



Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual Paulista

---

---

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT–D.007/2011

Teoria quântica do campo escalar real com autoacoplamento quártico  
– simulações de Monte Carlo na rede com um algoritmo worm

Rafael Reis Leme

Orientador

*Gastão Inácio Krein*

Maio de 2011

Dedico este trabalho à minha esposa e filha, Elaine Emiliano de Moraes e Lenna Rafaela Moraes Leme, por darem um significado muito maior à minha vida.

# Agradecimentos

Agradeço à minha família, por estarem ao meu lado em todas minhas decisões. Em especial, agradeço aos meus pais, Alceu da Silva Leme e Maria Aparecida Santos Reis Leme, e à minha tia Maria das Graças Reis Alves, por terem me ajudado em tudo o que podiam.

Agradeço a toda equipe do Instituto de Física Teórica da UNESP, pois sem este Instituto, não teria condições de realizar este feito. Em especial agradeço ao meu orientador Gastão Inácio Krein, por sua contribuição imprescindível à evolução e conclusão deste trabalho.

Agradeço aos meus amigos, por tornarem esta jornada mais tranquila e divertida. Em especial, agradeço ao meu amigo Victor Hugo Soliz, por sempre estar disposto ao que der e vier.

Agradeço ao Núcleo de Computação Científica (NCC) da UNESP, por disponibilizar seu recurso computacional para a execução dos programas deste trabalho. Em especial agradeço a Gabriel Winckler, por ter me ajudado pessoalmente no aprendizado de utilização do GridUNESP.

Agradeço ao CNPq, pelo apoio financeiro.

"O importante é não parar de questionar."  
(Albert Einstein)

# Resumo

Neste trabalho apresentamos resultados de simulações de Monte Carlo de uma teoria quântica de campos escalar com autointeração  $\varphi^4$  em uma rede (1+1) empregando o recentemente proposto *algoritmo worm*. Em simulações de Monte Carlo, a eficiência de um algoritmo é medida em termos de um expoente dinâmico  $z$ , que se relaciona com o tempo de autocorrelação  $\tau$  entre as medidas de acordo com a relação  $\tau \propto L^z$ , onde  $L$  é o comprimento da rede. O tempo de autocorrelação fornece uma medida para a “memória” do processo de atualização de uma simulação de Monte Carlo. O algoritmo worm possui um  $z$  comparável aos obtidos com os eficientes algoritmos do tipo cluster, entretanto utiliza apenas processos de atualização locais. Apresentamos resultados para observáveis em função dos parâmetros não-renormalizados do modelo  $\lambda$  e  $\mu^2$ . Particular atenção é dedicada ao valor esperado no vácuo  $\langle\varphi(x)\rangle$  e a função de correlação de dois pontos  $\langle\varphi(x)\varphi(x')\rangle$ . Determinamos a linha crítica  $(\lambda_C, \mu_C^2)$  que separa a fase simétrica e com quebra espontânea de simetria e comparamos os resultados com a literatura.

**Palavras Chaves:** Teoria quântica de campos, Transições de fase, Simulações de Monte Carlo, Algoritmo worm

**Áreas do conhecimento:** Física de Partículas e Campos, Mecânica Estatística, Física Computacional

# Abstract

In this work we will present results of Monte Carlo simulations of the  $\varphi^4$  quantum field theory on a  $(1 + 1)$  lattice employing the recently-proposed *worm algorithm*. In Monte Carlo simulations, the efficiency of an algorithm is measured in terms of a dynamical critical exponent  $z$ , that is related with the autocorrelation time  $\tau$  of measurements as  $\tau \propto L^z$ , where  $L$  is the lattice length. The autocorrelation time provides a measure of the “memory” of the Monte Carlo updating process. The worm algorithm has a  $z$  comparable with the ones obtained with the efficient cluster algorithms, but uses local updates only. We present results for observables as functions of the unrenormalized parameters of the theory  $\lambda$  and  $\mu^2$ . Particular attention is devoted to the vacuum expectation value  $\langle\varphi(x)\rangle$  and the two-point correlation function  $\langle\varphi(x)\varphi(x')\rangle$ . We determine the critical line  $(\lambda_C, \mu_C^2)$  that separates the symmetric and spontaneously-broken phases and compare with results of the literature.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Revisão sobre transições de fase e simulações de Monte Carlo</b>	<b>7</b>
2.1	Termodinâmica - revisão de alguns conceitos . . . . .	7
2.2	Transições de fase . . . . .	11
2.2.1	Equação de van der Waals - Expoentes Críticos . . . . .	13
2.3	Simulações de Monte Carlo . . . . .	16
2.3.1	Amostragem por Importância . . . . .	18
2.3.2	Algoritmo de Metropolis . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Algoritmo <i>worm</i> para o modelo de Ising</b>	<b>25</b>
3.1	Empansão em <i>worms</i> . . . . .	25
3.2	Algoritmo <i>worm</i> . . . . .	32
3.2.1	Taxa de Aceitação I . . . . .	33
3.2.2	Observáveis I . . . . .	37
3.2.3	Spin Fantasma . . . . .	39
3.2.4	Taxa de Aceitação II . . . . .	41
3.2.5	Observáveis II . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Campo Escalar Real na Rede</b>	<b>47</b>
4.1	Quantização do Campo Escalar . . . . .	47
4.2	Integral de trajetória na Mecânica Quântica . . . . .	50
4.3	Espaço Euclidiano . . . . .	53
4.4	Discretização do espaço Euclidiano . . . . .	58
4.5	Teoria Quântica de Campos & Mecânica Estatística . . . . .	59
4.6	Algoritmo <i>worm</i> . . . . .	62
4.7	Omissões . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Resultados de Simulações</b>	<b>70</b>
5.1	Modelo de Ising . . . . .	71

5.2	Campo Escalar Real . . . . .	73
<b>6</b>	<b>Conclusões e Perspectivas Futuras</b>	<b>94</b>
<b>A</b>	<b>Equivalência de Ensembles: Microcanônico e Canônico</b>	<b>97</b>
<b>B</b>	<b>Análise de erros</b>	<b>99</b>
B.1	Binning . . . . .	100
B.2	Jackknife . . . . .	100
B.3	Jackknife-Binnig . . . . .	101
	<b>Referências</b>	<b>102</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O formalismo da Teoria Quântica de Campos Relativística permite realizar predições para processos de interação entre elétrons e fótons que concordam com dados experimentais em oito dígitos significativos de precisão [1]. O sucesso da descrição de fenômenos eletromagnéticos por meio da teoria quântica de campos incentivou a extensão do formalismo a outras áreas da física, principalmente às áreas do mundo subatômico. A obtenção de resultados analíticos em uma teoria quântica de campos, no entanto, é muitas vezes impraticável. Em casos especiais, como no caso de vários processos de eletrodinâmica quântica, é possível o emprego da teoria de perturbações, onde o parâmetro de expansão é a constante de acoplamento [2]. Em outras situações, mesmo quando a interação é forte, expansões perturbativas ainda podem ser empregadas, mas a expansão perturbativa se dá em termos de parâmetros adimensionais tipicamente envolvendo a razão da energia (ou momento) do processo em estudo e uma escala intrínseca do problema. Estamos nos referindo particularmente a formalismos como a teoria de perturbação quiral [3]. Obviamente, para que expansões dessa natureza façam sentido, é necessário que os parâmetros de expansão sejam menores que a unidade. Entretanto, métodos perturbativos nem sempre são aplicáveis, como no caso dos proeminentes fenômenos da quebra dinâmica da simetria quiral e do confinamento dos quarks e gluons na cromodinâmica quântica (QCD) [4]. Para tratar situações desta natureza, distinguem-se os métodos de Monte Carlo [5]. Métodos de Monte Carlo são técnicas de cálculo numéricas, baseadas em conceitos estatísticos que procuram simular os possíveis estados do sistema de acordo com uma distribuição de probabilidades que está, no caso de uma teoria quântica de campos, associada à ação da teoria.

Neste trabalho faremos uso de uma particular técnica de Monte Carlo, conhecida como *algoritmo worm*<sup>\*</sup>, para estudar propriedades de uma teoria quântica de campos

---

<sup>\*</sup>A tradução para a língua portuguesa de *worm* é minhoca. No entanto, não nos sentimos confortáveis em usar o termo *algoritmo minhoca* e, na ausência de nome melhor, vamos empregar o termo *algoritmo worm* para a técnica.

relativística envolvendo um campo escalar real  $\varphi(x)$  auto-interagente, do tipo  $\varphi^4(x)$ . Um campo desta natureza descreve excitações (partículas) relativísticas sem spin. Além de possuir interesse intrínseco na física do mundo subatômico e na física de altas energias em geral, por exemplo, como protótipo do campo de Higgs, responsável pela quebra da simetria de calibre nas interações fracas [2], o modelo de um campo escalar autointeragente é muito rico sob um ponto de vista pedagógico, pois ele fornece um bom ponto de partida para o estudo de outros modelos de teoria quântica de campos.

A utilidade de uma teoria de campos envolvendo campos escalares autointeragentes vai além dos propósitos pedagógicos e transcende a física de altas energias. Por exemplo, no modelo de Ginzburg-Landau para o fenômeno da supercondutividade [6], a teoria do campo escalar<sup>†</sup> com autointeração  $\varphi^4(x)$  fornece as bases para o entendimento do fenômeno em termos de uma linguagem de transições de fase e fenômenos críticos da Mecânica Estatística [7]. O fenômeno da supercondutividade, descoberto por Onnes em 1911 [8], consiste basicamente no desaparecimento da resistência elétrica de certos materiais quando estes encontram-se abaixo de uma determinada temperatura, chamada de temperatura crítica. Transições de fase semelhantes ocorrem em materiais magnéticos, e são conhecidas como transições de fase de segunda ordem. Para o entendimento de conceitos básicos sobre transições de fase e fenômenos críticos, o modelo de Ising [7] se distingue por sua simplicidade e por servir de laboratório para várias técnicas de simulação numérica. O modelo de Ising fornece uma descrição qualitativa de alguns materiais com propriedades magnéticas, apresentando uma temperatura crítica  $T_C$  onde, para temperaturas acima de  $T_C$  esses materiais apresentam magnetização nula, e para temperaturas abaixo de  $T_C$ , eles apresentam uma magnetização não nula – diz-se que a temperaturas abaixo de  $T_C$  esses materiais adquirem uma magnetização espontânea.

O conceito de magnetização espontânea está relacionado ao fato da existência de magnetização mesmo na ausência de campo magnético externo. A existência de magnetização/supercondutividade para  $T < T_C$  e ausência para  $T > T_C$  estão relacionadas ao conceito de quebra espontânea de simetria no sistema [7]. No modelo de Ginzburg-Landau, a supercondutividade ocorre na fase onde o fluxo de campo magnético possui simetria global  $U(1)$ , as fases simétrica e com quebra de simetria neste modelo distinguem-se respectivamente pelos valores nulo e não nulo assumidos pelo valor absoluto de um campo escalar. No modelo de Ising a magnetização espontânea vem associada com uma fase onde houve a quebra da simetria rotacional. O fenômeno de quebra de simetria desempenha um papel importante em outras áreas

---

<sup>†</sup>Neste caso, o campo é complexo, equivalente a dois campos escalares reais.

da física. Em 2008, Yoichiro Nambu recebeu o prêmio Nobel de Física por estender o conceito de quebra espontânea de simetria da Mecânica Estatística para o mundo subatômico. Em particular, o conceito de quebra espontânea da simetria quiral na QCD, fundamental para o entendimento contemporâneo do papel desempenhado pelo méson  $\pi$  na física das interações fortes, deve-se a Nambu [9]. Entende-se o méson  $\pi$  como sendo um (pseudo) bóson de Goldstone da quebra espontânea da simetria quiral da QCD, o que explica sua pequena massa, frente à escala típica das massas hadrônicas. No modelo padrão das partículas elementares e interações fundamentais, o mecanismo de Higgs [10], responsável por gerar as massas das partículas elementares, envolve o conceito de quebra espontânea de simetria. Por trás deste mecanismo encontra-se um campo escalar complexo, que corresponde ao boson de Higgs. Na linguagem da Mecânica Estatística [7], o estudo de transições de fases faz uso do conceito de parâmetro de ordem. Este é um observável <sup>‡</sup> do sistema cujo valor é nulo em uma das fases e não nulo na outra. No modelo de Ising o parâmetro de ordem é a magnetização.

Na presente dissertação utilizamos o algoritmo worm para estudar a estrutura de fases de uma teoria quântica de campos relativística a temperatura zero de um campo escalar real com auto-interação do tipo  $\varphi^4(x)$ . Especificamente, nossos estudos têm como ponto de partida a ação da teoria em duas dimensões (1+1), a qual possui dois parâmetros,  $\mu_0^2$  e  $\lambda$ :  $\mu_0^2$  multiplica o termo  $\varphi^2(x)$ , e  $\lambda$  multiplica o termo de autointeração  $\varphi^4(x)$  na Lagrangeana do modelo. Estes definem o espaço de parâmetros do modelo, o qual, como será visto com detalhe, divide-se em duas regiões, simétrica e com quebra de simetria. Na fase simétrica, o potencial clássico possui um único ponto de mínimo e o valor esperado do campo no vácuo,  $\langle\varphi\rangle$ , é nulo; já na fase com quebra de simetria, o potencial efetivo é do tipo “duplo poço”, possuindo assim dois pontos de mínimo com  $\langle\varphi\rangle \neq 0$ . Este comportamento descreve uma transição de fase, assim como no modelo de Ising. Para a teoria do campo escalar as fases são caracterizadas por uma linha crítica definida pelos parâmetros  $(\lambda, \mu_0^2)$ , ou seja, para cada valor de  $\lambda$  teremos um valor crítico de  $\mu_0^2$ . Neste trabalho iremos encontrar pontos críticos  $(\lambda_C, \mu_{0C}^2)$  de modo a construir a linha crítica que separa a região simétrica da com quebra de simetria. Para encontrar estes pontos críticos olharemos basicamente para os comportamentos do campo valor esperado na vácuo  $\langle\varphi(\mu_0^2)\rangle$  e o calor específico para valores fixos de  $\lambda$ .

Num método de Monte Carlo em geral, fazemos o uso de algoritmos de simulações. Estes consistem basicamente de um método de atualização de configurações.

---

<sup>‡</sup>Na QCD, o loop de Polyakov [4] é usado como sendo um parâmetro de ordem para caracterizar, como função da temperatura, fases em que gluons estão confinados ou desconfinados - mas o loop de Polyakov não é um observável.

Estas configurações correspondem a pontos do espaço de fase, este espaço define os estados acessíveis do sistema. Na Mecânica Estatística, um sistema de muitos graus de liberdade (descritos por exemplo por um campo) em contato com um reservatório térmico sofre flutuações oriundas do contato com este reservatório térmico. Devido a estas flutuações o sistema muda constantemente de configuração e, desta forma, visita todo o espaço de fase. No caso de um sistema quântico a temperatura zero, as flutuações são de natureza quântica, como por exemplo as induzidas pelas flutuações de ponto zero. Em ambas situações, dizemos que um sistema possui uma probabilidade  $p_\mu$  de ser encontrado no estado  $\mu$  e uma probabilidade  $P(\mu \rightarrow \nu)$  de realizar uma transição para o estado  $\nu$  uma vez estando no estado  $\mu$ . No equilíbrio estas probabilidades obedecem a relação  $p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu)$  conhecida como condição de balanço detalhado. Um algoritmo de simulação de Monte Carlo tem o papel de “imitar” a dinâmica de transição entre configurações.

O algoritmo de simulação mais conhecido é o algoritmo de Metropolis [11]. Ele foi proposto em 1953 em um estudo da termodinâmica de um sistema de esferas rígidas bi-dimensionais. Este algoritmo marcou um avanço em simulações numéricas, entretanto, possui eficiência reduzida quando realizamos simulações nas proximidades de um ponto crítico [5]. Esta redução de eficiência é conhecida como *critical slowing down* e pode ser observada através de uma grandeza chamada tempo de correlação. O tempo de correlação,  $\tau$ , é um tempo característico de um algoritmo, o qual devemos “esperar” entre as estimativas sucessivas de um observável em uma simulação de Monte Carlo, de modo a garantir que nossas medidas sejam estatisticamente independentes. O tempo de correlação obedece a relação  $\tau \propto L^z$ , onde  $L$  é o tamanho da rede considerada na simulação e  $z$  é chamado de expoente dinâmico. Para o modelo de Ising, temos [5] que  $z \approx 2$  para o algoritmo de Metropolis, e  $z \approx 0,25$  para algoritmos conhecidos como sendo do tipo “cluster” [12, 13]. A diferença essencial entre estes algoritmos está no processo de atualização do sistema, o algoritmo de Metropolis é um algoritmo local, já o algoritmo de cluster é não-local. Algoritmos locais atualizam um único ponto da rede por vez, considerando a configuração deste ponto frente a configuração de seus vizinhos mais próximos; já algoritmos não locais atualizam uma região da rede, considerando a configuração desta região em meio a configuração global da rede. Apesar do ganho em eficiência dos algoritmos não-locais do tipo cluster, a programação é um pouco mais complicada e a paralelização desses algoritmos em clusters de computadores é bastante mais complicada do que a de um algoritmo local.

Recentemente foi proposto um novo algoritmo para simulações de Monte Carlo [14], chamado de algoritmo *worm*. O algoritmo *worm* soluciona o problema de *critical*

*slowing down*,  $z \approx 0,25$  para o modelo de Ising, sem utilizar processos de atualização não-locais. No contexto do modelo de Ising, este novo algoritmo consiste em uma expansão em série de potências no inverso da temperatura do fator de Boltzmann. Os termos dessa série, formados de produtos de operadores de spin referentes aos sítios da rede, são então re-arranjados em termos envolvendo *bonds* (ligações) entre os spins, de maneira que o espaço de configurações possa ser interpretado em termos de estruturas geométricas envolvendo *loops* (laços) abertos ou fechados – ou worms. No trabalho original em que o algoritmo *worm* foi proposto [14], os autores tomaram como exemplo para investigar a eficiência do algoritmo os modelos de Ising, XY, Potts-3d, e  $|\varphi|^4$ . Os proponentes obtiveram precisão e eficiência comparáveis com algoritmos não locais. Hoje, podemos observar o algoritmo *worm* sendo utilizado em problemas como sistemas de bosons [15, 16, 17], gás de Fermi [18] e QCD [19]. Na presente dissertação faremos uso do algoritmo *worm* para estudar o comportamento crítico do campo escalar real. O objetivo é mapear o espaço definido pelos parâmetros  $(\lambda, \mu_0^2)$  e determinar as regiões deste espaço nas quais temos  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ , i.e., determinar o diagrama de fase do campo escalar real. Para determinar  $\langle \varphi \rangle$  é necessário realizar uma modificação na versão original do algoritmo *worm*. A modificação consiste na introdução do chamado *spin fantasma*, no Cap. 3 discutiremos com mais detalhes este assunto. Nossos resultados obtidos na presente dissertação são comparados com resultados da literatura obtidos com outros algoritmos. Neste sentido, nossos resultados não são novos. A aplicação do algoritmo *worm* no modelo de campo escalar real autointeragente  $\varphi^4(x)$  também não é original, mas é relativamente recente, na literatura encontramos os trabalhos da Refs. [20] e [21]. Na primeira referência, Ref. [20], é investigada a eficiência do algoritmo neste modelo, e na Ref. [21] é uma tese *Diplomarbeit* em que um estudo bastante completo é realizado sobre este modelo, incluindo o comportamento crítico do modelo em diferentes dimensões. Apesar de não sermos os primeiros a aplicar o algoritmo *worm* na teoria quântica de campos relativística do campo escalar real  $\varphi^4(x)$ , os resultados apresentados aqui, no entanto, foram gerados por um código desenvolvido de maneira independente pelo autor da presente dissertação.

Neste ponto julgamos importante chamar à atenção sobre duas limitações importantes no presente estudo. O primeiro se refere ao fato de que a determinação da linha crítica na teoria do campo escalar é feita em termos dos parâmetros não-renormalizados da teoria. Isto é, não implementamos a renormalização dos parâmetros do modelo. Apesar de ser muito simples efetuar a renormalização nesta teoria, pois ela é super-renormalizável, não a fizemos porque o objetivo maior aqui é implementar as simulações no contexto do algoritmo *worm* neste modelo. Isso, no

entanto, não quer dizer que nossas simulações são sem uso para a determinação do ponto crítico em termos de quantidades renormalizadas, pois o processo de renormalização na rede requer o conhecimento do comportamento crítico das quantidades não renormalizadas. O segundo ponto refere-se ao fato de que a determinação da linha crítica feita nesta dissertação não emprega nenhum método de extrapolação para volume infinito. A determinação é feita de maneira qualitativa apenas. Como será visto no Capítulo 5, essa determinação é feita variando o tamanho da rede. Sabendo que o calor específico diverge no ponto crítico, à medida que o tamanho da rede aumenta, deve-se observar um pico cada vez mais acentuado em torno do valor crítico de  $\mu_0^2$ , para um dado valor de  $\lambda$ . A determinação do valor crítico de  $\mu_0^2$  é feita por inspeção nos arquivos de dados.

