} = 4 \frac{G(e_5)}{G(e_6)} [G(e_6) - G(e_5)]. \quad (5.33)$$

Assim, de posse das relações (5.22 – 5.23), (5.28 – 5.29) e (5.32 – 5.33), que são exatas para qualquer rede translacionalmente invariante, é fácil perceber, que as funções termodinâmicas do modelo Ising spin-1, a saber, $C_{0i}^{(\alpha\beta)}$, m e p , podem ser expressas analiticamente por,

$$m = \frac{E(e_1)}{E(e_2)} - \frac{G(e_5)}{G(e_6)}, \quad \text{e} \quad p = \frac{F(e_4) - F(e_3)}{F(e_4)}, \quad (5.34)$$

$$C_{0i}^{(22)} = \frac{F(e_3)}{F(e_4)} [F(e_4) - F(e_3)], \quad (5.35)$$

e

$$C_{0i}^{(11)} = 2 \left\{ \frac{E(e_1)}{E(e_2)} [E(e_2) - E(e_1)] + \frac{G(e_5)}{G(e_6)} [G(e_6) - G(e_5)] \right\} - \frac{F(e_3)}{F(e_4)} [F(e_4) - F(e_3)]. \quad (5.36)$$

Portanto, o procedimento computacional pode ser implementado executando as simulações apropriadas, com as evoluções temporais acima mencionadas; após isto, podemos usar as equações (5.34–5.36), para obter, finalmente, os parâmetros de ordem e as funções de correlação do modelo.

5.2.1 Uma Outra Abordagem para Obter os Parâmetros de Ordem

Relações exatas adicionais para os parâmetros de ordem $m = \langle S_i \rangle_T$ e $p = \langle S_i^2 \rangle_T$ do modelo, podem também ser obtidas, considerando as duas cópias A e B do sistema evoluindo no tempo, na presença de um campo magnético externo específico (H), sem qualquer spin fixo (esta abordagem será denotada daqui por diante como evolução temporal e_7).

Para este propósito, no tempo inicial ($t = 0$), devemos ter ambas as cópias (A e B) em equilíbrio térmico e com seus spins invertidos, isto é, $S_i^A(t = 0) = -S_i^B(t = 0)$ em todos os sítios [exceto, para os casos triviais, $S_i^A(t = 0) = S_i^B(t = 0) = 0$]. Além disso, ambas as cópias devem evoluir no tempo sob pequenos campos magnéticos opostos, $H^A = -H^B = H$ ($\forall t \geq 0$).

Portanto, considerando um outro sistema na presença de campo (H) para cima, por comparação, teremos no equilíbrio termodinâmico:

$$\langle \Pi_i(A) \rangle_t = \langle \Pi_i \rangle_T \quad \text{e} \quad \langle \Pi_i(B) \rangle_t = \langle (1 - \Pi_i) \rangle_T; \quad (5.37)$$

$$\langle \Omega_i(A) \rangle_t = \langle \Omega_i \rangle_T \quad \text{e} \quad \langle \Omega_i(B) \rangle_t = \langle (1 - \Omega_i) \rangle_T. \quad (5.38)$$

Considerando as quantidades E e G , definidas nas equações (5.12) e (5.14), obtém-se [nessa nova evolução], respectivamente,

$$E(e_7) = \langle \Pi_i(A) \rangle_t - \langle \Pi_i(B) \rangle_t = \langle S_i^2 \rangle_T + \langle S_i \rangle_T - 1 \quad (5.39)$$

$$G(e_7) = \langle \Omega_i(A) \rangle_t - \langle \Omega_i(B) \rangle_t = \langle S_i^2 \rangle_T - \langle S_i \rangle_T - 1 \quad (5.40)$$

que conduzem, assim, as novas relações exatas para os parâmetros de ordem do modelo,

$$\langle S_i \rangle_T = \frac{1}{2}[E(e_7) - G(e_7)] \quad \text{e} \quad \langle S_i^2 \rangle_T = \frac{1}{2}[E(e_7) + G(e_7)] + 1. \quad (5.41)$$

Portanto, para os parâmetros de ordem, caso em que estamos interessado em um amplo intervalo de temperatura, a única evolução temporal e_7 é mais conveniente por consumir menos tempo, do ponto de vista computacional. No que diz respeito às funções de correlação, devemos aplicar o procedimento acima, caracterizado pelas evoluções temporais e_1, \dots, e_6 ; embora este exija tempos computacionais maiores, é usualmente restrito a pequenos intervalos de temperaturas (próximo à criticalidade).

É importante lembrar que, em contraste aos resultados da referência [56], as relações exatas acima não representam a “distância de Hamming” entre as duas configurações, e são escritas em termos de quantidades que são independentes da regra dinâmica escolhida; portanto, estas relações valem para qualquer procedimento dinâmico ergódico.

Na próxima seção, nós descrevemos o procedimento numérico a ser usado para implementar as simulações de propagação de danos a um modelo específico, fazendo uso das relações exatas derivadas acima.

5.3 Implementação da Técnica: Resultados e Discussões

Nesta seção, nós ilustramos o método aplicando-o ao modelo Ising de spin-1 ferromagnético com interações de primeiros vizinhos na rede quadrada, isto é, $L = D = 0$ na equação 5.1. Para as simulações das evoluções e_1, \dots, e_6 , nós consideraremos $H = 0$, enquanto que na evolução e_7 , pequenos campos magnéticos serão aplicados as cópias A e B .

Aqui, salientamos que a computação das funções de correlação com dependência na distância entre os spins, segue o mesmo procedimento já usado nos capítulos anteriores; ou seja, que é sempre possível definir as funções de correlação como os valores médios,

$$C^{(\alpha\beta)}(r) = \frac{1}{4} \sum_{i(r)} C_{0i}^{(\alpha\beta)}, \quad (5.42)$$

onde $C_{0i}^{(\alpha\beta)}$ são definidos na equação (5.18). Aqui, lembramos que $\sum_{i(r)}$ corresponde a soma sobre quatro sítios com a mesma distância r a partir do sítio central; nos casos excepcionais onde podem existir mais do que quatro sítios com a mesma distância r do sítio central, os sítios extras não são levados em conta nas médias da equação (5.42)

No presente modelo, as quantidades relevantes computáveis através da técnica PD descritas na seção anterior, correspondem à temperatura crítica e expoentes críticos associado com a função de correlação $C^{(11)}(r)$ e a magnetização m . Como é usual, dentro das simulações de PD, nós vamos seguir a evolução temporal das cópias A e B do sistema para uma determinada temperatura T , sujeitas ao mesmo ruído térmico e ao mesmo conjunto de números aleatórios. Inicialmente, nós deixamos uma cópia (isto é, S_i^A), evoluir por t_{eq} passos de MC para o equilíbrio; como prática padrão, nossa unidade de tempo (1 passo de MC) consiste em uma completa varredura na rede. Nós assumimos que o estado de equilíbrio é atingido quando se observam pequenas flutuações no tempo sobre as quantidades termodinâmicas, como a magnetização e a energia.