Os diferentes capítulos da dissertação estão distribuídos da seguinte maneira. Na primeira parte do Cap. 2, faremos uma muito breve revisão a respeito de transições de fase, onde faremos uma abordagem termodinâmica deste assunto. Na segunda parte do Capítulo 2, vamos discutir simulações de Monte Carlo, onde esboçaremos as idéias fundamentais envolvidas nessas simulações e apresentaremos o algoritmo de Metropolis. No Capítulo 3 deduziremos o algoritmo *worm* para o modelo de Ising e reescreveremos observáveis como magnetização, energia e calor específico nesta nova formulação. Abordamos o modelo de Ising neste trabalho com o intuito de simplificar a exposição do algoritmo *worm* bem como realizar comparações dos algoritmos *worm* e Metropolis para este modelo. No Capítulo 4 discutiremos brevemente a teoria necessária para realizarmos simulações de Monte Carlo do campo escalar real, ao final deste capítulo iremos generalizar o algoritmo *worm*, obtido no Capítulo 3, para o campo escalar. Por fim apresentaremos nossos resultados obtidos nas simulações de Monte Carlo para o campo escalar real e modelo de Ising no Capítulo 5 e faremos as conclusões no Capítulo 6. Este trabalho conta também com dois Apêndices, um no qual abordamos a equivalência entre os ensembles microcanônico e canônico no limite termodinâmico e outro onde falamos sobre o método de análise de erros empregado neste trabalho.

## Capítulo 2

# Revisão sobre transições de fase e simulações de Monte Carlo

Diversos sistemas de interesse da natureza possuem muitas partes ou partículas. Por exemplo, se desejarmos estudar as propriedades de um gás contido em um volume de um litro, estaremos tratando de um número da ordem de  $10^{23}$  (número de Avogadro) partículas. Em tais sistemas, o tratamento individual destas partes é complicado e o tratamento via Termodinâmica e/ou Mecânica Estatística torna-se inevitável. No escopo da termodinâmica surge o conceito de transições de fase, e por meio da Mecânica Estatística podemos estudar tais transições com base na dinâmica microscópica do sistema. Entretanto, mesmo conhecendo a dinâmica microscópica, os estudos via os métodos da Mecânica Estatística em geral não podem ser feitos analiticamente e simulações computacionais são necessárias.

Nesta dissertação utilizaremos o método de Monte Carlo para simular computacionalmente modelos simples de sistemas físicos. O método de Monte Carlo é um método estatístico, que usa uma sequência de números aleatórios para simular os estados acessíveis de um dado sistema e, de posse desses estados, calcular valores médios de possíveis observáveis físicos. Neste capítulo faremos uma breve revisão sobre alguns aspectos da Termodinâmica, Sec. 2.1, para introduzir o conceito de transições de fase. Logo após, na Sec 2.2, discutiremos algumas propriedades de transições de fase. Por fim, na Sec. 2.3, discutiremos os conceitos envolvidos em simulações de Monte Carlo.

### 2.1 Termodinâmica - revisão de alguns conceitos

Em mecânica clássica dizemos que conhecemos a dinâmica de uma partícula quando somos capazes de determinar a maneira como a posição e o momento desta partícula varia com o tempo. Para um sistema composto por  $N$  partículas, deveríamos determinar  $6N$  variáveis (3 coordenadas para a posição e 3 coordenadas

para o momento de cada partícula) para conhecermos a dinâmica do sistema. Ao estudarmos sistemas onde  $N$  é muito grande, o tratamento via mecânica clássica torna-se pouco conveniente ou até mesmo impossível e, portanto, faz-se necessário uma mudança na maneira de como tratar matematicamente esses sistemas. Outro ponto que nos leva a abandonar o tratamento da mecânica clássica, para sistemas de muitas partículas, é que, em geral, as propriedades relevantes destes sistemas são na verdade valores médios da propriedade em questão. A Termodinâmica fornece uma descrição mais conveniente e apropriada de sistemas onde o número de partículas é da ordem do número de Avogadro ( $10^{23}$ ). As variáveis relevantes para a descrição termodinâmica de sistemas de muitas partículas são a energia média total, o volume que o sistema ocupa, pressão média que as partículas exercem nas paredes de um recipiente que o contém (no caso de sistemas fluidos), etc. Ou seja, um sistema é caracterizado por meio de suas propriedades globais, como um todo, que não são necessariamente propriedades de seus constituintes. Muitas dessas grandezas que caracterizam um sistema termodinâmico são chamadas de variáveis de estado. Um dos conceitos fundamentais na descrição termodinâmica de sistemas de muitas partículas é o de temperatura. Uma definição, genérica e não muito precisa, de temperatura é a seguinte: “Temperatura é uma medida da tendência que um objeto tem de ceder ou absorver energia de sua vizinhança. Quando dois objetos estão em contato térmico, aquele que tende perder energia espontaneamente está com a temperatura mais alta.” – ver Cap. 1 da Ref. [22]. Descrever um sistema termodinamicamente implica em conhecer como as variáveis de estado são afetadas pela temperatura e outras variáveis, como volume, número de partículas, etc [23].

Nesta seção iremos introduzir o conceito de transição de fase. Este conceito é empregado em vários contextos na presente dissertação e, como tal, julgamos necessário abordá-lo. Com este fim, discutiremos como descrever um sistema termodinâmico no equilíbrio. Inicialmente consideremos um sistema termodinâmico fora do equilíbrio, por exemplo, um gás dentro de um balão que é colocado em contato com um reservatório térmico. Entendemos um reservatório térmico como sendo um grande sistema de apoio do qual podemos extrair ou injetar energia (ou partículas) sem que nenhuma mudança termodinâmica ocorra no reservatório. Como o sistema de interesse está a priori fora do equilíbrio devemos esperar que, com o passar do tempo, as variáveis de estado do nosso sistema se ajustem até que o equilíbrio seja atingido, e, a partir deste momento, nenhuma transformação nas variáveis de estado deverá ocorrer. Dizemos então que estados em equilíbrio possuem a propriedade de não variarem em média se as condições externas permanecerem inalteradas. Então podemos imaginar que, um sistema fora do equilíbrio em contato com um reservatório

térmico, atingirá o equilíbrio dentro de um intervalo de tempo finito.

Consideremos agora um cilindro fechado cuja tampa superior é composta por um pistão móvel. Consideremos também que todas as paredes do cilindro são isolantes térmicas. Definimos isolantes térmicos como sendo um material que não permite a transferência de energia através dele, ou seja, se um sistema termodinâmico estiver confinado por um isolante térmico, nenhuma quantidade de energia pode entrar ou sair do sistema. Imaginemos agora que dentro deste cilindro existe uma determinada quantidade de gás e que em cima do pistão há pequenos pesos usados para controlar a pressão exercida sobre o gás. Preparamos o sistema acima descrito e esperamos um intervalo de tempo suficientemente grande para que o mesmo atinja o equilíbrio termodinâmico. Uma vez que nosso sistema está em equilíbrio (observe que estamos tratando de um sistema isolado), podemos realizar a seguinte experiência: retiramos (ou colocamos) um a um, os pesos em cima do pistão, e verificamos qual é a variação no volume oriunda de uma determinada variação de pressão; aqui devemos tomar o cuidado de a cada retirada de um peso, esperarmos um tempo suficiente para que o sistema entre em equilíbrio novamente. Podemos concluir, por meio de experiências como estas, que para um sistema isolado e em equilíbrio termodinâmico, os únicos parâmetros relevantes são a pressão  $P$  e o volume  $V$  [23], ou seja, para uma dada variação de pressão  $\Delta P_1$ , sempre haverá uma única variação de volume  $\Delta V_1$ , independente de qualquer outra característica do sistema. Definimos neste momento a pressão e o volume como sendo variáveis de estado.

Imaginemos agora dois sistemas isolados  $S_1$  e  $S_2$ , onde ambos estão em equilíbrio termodinâmico isoladamente. O sistema  $S_1$  possui variáveis de estado  $(P_1, V_1)$ , e o sistema  $S_2$ ,  $(P_2, V_2)$ . Coloquemos agora  $S_1$  e  $S_2$  em contato termodinâmico (ou seja, existe uma parede que separa os dois sistemas que não é isolante térmica) porém,  $S_1$  e  $S_2$  estão isolados do resto do mundo. Temos, então, um sistema composto  $S$ , dependente das variáveis de estado  $(P_1, V_1, P_2, V_2)$ . Se  $S_1$  e  $S_2$  estiverem em equilíbrio um com o outro, teremos resultados semelhantes aos obtidos na experiência descrita anteriormente, ou seja, para cada variação de pressão  $\Delta P_1$  em  $S_1$ , obteremos uma única variação de volume  $\Delta V_1$  em  $S_1$  e o análogo para o sistema  $S_2$ . Entretanto, se  $S_1$  e  $S_2$  não estiverem em equilíbrio mútuo, verificaremos que a variação  $\Delta V_1$  no volume (devido a variação de pressão  $\Delta P_1$  em  $S_1$ , realizada num tempo  $t$ ), será diferente se realizarmos a mesma variação de pressão  $\Delta P_1$  num tempo posterior  $t'$ . O mesmo acontece para o sistema  $S_2$ . Isto ocorre pelo fato de  $S_1$  e  $S_2$  não estarem em equilíbrio termodinâmico, e, tanto  $S_1$  quanto  $S_2$ , estarem passando por transformações para atingirem o equilíbrio mútuo. Podemos verificar, com este tipo de experimento, que se fixarmos os valores de  $P_1$ ,  $V_1$  e  $P_2$ , haverá um único valor de

$V_2$  no qual o sistema  $S$  estará em equilíbrio, ou seja,  $S_1$  e  $S_2$  em equilíbrio mútuo. Matematicamente podemos dizer que existe uma função  $F$  nas variáveis de estado  $(P_1, V_1, P_2, V_2)$ , que no equilíbrio pode ser escrita como

$$F(P_1, V_1, P_2, V_2) = 0. \quad (2.1)$$

A forma funcional de  $F$  dependerá do sistema em questão, entretando, ela pode ser determinada por um número suficiente de experimentos [23].

Com o intuito de obtermos mais informações oriundas da Eq. (2.1), lembremos que, se fixarmos 3 das 4 variáveis de estado do sistema  $S$ , composto pelos subsistemas  $S_1$  e  $S_2$ , a quarta variável será determinada em função das outras 3, ou seja, fixando  $(P_1, V_1, P_2)$ , teremos

$$V_2 = f(P_1, V_1, P_2). \quad (2.2)$$

Agora, consideremos um terceiro subsistema pertencente a  $S$ , que chamaremos de  $S_T$  (sistema de teste). Imaginemos que  $S_1$  está em contato térmico e em equilíbrio com  $S_T$ , por sua vez,  $S_2$  também está em contato térmico e em equilíbrio com  $S_T$  (note que  $S_1$  e  $S_2$  não estão em contato térmico diretamente). Neste momento faz-se necessário invocar a Lei Zero da Termodinâmica:

*Se os corpos  $A$  e  $B$  estão separadamente em equilíbrio termodinâmico com um corpo  $C$ , então  $A$  e  $B$  estão necessariamente em equilíbrio termodinâmico.*

Podemos dizer, com base na lei zero, que  $S_1$  e  $S_2$  estão em equilíbrio uma vez que ambos estão em equilíbrio com  $S_T$ . Desta forma, a Eq. (2.1) é válida para o sistema em questão. Alternativamente, fixando  $(P_1, V_1, P_2, V_2, P_T)$  (onde  $P_T$  é a pressão do subsistema  $S_T$ ) podemos escrever o volume de  $S_T$  como:

$$V_T = f_1(P_1, V_1, P_T) \quad \text{ou} \quad V_T = f_2(P_2, V_2, P_T), \quad (2.3)$$

logo

$$f_1(P_1, V_1, P_T) = f_2(P_2, V_2, P_T). \quad (2.4)$$

Tanto a Eq. (2.1) quanto a (2.4) são separadamente condições necessárias para que o sistema  $S_1$  esteja em equilíbrio com  $S_2$ , desta forma (2.1) e (2.4) devem ser equivalentes. Assim sendo, devemos esperar que  $f_1$  e  $f_2$  devam possuir dependência em  $V_T$  de tal forma que  $V_T$  se cancele na Eq. (2.4), uma vez que (2.1) não depende de  $V_T$ . Escrevendo  $f_i$  na forma

$$f_i = \phi_i(V_i, P_i)R(V_T) + L(V_T), \quad (2.5)$$

obtemos

$$\phi_1(V_1, P_1) = \phi_2(V_2, P_2). \quad (2.6)$$

Dizemos, então, que existe uma quantidade  $\phi_i(V_i, P_i)$  tal que: dado dois corpos em equilíbrio termodinâmico, a Eq. (2.6) deve ser satisfeita. A quantidade  $\phi_i(V_i, P_i)$  é definida como temperatura do sistema  $i$ . Podemos então enunciar a lei zero da termodinâmica de uma segunda forma:

*Equilíbrio de temperatura é uma condição necessária para o equilíbrio termodinâmico.*

Concluimos que as grandezas  $V$ ,  $P$  e  $T$  caracterizam um sistema termodinâmico em equilíbrio. Estas grandezas definem uma função conhecida como função de estado,

$$f(T, V, P) = 0, \quad (2.7)$$

cujos pontos da superfície são chamados de estados termodinâmicos, todos os estados possíveis de um dado sistema são representados por pontos nesta superfície. Podemos classificar a superfície da função de estado (estados termodinâmicos) em regiões, que chamaremos oportunamente de *fases*. Os diferentes pontos de uma dada região, que correspondem a diferentes estados de um sistema, possuem uma característica em comum, sua fase. Tomemos como exemplo a água ( $H_2O$ ). Na descrição termodinâmica desta substância, dizemos que ela possui três fases: sólido, líquido e vapor\*. Para um dado sistema, podemos construir os chamados diagramas de fase. Estes são cortes bi-dimensionais da superfície tri-dimensional da função de estado e relacionam as fases de um sistema com as variáveis  $V$ ,  $P$  e  $T$ . Por meio destes diagramas podemos estudar as chamadas transições de fase. A seguir, discutiremos estas transições.

## 2.2 Transições de fase

Como vimos, podemos descrever sistemas termodinamicamente através das grandezas  $V$ ,  $P$  e  $T$ , e classificar diferentes estados através de *fases*. Assim, podemos construir os chamados diagramas de fase de um determinado sistema, estes são  $PT$  (pressão *versus* temperatura),  $PV$  (pressão *versus* volume) e  $VT$  (volume *versus* temperatura). As Figs 2.1 e 2.2 ilustram um comportamento típico dos diagramas  $PT$  e  $PV$ .

---

\*Na verdade, a água possui muitas outras fases. Para os objetivos desta breve revisão, é suficiente discutir apenas estas três fases.

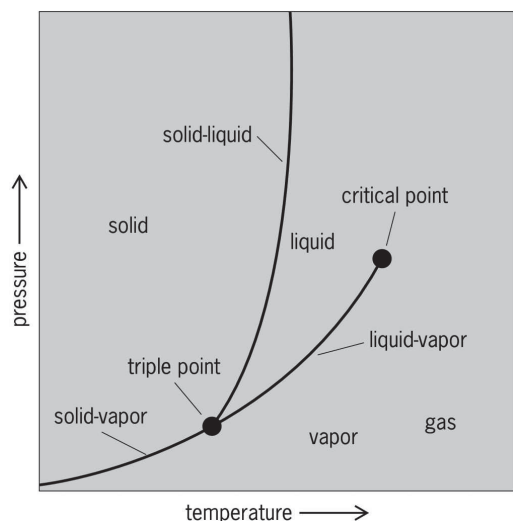


Figura 2.1: Diagrama de fase - Plano PT.

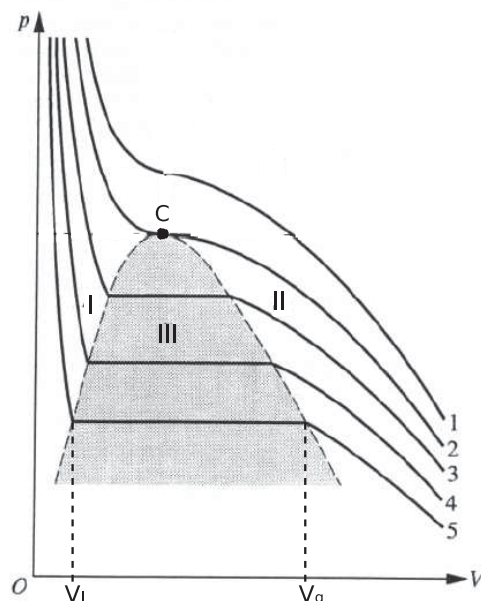


Figura 2.2: Diagrama de fase - Plano PV.

No diagrama  $PT$  (Fig. 2.1) podemos observar regiões denominadas *solid* (sólido), *liquid* (líquido) e *vapor* (vapor), estas são as projeções bi-dimensionais de regiões da superfície da função de estado. Entretanto, é possível fazer mais uma classificação da superfície da função de estado, as regiões de coexistência: se o sistema em questão é representado por um ponto nesta região, este sistema não possuirá uma fase distinta, mas sim, estará em duas ou três fases simultaneamente. As regiões de coexistência da superfície da função de estado são condensadas em linhas de coexistência no diagrama  $PT$ . Podemos ver (Fig. 2.1) que as três linhas de coexistência se encontram em um ponto, ponto triplo, neste ponto o sistema se apresenta nas três fases simultaneamente, já nos pontos sobre as linhas de coexistência o sistema se apresenta em duas fases simultaneamente. Quando mudamos as variáveis de estado do nosso sistema de modo que uma linha de coexistência seja transpassada, dizemos que houve uma transição de fase de primeira ordem. Notem que neste tipo de transição o sistema passa pela região de coexistência antes de mudar de fase. Podemos ver também que a linha *liquid-vapor* possui um ponto final chamado ponto crítico: o sistema pode mudar de fase sem passar pela linha de coexistência *liquid-vapor*, mas sim, contornando o ponto crítico. Transições deste tipo são chamadas de transições de fase de segunda ordem. Caracterizamos o ponto crítico pelas coordenadas  $T_C$  (temperatura crítica),  $P_C$  (pressão crítica) e  $V_C$  (volume crítico).

Também podemos ver o ponto crítico, denotados por  $C$ , no diagrama  $PV$  (Fig.

2.2), neste diagrama podemos distinguir as regiões: *I* que corresponde a fase líquida, *II* que corresponde a fase vapor, *III* que corresponde a coexistência das fases líquido-vapor e a região acima do ponto crítico. As curvas no diagrama *PV* representam processos isotérmicos, i.e., processos nos quais variamos a pressão e volume sem alterar o valor da temperatura. A curva 1 corresponde a uma processo cuja temperatura é maior que a temperatura crítica. Em processos como estes a interação entre as partículas do sistema é desprezível, desta forma, estas curvas se assemelham a curvas de processos de gases ideais. Para ser mais preciso, quanto mais além da temperatura crítica estivermos, nosso sistema mais se assemelha de um gás ideal. Para processos cujas temperaturas estão próximas ou abaixo da temperatura crítica a interação entre as partículas torna-se importante e, como consequência, observamos *platôs* na região *III* do diagrama *PV*. As curvas do diagrama *PV* correspondem a transições de fase, como podemos ver: considerando o sistema inicialmente na fase líquida, temos uma expansão isotérmica que leva nosso sistema à fase de vapor e, ao longo deste processo, o sistema passa por uma região de coexistência de fases (região *III*). Para temperaturas abaixo da temperatura crítica, vemos que um líquido ao ser expandido isotermicamente possui um volume  $V_l$  ao entrar na região *III* e volume  $V_g$  ao sair desta. Observamos que à medida que “caminhamos” em direção ao ponto crítico, o parâmetro  $M = V_l - V_g$  tende a zero. Este é chamado de parâmetro de ordem, que para o sistema líquido-vapor, equivale à diferença de volumes (ou equivalentemente, diferença de densidades) das fases líquido-vapor. Os parâmetros de ordem possuem, em geral, a propriedade de assumirem valores não nulos abaixo do ponto crítico e nulos acima. Para sistemas ferromagnéticos, por exemplo, o parâmetro de ordem é a magnetização. A escolha do parâmetro de ordem é feita de maneira fenomenológica e nem sempre é uma escolha óbvia [24].

Johannes Diderik van der Waals procurou argumentos qualitativos no intuito de encontrar uma equação de estado que incorporasse os efeitos da interação molecular e desta forma, descrever sistemas cujas temperaturas estão abaixo ou nas proximidades da temperatura crítica. Como resultado, em 1873, temos a equação de van der Waals. A seguir, analisaremos a equação de van der Waals no ponto crítico, e poderemos observar um comportamento universal para sistemas termodinâmicos que se encontrem no ponto crítico. Discutiremos também de uma maneira quantitativa as transições de fase, discutidas qualitativamente nesta introdução.

### 2.2.1 Equação de van der Waals - Expoentes Críticos

O potencial de interação entre moléculas é, em geral, dependente da separação entre as mesmas [24]. O potencial possui um caráter repulsivo a curtas distâncias

(devido à interação Coulombiana entre as nuvens eletrônicas das moléculas) e uma parte atrativa (assintoticamente tendendo a zero para grandes distâncias), oriunda da polarização das moléculas. van der Waals considerou as moléculas de um gás como sendo esferas duras, desta forma, aproximou o potencial de interação entre moléculas de um gás a um potencial atrativo com caroço duro [24]. Como consequência destas considerações, o volume acessível a uma molécula não é mais o volume do recipiente no qual o gás está confinado, mas sim um volume efetivo  $V_{eff} = V - b$ , onde  $b$  é o volume excluído devido ao volume individual de cada molécula, sendo  $b$  uma constante que caracteriza o sistema em questão. Outro efeito da interação entre as moléculas, considerado por van der Waals, é o atenuamento da pressão do gás. Considere o potencial de caroço duro escrito na forma

$$\phi(r) = q(r) - \frac{a}{V}, \quad (2.8)$$

onde  $a$  é uma constante que caracteriza o sistema,  $q(r)$  é infinito para  $r \leq r_0$  ( $r_0$  : raio da esfera dura) e zero para  $r > r_0$ . Como a energia do sistema é proporcional ao potencial de interação e a pressão é dada por

$$P = -\frac{\partial U}{\partial V}, \quad (2.9)$$

temos que a pressão será proporcional a  $-a/V^2$ . A pressão em um gás ideal deve-se unicamente à energia cinética das moléculas ( $P_{cinético}$ ). Mas agora teremos mais um termo contribuindo para a pressão, este termo é oriundo da interação entre as moléculas. Desta forma, escrevemos a pressão do sistema como sendo

$$P = P_{cinético} - \frac{a}{V^2}. \quad (2.10)$$

Com estas considerações, a equação dos gases ideais,  $PV = nRT$ , onde  $R$  é a constante de universal dos gases e  $n$  no número de moles, modifica-se para

$$(V - b) \left( P + \frac{a}{V^2} \right) = nRT. \quad (2.11)$$

Esta é a equação de van der Waals. Tomando  $T = T_C$ ,  $P = P_C$  e  $n = 1$ , temos

$$V^3 - \left( b + \frac{RT_C}{P_C} \right) V^2 + \frac{a}{P_C} V - \frac{ab}{P_C} = 0, \quad (2.12)$$

ou seja, temos uma equação do terceiro grau na variável  $V$  que a priori possui três raízes para o volume  $V$ . Entretanto, no ponto crítico temos três raízes iguais, ou seja, a equação de  $V$  tem o comportamento

$$(V - V_C)^3 = 0 \quad \text{ou} \quad V^3 - 3V_C V^2 + 3V_C^2 V - V_C^3 = 0, \quad (2.13)$$

comparando os termos das Eqs. (2.12) e (2.13)

$$3V_C = b + \frac{RT_C}{P_C}, \quad 3V_C^2 = \frac{a}{P_C}, \quad V_C^3 = \frac{ab}{P_C}. \quad (2.14)$$

Resolvendo este sistema de equações temos,

$$RT_C = \frac{8a}{27b}, \quad P_C = \frac{a}{27b^2} \quad \text{e} \quad V_C = 3b. \quad (2.15)$$

Usando estas relações acima e definindo

$$p = \frac{P}{P_C}, \quad v = \frac{V}{V_C}, \quad t = \frac{T}{T_C}, \quad (2.16)$$

a equação de van der Waals é escrita da seguinte forma:

$$\left(p + \frac{3}{v^2}\right) \left(v - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3}t. \quad (2.17)$$

Como podemos ver, a equação de van der Waals no ponto crítico (Eq. (2.17)) não depende de nenhuma constante que caracteriza o sistema em questão. Desta forma, o resultado de van der Waals parece indicar a existência de um comportamento universal no ponto crítico. Um exemplo desta universalidade pode ser visto no plot de Guggenheim, 1945. Guggenheim plotou  $T/T_C$  contra  $n/n_C$  ( $n$  : densidade) de oito oito substâncias sobre a linha de coexistência, Fig. (2.3), e observou que todas estas substâncias possuem a mesma curva.

Como vimos, as fases de sistemas termodinâmicos podem ser caracterizadas por parâmetros de ordem ( $M = V_l - V_g$ , para o caso de um sistema líquido vapor) que tendem a zero quando nos aproximamos da temperatura crítica. É possível mostrar [24, 25] que a universalidade dos sistemas termodinâmicos na temperatura crítica leva a relações do tipo

$$M \propto (T_C - T)^\beta, \quad (2.18)$$

$$C \propto (T_C - T)^{-\alpha}, \quad (2.19)$$

$$\chi \propto (T_C - T)^{-\gamma}, \quad (2.20)$$

cujas dependências se dá em termos dos chamados expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ... Existe uma grande variedade de estudos sobre o assunto de fenômenos críticos, tanto teóricos e computacionais quanto experimentais, mas para os nossos objetivos nesta dissertação, não é necessário nos deter numa revisão sobre eles.

A seguir vamos discutir o método de Monte Carlo. Como dito anteriormente, nesta dissertação vamos nos concentrar em simulações de Monte Carlo para a teoria do campo escalar real  $\phi^4(x)$  em duas dimensões. No entanto, com o intuito de

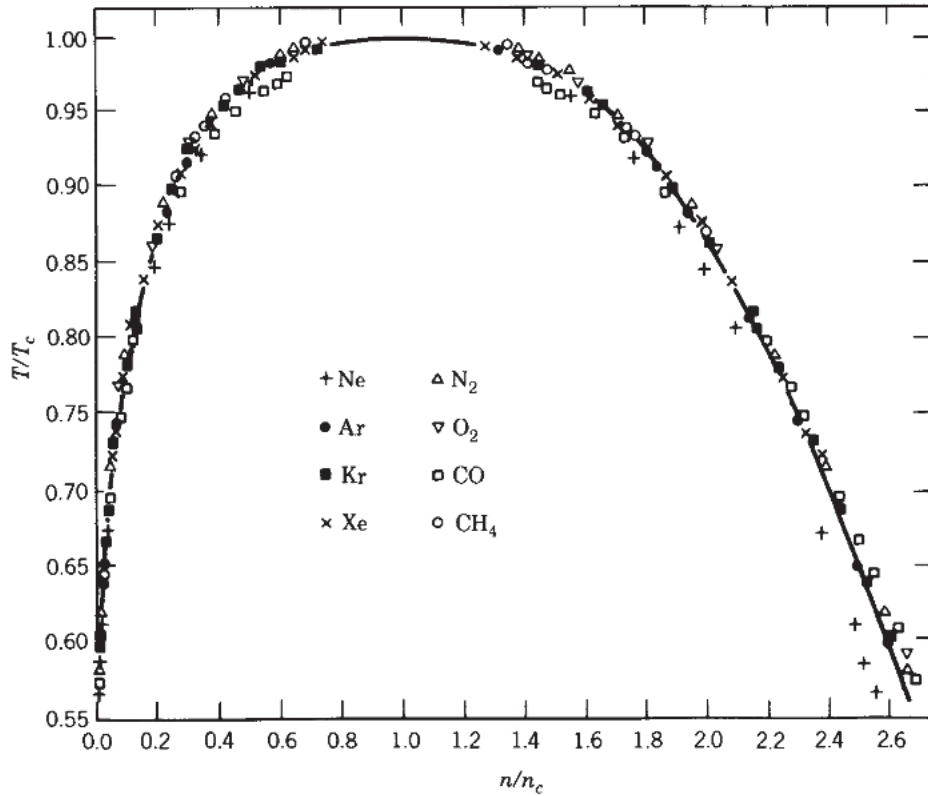


Figura 2.3: Guggenheim plot - Retirado de [24].

discutir os algoritmos de simulação de uma maneira mais simples, e verificar a confiabilidade de nosso programa numérico, vamos fazer uso do modelo de Ising. Este modelo em (uma e) duas dimensões possui solução analítica [24, 26, 27, 28], o que nos permite avaliar a qualidade de nossas simulações.

### 2.3 Simulações de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é um método estatístico onde geramos, dentre todos os estados acessíveis de um sistema, os estados com maior probabilidade segundo alguma distribuição de probabilidades [5]. No ensemble canônico, um sistema interage com seu reservatório térmico absorvendo ou cedendo pequenas quantidades de energia (“pequenas quantidades de energia” significa: pequeno comparado com a energia total do sistema). Esta interação perturba fracamente o sistema em questão e, como consequência, o sistema pode realizar transições entre estados. Em outras palavras, dado um sistema em um estado  $\mu$  este “pula” para o estado  $\nu$  que “pula” para o estado  $\sigma$  e assim sucessivamente. Desta forma, dizemos que um sistema “vizita” todos os estados possíveis. Entretanto existem estados com maior/menor probabilidade

de serem visitados. Em Mecânica Estatística, a distribuição de probabilidades é a distribuição de Boltzmann

$$w_\mu = \frac{e^{-\beta H_\mu}}{Z}, \quad Z = \sum_{\{\mu\}} e^{-\beta H_\mu}, \quad (2.21)$$

onde  $w_\mu$  é a probabilidade de encontrarmos o sistema descrito pelo hamiltoniano  $H$  no estado  $\mu$ ,  $Z$  é a chamada função de partição do sistema e a soma  $\{\mu\}$  significa que devemos somar sobre todos os estados possíveis. Desta forma, o valor médio de um observável  $\mathcal{O}$  é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{\{\mu\}} \mathcal{O}_\mu e^{-\beta H_\mu}}{Z}, \quad (2.22)$$

onde  $\mathcal{O}_\mu$  é o valor do observável  $\mathcal{O}$  no estado  $\mu$ .

Utilizaremos como base para nossa discussão a respeito do método de Monte Carlo o modelo de Ising bi-dimensional. Este modelo trata sistemas com propriedades magnéticas tratando-os como uma rede de spins  $s_i$  (Fig. 2.4). As variáveis de spin  $s_i$  podem assumir os valores  $\pm 1$  (spin para cima e spin para baixo) ao longo da rede. O hamiltoniano deste modelo é dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (2.23)$$

onde  $J$  é um parâmetro relacionado à intensidade da interação entre os spins,  $B$  é um campo magnético externo e  $\langle i, j \rangle$  significa que o produto  $s_i s_j$  envolve apenas os primeiros vizinhos de  $i$  e  $j$ . Em duas dimensões, os índices  $i$  e  $j$  correspondem a pares de coordenadas, i.e.,  $s_i s_j = s_{(i_a, i_b)} s_{(j_a, j_b)}$ . Desta forma, dado um sítio localizado pelas coordenadas  $a$  e  $b$  ( $s_{(a,b)}$ ) definimos como seus vizinhos os sítios  $s_{(a+1,b)}$  e  $s_{(a,b+1)}$ .

Uma vez que conhecemos o hamiltoniano do sistema, uma grandeza que poderíamos estar interessados em estimar é, e.g., a magnetização. Pela Eq. (2.22), temos que a magnetização média é dada por

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_\mu M_\mu e^{-\beta H_\mu}}{Z}, \quad (2.24)$$

onde  $M_\mu$  é o valor da magnetização da rede no estado  $\mu$  que, por sua vez, é a soma dos valores dos spins neste estado.

Neste momento nos deparamos com nosso primeiro problema: o sistema que estamos considerando é uma rede onde cada um de seus sítios pode apresentar dois valores distintos,  $\pm 1$  (spin para cima ou para baixo). Desta forma, se estivermos tratando de uma rede bidimensional quadrada  $100 \times 100$  (diga-se de passagem uma

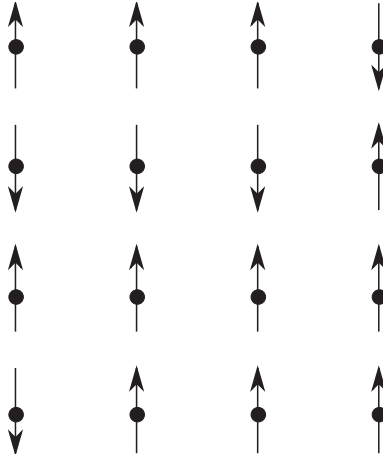


Figura 2.4: Rede bidimensional  $4 \times 4$ : pontos representam os sítios da rede e flechas representam os spins.

rede muito pequena comparada com sistemas macroscópicos) teremos um total de  $2^{100 \times 100}$  estados possíveis. Considerar todos estes estados é um tanto quanto inviável. Entretanto, os estados acessíveis de um sistema em equilíbrio não possuem a mesma probabilidade de ocorrência (Eq. (2.21)), ou seja, nem todos os  $2^{100 \times 100}$  estados acessíveis são estados com probabilidade significativa de ocorrer. Uma simulação de Monte Carlo consiste não somente em gerar os possíveis estados de um sistema em equilíbrio, mas sim, gerar os estados mais prováveis deste sistema no equilíbrio. A técnica de gerar os estados com maior peso da distribuição de Boltzmann é chamada de “Amostragem por Importância”. Discutiremos brevemente esta técnica na subseção seguinte, apresentando suas idéias básicas (processo de Markov, ergodicidade e balanço detalhado). Ao final falaremos do conceito de “taxa de aceitação”, este conceito é necessário para a construção do algoritmo de simulação. Para finalizar este Capítulo, utilizaremos essas idéias no contexto do algoritmo de “Metropolis” e, aplicaremos este algoritmo no modelo de Ising.

### 2.3.1 Amostragem por Importância

Como mencionamos, o número de estados possíveis de um sistema pode ser extremamente grande. Utilizar um computador para gerar todos estes estados não é a maneira mais eficiente para obtemos médias termodinâmicas. Pode-se mostrar, veja apêndice A, que em um sistema termodinâmico em equilíbrio, a flutuação da energia é desprezível em comparação com a energia média do sistema. O mesmo é válido para outras grandezas como, e.g., a magnetização. Interpretamos esta situação como se um sistema em equilíbrio termodinâmico passasse a maior parte

do tempo nos  $M$  estados de maior probabilidade. Desta forma, se nosso algoritmo gerar os  $M$  estados mais prováveis  $(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M)$ , o valor médio de uma grandeza  $Q$  é dado por

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}, \quad (2.25)$$

onde  $Q_{\mu_i}$  é o valor do observável  $Q$  no estado  $\mu_i$ .

Afim de garantir que nosso algoritmo esteja gerando estados com os pesos corretos da distribuição de Boltzmann, devemos nos atentar a alguns requerimentos que devem ser satisfeitos, estes são: **Processo de Markov**, **Ergodicidade** e **Balanço Detalhado**. A seguir discutiremos brevemente cada um deles.

### *Processo de Markov*

O procedimento de gerar um estado  $\nu$  a partir de um estado  $\mu$  é chamado de processo de Markov. Este procedimento é realizado de maneira probabilística, ou seja, dado um estado  $\mu$  não temos sempre o mesmo estado  $\nu$  sendo gerado. A probabilidade de gerar um estado  $\nu$  a partir de um estado  $\mu$  é chamada de **probabilidade de transição**  $P(\mu \rightarrow \nu)$ . Esta probabilidade de transição deve satisfazer

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1. \quad (2.26)$$

Durante uma simulação, o processo de Markov é repetido inúmeras vezes. O processo de Markov, embutido em nosso algoritmo de simulação, é realizado de modo a garantir que, para um tempo suficientemente grande, a sucessão de estados gerados corresponda à distribuição de Boltzmann. Dizemos, então, que o sistema simulado atingiu o equilíbrio ou, o sistema termalizou.

### *Ergodicidade*

Na distribuição de Boltzmann todos os estados possíveis de um sistema possuem uma probabilidade não nula de ocorrência, Eq. (2.21). Desta forma, o processo de Markov deve ser capaz de gerar qualquer estado dentro de um número finito de repetições do processo. Note que a transição entre os estados  $\alpha$  e  $\beta$ ,  $\alpha \rightarrow \beta$ , pode ter probabilidade nula, entretanto devem haver subestados que conectam os estados  $\alpha$  e  $\beta$ , digamos  $\alpha \rightarrow \lambda \rightarrow \dots \rightarrow \mu \rightarrow \beta$ , de modo que o estado  $\beta$  seja acessível.

### *Balanço Detalhado*

A condição de balanço detalhado nos permite garantir que, no equilíbrio, os estados gerados pelo nosso processo de Markov correspondam à distribuição de Boltzmann, como queremos. Esta condição nos diz que, no equilíbrio, a taxa na qual o

sistema realiza transições para um dado estado  $\mu$  é igual à taxa de transição na qual o sistema deixa o estado  $\mu$ . Matematicamente temos

$$w_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = w_\nu P(\nu \rightarrow \mu), \quad (2.27)$$

onde  $w_\mu$  é a probabilidade do sistema ser encontrado no estado  $\mu$  e  $P(\mu \rightarrow \nu)$  é a probabilidade do sistema realizar uma transição para o estado  $\nu$  estando no estado  $\mu$ . Podemos escrever a equação acima como

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{w_\nu}{w_\mu}. \quad (2.28)$$

Escolhendo as probabilidades  $w$  como sendo as probabilidades de Boltzmann teremos

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{w_\nu}{w_\mu} = e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)}. \quad (2.29)$$

Satisfazendo a condição de balanço detalhado, Eq. (2.29), a Eq. (2.26) e a condição de ergodicidade, a distribuição obtida pelo processo de Markov corresponderá à distribuição de Boltzmann quando termalizada [5]. Note que temos uma certa liberdade na escolha das probabilidades de transição. Desta forma, poderíamos escolher uma probabilidade de transição que satisfaça as Eqs. (2.29) e (2.26) e escrever um programa de computador para realizar a simulação, entretanto ainda temos um problema. Qual é o processo de Markov que gera estados com as probabilidades de Boltzmann corretas? A solução para este impasse está no conceito de **taxa de aceitação**.

### *Taxa de Aceitação*

Iniciemos este tópico com a pergunta do tópico anterior. Qual é o processo de Markov que gera estados com as probabilidades de Boltzmann corretas? Felizmente podemos reescrever a probabilidade de transição de modo a não ser necessário saber a resposta da pergunta acima. Escrevendo a probabilidade de transição da seguinte forma:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu), \quad (2.30)$$

onde  $g(\mu \rightarrow \nu)$  é a probabilidade de nosso algoritmo gerar o estado  $\nu$  a partir do estado  $\mu$  e  $A(\mu \rightarrow \nu)$  é a probabilidade de nosso algoritmo aceitar este novo estado,  $A(\mu \rightarrow \nu)$  é chamado de taxa de aceitação. Iremos introduzir a equação acima na Eq. (2.29), desta forma estaremos substituindo o problema de conhecer a probabilidade de transição  $P(\mu \rightarrow \nu)$  pelo conhecimento da probabilidade de nosso

algoritmo gerar um estado  $g(\mu \rightarrow \nu)$  e da probabilidade de aceitarmos este estado gerado  $A(\mu \rightarrow \nu)$ . Note que o algoritmo ideal possui taxa de aceitação igual a 100%, ou seja, situação na qual estamos gerando estados com as probabilidades de Boltzmann corretas. Em um caso usual a taxa de aceitação não é de 100%, quanto maior for a taxa de aceitação de um algoritmo, mais eficiente ele é.

A seguir, ilustraremos as idéias expostas até aqui usando o algoritmo de Metropolis. No Cap. 3 apresentaremos o algoritmo *worm* para o modelo de Ising e no Cap. 4 para o campo escalar real.

### 2.3.2 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis, proposto na Ref. [11], famoso e amplamente utilizado em simulações de Monte Carlo, será utilizado neste trabalho com intuito de fixar as idéias envolvidas nas simulações de Monte Carlo. Utilizemos, novamente, o hamiltoniano do modelo de Ising

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (2.31)$$

onde  $B$  é o campo magnético externo. O hamiltoniano acima é definido em um espaço discreto, onde, em cada ponto deste espaço temos um “spin”. Do ponto de vista computacional temos um *array* onde cada elemento deste *array* (sítios da rede) assume os valores  $+1$  ou  $-1$  (valores dos spins na rede). Nas considerações a seguir iremos fixar  $B = 0$  com o intuito de tornar a exposição mais simples.