Após o processo de equilíbrio da cópia A (tempo $t = 0$), esta configuração é armazenada (como uma nova cópia A_0), e permanecerá intacta; então, a evolução temporal e_1 (caracterizada por sua correspondente restrição, como descrito na seção anterior) é desenvolvida para as cópias A e B , de tal modo que se obtem, após t_{av} passos de MC, $E(e_1)$. Agora, recuperando a configuração A_0 , que deve tornar a configuração A para a evolução e_2 , executa-se tal evolução para obter $E(e_2)$.

O procedimento é repetido para as evoluções temporais e_3, \dots, e_6 , de tal modo que podemos computar as funções de correlação e os parâmetros de ordem, fazendo uso das relações exatas derivadas na seção anterior. Na evolução e_7 , a cópia A é considerada na presença de um campo magnético suficientemente pequeno e então levada ao equilíbrio; neste instante ($t = 0$), a cópia B é definida com os spins e com o campo magnético invertido com respeito àqueles da cópia A .

Devemos lembrar que as relações exatas da seção anterior valem para qualquer dinâmica ergódica aplicada a sistemas translacionalmente invariante. Aqui, temos considerado uma simulação em que todos os sítios da rede são visitados de uma forma sequencial, e atualizados (em ambas as cópias A e B) segundo as regras de implementação da dinâmica de Glauber; similar aos procedimentos de atualização vistos nos capítulos anteriores [72, 98].

Nós investigamos o modelo em redes quadrada de tamanhos lineares $L = 50$ e $L = 100$, com condições de fronteiras periódicas. Para as funções de correlações, a distância r foi medida com respeito ao sítio central, localizado nas coordenadas $(L/2, L/2)$. Nós temos sempre partido da cópia A com todos os spins $S_i^A = 1$ ($\forall i$); portanto, esta cópia foi deixada evoluir para o equilíbrio por t_{eq} passos de Monte Carlo, após isto, a segunda cópia (cópia B) foi criada. No caso da evolução do tipo e_7 , nós temos atribuído pequenos números positivos para a quantidade adimensional $[H/(k_B T)]$; para achar seu valor apropriado, esta quantidade foi sucessivamente diminuída, de tal modo a minimizar a dependência da escolha particular dos campos magnéticos em nossos resultados, levando em conta as

barras de erros.

Nas presentes simulações, nós temos considerado $[H/(k_B T)] = 0.0001$. Para a evolução de equilíbrio, nós verificamos que $t_{\text{eq}} = 1 \times 10^4$ ($L = 50$) e $t_{\text{eq}} = 5 \times 10^4$ ($L = 100$) passos de monte carlo foram suficientes para as condições de equilíbrio descrito acima, isto é, pequenas flutuações na magnetização e na energia. Quando usadas as evoluções e_1, \dots, e_6 , as médias térmicas foram desenvolvidas sob tempos $t_{\text{av}} = 2.4 \times 10^5$ ($L = 50$) e $t_{\text{av}} = 2.4 \times 10^6$ ($L = 100$) passos de monte carlo, visto que no cálculo dos parâmetros de ordem [evolução temporal e_7] tempos menores foram necessários, isto é, $t_{\text{av}} = 1.5 \times 10^4$ ($L = 50$) e $t_{\text{av}} = 3 \times 10^5$ ($L = 100$) passos de monte de carlo. Para reduzir os possíveis efeitos de correlações no tempo, nós somente consideramos, em nossa médias temporais, dados em cada intervalo temporal de 3 passos de monte carlo. Portanto, cada média temporal consiste em uma média sob $t_{\text{av}}/3$ medidas.

É importante salientar que, devido a grandes flutuações, os tempos t_{av} considerados aqui são muito maiores do que aqueles usados em modelos ferromagnéticos mais simples [56, 72, 98]. Em adição a isto, para melhorar as estatísticas, como também para reduzir possíveis dependências em seqüências de números aleatórios, cada simulação foi repetida para M amostras diferentes. Para o tamanho linear $L = 50$ consideramos $M = 50$ (para as evoluções temporais e_1, \dots, e_6) e $M = 20$ (evolução temporal e_7), visto que no caso $L = 100$ usamos $M = 25$ (evoluções temporais e_1, \dots, e_6) e $M = 20$ (evolução temporal e_7).

Deve ser mencionado que apesar da a temperatura crítica do presente modelo não ser conhecida exatamente, existem estimativas precisas para ela; em termos da variável $u = \exp[-J/(k_B T)]$, uma abordagem de matriz de transferência resulta no valor $u_C \approx 0.554066$ (Ref. [109]), e a partir de uma extensiva expansão em séries a baixas-temperaturas até a 79^o ordem, $u_C = 0.554065(5)$ (Ref. [108]). Baseado nestes resultados, na análise a seguir expressaremos nossos resultados em termos da estimativa aproximada para a temperatura crítica,

$$u_C = 0.554065; \quad \Rightarrow \frac{k_B T_C}{J} = 1.693556\dots \quad (5.43)$$

Na figura 5.2 apresentamos a função de correlação $C^{(11)}(r)$ versus r para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$. Neste caso, nosso critério para localizar a temperatura crítica (associada com o tamanho finito do sistema considerado) consiste em procurar pela razão de temperatura T/T_C em que a função $C^{(11)}(r)$ apresenta decaimento mais lento com a distância r . Por motivo de clareza, na figura 5.2 apresentamos somente as funções de correlação associadas com quatro razões diferentes T/T_C , incluindo a de decaimento mais lento, apesar de termos investigado outros valores de temperatura também (de fato, nós analisamos outras temperaturas ao redor da criticalidade por considerar incrementos de 0.001 em T/T_C). O comportamento de lei de potência

$$C^{(11)}(r) \sim r^{-\eta} \quad (r \rightarrow \infty), \quad (5.44)$$

é verificado no “inset” da figura 5.2, para a razão de temperatura $T/T_C = 0.999$, com o associado expoente crítico, $\eta = 0.2507 \pm 0.0025$. É importante lembrar que, segundo as hipóteses de escala, os expoentes críticos de um determinado modelo não devem depender de seus detalhes microscópico, mas sim de propriedades globais como a dimensão da rede e a simetria do parâmetro de ordem; portanto os modelos spin-1 e spin-1/2 em redes de mesma dimensão devem apresentar o mesmo conjunto de expoentes críticos.