Considerando uma rede unidimensional com 5 spins, Fig. 2.5, onde todos os spins estão apontados para cima ( $+1$ ) e condições de contorno periódicas, i.e., o vizinho a direita do spin 4 é o spin 0, temos que a energia deste sistema (dada pelo hamiltoniano acima) é  $-5J$ . Consideremos agora uma rede bidimensional  $4 \times 4$  com condição de contorno periódica, Fig. 2.6. Nesta figura estamos considerando uma transição entre duas configurações, a configuração da esquerda possui energia  $-16J$ , já a configuração da direita possui energia  $+16J$ . O valor mínimo de energia para esta rede é  $-16J$  e o valor máximo é  $+16J$ . Ou seja, na Fig. 2.6 estamos considerando uma transição do valor mínimo de energia para o valor máximo. Vimos que, veja apêndice A, no equilíbrio, um sistema ao trocar energia com um reservatório térmico troca pequenas quantidades de energia comparado com a energia média do sistema. Desta forma concluímos que, se nosso algoritmo realizar transições do tipo da Fig. 2.6, apesar dos dois estados na transição (inicial e final) serem estados válidos, não estaremos “imitando” a natureza de um sistema termodinâmico em equilíbrio. Assim, consideraremos transições na qual apenas um spin é flipado,

*single-spin-flip*. Usando *single-spin-flip* estamos garantindo que a flutuação de energia seja pequena ao longo do processo de Markov, além de estarmos garantindo a condição de ergodicidade.

$$\begin{array}{cccccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{array}$$

Figura 2.5: Rede unidimensional.

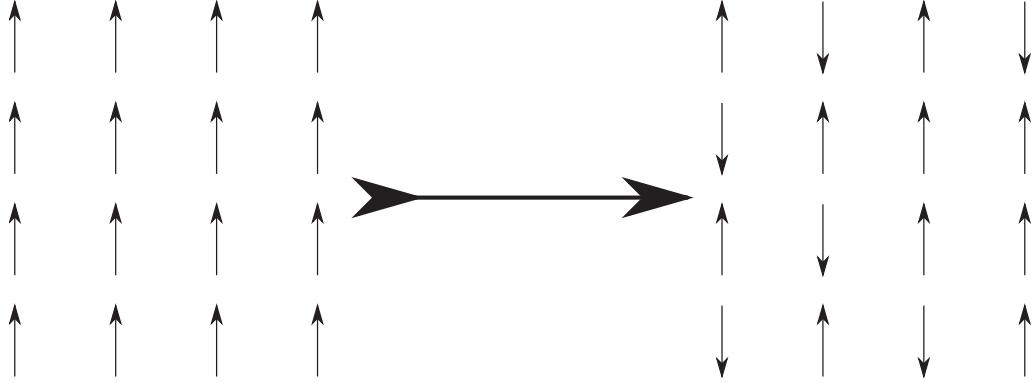


Figura 2.6: Rede bidimensional: transição entre duas configurações.

Das Eqs. (2.29) e (2.30) temos,

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (2.32)$$

Se escolhermos aleatoriamente, e com mesma probabilidade, um dos  $N$  sítios da rede para flipar, teremos que a função  $g(\nu \rightarrow \mu)$  terá valores

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}. \quad (2.33)$$

Os casos onde a diferença entre o estado inicial e final se dá por mais de um spin flipado, e.g. Fig. 2.6, teremos

$$g(\mu \rightarrow \nu) = 0, \quad (2.34)$$

logo

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (2.35)$$

Agora temos que escolher a taxa de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$ . Uma escolha possível seria

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (2.36)$$

onde  $A_0$  é uma constante. Como mencionamos anteriormente, a situação ideal é aquela na qual  $A(\mu \rightarrow \nu) = 1$  para todas as transições, ou seja, nosso algoritmo gera uma cadeia de configurações com os pesos corretos da distribuição Boltzmann. O algoritmo de Metropolis é caracterizado pela escolha da taxa de aceitação, que apesar de não ser o caso ideal, é mais eficiente que o caso acima. Especificamente,

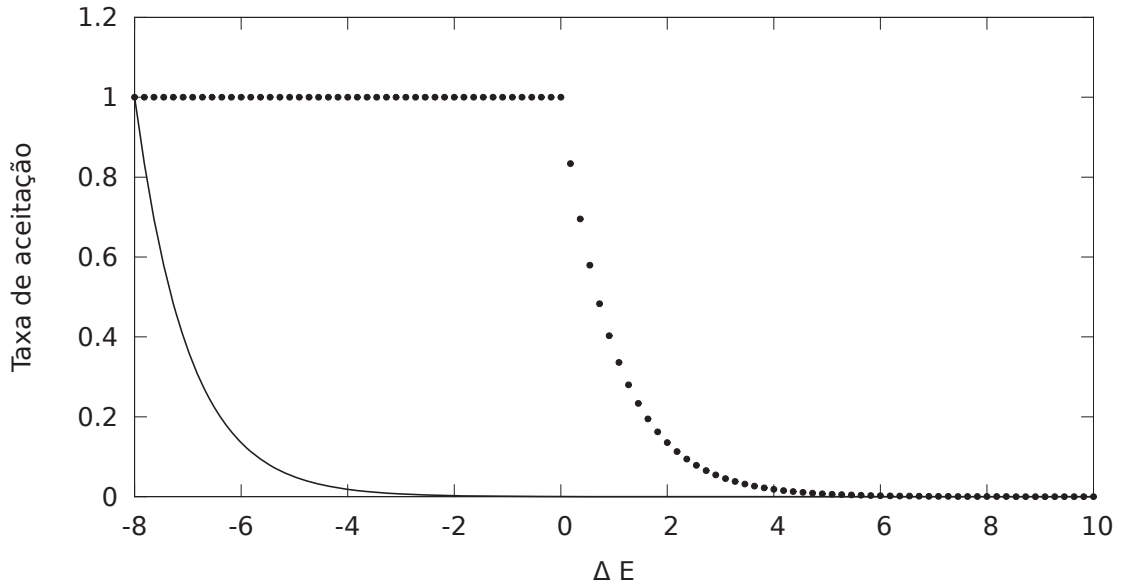


Figura 2.7: Taxas de aceitação.

$$A(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad \text{se } \Delta E \leq 0; \quad (2.37)$$

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta\Delta E} \quad \text{se } \Delta E > 0. \quad (2.38)$$

Ou seja, sempre que estivermos propondo uma transição para uma configuração com energia mais baixa ( $\Delta E < 0$ ), aceitamos essa transição com probabilidade 1. Caso  $\Delta E > 0$ , aceitamos com probabilidade  $e^{-\beta\Delta E}$ , isto é, sorteamos um número  $r$  (entre 0 e 1) aleatoriamente e o comparamos com o valor de  $e^{-\beta\Delta E}$ , se  $r < e^{-\beta\Delta E}$  aceitamos a transição, caso contrário, continuamos na configuração atual. Para visualizarmos a vantagem da taxa de aceitação do algoritmo de Metropolis frente à taxa de aceitação da Eq. (2.36) olhemos para o gráfico da Fig. 2.7. Nesse gráfico usamos  $A_0 = 2zJ$ , onde  $z$  é a quantidade de vizinhos que um dado sítio possui, fizemos essa escolha para garantirmos que  $A(\mu \rightarrow \nu)$  esteja entre 0 e 1 e assim interpretá-lo como uma probabilidade.

A seguir, descrevemos os passos que implementam o algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising:

1. Inicializar a rede com uma configuração qualquer;
2. escolher aleatoriamente um sítio ( $s_i$ );
3. propor  $s_i \rightarrow -s_i$ ;
4. calcular  $\Delta E$ ;
5. se  $\Delta E < 0$ , realizar  $s_i \rightarrow -s_i$ ;
  - se  $\Delta E > 0$ ;
    - sortear um número aleatório ( $r$ ) entre 0 e 1;
    - se  $r < e^{-\beta\Delta E}$ , realizar  $s_i \rightarrow -s_i$ .
6. repetir os procedimentos 2 a 5  $N$  vezes ( $N$  é o número de sítios da rede);
7. cálculo dos observáveis;
8. repetir os procedimentos 2 a 7 inúmeras vezes.

Agora somos capazes de realizar simulações de Monte Carlo no modelo de Ising com o algoritmo de Metropolis. No Cap. 5 mostraremos alguns resultados. Estes resultados serão usados para comparar com os obtidos pelo algoritmo *worm*, que será discutido no Cap. 3. Apresentamos também resultados analíticos, obtidos da solução exata do problema.

## Capítulo 3

### Algoritmo *worm* para o modelo de Ising

O algoritmo *worm*, proposto na Ref. [14], origina-se de uma expansão de altas temperaturas da função de partição. Por meio desta expansão, deixamos de considerar a soma tradicional, sobre todas as configurações de spin sobre a rede e passamos a considerar uma nova soma. Esta nova soma é realizada no que chamamos de *bond configuration*, para cada *bond configuration* associamos um “desenho” que correspondem a caminhos (worms) na rede. Desta forma, a função de partição será reescrita em uma nova forma, em termos de worms. Neste capítulo discutiremos o algoritmo worm via modelo de Ising. Como dito anteriormente, utilizaremos este modelo com o intuito de tornar a apresentação mais didática. No Cap. 4, iremos generalizar as ideias aqui desenvolvidas para o campo escalar real, que o foco principal de nossas atenções na presente dissertação. Inicialmente, realizaremos uma expansão de altas temperaturas do modelo de Ising, logo após, abordaremos o algoritmo worm propriamente dito.

#### 3.1 Expansão em *worms*

Vamos iniciar a discussão expandindo o fator de Boltzmann da função de partição do modelo de Ising, sem campo magnético externo. O intuito é introduzir o conceito de caminhos (worms) na rede e, posteriormente, calcular grandezas termodinâmicas por meio de simulações de Monte Carlo usando o algoritmo de worm [14]. Em duas dimensões, o hamiltoniano de Ising sem campo magnético externo é dado por

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j, \quad (3.1)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  significa que os sítios  $i$  e  $j$  são primeiros vizinhos. Podemos reescrever o hamiltoniano acima da seguinte forma:

$$H = -J \sum_b S_b, \quad (3.2)$$

onde  $b$  (“bond”),  $b \equiv \{i, j\}$ , é uma nova notação para primeiros vizinhos, com o entendimento de que estamos tratando de uniões entre sítios vizinhos. A Fig. 3.1 a seguir ilustra o que falamos até aqui.

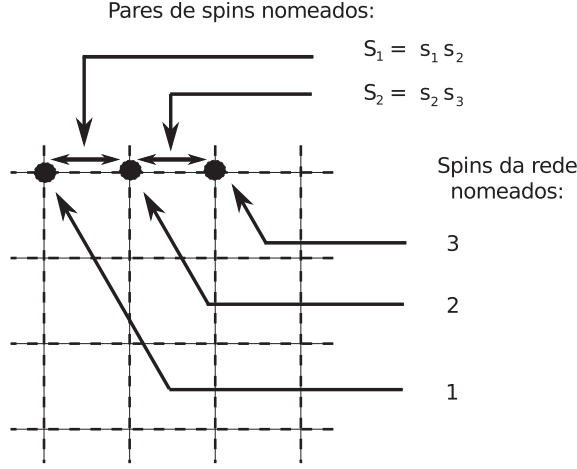


Figura 3.1: Rede bi-dimensional de spins  $4 \times 4$ . Aqui temos uma possível nomeação de alguns sítios e pares de spins.

Consideremos agora as seguintes definições:

$$-\frac{H}{T} \equiv \sum_b H_b, \quad H_{b=\{i,j\}} \equiv \beta s_i s_j, \quad \beta \equiv \frac{1}{T}, \quad (3.3)$$

onde  $T$  é a temperatura do sistema. Desta forma, temos que, tomando  $J = 1$  por simplicidade,

$$e^{-\frac{H}{T}} = \prod_b e^{H_b} = \prod_b e^{\beta s_i s_j} = \prod_b e^{\beta S_b}. \quad (3.4)$$

Ao expandirmos esta exponencial em série, obtemos

$$e^{-\frac{H}{T}} = \prod_b \sum_{N_b=0}^{\infty} \beta^{N_b} \frac{(S_b)^{N_b}}{N_b!}. \quad (3.5)$$

Vamos desenvolver a expressão acima um pouco mais. Consideremos uma rede linear com 3 spins e condições de contorno periódicas, veja Fig. 3.2. Desta forma, teremos

$$\begin{aligned} e^{-\frac{H}{T}} &= \left[ (\beta)^{N_1=0} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} + (\beta)^{N_1=1} \frac{S_1^{N_1=1}}{(N_1=1)!} + (\beta)^{N_1=2} \frac{S_1^{N_1=2}}{(N_1=2)!} + \dots \right] \times \\ &\times \left[ (\beta)^{N_2=0} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} + (\beta)^{N_2=1} \frac{S_2^{N_2=1}}{(N_2=1)!} + (\beta)^{N_2=2} \frac{S_2^{N_2=2}}{(N_2=2)!} + \dots \right] \times \\ &\times \left[ (\beta)^{N_3=0} \frac{S_3^{N_3=0}}{(N_3=0)!} + (\beta)^{N_3=1} \frac{S_3^{N_3=1}}{(N_3=1)!} + (\beta)^{N_3=2} \frac{S_3^{N_3=2}}{(N_3=2)!} + \dots \right], \quad (3.6) \end{aligned}$$

onde os termos entre colchetes correspondem respectivamente ao primeiro, segundo e terceiro par de vizinhos. Após manipulações algébricas, podemos re-escrever esta equação como

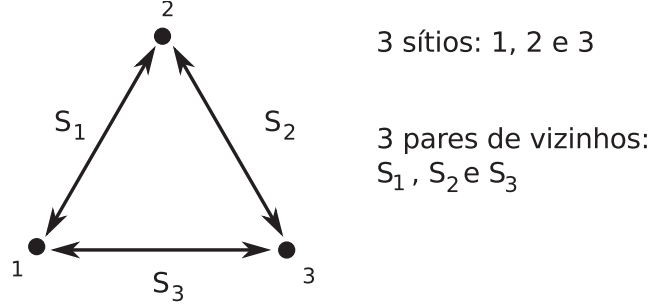


Figura 3.2: Rede unidimensional com 3 spins e condições de contorno periódicas.

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{H}{T}} &= \left( \beta^{(N_1=0)+(N_2=0)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} + \beta^{(N_1=0)+(N_2=1)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=1}}{(N_2=1)!} + \right. \\
&+ \beta^{(N_1=0)+(N_2=2)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=2}}{(N_2=2)!} + \beta^{(N_1=1)+(N_2=0)} \frac{S_1^{N_1=1}}{(N_1=1)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} + \\
&+ \beta^{(N_1=1)+(N_2=1)} \frac{S_1^{N_1=1}}{(N_1=1)!} \frac{S_2^{N_2=1}}{(N_2=1)!} + \beta^{(N_1=1)+(N_2=2)} \frac{S_1^{N_1=1}}{(N_1=1)!} \frac{S_2^{N_2=2}}{(N_2=2)!} + \\
&+ \beta^{(N_1=2)+(N_2=0)} \frac{S_1^{N_1=2}}{(N_1=2)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} + \beta^{(N_1=2)+(N_2=1)} \frac{S_1^{N_1=2}}{(N_1=2)!} \frac{S_2^{N_2=1}}{(N_2=1)!} + \\
&+ \left. \beta^{(N_1=2)+(N_2=2)} \frac{S_1^{N_1=2}}{(N_1=2)!} \frac{S_2^{N_2=2}}{(N_2=2)!} + \dots \right) \left( \beta^{N_3=0} \frac{S_3^{N_3=0}}{(N_3=0)!} + \right. \\
&+ \left. \beta^{N_3=1} \frac{S_3^{N_3=1}}{(N_3=1)!} + \beta^{N_3=2} \frac{S_3^{N_3=2}}{(N_3=2)!} + \dots \right), \tag{3.7}
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{H}{T}} &= \beta^{(N_1=0)+(N_2=0)+(N_3=0)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} \frac{S_3^{N_3=0}}{(N_3=0)!} + \\
&+ \beta^{(N_1=0)+(N_2=0)+(N_3=1)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} \frac{S_3^{N_3=1}}{(N_3=1)!} + \\
&+ \beta^{(N_1=0)+(N_2=0)+(N_3=2)} \frac{S_1^{N_1=0}}{(N_1=0)!} \frac{S_2^{N_2=0}}{(N_2=0)!} \frac{S_3^{N_3=2}}{(N_3=2)!} + \dots \tag{3.8}
\end{aligned}$$

Logo,

$$e^{-\frac{H}{T}} = \sum_{\{N_b\}} \beta^{\sum_b N_b} \prod_b \frac{1}{N_b!} S_b^{N_b}. \tag{3.9}$$

Nesta soma,  $\sum_{\{N_b\}}$  significa que devemos somar sobre todas as combinações de  $N_b$ ,  $\{N_b\}$  é chamado de “bond configuration”. No exemplo acima, onde tínhamos

uma rede unidimensional com 3 sítios (consequentemente temos 3 pares de vizinhos e 3  $N_b$ s), escrevemos explicitamente três possíveis configurações,  $(N_1 = 0, N_2 = 0, N_3 = 0)$ ,  $(N_1 = 0, N_2 = 0, N_3 = 1)$  e  $(N_1 = 0, N_2 = 0, N_3 = 2)$ . Note que existem infinitas outras configurações, e.g.,  $(N_1 = \infty, N_2 = 0, N_3 = 13)$ .

Até o momento não especificamos em qual configuração de spins nossa rede está, as equações acima são válidas para qualquer configuração de spins possível. A soma sobre todas as possíveis configurações de spins de  $e^{-\frac{H}{T}}$  é a função de partição.

Entretanto, antes de realizarmos tal soma, consideremos uma particular escolha de bond configuration (digamos  $N_b = \{2, 1, 0\}$ ). Note que ainda estamos tratando de uma rede unidimensional com 3 spins, esta rede pode ser representada pela Fig. 3.3.

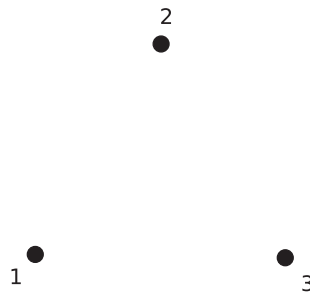


Figura 3.3: Rede unidimensional com 3 spins e condição de contorno periódica.

Iremos representar graficamente cada valor de  $N_b$  como um “risco” entre seus respectivos sítios, desta forma para nossa escolha de bond configuration ( $N_1 = 2$ ,  $N_2 = 1$  e  $N_3 = 0$ ) teremos dois riscos entre os sítios 1 e 2, um risco entre os sítios 2 e 3 e nenhum risco entre os sítios 3 e 1 — ver Fig. 3.4. Estes riscos irão formar caminhos (“worms”) em uma rede bidimensional e desempenharão um papel importante no algoritmo de worm.

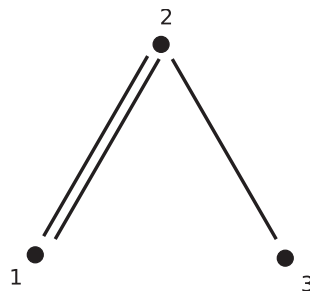


Figura 3.4: Representação gráfica de uma “bond configuration”.

Agora, para nossa particular escolha ( $N_1 = 2$ ,  $N_2 = 1$  e  $N_3 = 0$ ), vamos efetuar

a soma sobre todas as possíveis configurações de spins, ou seja, estamos calculando

$$\sum_{\{\mu\}} \Pi_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} S_b^{N_b}. \quad (3.10)$$

Lembrando que  $S_b = s_i s_j$ :

$$\begin{aligned} & \beta^{N_1+N_2+N_3} \frac{(s_1^{(1)} s_2^{(1)})^{N_1}}{N_1!} \frac{(s_1^{(1)} s_2^{(1)})^{N_2}}{N_2!} \frac{(s_1^{(1)} s_2^{(1)})^{N_3}}{N_3!} && 1^a \text{ configuração de spins} \\ + & \beta^{N_1+N_2+N_3} \frac{(s_1^{(2)} s_2^{(2)})^{N_1}}{N_1!} \frac{(s_1^{(2)} s_2^{(2)})^{N_2}}{N_2!} \frac{(s_1^{(2)} s_2^{(2)})^{N_3}}{N_3!} && 2^a \text{ configuração de spins} \\ + & \beta^{N_1+N_2+N_3} \frac{(s_1^{(3)} s_2^{(3)})^{N_1}}{N_1!} \frac{(s_1^{(3)} s_2^{(3)})^{N_2}}{N_2!} \frac{(s_1^{(3)} s_2^{(3)})^{N_3}}{N_3!} && 3^a \text{ configuração de spins} \\ + & \dots && \text{outras configurações} \\ = & \frac{\beta^{N_1+N_2+N_3}}{N_1!N_2!N_3!} \left( s_1^{(1)N_1+N_3} s_2^{(1)N_1+N_2} s_3^{(1)N_2+N_3} + s_1^{(2)N_1+N_3} s_2^{(2)N_1+N_2} s_3^{(2)N_2+N_3} + \right. \\ & \left. + s_1^{(3)N_1+N_3} s_2^{(3)N_1+N_2} s_3^{(3)N_2+N_3} + \dots \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Note que o spin do sítio 1, seja qual for a configuração de spin, é elevado à soma dos traços (que agora chamaremos de bonds) que saem do sítio 1, o mesmo é válido para o spin de qualquer outro sítio.

Podemos agora generalizar a expressão acima para o caso mais geral possível, i.e, qualquer dimensão e qualquer quantidade de sítios. Para uma rede com  $M$  spins temos um total de  $g = 2^M$  configurações. Lembremos que no modelo de Ising cada sítio pode assumir dois valores de spin  $s_i = \pm 1$ , desta forma a expressão geral da equação anterior pode ser escrita como:

$$\frac{\beta^{N_1+N_2+\dots+N_{2M}}}{N_1!N_2!\dots N_{2M}!} \left[ s_1^{(1)k_1} s_2^{(1)k_2} s_3^{(1)k_3} \dots s_M^{(1)k_{2M}} + s_1^{(2)k_1} s_2^{(2)k_2} s_3^{(2)k_3} \dots s_M^{(2)k_{2M}} + \dots \right. \\ \left. \dots + s_1^{(g)k_1} s_2^{(g)k_2} s_3^{(g)k_3} \dots s_M^{(g)k_{2M}} \right], \quad (3.12)$$

onde  $k_i$  é a soma de bonds em torno do sítio  $i$ , ou seja,

$$k_i = \sum_{\nu} N_{i,\nu}, \quad (3.13)$$

e na soma acima,  $\nu$  representa os sítios vizinhos de  $i$ .

Consideremos agora um determinado sítio, digamos  $i = 1$ . Devemos notar que, dentre as  $g = 2^M$  configurações de spin  $(s_1^{(1)k_1}, s_1^{(2)k_1}, s_1^{(3)k_1}, \dots, s_1^{(g)k_1})$ , a metade destas configurações,  $g/2$ , assume o valor “+1” e a outra metade “-1”. Desta forma podemos escrever o termo entre colchetes, Eq. (3.12), como

$$\left[ s_1^{(1)k_1} s_2^{(1)k_2} \dots s_M^{(1)k_M} + s_1^{(2)k_1} s_2^{(2)k_2} \dots s_M^{(2)k_M} + \dots + s_1^{(g)k_1} s_2^{(g)k_2} \dots s_M^{(g)k_M} \right] = \\ (+1)^{k_1} \left( \dots \frac{g}{2} \text{ termos} \right) + (-1)^{k_1} \left( \dots \frac{g}{2} \text{ termos} \right). \quad (3.14)$$

Podemos realizar o mesmo procedimento para os termos entre parênteses,

$$\begin{aligned} & \left[ s_1^{(1)^{k_1}} s_2^{(1)^{k_2}} \dots s_M^{(1)^{k_M}} + s_1^{(2)^{k_1}} s_2^{(2)^{k_2}} \dots s_M^{(2)^{k_M}} + \dots + s_1^{(g)^{k_1}} s_2^{(g)^{k_2}} \dots s_M^{(g)^{k_M}} \right] = \\ & \quad (+1)^{k_1} \left[ (+1)^{k_2} \left( \dots \frac{g}{4} \text{ termos} \right) + (-1)^{k_2} \left( \dots \frac{g}{4} \text{ termos} \right) \right] + \\ & \quad (-1)^{k_1} \left[ (+1)^{k_2} \left( \dots \frac{g}{4} \text{ termos} \right) + (-1)^{k_2} \left( \dots \frac{g}{4} \text{ termos} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.15)$$

e assim sucessivamente,

$$\begin{aligned} & \left[ s_1^{(1)^{k_1}} s_2^{(1)^{k_2}} \dots s_M^{(1)^{k_M}} + s_1^{(2)^{k_1}} s_2^{(2)^{k_2}} \dots s_M^{(2)^{k_M}} + \dots + s_1^{(g)^{k_1}} s_2^{(g)^{k_2}} \dots s_M^{(g)^{k_M}} \right] = \\ & = (1)^{k_1} (1)^{k_2} (1)^{k_3} \dots (1)^{k_M} + (1)^{k_1} (1)^{k_2} (-1)^{k_3} \dots + (1)^{k_1} (-1)^{k_2} (1)^{k_3} \dots \\ & + (1)^{k_1} (-1)^{k_2} (-1)^{k_3} \dots + \dots \\ & + (-1)^{k_1} (1)^{k_2} (1)^{k_3} \dots (-1)^{k_M} + (-1)^{k_1} (1)^{k_2} (-1)^{k_3} \dots + (-1)^{k_1} (-1)^{k_2} (1)^{k_3} \dots \\ & + (-1)^{k_1} (-1)^{k_2} (-1)^{k_3} \dots + \dots \end{aligned} \quad (3.16)$$

Agora, podemos colecionar os termos e reescrever a Eq. (3.12) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} & \left[ s_1^{(1)^{k_1}} s_2^{(1)^{k_2}} \dots s_M^{(1)^{k_M}} + s_1^{(2)^{k_1}} s_2^{(2)^{k_2}} \dots s_M^{(2)^{k_M}} + \dots + s_1^{(g)^{k_1}} s_2^{(g)^{k_2}} \dots s_M^{(g)^{k_M}} \right] = \\ & \quad \left[ (+1)^{k_1} + (-1)^{k_1} \right] \left[ (+1)^{k_2} + (-1)^{k_2} \right] \dots \left[ (+1)^{k_M} + (-1)^{k_M} \right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

No lado direito da expressão acima, o primeiro par de colchetes corresponde ao primeiro sítio da rede. O segundo par de colchetes, ao segundo sítio e assim por diante. Em uma forma mais compacta temos

$$\left[ s_1^{(1)^{k_1}} \dots s_M^{(1)^{k_M}} + s_1^{(2)^{k_1}} \dots s_M^{(2)^{k_M}} + \dots + s_1^{(g)^{k_1}} \dots s_M^{(g)^{k_M}} \right] = \prod_i \left( \sum_{s_i=\pm 1} s_i^{k_i} \right). \quad (3.18)$$

Finalmente, após as considerações acima, podemos escrever a função de partição do modelo de Ising como

$$Z = \sum_{\{N_b\}} W_Z(\{N_b\}), \quad (3.19)$$

onde definimos,

$$Q(k_i) \equiv \sum_{s_i=\pm} s_i^{k_i}, \quad (3.20)$$

$$W_Z(\{N_b\}) \equiv \left( \prod_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \right) (\prod_i Q(k_i)). \quad (3.21)$$

Com isto, temos agora que a função de partição é obtida por meio da soma de todos os possíveis gráficos (bond configuration), veja Fig. 3.4, ao invés da soma de todas

as possíveis configurações de spin sobre a rede. Estritamente falando, esta nova função de partição não é válida somente para altas temperaturas, uma vez que não estamos truncando nenhuma das somas acima. Entretanto, para altas temperaturas apenas gráficos com poucos bonds fornecem uma contribuição significativa, uma vez que  $\beta \equiv 1/T$  está elevado à soma de todos os bonds.

Outro ponto interessante desta formulação é que nem todos os gráficos, mesmo quando a soma de bonds é pequena, fornecem contribuição não nula para a função de partição. Como podemos ver na Eq. (4.84), se um dos sítios da rede possuir um número ímpar de bonds em torno de si,  $Q(k_i)$  resulta em zero. Desta forma, para a função de partição, apenas os gráficos nos quais todos os sítios possuem um número par de bonds fornecem contribuição não nula.

Olhemos agora para a função de correlação de dois pontos

$$\langle s_{i_1} s_{i_2} \rangle = G(i_1 - i_2) \equiv \frac{g(i_1 - i_2)}{Z}, \quad (3.22)$$

onde

$$g(i_1 - i_2) \equiv \sum_{\{s_i\}} s_{i_1} s_{i_2} e^{-\beta H}, \quad (3.23)$$

e  $\{s_i\}$  significa que estamos somando sobre todas as configurações de spin. Por meio do mesmo procedimento utilizado até agora, concluiremos que a diferença entre a função de partição  $Z$  e a função de correlação  $g(i_1 - i_2)$  está na função  $Q(k_i)$ . Como já vimos, no caso da função de partição,

$$\Pi_b Q(k_i) = \left[ (+1)^{k_1} + (-1)^{k_1} \right] \left[ (+1)^{k_2} + (-1)^{k_2} \right] \dots \left[ (+1)^{k_M} + (-1)^{k_M} \right], \quad (3.24)$$

onde,  $k_i \equiv \sum_{\nu} N_{i,\nu}$  e  $\nu$  representa os sítios vizinhos do sítio  $i$ . Já para função de correlação  $g(i_1 - i_2)$  teremos,

$$\Pi_i Q(k_i) = \left[ (+1)^{k_1} + (-1)^{k_1} \right] \dots \left[ (+1)^{k_{i_1+1}} + (-1)^{k_{i_1+1}} \right] \dots \left[ (+1)^{k_{i_2+1}} + (-1)^{k_{i_2+1}} \right]. \quad (3.25)$$

ou seja, para a função de correlação de dois pontos  $g(i_1 - i_2)$ , definimos então

$$\bar{k}_i \equiv \sum_{\nu} N_{i,\nu} + \delta_{i,i_1} + \delta_{i,i_2}. \quad (3.26)$$

Isso significa que, diferentemente da função de partição, dado uma configuração de bonds, os sítios  $i_1$  e  $i_2$  devem possuir um número ímpar de “bonds” nos sítios  $i_1$  e  $i_2$  para que sua contribuição não seja nula para a função de correlação. Desta forma, escrevemos

$$g(i_1 - i_2) = \sum_{\{N_b\}} W_g(\{N_b\}), \quad (3.27)$$

onde,

$$W_g(\{N_b\}) \equiv \left( \prod_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \right) (\Pi_i Q(\bar{k}_i)), \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \bar{k}_i &\equiv \sum_{\nu} N_{i,\nu} + \delta_{i,i_1} + \delta_{i,i_2}, \\ &= k_i + \delta_{i,i_1} + \delta_{i,i_2}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

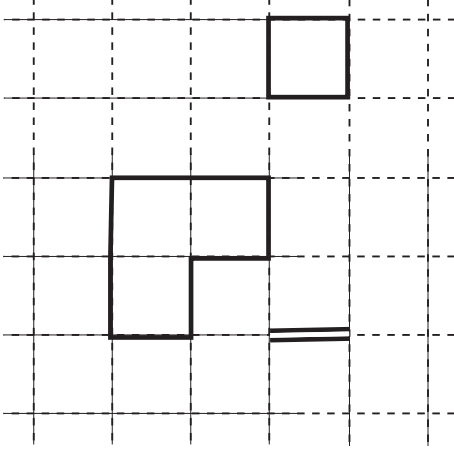


Figura 3.5: Possível configuração para a função de partição.

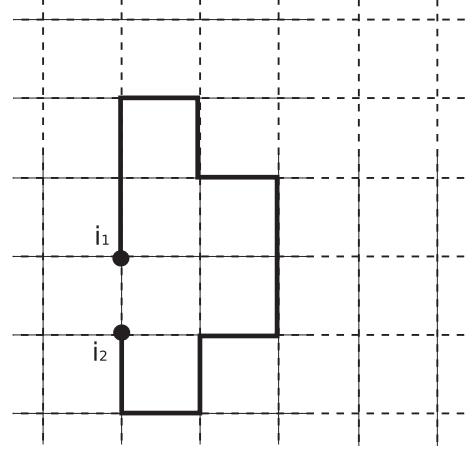


Figura 3.6: Possível configuração para a função de correlação.

As Figs. 3.5 e 3.6 ilustram respectivamente configurações de bonds que fornecem contribuição não nula para a função de partição e correlação do modelo de Ising em uma rede  $6 \times 6$ .

Agora que conhecemos esta nova formulação da função de partição, função de correlação e, sabemos também como representar configurações (estados do sistema) nesta nova formulação, estamos aptos a tratar do algoritmo worm.

### 3.2 Algoritmo *worm*

Como vimos, o algoritmo de Metropolis consiste em: dada uma configuração de spins, gerar uma nova configuração e aceitá-la de acordo com uma dada taxa de aceitação. O algoritmo *worm* consiste em propor uma nova configuração de bond a partir de uma dada configuração, como na Fig. 3.6, por meio da movimentação dos pontos  $i_1$  e  $i_2$  [14]. Antes de derivarmos a expressão da taxa de aceitação vamos fazer uma descrição preliminar do algoritmo.

Podemos imaginar o ponto  $i_1$  como uma *caneta* que, ao andar pela rede, escreve ou apaga uma linha (aumenta ou diminui em uma unidade o valor do “bond” entre os

sítios em questão). A escolha da direção na qual vamos mover o ponto  $i_1$  é aleatória, bem como a escolha do procedimento apagar/escrever. O ponto  $i_2$  é uma espécie de marcador, quando  $i_1 = i_2$  (situação na qual geramos uma configuração válida para a função de partição) iremos escolher *entre* continuar escrevendo/apagando no ponto  $i = i_1 = i_2$  que estamos *ou* começar a escrever/apagar em um outro ponto qualquer da rede. Se chamarmos a probabilidade de começarmos a escrever/apagar em outro ponto da rede de  $p_0$  e a probabilidade de continuarmos a escrever/apagar no mesmo ponto de  $p_1$ , temos que a soma destas probabilidades é:  $p_0 + p_1 = 1$ . Notem que os valores de  $p_0$  e  $p_1$  são arbitrários, desde que a soma de seus valores seja igual a 1. Esta é a descrição “quase” completa do algoritmo. Ela é “quase” completa devido ao fato de, como veremos na Sec. 3.2.2, “Observáveis I”, existi um problema no cálculo da magnetização. Dizemos então que: esta descrição é completa se não estivermos interessados em calcular a magnetização, restando-nos apenas saber qual é a probabilidade de aceitar, taxa de aceitação, uma nova configuração de “bonds” gerada a partir de uma dada configuração. Se estivermos interessados em calcular a magnetização, a descrição deverá ser icrementada. A seguir teremos as Seções: “Taxa de Aceitação I” e “Observáveis I” para o caso onde não estamos interessados na magnetização, logo após temos, “Spin Fantasma” que descreve o procedimento necessário para calcular a magnetização, por fim, “Taxa de Aceitação II” e “Observáveis II” para o caso onde estamos interessados na magnetização.

### 3.2.1 Taxa de Aceitação I

A probabilidade do estado  $\mu$  ocorrer, dentre todos os possíveis estados de um sistema, é dada por

$$w_\mu = \frac{e^{-\beta H_\mu}}{Z}. \quad (3.30)$$

Nesta nova formulação de “bond configuration”, podemos reescrever esta probabilidade como sendo

$$w_{\{N_b\}} = \frac{W(\{N_b\})}{Z}, \quad (3.31)$$

que corresponde à probabilidade do gráfico (estado - “bond configuration”) ocorrer. Com esta nova maneira de escrever a probabilidade de Boltzmann e com as Eqs. (2.29) e (2.30) seremos capazes de derivar a taxa de aceitação do algoritmo worm. Entretanto, devemos considerar os procedimentos de apagar e escrever separadamente.

Imagine que nosso algoritmo esteja realizando o procedimento de escrever, ou seja, estamos realizando a transição entre as configurações  $\{N_b\}$  e  $\{N'_b\}$ , veja Fig. 3.7.

A discussão a seguir é válida para a transição mostrada na Fig. 3.7. Estas duas configurações estão relacionadas pelo vínculo de balanço detalhado. Usando as Eqs. (2.29) e (2.30) podemos escrever

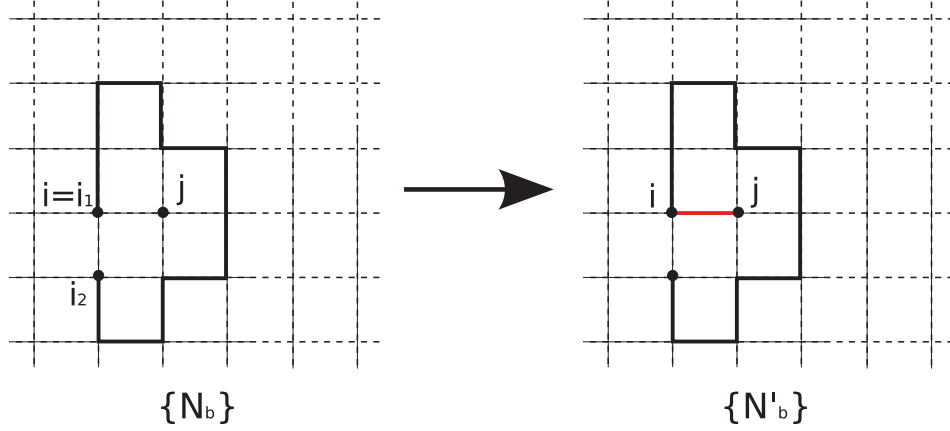


Figura 3.7: Transição entre duas configurações de worm.

$$\frac{A_{\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}}}{A_{\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}}} = \frac{w_{\{N'_b\}} g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\})}{w_{\{N_b\}} g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\})}. \quad (3.32)$$

Para determinarmos os valores de  $g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\})$  e  $g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\})$  lembremos que devemos fazer uma escolha, como mesma probabilidade, entre dois procedimentos (apagar ou escrever) e escolher, como mesma probabilidade, uma das quatro possíveis direções (estamos tratando de duas dimensões). Desta forma, temos

$$g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}) = g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}) = \frac{1}{2 \times 4} = \frac{1}{8}. \quad (3.33)$$

Usando as Eqs. (3.31) e (3.21) temos

$$\begin{aligned} \frac{A_{\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}}}{A_{\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}}} &= \frac{\beta^{\sum N_b + 1} N_1! \dots N_{\langle i,j \rangle}! \dots}{\beta^{\sum N_b} N_1! \dots (N_{\langle i,j \rangle} + 1)! \dots} \\ &\times \frac{Q(k_1)Q(k_2) \dots Q(k_i + 1)Q(k_j + 1 + 1) \dots}{Q(k_1)Q(k_2) \dots Q(k_i + 1)Q(k_j) \dots}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

A sutileza da equação acima está na razão entre as funções  $Q(k_i)$ . O numerador desta razão corresponde aos sítios da nova configuração  $\{N'_b\}$  e o denominador corresponde a configuração antiga  $\{N_b\}$ . Apenas nos sítios  $i$  e  $j$  é que temos diferença nas funções  $Q$  de ambas configurações. Ambas configurações são configurações do tipo “função de correlação”. No sítio  $i$  da configuração  $\{N_b\}$  (denominador) temos  $Q(k_i + 1)$ , onde  $k_i$  é a soma dos “bonds” em torno do sítio  $i$  e o “+1” deve-se ao fato deste sítio ser a ponta de um gráfico do tipo “função de correlação”. Para a

configuração  $\{N'_b\}$  (numerador), na função  $Q(k_i + 1)$ , sítio  $i$ , o termo “+1” deve-se ao fato de fazermos um “risco” entre os sítios  $i$  e  $j$ ; na função  $Q(k_j + 1 + 1)$ , um dos “+1” corresponde ao “risco” que fizemos e o outro corresponde ao fato de, nesta nova configuração, o sítio  $j$  corresponder à ponta de uma configuração do tipo “função de correlação”. Logo, podemos escrever a taxa de aceitação para uma transição do tipo da Fig. 3.7 da seguinte forma

$$A^+(i \rightarrow j, N_b \rightarrow N_b + 1) = \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}, \quad (3.35)$$

onde estamos usando o índice + para enfatizar que estamos tratando do procedimento “escrever”, analogamente usaremos o índice – para o procedimento “apagar”.