A presente estimativa está em concordância com o bem conhecido resultado exato para o modelo spin-1/2 em uma rede quadrada, isto é, $\eta = 1/4$. Apesar do pequeno tamanho de rede considerado, a temperatura associada com a função de correlação de decaimento mais lento apresenta uma relativa discrepância de 0.001 com respeito a temperatura crítica da equação (5.43); esta discrepância deve ser reduzida para tamanhos de rede maior. Esta tendência foi confirmada através da computação da função de correlação $C^{(11)}(r)$ para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, como será discutido abaixo.

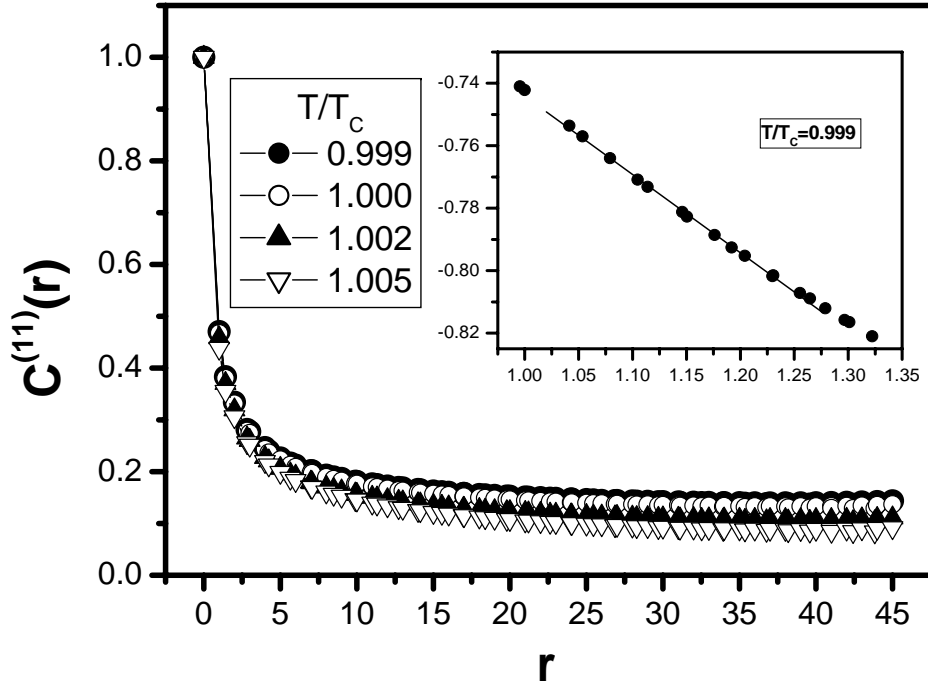


Figura 5.2: A função de correlação $C^{(11)}(r)$ versus r (rede quadrada de tamanho linear $L = 100$), para razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. O decaimento mais lento foi encontrado para $T/T_C = 0.999$, caso em que o gráfico de $\log_{10}[C^{(1)}(r)]$ versus $\log_{10} r$ está apresentado no “inset”, conduzindo à estimativa $\eta = 0.2507 \pm 0.0025$.

Na figura 5.3 exibimos a magnetização m versus T/T_C , para a rede quadrada de tamanho linear $L = 100$, obtida ao usarmos a evolução e_7 . O gráfico log-log no “inset” fornece o associado expoente crítico, $\beta = 0.1249 \pm 0.0003$, com a temperatura crítica da equação (5.43); neste caso, a temperatura crítica da equação (5.3) leva ao melhor ajuste linear em tal gráfico log-log. Novamente, a presente estimativa do expoente crítico está em concordância com a hipótese de universalidade, quando comparada com o bem conhecido resultado exato para o modelo Ising de spin 1/2 em uma rede quadrada, isto é, $\beta = 1/8$. É importante mencionar que resultados similares poderiam também ser obtidos para a magnetização, usando as evoluções temporais e_1, \dots, e_6 , embora um esforço computacional maior deva ser exigido para obter a curva da magnetização para tal grande intervalo de temperaturas (conforme referência [72]). Apesar do tamanho da

rede razoavelmente pequeno considerado, observa-se na figura 5.3 uma curva da magnetização que é essencialmente caracterizada por uma quase ausência de flutuações – mesmo próximo da criticalidade – com fracos efeitos de tamanho finito; isto representa uma das grandes vantagens da presentes simulação PD. De fato, as estimativas do expoente crítico para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$ (a partir das figuras 5.2 e 5.3) coincidem, dentro das barras de erros, com aqueles obtidos através da técnica PD para o tamanho $L = 50$. Estes resultados sugerem que o tamanho linear $L = 100$ é suficiente, ao menos no tocante à técnica PD, para estimativas confiáveis do expoente crítico. Combinando os resultados da função de correlação $C^{(11)}(r)$ com aqueles da magnetização, pode-se calcular um valor médio para a temperatura crítica; fornecendo o valor médio, $(k_B T_C / J) = 1.692709 \pm 0.000847$, isto é, $u_C = 0.553901 \pm 0.000164$, em concordância com os resultados da equação (5.43), dentro das barras de erros.

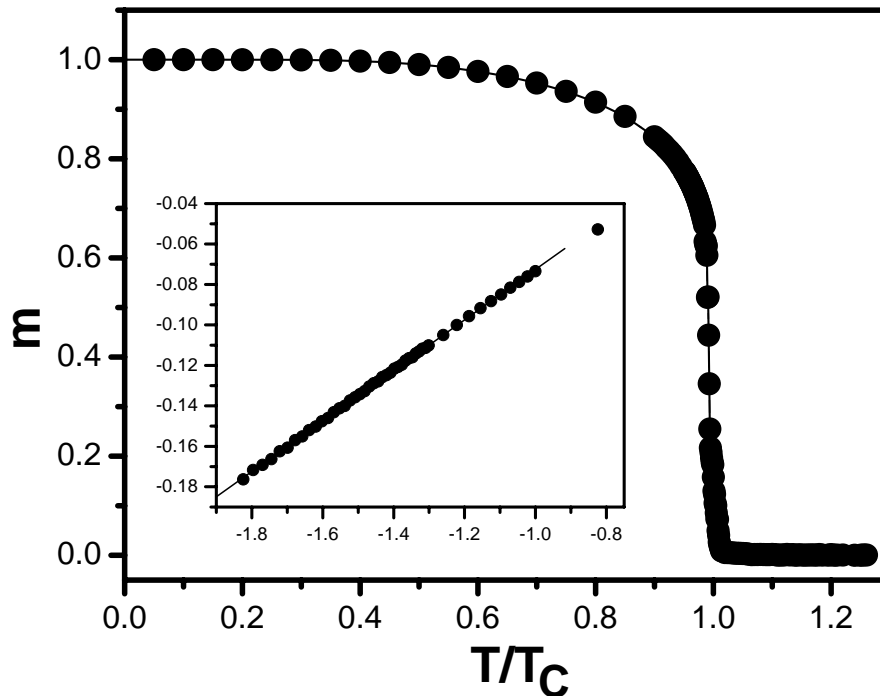


Figura 5.3: A magnetização m versus T/T_C para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 100$. O inset mostra o gráfico de $\log_{10}(m)$ versus $\log_{10}(1 - T/T_C)$, conduzindo a estimativa $\beta = 0.1249 \pm 0.0003$.

Nós agora ilustramos a eficiência do presente método quando comparado com as simulações padrões de MC. Na figura 5.4 verificamos o comportamento de lei de potência da equação (5.44) apresentando os gráficos da função de correlação $C^{(11)}(r)$ versus r , em escala logarítmica, com os dados obtidos a partir de uma simulação de MC e do presente procedimento de PD. O dado exibido corresponde, em cada caso, ao decaimento mais lento da função de correlação $C^{(11)}(r)$, encontrado a partir de uma varredura em T/T_C ao redor do aproximado valor da equação (5.43) com incrementos de 0.001, como mencionado acima, e usando os mesmos parâmetros de simulação para cada tamanho linear L (isto é, t_{eq} e t_{av}). Na figura 5.4(a), nós comparamos o resultado de uma simulação padrão de MC com aquele da técnica PD, para uma rede de tamanho linear $L = 50$; nota-se uma significativa redução de efeitos de tamanho finito na última abordagem, com respeito à primeira, através das seguintes características:

(i) A razão T/T_C , associada com o decaimento mais lento da função de correlação $C^{(11)}(r)$, está muito próxima do aproximado valor da equação (5.43) na técnica PD [$(T/T_C) = 0.995$], do que no método MC [$(T/T_C) = 0.990$];

(ii) O ajuste linear, obtido no gráfico log-log do resultado PD é mais confiável, no sentido que ele cobre um maior alcance de valores de r . Porém, se restringirmos a análise, em cada caso, para aqueles conjuntos de pontos associados com os melhores ajustes lineares, obtém-se essencialmente as mesmas estimativas (dentro das barras de erros) para o expoente η em ambas as técnicas, isto é, $\eta = 0.2429 \pm 0.0075$ (ajuste linear considerando sete pontos a partir do procedimento de MC) e $\eta = 0.2505 \pm 0.0008$ (ajuste linear com onze pontos a partir do método PD), estando ambos em concordância com o resultado exato para o modelo Ising spin-1/2 em uma rede quadrada.

Para valores maiores de r , os efeitos de tamanho finito tornam-se pronunciados, como usual, conduzindo a pontos fora do regime linear; lembrando que o comportamento de lei de potência da equação (5.44) é esperado valer no limite $r \rightarrow \infty$, nota-se que o regime linear na figura 5.4(a) ocorre tipicamente para $1 < r < 6$ ($4 < r < 12$) na abordagem MC

(PD). Portanto, para este caso, os efeitos de tamanho finito são mais fracos na técnica PD, conduzindo essencialmente a um aumento por um fator de dois nos valores de r que fitam dentro do comportamento de lei de potência da equação 5.44.

Na figura 5.4(b), nós exibimos os resultados PD para os dois tamanhos lineares analisados, a saber, $L = 50$ e $L = 100$. Observa-se que este método produz dados para o tamanho menor que são comparáveis àqueles de tamanho maior, mostrando a eficiência da técnica PD, no sentido que podemos obter estimativas precisas de expoente crítico a partir de redes de tamanhos pequenos; as duas estimativas para o expoente η , da figura 5.4(b) coincidem dentro das barras de erros. Porém, o alcance de validade do comportamento de lei de potência, associado com o ajuste linear da figura 5.4(b), ocorre para valores maiores de r no caso $L = 100$ (tipicamente para $7 < r < 20$), conforme é esperado. A redução de efeitos de tamanho finito foi verificada também na curva da magnetização, onde observa-se uma curva suave ao redor da criticalidade, seguida pela bem conhecida cauda (caracterizada por $m > 0$ para $T > T_C$) dentro do método MC, enquanto na abordagem PD, encontra-se uma curva aguda ao redor de T_C , como mostrada na figura 5.3.