Como mencionado anteriormente, considerações acima são válidas para tipos de transições ilustradas na Fig. 3.7, ou seja, casos onde  $i \neq i_1$  e  $j \neq i_2$ . Agora vamos realizar as generalizações necessárias. O que não levamos em conta até o momento é que podemos ter as situações:  $i = i_1 = i_2$  ou  $i = i_1$  e  $j = i_2$ . Nestes casos não é mais válida a relação  $g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}) = g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}) = \frac{1}{8}$  e a razão entre as funções  $Q(k_i)$  também são modificadas. Consideremos o caso  $i = i_1 = i_2$ . Devemos lembrar que, no momento em que nosso algoritmo fecha um *worm* ( $i = i_1 = i_2$ ) devemos escolher entre: continuar apagando/escrevendo no mesmo sítio  $i$  com probabilidade  $p_1$  ou começar a apagar/escrever em outro sítio da rede, escolhido aleatoriamente, com probabilidade  $p_0$ . Repetindo, os valores de  $p_0$  e  $p_1$  são arbitrários desde que estes estejam vinculados pela relação  $p_0 + p_1 = 1$ . Desta forma,  $g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\})$  deve incluir: a probabilidade de continuar apagando/escrevendo ( $p_1$ ) no sítio  $i$ , a escolha entre uma das quatro direções (onde cada direção possui a mesma probabilidade de ser escolhida) e a escolha entre um os procedimentos apagar/escrever (onde a escolha entre os procedimentos é realizada com mesma probabilidade). Desta forma temos que

$$g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}) = \frac{p_1}{4 \times 2} = \frac{p_1}{8}. \quad (3.36)$$

Já para a probabilidade  $g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\})$ , temos apenas que considerar a escolha da direção e do procedimento, ou seja,

$$g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}) = \frac{1}{4 \times 2} = \frac{1}{8}, \quad (3.37)$$

logo teremos

$$\frac{A_{\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}}}{A_{\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}}} = \frac{1}{p_1} \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1 + 1)Q(k_j + 1 + 1)\dots}{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i)Q(k_j)\dots}. \quad (3.38)$$

Notem a diferença das funções  $Q(k)$ , correspondente ao sítio  $i = i_1 = i_2$ , no numerador e denominador, a explicação destes termos é análoga a utilizada para o caso onde  $i \neq i_1$  e  $j \neq i_2$ . Desta forma,

$$A^+(i \rightarrow j, N_b \rightarrow N_b + 1) = \frac{1}{p_1} \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_i + 2)Q(k_j + 2)}{Q(k_i)Q(k_j)}. \quad (3.39)$$

Para o caso  $i = i_1$  e  $j = i_2$ , as considerações são exatamente as mesmas do caso  $i = i_1 = i_2$ , temos então

$$g(\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}) = \frac{p_1}{8}, \quad (3.40)$$

$$g(\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}) = \frac{1}{8}, \quad (3.41)$$

e

$$\frac{A_{\{N_b\} \rightarrow \{N'_b\}}}{A_{\{N'_b\} \rightarrow \{N_b\}}} = p_1 \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)Q(k_j + 1)\dots}{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)Q(k_j + 1)\dots}. \quad (3.42)$$

Ou seja,

$$A^+(i \rightarrow j, N_b \rightarrow N_b + 1) = p_1 \frac{\beta}{N_b + 1}. \quad (3.43)$$

Desta forma, as taxas de aceitação são iguais para os 3 tipos de transição a menos de um fator multiplicativo envolvendo  $p_1$ , que chamaremos de  $r$ , e da maneira como as funções  $Q$  estão agrupadas. Assim, escrevemos a expressão geral da taxa de aceitação do procedimento “escrever” como

$$A^+(i \rightarrow j, N_b \rightarrow N_b + 1) = r \frac{\beta}{N_b + 1} \mathcal{Q}^+, \quad (3.44)$$

onde

$$r = \begin{cases} 1/p_1 & i_1 = i_2 = i \\ p_1 & i_1 = i, i_2 = j \\ 1 & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.45)$$

e

$$\mathcal{Q}^+ = \begin{cases} \frac{Q(k_i+2)Q(k_j+2)}{Q(k_i)Q(k_j)} & i_1 = i_2 = i \\ 1 & i_1 = i, i_2 = j \\ \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.46)$$

Utilizando a mesma linha de raciocínio, podemos escrever a taxa de aceitação para o procedimento “apagar” como

$$A^-(i \rightarrow j, N_b \rightarrow N_b - 1) = r \frac{N_b}{\beta} \mathcal{Q}^-, \quad (3.47)$$

onde

$$\mathcal{Q}^- = \begin{cases} 1 & i_1 = i_2 = i \\ \frac{Q(k_i-1)Q(k_j-1)}{Q(k_i+1)Q(k_j+1)} & i_1 = i, i_2 = j \\ \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.48)$$

Na Seção seguinte mostraremos como reescrever grandezas termodinâmicas na linguagem *worm*. A princípio, após a Sec. 3.2.2 poderíamos escrever um programa de computador e calcular qualquer observável. Entretanto veremos que para o cálculo da magnetização precisaremos de um “truque”, este truque será apresentado na Sec. 3.2.3.

### 3.2.2 Observáveis I

Derivar a expressão do valor esperado de uma grandeza na linguagem de “bonds” é análogo ao caso tradicional. No ensemble canônico, temos que o valor esperado de uma grandeza  $\mathcal{O}$  é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\mu\}} \mathcal{O}_\mu e^{-\beta E_\mu}, \quad (3.49)$$

onde  $\{\mu\}$  significa que devemos somar sobre todas as configurações. Entretanto, na prática não consideramos todas as possíveis configurações. Em geral tomamos  $M$  medidas do observável  $\mathcal{O}$  e realizamos uma estimativa de seu valor dada por

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathcal{O}_{\mu_i}, \quad (3.50)$$

onde  $\bar{\mathcal{O}}$  é chamado de estimador do observável  $\mathcal{O}$ .

Para o valor esperado da energia temos

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}. \quad (3.51)$$

Logo, para encontrarmos a expressão do valor esperado da energia em termos dos *worms* basta usar a expressão da função de partição em termos dos *worms*. Pois, das Eqs. (3.19) e (3.21) temos

$$Z = \sum_{\{N_b\}} \left( \Pi_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \right) (\Pi_i Q(k_i)), \quad (3.52)$$

e, conseqüentemente,

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \sum_{\{N_b\}} \left( \frac{\sum N_b}{\beta} \right) W_Z(\{N_b\}), \quad (3.53)$$

ou seja, o estimador da energia é

$$\bar{E} = \frac{1}{M} \sum_{\mu_{\{N_b\}}=1}^M \left( -\frac{\sum N_b}{\beta} \right) = \frac{1}{M} \sum_{\mu_{\{N_b\}}=1}^M E_{\mu_{\{N_b\}}}. \quad (3.54)$$

Temos então que o valor da energia de uma dada configuração de bonds é proporcional à soma total de bonds dessa configuração.

O calor específico é dado por

$$C \equiv \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}, \quad (3.55)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura. Desta forma, fazendo  $k = 1$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} C &= \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = \beta^2 \left[ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} + \left( \frac{\partial Z^{-1}}{\partial \beta} \right) \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) \right] \\ &= \beta^2 \left[ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Mas

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = -\langle E \rangle \quad \text{e} \quad \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z = \frac{1}{Z} \sum_{\{\mu\}} H_\mu^2 e^{-\beta H_\mu} = \langle E^2 \rangle. \quad (3.57)$$

Desta expressão, podemos escrever calor específico como

$$C = \beta^2 \left( \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right), \quad (3.58)$$

e, portanto, podemos obter o valor deste observável a partir dos valores médios da energia ao quadrado e da energia.

A expressão para a função de correlação já foi derivada ao longo da construção do algoritmo *worm*. Partindo da definição de função de correlação, Eqs. (3.22) e (3.23):

$$G(i_1 - i_2) = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_{i_1} s_{i_2} e^{-\beta H}, \quad (3.59)$$

temos das Eqs. (3.27) e (3.28), que

$$G(i_1 - i_2) = \frac{1}{Z} \sum_{\{N_b\}} \left( \Pi_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \right) \left( \Pi_i Q(\bar{k}_i) \right). \quad (3.60)$$

Aqui chamamos à atenção para o argumento da função  $Q$ . O argumento na função de partição ( $k_i$ ) corresponde à soma dos “bonds” em torno do sítio  $i$ , para o caso da função de correlação  $G(i_1 - i_2)$ , o argumento é  $k_i + \delta_{i,i_1} + \delta_{i,i_2}$ , ou seja, temos a soma de todos os “bonds” com a adição do número 1 caso o sítio “ $i$ ” seja uma das pontas do *worm*. Desta forma, dizemos que o estimador da função de correlação é  $\delta_{a,i_1} \delta_{b,i_2}$ , onde  $a$  e  $b$  são as extremidades do *worm*.

Vimos que os gráficos que contribuem para a função de correlação  $G(i_1 - i_2)$  são aqueles cujos sítios  $i_1$  e  $i_2$  possuem um número ímpar de bonds e todos os demais sítios possuem um número par de bonds. É fácil notar que, para o spin médio

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta H}, \quad (3.61)$$

temos um problema. Para o spin médio, e conseqüentemente para a magnetização, os gráficos contribuintes são aqueles tais que todos os sítios da rede possuem um número par de bonds, com exceção de um sítio, que deverá possuir um número ímpar de bonds. O problema reside no fato que tal gráfico não existe! Entretanto, existe uma maneira de contornar essa situação, que será discutida na Sec. 3.2.3.

O problema acima citado não se manifesta no cálculo da magnetização quadrática média,

$$\langle m^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \left( \sum_i s_i \right)^2 e^{-\beta H} \quad (3.62)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \left( \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right) e^{-\beta H}. \quad (3.63)$$

Da Eq. (3.59), segue-se então que

$$\langle m^2 \rangle = \sum_r G(r), \quad (3.64)$$

onde  $r = i_a - i_b$  é a distância entre dois pontos da rede. Podemos também calcular a magnetização quadrática média por meio de uma sequência de medidas da magnetização, para tal, vejamos a seção seguinte.

### 3.2.3 Spin Fantasma

Para calcularmos a magnetização no modelo de Ising, precisamos considerar o hamiltoniano de Ising com campo externo

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (3.65)$$

onde  $B$  é o campo magnético externo (uniforme). Utilizaremos um campo magnético com valor pequeno comparado à constante de acoplamento  $J$ , tão pequeno quanto possível, de forma a gerar a magnetização e não interferir na transição de fase de segunda ordem.

Introduziremos agora o *spin fantasma*\*. Este spin é um spin vizinho a todos os sítios da rede, veja Fig. (3.8), e possui valor sempre igual a “1”. O hamiltoniano de Ising torna-se

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_{\langle i,g \rangle} s_i s_g, \quad (3.66)$$

onde  $B$  desempenha o papel de uma constante de acoplamento entre cada spin da rede  $s_i$  e o spin fantasma  $s_g$ . Matematicamente,  $s_g$  é apenas o número 1, i.e., estamos utilizando um truque matemático, que, como veremos a seguir, é útil para o cálculo da magnetização.

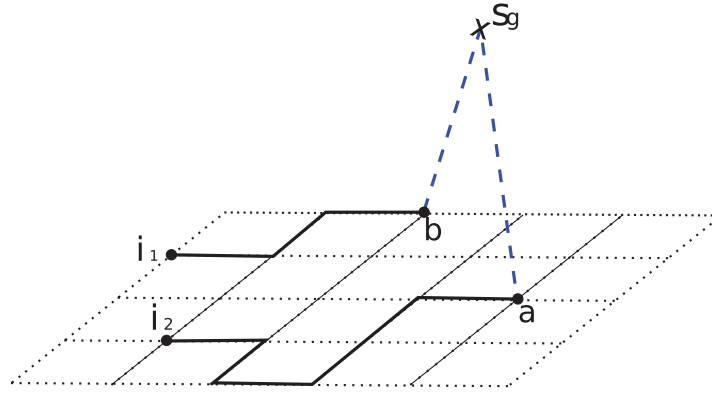


Figura 3.8: Rede bidimensional com spin fantasma.

Seguindo o mesmo procedimento e definições do início do capítulo, com a ressalva que agora temos duas expansões de exponenciais

$$e^{-H/T} = e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} e^{\beta B \sum_{\langle i,g \rangle} s_i s_g}, \quad (3.67)$$

temos

$$Z = \sum_{\{N_b, M_b\}} \left[ \Pi_b \frac{\beta^{N_b + M_b}}{N_b! M_b!} J^{N_b} B^{M_b} (\Pi_i Q(k_i)) \right], \quad (3.68)$$

onde os  $M_b$ 's são os bonds entre os sítios da rede e o spin  $s_g$ . Na Fig. (3.8), os sítios  $a$  e  $b$  possuem, ambos, 1 bond com o spin  $s_g$ . Nesta figura temos representado uma das possíveis configurações de bonds fantasmas  $\{M_b\}$  (riscos tracejados) e uma das

\*A técnica de spin fantasma utilizada neste trabalho foi inspirada na Ref. [29].

possíveis configurações de bonds  $\{N_b\}$  (linhas cheias). A função  $Q(k_i)$  é semelhante ao caso sem spin fantasma

$$Q(k_i) = (+1)^{k_i} + (-1)^{k_i}, \quad (3.69)$$

a diferença está em  $k_i$ :

$$k_i = \sum_{\nu} N_{i,\nu} + M_i. \quad (3.70)$$

Agora,  $k_i$  corresponde à soma de todos os bonds que circundam o sítio  $i$  incluindo os bonds fantasmas. Analogamente ao caso sem spin fantasma, a função de correlação possui a mesma função  $Q$ , porém com argumento diferente

$$Q(\bar{k}_i) = Q(k_i + \delta_{i,i_1} + \delta_{i,i_2}), \quad \text{para a função de correlação.} \quad (3.71)$$

Ou seja, temos uma potência extra se estivermos considerando os sítios  $i_1$  ou  $i_2$  ao calcularmos a função de correlação  $G(i_1 - i_2)$ .

### 3.2.4 Taxa de Aceitação II

Com a introdução do spin fantasma, nosso algoritmo deve realizar mais uma tarefa: atualizar a configuração de bonds fantasmas (linhas tracejadas da Fig. (3.8)). Podemos visualizar uma possível transição na Fig. (3.9). As taxas de aceitação para as transições realizadas no plano (considerando o caso bidimensional) não são alteradas, veja Eqs. (3.44) e (3.47).

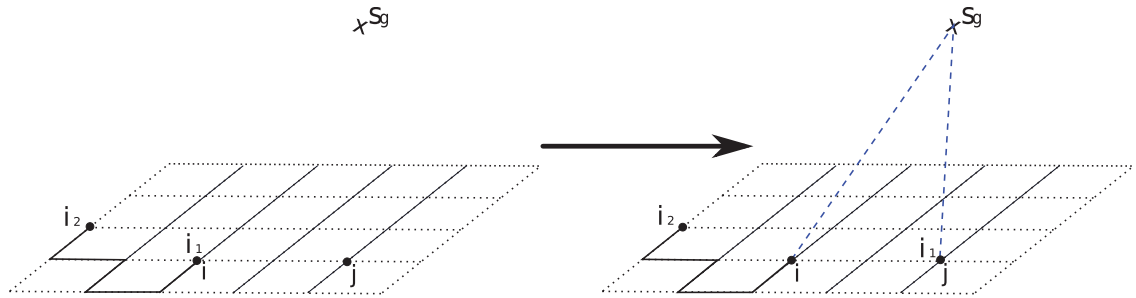


Figura 3.9: Transição entre configurações de bonds fantasmas.

Para as atualizações dos bonds fantasmas devemos proceder da seguinte maneira: dado um sítio  $i = i_1$ , escolher aleatoriamente um sítio  $j$  da rede; uma vez escolhido o sítio  $j$ , escolhemos aleatoriamente e com mesma probabilidade um dos 4 procedimentos listados a seguir:

- aumentar em uma unidade o bond  $M_i$  entre o sítio  $i$  e o sítio  $s_g$  (*subir escrevendo*) & aumentar em uma unidade o bond  $M_j$  entre o sítio  $j$  e o sítio  $s_g$  (*descer escrevendo*): **subir escrevendo - descer escrevendo**;

- aumentar em uma unidade o bond  $M_i$  entre o sítio  $i$  e o sítio  $s_g$  (*subir escrevendo*) & diminuir em uma unidade o bond  $M_j$  entre o sítio  $j$  e o sítio  $s_g$  (*descer apagando*): **subir escrevendo - descer apagando**;
- diminuir em uma unidade o bond  $M_i$  entre o sítio  $i$  e o sítio  $s_g$  (*subir apagando*) & aumentar em uma unidade o bond  $M_j$  entre o sítio  $j$  e o sítio  $s_g$  (*descer escrevendo*): **subir apagando - descer escrevendo**;
- diminuir em uma unidade o bond  $M_i$  entre o sítio  $i$  e o sítio  $s_g$  (*subir apagando*) & diminuir em uma unidade o bond  $M_j$  entre o sítio  $j$  e o sítio  $s_g$  (*descer apagando*): **subir apagando - descer apagando**.

Para cada uma dessas quatro possibilidades podemos ter os casos:  $i = i_1 = i_2$ ;  $i = i_1$ ,  $j = i_2$  e “*demais casos*”. A seguir derivaremos as taxas de transições dos procedimentos acima citados.

#### *Subir escrevendo - Descer escrevendo*

Começemos com o tipo de transição ilustrado na Fig. (3.9), classificado como “*demais casos*” acima. Para esta transição, usando as Eqs. (2.29) e (2.30), temos

$$\frac{A_{\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\}}}{A_{\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\}}} = \frac{w_{\{M'_b\}} g(\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\})}{w_{\{M_b\}} g(\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\})}. \quad (3.72)$$

As probabilidades  $g(\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\})$  e  $g(\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\})$  são ambas iguais a  $1/N$ . Usando a Eq. (3.68):

$$\frac{A_{\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\}}}{A_{\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\}}} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)} \frac{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)\dots Q(k_j + 1)\dots}{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)\dots Q(k_j)\dots}, \quad (3.73)$$

logo, a taxa de transição para o procedimento *subir escrevendo - descer escrevendo*  $A_{SEDE}$  é dada por

$$A_{SEDE} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)} \frac{Q(k_j + 1)}{Q(k_j)}. \quad (3.74)$$

Consideremos agora uma transição na qual  $i = i_1$  e  $j = i_2$ , veja Fig. (3.10).

Para uma transição deste tipo temos

$$\frac{A_{\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\}}}{A_{\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\}}} = \frac{w_{\{M'_b\}} g(\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\})}{w_{\{M_b\}} g(\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\})}. \quad (3.75)$$

Novamente as probabilidades  $g(\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\})$  e  $g(\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\})$  são ambas iguais a  $1/N$ ,

$$\frac{A_{\{M_b\} \rightarrow \{M'_b\}}}{A_{\{M'_b\} \rightarrow \{M_b\}}} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)} \frac{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)\dots Q(k_j + 1)\dots}{Q(k_1)Q(k_2)\dots Q(k_i + 1)\dots Q(k_j + 1)\dots}. \quad (3.76)$$

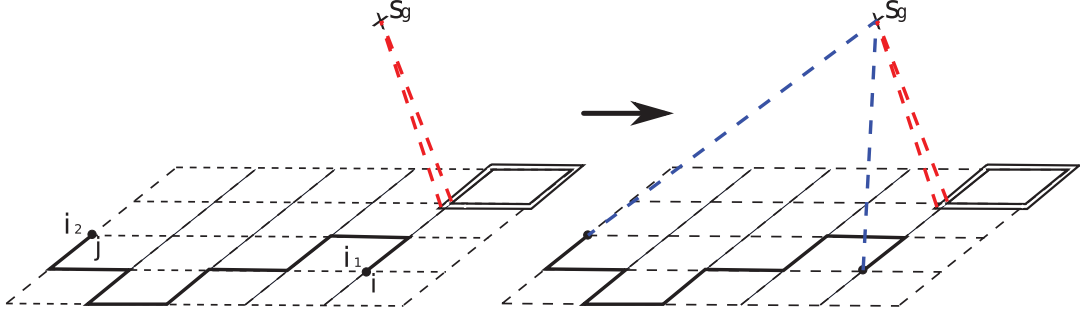


Figura 3.10: Transição entre configurações de bonds fantasma.

Logo, a taxa de transição para o procedimento *subir escrevendo - descer escrevendo*  $A_{SEDE}$ , para o caso onde  $i = i_1$  e  $j = i_2$ , é dada por

$$A_{SEDE} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)}. \quad (3.77)$$

Analogamente teremos, para o caso  $i = i_1 = i_2$

$$A_{SEDE} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)} \frac{Q(k_i + 2)Q(k_j + 2)}{Q(k_i)Q(k_j)}. \quad (3.78)$$

Resumindo os três casos em uma só equação,

$$A_{SEDE} = \frac{\beta^2 B^2}{(M_i + 1)(M_j + 1)} \mathcal{Q}_{SEDE}, \quad (3.79)$$

onde

$$\mathcal{Q}_{SEDE} = \begin{cases} \frac{Q(k_i+2)Q(k_j+2)}{Q(k_i)Q(k_j)} & i_1 = i_2 = i \\ 1 & i_1 = i, i_2 = j \\ \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.80)$$

*Subir escrevendo - Descer apagando*

O procedimento para este e demais casos é completamente análogo ao realizado no caso *subir escrevendo - descer escrevendo* e subseção (3.2.1), por este motivo escreveremos apenas os resultados.

$$A_{SEDA} = \frac{M_j}{(M_i + 1)} \mathcal{Q}_{SEDA}, \quad (3.81)$$

onde

$$\mathcal{Q}_{SEDA} = \begin{cases} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} & i_1 = i_2 = i \\ \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} & i_1 = i, i_2 = j \\ 1 & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.82)$$

*Subir apagando - Descer escrevendo*

$$A_{SADE} = \frac{M_i}{(M_j + 1)} \mathcal{Q}_{SADE}, \quad (3.83)$$

onde

$$\mathcal{Q}_{SADE} = \begin{cases} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} & i_1 = i_2 = i \\ \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} & i_1 = i, i_2 = j \\ \frac{Q(k_i-1)Q(k_j+2)}{Q(k_i+1)Q(k_j)} & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.84)$$

*Subir apagando - Descer apagando*

$$A_{SADA} = \frac{M_i M_j}{\beta^2 B^2} \mathcal{Q}_{SADA}, \quad (3.85)$$

onde

$$\mathcal{Q}_{SADA} = \begin{cases} 1 & i_1 = i_2 = i \\ \frac{Q(k_i-1)Q(k_j-1)}{Q(k_i+1)Q(k_j+1)} & i_1 = i, i_2 = j \\ \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.86)$$

### 3.2.5 Observáveis II

Com a inclusão do spin fantasma podemos obter a expressão da magnetização, partindo de

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B}, \quad (3.87)$$

e usando a Eq. (3.68),

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\beta Z} \sum_{\{N_b, M_b\}} \left( \frac{\sum M_b}{B} \right) W(\{N_b, M_b\}), \quad (3.88)$$

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{N_b, M_b\}} m_{\{M_b\}} W(\{N_b, M_b\}). \quad (3.89)$$

Desta forma, o estimador da magnetização é

$$\bar{m} = \frac{1}{M} \sum_{\mu_{\{N_b, M_b\}}=1}^M \left( \frac{\sum M_b}{\beta B} \right), \quad (3.90)$$

ou seja, a magnetização é proporcional à soma dos bonds fantasmas e ao campo magnético externo aplicado.

A expressão do valor esperado da energia sofre uma pequena modificação com a inclusão dos spin fantasma. Usando

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (3.91)$$

temos que

$$E_{\{N_b, M_b\}} = -\frac{\sum(N_b + M_b)}{\beta}. \quad (3.92)$$

Agora, o valor da energia de uma dada configuração de bonds é proporcional à soma total de bonds dessa configuração, incluindo os bonds fantasmas.

A seguir apresentaremos esquematicamente uma maneira de implementar o algoritmo *worm* para o modelo de Ising:

1. Inicializar a rede com uma configuração de bonds qualquer;
2. escolher aleatoriamente um sítio  $i = i_1 = i_2$ ;
3. escolher aleatoriamente um sítio vizinho  $j$ ;
4. escolher aleatoriamente um procedimento: escrever ou apagar;
5. escrever/apagar com probabilidade  $A^+/A^-$ , Eqs. (3.44) e (3.47);
6. **escolher aleatoriamente outro sítio  $k$ ;**
7. **escolher aleatoriamente um dos procedimentos descritos na Subseção 3.2.4;**
8. **realizar a atualização escolhida com probabilidades dadas pelas Eqs. (3.79) a (3.85);**

9. estimar a função de correlação;
10. se  $i_1 = i_2$ 
  - estimar energia e **magnetização**;
  - com probabilidade  $p_0$  mudar o sítio  $i = i_1 = i_2$  para um outro sítio escolhido aleatoriamente.
11. repetir os procedimentos 2-10 inúmeras vezes.

Na descrição do algoritmo feita acima, temos procedimentos escritos em negrito, estes procedimentos são pertinentes ao caso onde estamos usando o spin fantasma. Desta forma, se não estivermos interessados em calcular a magnetização, não precisamos usar spin fantasma e, assim, os procedimentos em negrito podem ser desconsiderados.

## Capítulo 4

### Campo Escalar Real na Rede

Por meio da quantização do campo eletromagnético foi possível matematizar os fenômenos de emissão e absorção de radiação cujo mecanismo já havia sido postulado por Einstein em 1905, quando surgiu a interpretação de partículas como “quanta” de campos. O campo escalar é o campo mais simples a ser estudado, entretanto, conforme já dito anteriormente, sua utilidade vai além dos propósitos pedagógicos. Também como já dito, nosso objetivo é investigar o comportamento crítico do campo escalar real com autointeração do tipo  $\varphi^4$  empregando simulações de Monte Carlo através do algoritmo *worm*. Afim de realizarmos simulações de Monte Carlo, precisamos escrever a ação do campo escalar no espaço Euclidiano e discretizar o espaço-tempo. A teoria de campos escrita em um espaço-tempo discreto é o que chamamos de teoria de campos na rede.

Iniciaremos o presente Capítulo com uma breve e superficial discussão sobre a quantização da teoria do campo escalar. Logo após, falaremos da formulação de Feynman para a mecânica quântica e veremos que esta formulação no espaço Euclidiano nos permite fazer analogias com a Mecânica Estatística, onde o objeto que desempenha papel central é a ação clássica. Desta forma escreveremos a ação do campo escalar, originalmente escrita no espaço de Minkowski, no espaço Euclidiano. Posteriormente reescreveremos esta ação na rede e discutiremos a conexão da teoria quântica de campos com a Mecânica Estatística clássica. Por fim, apresentaremos o algoritmo *worm* para o campo escalar.

#### 4.1 Quantização do Campo Escalar

Assim como um sistema de partículas pode ter sua dinâmica quantizada obedecendo os postulados da Mecânica Quântica, podemos fazer o mesmo com um sistema de campos. No caso de uma teoria de campos relativística, o intuito deste procedimento é estudar partículas relativísticas na Mecânica Quântica. Para tal, mostraremos que ao quantizar um campo (campo escalar em nosso caso) podemos

interpretar os campos como operadores de criação e aniquilação de partículas.

Iniciamos escrevendo a densidade Lagrangeana do campo escalar real sem interações:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[ \partial_\mu \varphi(x) \partial^\mu \varphi(x) - \mu_0^2 \varphi^2(x) \right]. \quad (4.1)$$

Por meio das equações de Euler-Lagrange obtemos,

$$\left( \partial_\mu \partial^\mu + \mu_0^2 \right) \varphi(x) = 0, \quad (4.2)$$

que corresponde à equação de Klein-Gordon. Realizando uma transformada de Fourier no campo  $\varphi(x)$ ,

$$\varphi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \varphi(\vec{p}, t), \quad (4.3)$$

temos que, a equação de movimento para  $\varphi(\vec{p}, t)$  é dada por:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left( |\vec{p}|^2 + \mu_0^2 \right) \right] \varphi(\vec{p}, t) = 0, \quad (4.4)$$

que corresponde justamente à equação do oscilador harmônico com frequência  $w_{\vec{p}} = \sqrt{|\vec{p}|^2 + \mu_0^2}$ . Agora podemos “imitar” o processo de quantização do oscilador harmônico, mas antes façamos uma revisão deste procedimento.

O hamiltoniano de uma partícula de massa  $m$  sujeita a um potencial do tipo oscilador harmônico unidimensional é dado em termos da posição  $x$  e momento  $p$  da partícula, temos

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2x^2}{2}, \quad (4.5)$$

onde  $w$  é a frequência de oscilação. A seguir, dizemos que o momento  $p$  e a posição  $x$  são operadores,  $\hat{p}$  e  $\hat{x}$ , e satisfazem a relação de comutação  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}$ . Podemos agora definir os operadores

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{mw} \right), \quad (4.6)$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{mw} \right). \quad (4.7)$$

Escrevendo  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  em termos de  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$  (ou seja, invertendo as relações acima), substituindo as expressões encontradas para  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  na Eq. (4.5) e definindo

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad (4.8)$$

podemos reescrever o hamiltoniano da seguinte forma:

$$\hat{H} = \hbar w \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.9)$$

É possível mostrar que os autovalores de  $\hat{N}$  são reais, inteiros e não negativos. Considerando o autovetor  $|n\rangle$  de  $\hat{N}$ :

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (4.10)$$

e calculando  $\hat{H}|n\rangle$  temos que,

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \quad (4.11)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.12)$$

Uma vez que  $n$  é um número inteiro, os possíveis valores para a energia de um oscilador harmônico quântico são discretos.

A relação de comutação  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  implica nas seguintes relações para os operadores  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{N}$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (4.13)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad (4.14)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \quad (4.15)$$

que, por sua vez, implicam em

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (4.16)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (4.17)$$

Dizemos então que  $|n\rangle$  corresponde aos autoestados de energia do oscilador harmônico, onde  $|n=0\rangle$  é o estado de mais baixa energia, i.e., estado fundamental, e,  $|n=1, 2, 3, \dots\rangle$  correspondem aos estados excitados. Por fim, interpretamos os operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  respectivamente como operadores de criação e aniquilação, uma vez que, dada a atuação de  $\hat{a}^\dagger$  em um estado, e.g., estado fundamental, criamos o primeiro estado excitado. Da mesma forma, podemos aniquilar um estado e obter um de energia mais baixa por meio do operador  $\hat{a}$ .

Voltando para o campo escalar, o campo  $\varphi(x)$  e seu momento canonicamente conjugado  $\pi(x)$ , onde

$$\pi(x) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}}, \quad (4.18)$$

passam a ser considerados operadores, e desta forma, definimos operadores de criação e aniquilação, assim como no caso do oscilador harmônico. Escrevemos então

$$\hat{\varphi}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2w_{\vec{p}}}} (\hat{a}_{\vec{p}} + \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}, \quad (4.19)$$

$$\hat{\pi}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} (-i)\sqrt{\frac{w_{\vec{p}}}{2}} (\hat{a}_{\vec{p}} - \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}, \quad (4.20)$$

ou seja, os campos  $\hat{\phi}(x)$  e  $\hat{\pi}(x)$  correspondem a uma coleção de osciladores harmônicos, cada qual com seus operadores de criação e aniquilação e frequência  $w_{\vec{p}} = \sqrt{|\vec{p}|^2 + \mu_0^2}$ . Cada modo de oscilação é interpretado como sendo uma partícula. Concluímos que, ao quantizar o campo escalar conseguimos usar o mesmo formalismo de representação de número utilizado no caso do oscilador harmônico quântico, e desta forma, segue-se a interpretação de partículas como sendo os quanta do campo.

## 4.2 Integral de trajetória na Mecânica Quântica

De acordo com os postulados da Mecânica Quântica, um sistema físico, em um dado tempo  $t$ , é descrito por um vetor no espaço de Hilbert. Na notação de Dirac, este vetor é descrito pelo ket  $|\Psi(t)\rangle$  e a evolução temporal deste vetor é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (4.21)$$

ou seja, podemos escrever o ket  $|\Psi(t)\rangle$  no tempo  $t$  em termos do ket  $|\Psi(t_0)\rangle$  no tempo  $t_0$ ,

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (4.22)$$

onde  $\hat{U}(t, t_0)$  é o operador de evolução temporal dado por

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}. \quad (4.23)$$

Utilizando a representação de coordenadas,

$$\Psi(x, t) \equiv \langle x | \Psi(t) \rangle, \quad (4.24)$$

onde  $|x\rangle$  representa os autoestados do operador posição, temos

$$\Psi(x, t) = \int dx' \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x' \rangle \Psi(x', t_0), \quad (4.25)$$

onde fizemos uso da relação de completeza,

$$1 = \int dx |x\rangle \langle x|. \quad (4.26)$$

Definindo

$$K(xt; x't_0) \equiv \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x' \rangle, \quad (4.27)$$

conhecido como propagador de Feynman ou função de Green, temos

$$\Psi(x, t) = \int dx' K(xt; x't_0) \Psi(x', t_0). \quad (4.28)$$

Logo, a solução da Eq. (4.21) resume-se a encontrar o propagador  $K(xt; x't_0)$ .

Analisemos então o objeto  $K(x't'; xt)$ . Para tal vamos dividir o intervalo de tempo  $t' - t$  em  $n$  pedaços de mesmo tamanho

$$\epsilon = \frac{t' - t}{n}. \quad (4.29)$$

Com isto, podemos escrever

$$e^{-i(t'-t)\hat{H}/\hbar} = e^{-in\epsilon\hat{H}/\hbar} = e^{-i(\epsilon+\epsilon+\dots+\epsilon)\hat{H}/\hbar}, \quad (4.30)$$

onde a soma entre parenteses na última exponencial contém  $n$  termos. Desta forma, escrevemos o propagador do seguinte modo

$$K(x't'; xt) = \langle x' | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} \dots e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x \rangle.$$

Fazendo uso de  $n - 1$  relações de completeza entre cada par de exponenciais, temos:

$$K(x't'; xt) = \langle x' | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} \int dx_{n-1} | x_{n-1} \rangle \langle x_{n-1} | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} \int dx_{n-2} | x_{n-2} \rangle \langle x_{n-2} | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} \dots e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} \int dx_1 | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x \rangle, \quad (4.31)$$

que reescrevemos como

$$K(x't'; xt) = \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \langle x' | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_{n-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x \rangle. \quad (4.32)$$

Agora, consideremos o hamiltoniano na forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (4.33)$$

Utilizando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots}, \quad (4.34)$$

e desconsiderando termos cujas potencias em  $\epsilon$  são maiores ou igual a 2, temos

$$e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} = e^{-\epsilon\frac{i\hat{p}^2}{2m\hbar}} e^{-\epsilon\frac{iV(\hat{x})}{\hbar}}. \quad (4.35)$$

Desta forma podemos escrever o termo  $\langle x_2 | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_1 \rangle$  que aparece no propagador  $K(x't'; xt)$  da seguinte forma

$$\langle x_2 | e^{-i\epsilon\hat{H}/\hbar} | x_1 \rangle = \langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon\hat{p}^2}{2m\hbar}} e^{-i\frac{\epsilon V(\hat{x})}{\hbar}} | x_1 \rangle = e^{-i\frac{\epsilon V(x_1)}{\hbar}} \langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon\hat{p}^2}{2m\hbar}} | x_1 \rangle, \quad (4.36)$$

ou seja,

$$K(x't'; xt) = \int dx_1 \dots dx_{n-1} e^{\frac{-i\epsilon}{\hbar}[V(x)+V(x_1)+V(x_2)+\dots+V(x_{n-1})]} \times \langle x' | e^{-i\frac{\epsilon\hat{p}^2}{2m\hbar}} | x_{n-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-i\frac{\epsilon\hat{p}^2}{2m\hbar}} | x \rangle. \quad (4.37)$$

Calculemos agora o termo  $\langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon p^2}{2m\hbar}} | x_1 \rangle$ . Para tal usemos

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i p x}, \quad (4.38)$$

que leva a

$$\langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon p^2}{2m\hbar}} | x_1 \rangle = \int dp \langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon p^2}{2m\hbar}} | p \rangle \langle p | x_1 \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon \frac{p^2}{2m} - \frac{i}{\hbar} p(x_2 - x_1)}. \quad (4.39)$$

A integral acima é uma integral ‘‘Gaussiana’’ do tipo

$$\int dx e^{iax^2 + ibx} = e^{\frac{-ib^2}{4a}} \sqrt{\frac{\pi}{ia}}. \quad (4.40)$$

Temos então que:

$$\langle x_2 | e^{-i\frac{\epsilon p^2}{2m\hbar}} | x_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}} e^{i \frac{m}{\hbar} \frac{(x_2 - x_1)^2}{\epsilon}}. \quad (4.41)$$

Desta forma escrevemos o propagador como

$$\begin{aligned} K(x't'; xt) &= \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{n/2} \int dx_1 \dots dx_{n-1} \left[ e^{i \frac{m}{\hbar} \frac{(x' - x_{n-1})^2}{\epsilon}} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_{n-1})} \right] \\ &\times \left[ e^{i \frac{m}{\hbar} \frac{(x_{n-1} - x_{n-2})^2}{\epsilon}} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_{n-2})} \right] \dots \left[ e^{i \frac{m}{\hbar} \frac{(x_1 - x)^2}{\epsilon}} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)} \right]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Fazendo  $x \equiv x_0$ ,  $t \equiv t_0$ ,  $x' \equiv x_n$  e  $t' \equiv t_n$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} K(x_n t_n; x_0 t_0) &= \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{n/2} \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n \epsilon \left[ \frac{m}{2} \frac{(x' - x_{n-1})^2}{\epsilon^2} - V(x_{i-1}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

No limite  $\epsilon \rightarrow 0$  ( $n \rightarrow \infty$ ) temos

$$\frac{(x' - x_{n-1})^2}{\epsilon^2} \rightarrow \left( \frac{dx(t)}{dt} \right)^2, \quad (4.44)$$

$$\sum_{i=1}^n \epsilon \rightarrow \int dt, \quad (4.45)$$

ou seja, no limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , escrevemos o propagador da seguinte maneira

$$K(x_n t_n; x_0 t_0) = \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{n/2} \int dx_1 \dots dx_{n-1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int dt \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] \right\}. \quad (4.46)$$

Mas,

$$\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) = L(\dot{x}, x) \quad (4.47)$$

é a Lagrangeana clássica do sistema. Desta forma temos que

$$K(x_n t_n; x_0 t_0) = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S}, \quad (4.48)$$

onde definimos a medida de integração funcional

$$\int \mathcal{D}[x(t)] \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{n/2} \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1}, \quad (4.49)$$

e

$$S = \int dt L, \quad (4.50)$$

é a ação clássica do problema. Ou seja, o propagador de Feynman é escrito em termos da ação clássica do sistema em questão.

Para implementarmos uma simulação de Monte Carlo, é necessário migrar para o espaço Euclidiano. Migrar para o espaço Euclidiano significa fazer a transformação  $t \rightarrow -i\tau$ , onde  $\tau > 0$ , o que leva ao resultado (ver Sec. 4.3)

$$K(x_n \tau_n; x_0 \tau_0) = \int \mathcal{D}x e^{-S^E/\hbar}, \quad (4.51)$$

onde o índice  $E$  nos diz que a ação esta escrita no espaço Euclidiano.

Ao escrevermos a expressão do propagador no espaço Euclidiano, temos uma analogia imediata com a função de partição da Mecânica Estatística:

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta H_{\mu}}, \quad (4.52)$$

onde a soma em  $\mu$  corresponde à soma de todos os estados acessíveis do sistema descrito pelo hamiltoniano  $H$ . Na Eq. (4.51), identificando  $S^E/\hbar$  com  $\beta H$ , podemos interpretar  $e^{-S^E/\hbar}$  como o fator de Boltzmann. Portanto, para fazermos a integral funcional da teoria quântica, que consiste em somar sobre todas as possíveis trajetórias  $x(\tau)$ , podemos empregar os mesmos métodos de Monte Carlo que foram desenvolvidos no contexto da Mecânica Estatística clássica discutidos anteriormente.

Como vimos, é necessário tratar nossa teoria no espaço Euclidiano para podermos utilizar conceitos da Mecânica Estatística e, desta forma, fazer simulações de Monte Carlo. Na seção seguinte iremos escrever a ação clássica do campo escalar no espaço Euclidiano.

### 4.3 Espaço Euclidiano

O objetivo desta seção é escrever a ação clássica do campo escalar no espaço Euclidiano. A densidade lagrangeana do campo escalar real sem interação é dada por:

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \left[ \partial_{\mu} \varphi(x) \partial^{\mu} \varphi(x) - \mu_0^2 \varphi^2(x) \right]. \quad (4.53)$$

O termo de autointeração é dado por

$$\mathcal{L}_I = \frac{\lambda}{4}\varphi^4(x), \quad (4.54)$$

onde  $\lambda$  é a constante de acoplamento. Temos então que a densidade Lagrangeana é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\varphi] &= \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_I \\ &= \frac{1}{2} \left[ \partial_\mu \varphi(x) \partial^\mu \varphi(x) - \mu_0^2 \varphi^2(x) \right] - \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x). \end{aligned} \quad (4.55)$$

A ação do campo escalar com interação do tipo  $\lambda\varphi^4$  é então dada por

$$\begin{aligned} S[\varphi] &\equiv \int dx^0 \int d^3\vec{x} \mathcal{L}[\varphi] \\ &= \int d^4x \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x^0} \right)^2 - \frac{1}{2} [\nabla\varphi(x)]^2 - \frac{\mu_0^2 \varphi^2(x)}{2} - \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x) \right\}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

A ação acima está escrita no espaço de Minkowski, para simulações de Monte Carlo é necessário escrevê-la no espaço Euclidiano. Dado dois vetores,  $x^M = (x^0, \vec{x})$  e  $y^M = (y^0, \vec{y})$ , no espaço de Minkowski, temos

$$x^M y^M = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y}. \quad (4.57)$$

Migrar do espaço de Minkowski para o espaço Euclidiano significa em termos simples realizar a seguinte mudança de variável,

$$x^0 \equiv -ix^4, \quad x^4 \in \Re, \quad (4.58)$$

de maneira que

$$x^M y^M = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y} \rightarrow -(x^4 y^4 + \vec{x} \cdot \vec{y}). \quad (4.59)$$

Definindo  $x^E y^E \equiv x^4 y^4 + \vec{x} \cdot \vec{y}$ , onde  $x^E$  e  $y^E$  são vetores no espaço Euclidiano, temos

$$x^M y^M \rightarrow -x^E y^E. \quad (4.60)$$

Aplicando estas transformações na ação do campo escalar:

$$dx^0 \rightarrow -idx^4, \quad (4.61)$$

$$\varphi(x^0, \vec{x}) \rightarrow \varphi(x^4, \vec{x}), \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \rightarrow i \frac{\partial}{\partial x^4}, \quad (4.63)$$

teremos

$$\begin{aligned}
S^M &= \int dx^0 d^3\vec{x} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x^0} \right)^2 - \frac{1}{2} (\nabla\varphi(x))^2 - \frac{\mu_0^2\varphi^2(x)}{2} - \frac{\lambda}{4}\varphi^4(x) \right] \\
&\rightarrow i \int \frac{dx^4 d^3\vec{x}}{2} \left[ \left( \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x^4} \right)^2 + (\nabla\varphi(x))^2 + \mu_0^2\varphi^2(x) + \frac{\lambda}{2}\varphi^4(x) \right]. \quad (4.64)
\end{aligned}$$

Definindo,

$$S^E \equiv \int d^4x \mathcal{L}^E, \quad (4.65)$$

onde  $\mathcal{L}^E$  é a densidade Lagrangeana no espaço Euclidiano dada por

$$\mathcal{L}^E \equiv \frac{1}{2} (\partial_\mu\varphi) (\partial_\mu\varphi) + \frac{\mu_0^2\varphi^2(x)}{2} + \frac{\lambda}{4}\varphi^4(x), \quad (4.66)$$

chegamos a seguinte relação

$$S^M \rightarrow iS^E, \quad (4.67)$$

onde

$$(\partial_\mu\varphi) (\partial_\mu\varphi) = \left( \frac{\partial\varphi}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial\varphi}{\partial x_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial\varphi}{\partial x_3} \right)^2 + \left( \frac{\partial\varphi}{\partial x_4} \right)^2. \quad (4.68)$$

A ação Euclidiana, dada pela Eq. (4.65), será usada neste trabalho daqui em diante. Omitiremos o índice “ $E$ ” por simplicidade, e, a não ser que digamos o contrário, ao falarmos da ação estaremos falando da ação Euclidiana. Para simular computacionalmente o campo escalar utilizando o método de Monte Carlo, é necessário escrever o campo escalar em uma rede, isto é, escrevê-lo em um espaço-tempo discreto. A seção seguinte destina-se a escrever a ação do campo escalar real em uma rede Euclidiana.