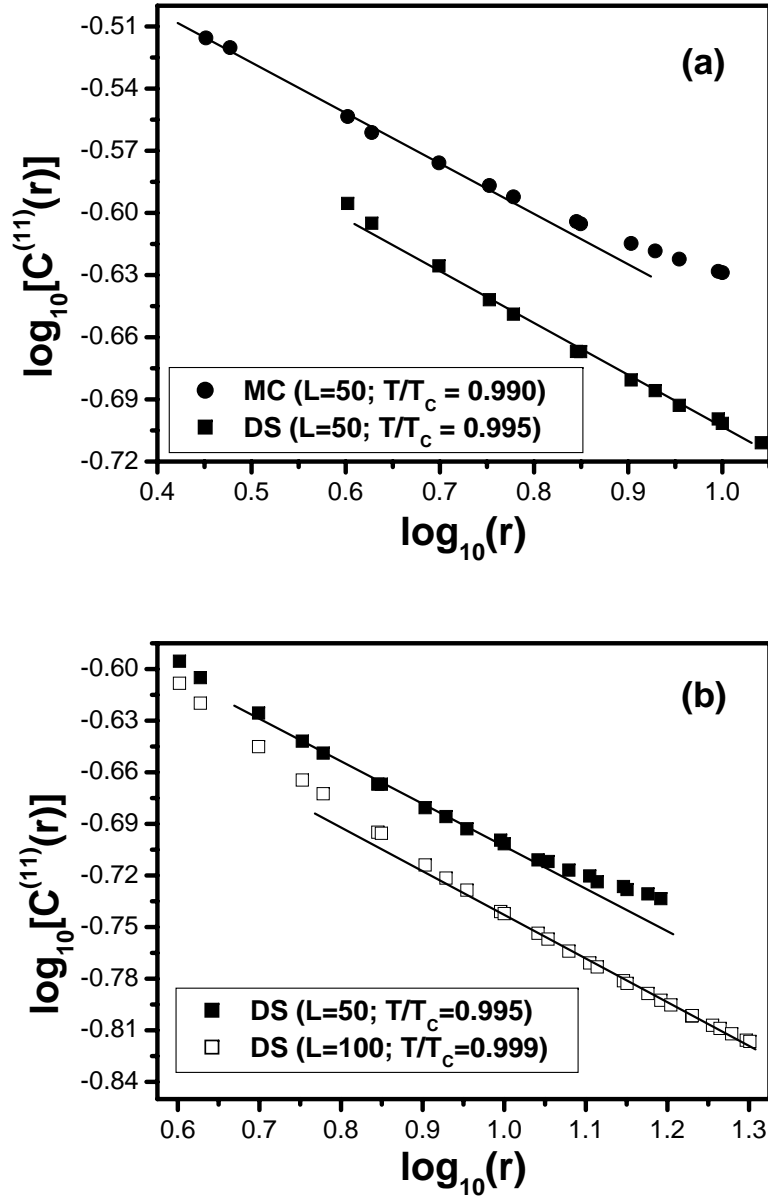


Figura 5.4: Ajustes lineares para a computação dos expoentes η , associados com as funções de correlação $C^{(11)}(r)$. (a) Os dados obtidos por simulações padrões de Monte Carlo (círculos pretos) e a presente abordagem de propagação de danos (quadrados pretos), para uma rede quadrada de tamanho linear $L = 50$, são comparados. Vemos que os efeitos de tamanho finito são reduzidos no último procedimento. (b) Dados produzidos pela presente abordagem (PD) para tamanhos $L = 50$ (quadrados pretos) e $L = 100$ (quadrados vazios).

Embora não sejam relevantes para o presente modelo, as funções de correlação de ordem superior e o parâmetro de polarização [definidas nas equações (5.18) e (5.19), respectivamente] podem também ser computados dentro da presente abordagem. Usando as evoluções temporais e_1, \dots, e_6 , nós calculamos a função de correlação $C^{(22)}(r)$ e o parâmetro polarização, para um tamanho linear $L = 100$, como exibido na figura 5.5. Para temperaturas típicas ao redor de T_C , a função de correlação $C^{(22)}(r)$ apresenta um comportamento trivial para este modelo, isto é, $C^{(22)}(r) = 0$, para $r > 0$, refletindo a ausência de termos quadrados ($L = D = 0$) no Hamiltoniano considerado na presente simulação. No que diz respeito à polarização, obtém-se um comportamento suave ao redor de T_C , sugerindo que não há nenhuma transição de fase associado com este parâmetro. Nota-se que a polarização aproxima-se de seu esperado valor assintótico para temperaturas suficientemente altas, isto é, $p = 2/3$, já que neste limite as variáveis de spins devem tornar-se igualmente distribuídas por seus três possíveis estados, $S_i = \pm 1, 0$.

Embora as quantidades apresentadas na figura 5.5 não tragam qualquer informação física para o presente modelo, elas são relevantes para outros modelos spin-1 ainda controversos na literatura, como os modelos Blume-Capel ($L = 0; D \neq 0$) [104, 105] e Blume-Emery-Griffithis ($L \neq 0; D \neq 0$) [100] e podem ser computadas também dentro da presente abordagem.

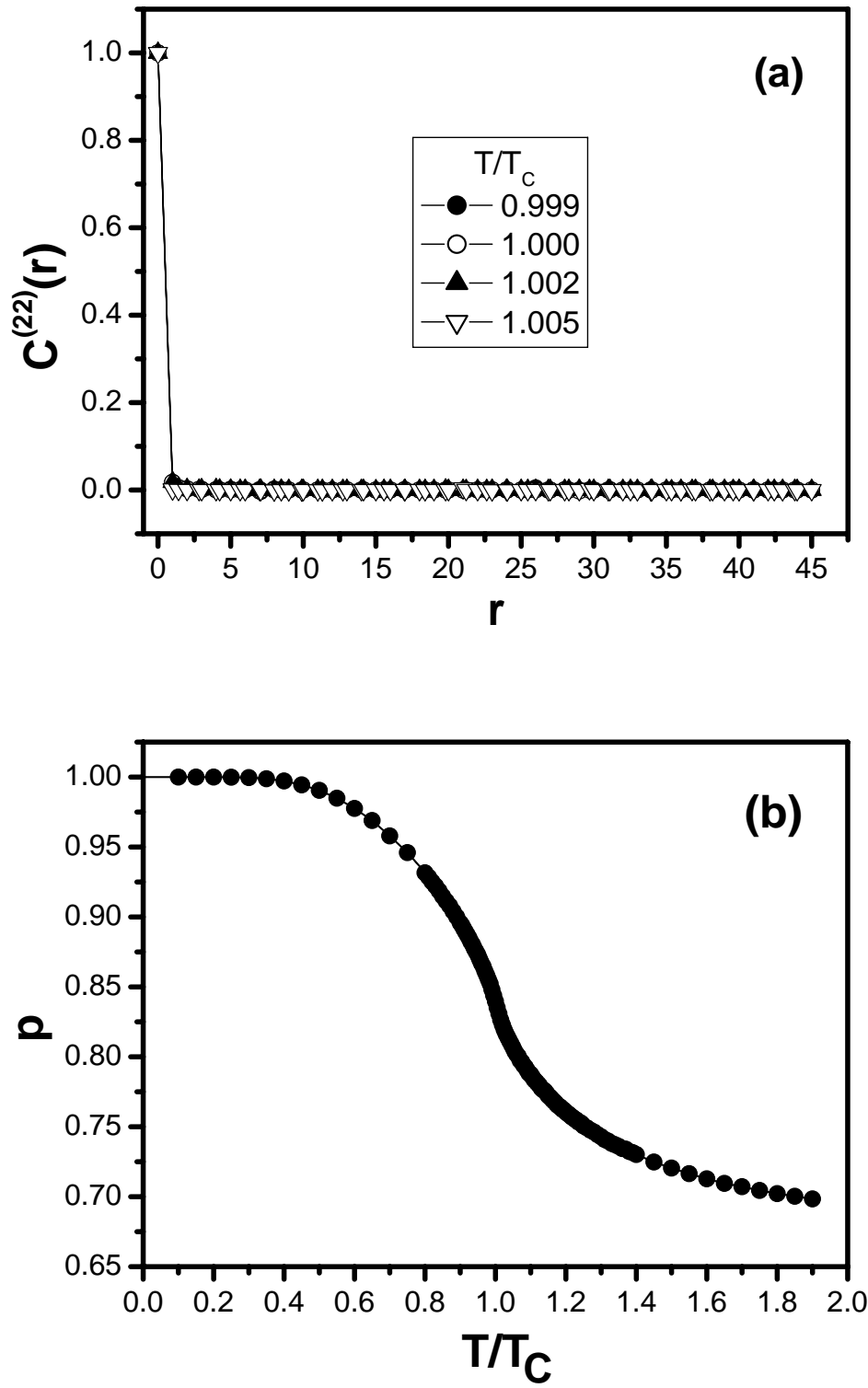


Figura 5.5: (a) A função de correlação $C^{(22)}(r)$ versus r , para razões de temperatura T/T_C , próximo da criticalidade. (b) A polarização p versus T/T_C .

5.4 Conclusão

Estudamos o modelo de Ising spin-1 de interação de primeiros vizinhos através da técnica de propagação de danos. Relações exatas envolvendo quantidades computáveis através de simulações de propagação de danos e propriedades termodinâmicas foram derivadas para o modelo de spin-1 geral que cobre vários casos relevantes e controversos da literatura. Estas relações valem para qualquer procedimento dinâmico ergódico aplicado a sistemas translacionalmente invariantes.

A implementação do método foi ilustrada executando simulações de propagação de danos para o modelo Ising spin-1 ferromagnético na rede quadrada. Sua eficiência foi verificada pela computação da função de correlação de dois-spin e a magnetização, conduzindo a estimativas precisas dos associados expoentes críticos, apesar de empregarmos redes de tamanhos pequenos. Obtivemos as estimativas,

$$\beta = 0.1249 \pm 0.0003; \quad \eta = 0.2507 \pm 0.0025, \quad (5.45)$$

resultando na mesma classe de universalidade do modelo de Ising spin-1/2 em redes bidimensionais. Tais resultados confirmam as hipóteses de universalidades para este modelo, que declara que os expoentes críticos devem depender somente das propriedades globais do modelo, como a dimensão da rede e a simetria do parâmetro de ordem. Até onde sabemos, a função de correlação de dois-spins não tinha sido ainda calculada numericamente na literatura para o presente modelo, e assim ela foi estimada precisamente aqui, pela primeira vez, dentro das simulações de propagação de danos. Combinando os resultados obtidos a partir da função de correlação e magnetização, estimamos a temperatura crítica,

$$\frac{k_B T_C}{J} = 1.692709 \pm 0.000847; \quad \Rightarrow \quad u_C = \exp[-J/(k_B T_C)] = 0.553901 \pm 0.000164, \quad (5.46)$$

que concorda, dentro das barras de erros, com a temperatura estimada a partir de uma

extensiva expansão em séries a baixa temperatura até a 79^o ordem (Ref.[108]). Estes resultados reforçam a eficiência do presente método, que tem sido também estabelecida em outros modelos de spins [56, 72, 98], conduzindo a uma significativa redução de efeitos de tamanho finito, quando comparados com aqueles produzidos por simulações padrões de Monte Carlo.

As presentes relações exatas podem ser implementadas também em simulações numéricas de propagação de danos em outros modelos spin-1 de interação de primeiros vizinhos translacionalmente invariantes, abrindo a possibilidade de investigar modelos mais complicados e controversos através desta técnica: (i) modelos ferromagnéticos em redes hipercúbicas ($d > 2$), para testar as hipóteses de universalidade; (ii) modelos caracterizados por termos do tipo spin quadrado no Hamiltoniano, isto é, os modelos Blume-Capel [104, 105] e Blume-Emery-Griffiths [100], para os quais existem várias controvérsias concernentes aos seus diagramas de fases em redes com d dimensão.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho, utilizamos e generalizamos uma abordagem que conecta, por meio de relações analíticas exatas, certas combinações de danos e propriedades termodinâmicas de modelos de spins interagentes. Investigamos numericamente sua aplicação em diferentes generalizações do modelo de Ising, com o propósito de reforçar a eficiência do presente método, que tem provado ser bastante preciso em suas estimativas dos expoentes e parâmetros críticos e também, por apresentar uma significativa redução de efeitos de tamanho finito, em seus resultados, quando comparado com aqueles produzidos por simulações de Monte Carlo convencionais.

Iniciamos com breves introduções às transições de fase, com ênfase no modelo de Ising com spin-1/2 e às simulações de Monte Carlo (Capítulo 1) e em seguida com uma exposição das principais características e resultados conhecidos relacionados ao método de propagação de danos (Capítulo 2). Estas seções tiveram objetivos essencialmente didáticos, para propiciar uma leitura compreensível, já que os principais aspectos dessas seções serviram de embasamento teórico para as implementações que se seguem nos próximos capítulos.

A metodologia aqui utilizada para obter propriedades de equilíbrio a partir de simulações numéricas de propagação de danos seguiu a abordagem desenvolvida anteriormente para o modelo de Ising, por Coniglio e colaboradores [56] que, além introduzir

um novo procedimento numérico para estimar quantidades como parâmetro de ordem e funções de correlação spin-spin, apresentou resultados quantitativos extremamente precisos, notadamente com uma redução apreciável das flutuações críticas.

Os capítulos 3 e 4 foram dedicados à apresentação da metodologia e dos resultados obtidos para os sistemas ferromagnéticos, de Potts q -estados e Ashkin-Teller, ambos na rede quadrada. No que diz respeito ao modelo de Potts, a eficiência do método foi ilustrada através de estimativas precisas dos expoentes β e η , associados, respectivamente, com a magnetização e a função de correlação, para $q = 2, 3$, e 4 . Para o modelo Ashkin-Teller, a análise de tais quantidades foram restritas à linha de Baxter, bem conhecida por seus expoentes críticos variando continuamente; o método forneceu estimativas precisas, apesar dos tamanhos de rede considerados pequenos, fornecendo concordâncias dos expoentes críticos computados com os correspondentes resultados exatos, dentro de quatro casas decimais. Neste último caso, além de uma significativa redução de efeitos de tamanho finito, com relação às simulações padrões de Monte Carlo, a bem conhecida quebra de universalidade ao longo da linha de Baxter foi detectada, com os resultados sugerindo variações suaves e contínuas dos expoentes críticos, aspecto de obtenção não trivial dentro das simulações de Monte Carlo.

No Capítulo 5, investigamos o modelo de Ising com spin-1 através da abordagem analítica de propagação de danos. Além de derivar relações exatas entre quantidades computáveis através de simulações do tipo propagação de danos e propriedades termodinâmicas, ilustramos o método por aplicá-lo ao modelo de Ising com spin-1, ferromagnético, com interação entre primeiros vizinhos na rede quadrada, para testar as hipóteses de universalidade do presente modelo. Propriedades térmicas relevantes do modelo, a saber, a temperatura crítica, as funções de correlação e os parâmetros de ordem também foram corretamente estimadas.

Salientamos também, que as relações que obtivemos (no último capítulo), conectando os parâmetros de ordem e as funções de correlação do modelo com certas funções obtidas

a partir de diferentes tipos de danos, são exatas e válidas para qualquer rede homogênea e também independem da dinâmica empregada para evoluir o sistema (desde que ergódica). Tal generalidade abre um amplo leque futuro de aplicações (algumas em andamento) que originarão trabalhos futuros. Entre as extensões a serem feitas, destacamos:

(i) A obtenção do diagrama de fases do modelo Ashkin-Teller de 3-cores em duas e três dimensões, incluindo uma extensão do formalismo para permitir a aplicação de campo magnético externo;

(ii) O mapeamento das principais características do modelo de Ising com spin-1 com os termos adicionais de interação biquadrática e de anisotropia.

(iii) Na área de propagação de danos, estamos investigando presentemente, via simulação de Monte-Carlo, o aparecimento de uma transição a temperatura nula do tipo Kosterlitz-Thouless, no modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular com campo externo uniforme.

Referências Bibliográficas

- [1] Um breve resumo desse desenvolvimento histórico pode ser visto em R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, Ontario, Canadá, 1986).
- [2] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, London, 1980).
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley, New York, 2nd edition, 1987).
- [4] J. A. Gonzalo, *Effective Field Approach to Phase Transitions and Some Applications to Ferroelectric* (World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 35, 1990).
- [5] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, London, 1971).
- [6] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, (Oxford University Press, 1994).
- [7] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group* (Oxford University Press, New York, 1992).
- [8] G. S. Rushbrooke, *J. Chem. Phys.* **39**, 842 (1963).
- [9] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Letters* **14**, 623 (1965).
- [10] M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **180**, 594 (1969).
- [11] B. D. Josephson, *Proc. Phys. Soc.* **92**, 269 (1967).
- [12] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13**, 253 (1945).

- [13] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, 1975).
- [14] E. Z. Ising, Physik **31**, 253 (1925).
- [15] Um apanhado histórico desse desenvolvimento pode ser visto em S. G. Brush, Phys. Rev. Mod. **39**, 883 (1967).
- [16] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [17] R. B. Potts, Proc. Camb. Philos. Soc., **48**, 106 (1952).
- [18] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and The Renormalization Group* (Addison-Wesley Publishig Company, Frontiers in Physic, Vol. **85**).
- [19] H. Gould and J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods*, Second Edition, (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1996).
- [20] K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988).
- [21] M. E. J. Newman. and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, New York, 2001).
- [22] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [23] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys., **21**, 1087 (1953).
- [24] Para uma breve revisão ver: A. M. Mariz, H. J. Herrmann and L. de Arcangelis, J. Stat. Phys. **59**, 1043 (1990).
- [25] S. A. Kauffman, J. Theor. Biol. **22**, 437 (1969).
- [26] M. Creutz, Ann. Phys. (N.Y.) **167**, 62 (1986).
- [27] R. W. Hamming, Bell Syst. Tech. J. **27**, 147 (1950).

- [28] Para uma Revisão ver N. Jan and L. de Arcangelis, in *Annual Review of Computational Physics*, edited by Stauffer D. (World Scientific, Singapore, 1994), Vol. **1**.
- [29] H. E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2326 (1987).
- [30] U. M. S. Costa, *J. Phys. A* **20**, L583 (1987).
- [31] Muller - H. Krumbhaar, *Phys. Lett. A* **50**, 77 (1975); D. W. Heermann and D. Stauffer, *Z. Phys. B* **44**, 339 (1981).
- [32] G. Le Caër, *J. Phys. A* **22**, L647 (1989).
- [33] P. Grassberger, *J. Phys. A* **28**, L67 (1995).
- [34] F. A. Tamarit and L. da Silva, *J. Phys. A* **27**, L809 (1994).
- [35] A. U. Neumann and B. Derrida, *J. Phys. (Paris)* **49**, 1647 (1988).
- [36] A. M. Mariz, H. J. Herrmann and L. de Arcangelis, *J. Stat. Phys.* **59**, 1043 (1990).
- [37] A. M. Mariz and H. J. Herrmann, *J. Phys. A* **22**, L1081 (1989).
- [38] R. M. C. de Almeida, *J. Phys. I (France)* **3**, 951 (1993).
- [39] F. D. Nobre, A. M. Mariz, and E. S. Sousa, *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 13 (1992).
- [40] F. D. Nobre, A. M. Mariz, E. S. Sousa and F. A. da Costa, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 2047 (1993).
- [41] E. S. Sousa, Tese de Doutorado, DFTE/UFRN (1997).
- [42] B. Derrida and G. Weisbuch, *Europhys. Lett.* **4**, 657 (1987).
- [43] M. N. Barber and B. Derrida, *J. Stat. Phys.* **51**, 877 (1988).
- [44] L. de Arcangelis, A. Coniglio and H. J. Herrmann, *Europhys. Lett.* **9**, 749 (1989).
- [45] L. de Arcangelis, H. J. Herrmann and A. Coniglio, *J. Phys. A* **22**, 4659 (1989).
- [46] H. R. Cruz, U. M. S. Costa and E. M. F. Curado, *J. Phys. A* **22**, L651 (1989).

- [47] B. Derrida, J. Phys. A **20**, L721 (1987).
- [48] R. M. C. de Almeida, L. Bernardi and I. A. Campbell, J. Phys. I (Paris) **5**, 355 (1995).
- [49] O. Golinelli and B. Derrida, J. Phys. A **22**, L939 (1989).
- [50] J. Chiu and S. Teitel, J. Phys. A **23**, L891 (1990).
- [51] Y. Leroyer and K. Roudi, J. Phys. A **24**, 1931 (1991).
- [52] E. N. Miranda and N. Parga, J. Phys. A **24**, 1059 (1991).
- [53] A. A. Júnior and F. D. Nobre, Physica A **243**, 58 (1997).
- [54] F. D. Nobre and A. A. Júnior, Phys. Lett. A **288**, 271 (2001).
- [55] E. S. Sousa, A. M. Mariz, F. D. Nobre and U. M. S. Costa, Physica A **241**, 469 (1997)
- [56] A. Coniglio, L. de Arcangelis, H. J. Herrmann and N. Jan, Europhys. Lett. **8**, 315 (1987).
- [57] H. J. Herrmann, Physica A **168**, 516 (1990).
- [58] H. J. Herrmann, in: *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics*, edited by D. P. Landau, K. K. Mon and H. B. Schuttler (Springer, Berlin, 1990).
- [59] L. de Arcangelis, H. J. Herrmann and A. Coniglio, J. Phys. A **23**, L265 (1990).
- [60] P. H. Poole, N. Jan, J. Phys. A **23**, L453 (1990).
- [61] A. M. Mariz, J. Phys. A **23**, 979 (1990).
- [62] A. M. Mariz, A. M. de Sousa and C. Tsallis, J. Phys. A **26**, L1007 (1993).
- [63] A. M. Mariz, E. S. de Sousa and F. D. Nobre, Physica A **257**, 429 (1998).
- [64] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).

- [65] R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6**, L445 (1973).
- [66] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [67] C. Tsallis and A. C. N. de Magalhães, *Phys. Rep.* **268**, 305 (1996).
- [68] M. F. de A. Bibiano, F. G. Brady Moreira and A. M. Mariz, *Phys. Rev. E* **55**, 1448 (1997).
- [69] L. da Silva, F. A. Tamarit, and A. C. N. Magalhães, *J. Phys. A* **30**, 2329 (1997).
- [70] E. M. de Sousa Luz, M. P. Almeida, U. M. S. Costa, and M. L. Lyra, *Physica A* **282**, 176 (2000).
- [71] J. A. Redinz, F. A. Tamarit and A. C. N. Magalhães, *Physica A* **293**, 508 (2001).
- [72] A. S. Anjos, D. A. Moreira, A. M. Mariz and F. D. Nobre, *Phys. Rev. E*, **74**, 16703 (2006).
- [73] J. Ashkin and E. Teller, *Phys. Rev.* **64**, 178 (1943).
- [74] H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
- [75] C. Fan, *Phys. Lett. A* **39**, 136 (1972).
- [76] P. Bak, P. Kleban, W. N. Unertl, J. Ochab, G. Akinci, N. C. Bartelt and T. L. Einstein, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1539 (1985).
- [77] F. C. Alcaraz and R. Koberle, *J. Phys. A* **13**, L153 (1980).
- [78] C. Fan, *Phys. Rev. B* **6**, 902 (1972).
- [79] F. J. Wegner, *J. Phys. C* **5**, L131 (1972).
- [80] R. J. Baxter, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 832 (1971).
- [81] F. W. Wu and K. Y. Lin, *J. Phys. C* **7**, L181 (1974).
- [82] F. W. Wu, *Phys. Rev. B* **4**, 2312 (1971).
- [83] H. J. F. Knops, *J. Physica A* **8**, 1508 (1975).

- [84] I. G. Enting, J. Phys. A **8**, 1681 (1975).
- [85] M. P. M. den Nijs, J. Phys. A **12**, 1857 (1979).
- [86] M. Kohmoto, M. P. M. den Nijs, and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **24**, 5229 (1975).
- [87] J. R. Drugowich de Felício, and R. Koberle, Phys. Rev. B **25**, 511 (1982).
- [88] J. R. Drugowich de Felício, R. Koberle, and L. N. de Oliveira, J. Phys. C **15**, L773 (1982).
- [89] A. M. Mariz, C. Tsallis, and P. Fulco, Phys. Rev. B **32**, 6055 (1985).
- [90] S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. E **48**, 4080 (1993).
- [91] B. Nienhuis, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1987), Vol. 11.
- [92] E. Domany and E. K. Riedel, Phys. Rev. B **19**, 5817 (1979).
- [93] R. V. Ditzian, J. R. Banavar, G. S. Grest and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **22**, 2542 (1980).
- [94] G. Kamieniarz and P. Kozłowski, Phys. Rev. E **55**, 3724 (1997).
- [95] F. A. da Costa, M. J. de Oliveira and S. R. Salinas, Phys. Rev. B **36** 7163 (1987).
- [96] S. Bekhechi, A. Benyoussef, A. Elkenz, B. Ettaki, M. Loulidi, Physica A **264**, 503 (1999).
- [97] M. Badehdah, S. Bekhechi, A. Benyoussef, M. Touzani, Physica B **291**, 394 (2000).
- [98] A. S. Anjos, D. A. Moreira, A. M. Mariz, F. D. Nobre and F. A. da Costa, Phys. Rev. E, **76**, 41137 (2007).
- [99] A. S. Anjos, Dissertação de Mestrado, DFTE/UFRN (2002).
- [100] M. B. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, Phys. Rev. A, **4**, 1071 (1971).
- [101] J. Lajzerowicz and J. Sivardiere, Phys. Rev. A **11**, 2079 (1975); J. Sivardiere and J. Lajzerowicz, Phys. Rev. A **11**, 2090 (1975)

- [102] M. Shick and W. H. Shih, Phys. Rev. B **34**, 1797 (1986).
- [103] K. E. Newman and J. D. Dow, Phys. Rev. B **27**, 7495 (1983)
- [104] M. B. Blume, Phys. Rev. B **141**, 517 (1966).
- [105] H. W. Capel, Physica (Utrecht) **32**, 966 (1966).
- [106] W. Hoston and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett **67**, 1027 (1991).
- [107] A. N. Berker and M. Wortis, Phys. Rev. B, **14**, 4946 (1976).
- [108] I. G. Enting, A. J. Guttmann, and I. Jensen, J. Phys. A **27**, 6987 (1994).
- [109] A. Lipowski and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan, **61**, 4356 (1992).
- [110] Y. L. Wang, F. Lee and J. D. Kimel, Phys. Rev. B **36**, 8945 (1987).
- [111] K. G. Chakraborty, Phys. Rev. B **29**, 1454 (1984).
- [112] A. S. Anjos, A. M. Mariz, F. D. Nobre and I. G. Araujo, Phys. Rev. E, **78**, 031105 (2008).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)