Vamos agora discutir a questão da quebra espontânea de simetria no contexto da densidade Lagrangeana da Eq. (4.66). A discussão será a nível clássico e, eventualmente, vamos invocar conceitos quânticos. O termo referente à energia potencial clássica  $V(\varphi)$  é dado por

$$V(\varphi) = \frac{\mu_0^2\varphi^2(x)}{2} + \frac{\lambda}{4}\varphi^4(x). \quad (4.69)$$

Uma função deste tipo possui uma simetria, a saber,  $\varphi \rightarrow -\varphi$ . Isto é, o potencial (e obviamente a Lagrangeana, que inclui o termo cinético) não muda sob esta troca de  $\varphi$  por  $-\varphi$ . Os pontos de máximo e de mínimo do potencial são dados por:

$$V'(\varphi) = 0 \rightarrow \varphi(\mu_0^2 + \lambda\varphi^2) = 0. \quad (4.70)$$

Para  $\mu_0^2 > 0$ , temos que esta equação tem uma única solução, que é  $\varphi = 0$ . Este valor de  $\varphi$  corresponde a um mínimo de  $V(\varphi)$ , como pode ser facilmente verificado. Por outro lado, para  $\mu_0^2 < 0$ , i.e.  $\mu_0^2 = -|\mu_0^2|$ , a Eq. (4.70) possui três soluções:

$$\varphi = 0, \quad \varphi = \pm \sqrt{\frac{|\mu_0^2|}{\lambda}} = \pm v. \quad (4.71)$$

Pode ser facilmente verificado que, agora,  $\varphi = 0$  corresponde a um máximo de  $V(\varphi)$ , enquanto que  $\varphi = \pm v$  correspondem a mínimos de  $V(\varphi)$ . Os mínimos do potencial correspondem aos mínimos da energia total do sistema, porque o termo cinético, que envolve derivadas, simplesmente aumenta a energia.

Na versão quântica da teoria, um objeto similar ao potencial clássico pode ser definido, trata-se do potencial efetivo [2]. O potencial efetivo é função de uma variável de campo, que denotamos aqui de  $\bar{\varphi}$ , e incorpora os efeitos quânticos sobre o potencial clássico. O valor do campo  $\bar{\varphi}$  no mínimo do potencial efetivo fornece o valor médio do campo quântico no estado de vácuo e é denotado por  $\langle \varphi \rangle$ . Neste sentido,  $\langle \varphi \rangle$  desempenha o papel do mínimo do potencial  $V(\varphi)$  da teoria clássica.

A Fig. 4.1 ilustra o potencial clássico  $V(\varphi)$  para as situações de um e dois mínimos – nesta figura, estamos usando a notação quântica, apesar de não ser a situação que estamos discutindo neste momento.

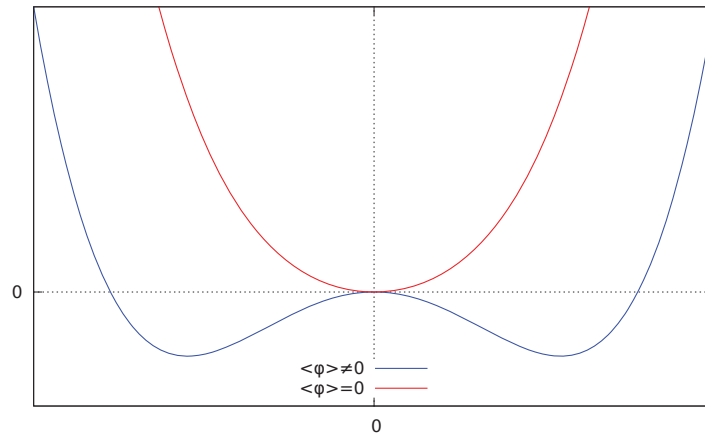


Figura 4.1: Tipos de potenciais: A curva vermelha corresponde a um potencial típico da região na qual  $\langle \varphi \rangle = 0$  e a curva azul corresponde a um potencial típico da região na qual  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ .

Claramente, quando  $\mu_0^2 < 0$ ,  $\mu_0$  não é a massa da partícula escalar correspondente ao campo  $\varphi$ . Para sabermos a massa é necessário perturbarmos o potencial ao redor do mínimo. Dito de outra forma, para encontrarmos as excitações de baixas

frequências do campo, que nos fornecem a massa das partículas, é necessário perturbarmos o estado fundamental do sistema. Esta perturbação é mais facilmente implementada escrevendo o campo  $\varphi$  como sendo

$$\varphi = \varphi' \pm v, \quad (4.72)$$

e substituindo isto na Lagrangeana original, de maneira que o termo quadrático em  $\varphi'^2$  dessa nova Lagrangeana fornece o termo de massa. No entanto, o sistema quando no estado fundamental vai sempre se encontrar em um dos dois mínimos – ele não pode estar ao mesmo tempo nos dois mínimos, pois há uma barreira de potencial entre eles; a situação em que o sistema fica “pulando” entre os dois mínimos corresponde a um estado de mais alta energia. Isto significa que temos que perturbar o potencial com  $\varphi = \varphi' + v$ , ou com  $\varphi = \varphi' - v$ . Agora, escolhido um dos mínimos, a simetria original de troca do sinal do campo não existe mais, como pode ser facilmente verificado examinando a Lagrangiana em termos do campo  $\varphi'$ . Dize-se, então, que a simetria da Lagrangiana foi quebrada espontaneamente, no sentido de que o estado de mínima energia, que corresponde a uma das escolhas de  $v$  ou  $-v$ , não respeita esta simetria.

Para o caso em que o mínimo de  $V(\varphi)$  acontece para  $\varphi = 0$ , i.e. na situação que  $\mu_0^2 > 0$ , o estado de mínima energia possui a simetria de troca de sinal do campo. Dizemos, então, que a *fase* na qual  $\varphi = 0$  (ou  $\langle \varphi \rangle = 0$  na teoria quântica) é a *fase simétrica*. Na outra situação, quando o valor do campo no mínimo do potencial não é nulo, temos a *fase de simetria quebrada*. É importante notar que a quebra de simetria não é gerada por um fator externo, mas sim, pela própria dinâmica do campo interagente que faz com que o sistema “role” para um dos mínimos  $\pm v$  do potencial.

Um ponto importante que deve ser chamado à atenção neste ponto é que, como a simetria quebrada espontaneamente é discreta, não se deve esperar encontrar excitações de massa zero (bosons de Goldstone) no espectro da teoria – o teorema de Goldstone [2] se aplica ao caso de quebra espontânea de uma simetria contínua, como a simetria quiral na cromodinâmica quântica.

Toda a discussão acima foi ao nível clássico. A questão que se coloca é como essas fases simétrica e de simetria quebrada dependem dos parâmetros da teoria,  $\mu_0^2$  e  $\lambda$ , quando os efeitos quânticos são incluídos. É precisamente este ponto que vai-se investigar na presente dissertação. Essa questão pode ser examinada analiticamente empregando, por exemplo a expansão em loops – que é uma expansão do potencial efetivo em potências de  $\hbar$  [2]. No entanto, não é possível efetuar cálculos analíticos para potências muito altas de  $\hbar$ . Através de simulações de Monte Carlo, como as

que efetuamos na presente dissertação, a determinação das fases da teoria pode ser feita sem empregar nenhum método de expansão.

#### 4.4 Discretização do espaço Euclidiano

Na Eq. (4.65), o campo  $\varphi(x)$  está definido em um espaço contínuo. Para escrevê-lo em um espaço discreto (em uma rede), o campo  $\varphi(x)$  será definido apenas nos pontos da rede, ou seja,  $x$  agora é um parâmetro discreto. A Fig. 4.2 ilustra uma rede unidimensional, cujo espaçamento entre os pontos da rede é  $a$ .

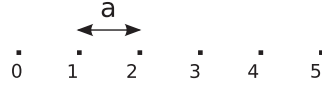


Figura 4.2: Espaço discretizado.

Desta forma, o parâmetro  $x$  é escrito como,

$$x_\mu = m_\mu a \quad m_\mu = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad , \quad (4.73)$$

onde  $n$  é o número de pontos numa direção e  $\mu = 1, 2, 3, 4$  discrimina a direção que estamos tratando. Note que no limite  $a \rightarrow 0$ , devemos retomar o caso contínuo. Na rede, a integral 4-dimensional torna-se,

$$\int d^4x \rightarrow a^4 \sum_x \quad . \quad (4.74)$$

Por conveniência, consideremos o caso genérico de “ $d$ ” dimensões, ou seja,

$$\int d^d x \rightarrow a^d \sum_x \quad , \quad (4.75)$$

e

$$\sum_x = a^d \sum_{m_1=0}^{n-1} \sum_{m_2=0}^{n-1} \dots \sum_{m_d=0}^{n-1} \quad . \quad (4.76)$$

Para as derivadas, usamos

$$\partial_\mu f(x) \rightarrow \Delta_\mu f(x) = \frac{f(x + a\hat{\mu}) - f(x)}{a} \quad , \quad (4.77)$$

$$\partial_\mu f(x) \rightarrow \Delta'_\mu f(x) = \frac{f(x) - f(x - a\hat{\mu})}{a} \quad , \quad (4.78)$$

onde  $\Delta_\mu f(x)$  e  $\Delta'_\mu f(x)$  são respectivamente as definições de derivada à direita e à esquerda. Pode-se mostrar facilmente a seguinte propriedade do produto escalar envolvendo  $\Delta$  e  $\Delta'$ :

$$(\Delta_\mu f, g) = -(f, \Delta'_\mu f) \quad . \quad (4.79)$$

Logo,

$$(\Delta_\mu \varphi, \Delta_\mu \varphi) = -(\varphi, \Delta'_\mu \Delta_\mu \varphi) \equiv (\varphi, \square \varphi), \quad (4.80)$$

onde,  $\square$  é o operador d'Alambertiano na rede, definido por

$$\square \varphi(x) \equiv \sum_{\mu=1}^d \frac{1}{a^2} (2\varphi(x) - \varphi(x + a\hat{\mu}) - \varphi(x - a\hat{\mu})). \quad (4.81)$$

Desta forma, podemos escrever a Eq. (4.65) do seguinte modo:

$$\begin{aligned} S &= a^d \sum_x \left\{ \frac{1}{2a^2} \sum_\mu [\varphi(x) (2\varphi(x) - \varphi(x + a\hat{\mu}) - \varphi(x - a\hat{\mu}))] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \mu_0^2 \varphi^2(x) + \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x) \right\}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Manipulando os termos, obtemos

$$\begin{aligned} S &= \sum_x \left[ -a^{d-2} \sum_\mu (\varphi(x) \varphi(x + a\hat{\mu})) + da^{d-2} \varphi^2(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{a^d}{2} \mu_0^2 \varphi^2(x) + a^d \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x) \right]. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Esta é a ação que utilizaremos nas simulações de Monte Carlo deste trabalho.

Na seção a seguir discutiremos como a relação formal entre a teoria quântica de campos e a Mecânica Estatística permite calcular observáveis da teoria quântica de campos utilizando o método de Monte Carlo.

## 4.5 Teoria Quântica de Campos & Mecânica Estatística

As vantagens da passagem do espaço de Minkowski para o espaço Euclidiano, veja Seção (4.4), foram primeiramente anunciadas por Symanzik [32], o qual considerou os campos Euclidianos como variáveis aleatórias. Através do aperfeiçoamento destas idéias por Edward Nelson, foi possível que se fizesse analogias entre a Mecânica Estatística e a teoria quântica de campos. A utilização de métodos da teoria quântica de campos na Mecânica Estatística, e vice-versa, possibilitou a abordagem de uma série de fenômenos físicos [30, 31].

O problema a ser considerado é: dado um observável  $\mathcal{O}[\varphi]$  encontrar a distribuição de probabilidade  $d\mu$  apropriada para  $\varphi(x)$  tal que

$$\langle \mathcal{O}[\varphi] \rangle = \int d\mu \mathcal{O}[\varphi]. \quad (4.84)$$

Para responder a esta pergunta, a seguir faremos uma breve incursão no cálculo de observáveis a partir de um funcional gerador. O conteúdo a seguir está baseado na Ref. [30].

Inicialmente consideremos a integral Gaussiana

$$Z_0(J) \equiv \frac{1}{Z_0} \int d^k \varphi e^{-\frac{1}{2}(\varphi, A\varphi) + (J, \varphi)}, \quad (4.85)$$

onde  $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$ ,  $(f, g)$  denota o produto escalar entre  $f$  e  $g$ ,  $A$  é uma matriz real simétrica e com autovalores positivos e

$$Z_0 \equiv \int d^k \varphi e^{-\frac{1}{2}(\varphi, A\varphi)}. \quad (4.86)$$

Definindo

$$\langle \varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_n \rangle \equiv \frac{1}{Z_0} \int d^k \varphi \varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_n e^{-\frac{1}{2}(\varphi, A\varphi) + (J, \varphi)}, \quad (4.87)$$

não é difícil mostrar que

$$\langle \varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_n \rangle = \left[ \frac{\partial}{\partial J_1} \frac{\partial}{\partial J_2} \dots \frac{\partial}{\partial J_n} Z_0(J) \right]_{J=0}. \quad (4.88)$$

Agora vamos considerar a generalização desta discussão para o caso contínuo, isto é, os índices discretos  $i = 1, \dots, N$  na variáveis  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$  tornam-se uma variável contínua  $x$ :  $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N) \rightarrow \varphi(x)$ .

Identificando  $\varphi$  como sendo o campo escalar Euclidiano  $\varphi(x)$ ,  $J$  como um campo externo  $J(x)$  e  $A$  como o inverso do propagador  $G^{-1}$ , i.e, o operador de Klein-Gordon

$$G^{-1} = \square + \mu_0^2, \quad (4.89)$$

onde  $\square \equiv -\partial_\mu \partial_\mu$ , teremos, por analogia com o caso discreto:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\varphi(x), (\square + \mu_0^2)\varphi(x)) &= \frac{1}{2} \int d^4x \varphi(x) (\square + \mu_0^2)\varphi(x) \\ &= \frac{1}{2} \int d^4x \varphi (-\partial_\mu \partial_\mu + \mu_0^2)\varphi = \frac{1}{2} \int d^4x \partial_\mu \varphi \partial_\mu \varphi + \mu_0^2 \varphi^2. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Na ultima passagem usamos

$$\int d^4x \partial_\mu \varphi(x) \partial_\mu \varphi(x) = \varphi(x) \partial \varphi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int d^4x \varphi(x) \partial_\mu \partial_\mu \varphi(x), \quad (4.91)$$

e desprezamos o primeiro termo do lado direito, por este se tratar de um termo de superfície. Logo, da Eq. (4.65), temos que

$$\frac{1}{2} (\varphi(x), (\square + \mu_0^2)\varphi(x)) = S_0 \quad (4.92)$$

corresponde à ação Euclidiana livre, i.e, sem o termo de interação. Temos então

$$Z_0[J] = \frac{1}{Z_0} \int \Pi_x d\varphi(x) e^{-S_0 + (J(x), \varphi(x))}, \quad (4.93)$$

e

$$Z_0 = \int \Pi_x d\varphi(x) e^{-S_0}. \quad (4.94)$$

Devemos agora substituir as derivadas da Eq. (4.88) por derivadas funcionais

$$\frac{\partial}{\partial J_i} \rightarrow \frac{\delta}{\delta J(x)}, \quad (4.95)$$

mas antes, lembremos de algumas propriedades matemáticas das derivadas funcionais, a saber:

$$1) F_1[J] = \int d^4x J(x) f(x) \rightarrow \frac{\delta F_1[J]}{\delta J(x)} = f(x), \quad (4.96)$$

$$2) F_2[J] = \int d^4x d^4y J(x) J(y) f(x, y) \\ \rightarrow \frac{\delta F_2[J]}{\delta J(x)} = \int d^4y J(y) [f(x, y) + f(y, x)], \quad (4.97)$$

$$3) F_3[J] = J(z) \rightarrow \frac{\delta F_3[J]}{\delta J(x)} = \delta(x - z). \quad (4.98)$$

Fazendo uso dessas propriedades, temos que:

$$G(x_1, \dots, x_n) \equiv \langle \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) \rangle = \frac{\delta}{\delta J_{x_1}} \dots \frac{\delta}{\delta J_{x_n}} F[J], \quad (4.99)$$

onde

$$F[J] = \frac{1}{n!} \int d^4x_1 \dots d^4x_n J(x_1) \dots J(x_n) G(x_1, \dots, x_n), \quad (4.100)$$

é chamado de gerador funcional da função  $G(x_1, \dots, x_n)$ .

Fazendo  $F[J]$  igual a  $Z_0[J]$  na Eq. (4.93) teremos

$$G(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z_0} \int \Pi_x d\varphi(x) \varphi(x_1) \varphi(x_2) \dots \varphi(x_n) e^{-S_0}. \quad (4.101)$$

Notem a semelhança entre a Eq. (4.101) e a seguinte equação da Mecânica Estatística

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\mu\}} A_\mu e^{-\beta E_\mu}, \quad (4.102)$$

onde  $\langle A \rangle$  é o valor médio e do observável  $A$ ,  $A_\mu$  é o valor do observável no estado  $\mu$ ,  $Z$  é a função de partição do sistema,  $E_\mu$  é a energia do sistema no estado  $\mu$  e

$\{\mu\}$  significa que estamos considerando todos os estados possíveis do sistema em questão.

Concluimos, então, que o cálculo da função de Green, Eq. (4.101), é matematicamente igual ao cálculo do valor esperado de uma grandeza termodinâmica. Desta forma, interpretamos a função  $Z_0$  da Eq. (4.94) como sendo a *função de partição* do campo escalar sem interação no espaço Euclidiano. Se considerarmos o campo escalar com interação, Eq. (4.65), teremos

$$G(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \int \Pi_x d\varphi(x) \varphi(x_1) \varphi(x_2) \dots \varphi(x_n) e^{-S}, \quad (4.103)$$

onde

$$Z = \int \Pi_x d\varphi(x) e^{-S}, \quad (4.104)$$

e  $S$  é a ação com interação dado pela Eq. (4.65). Dizemos então que, a distribuição de probabilidades  $d\mu$  da Eq. (4.84) é

$$d\mu = \frac{1}{Z} e^{-S[\varphi]} \Pi_x d\varphi(x). \quad (4.105)$$

Assim, escrevemos a função de Green como

$$G(x_1, \dots, x_n) = \int [\varphi(x_1) \varphi(x_2) \dots \varphi(x_n)] d\mu. \quad (4.106)$$

O termo  $[\varphi(x_1) \varphi(x_2) \dots \varphi(x_n)]$ , é chamado de estimador da função de Green.

Na seção a seguir apresentaremos o algoritmo *worm* para o campo escalar, bem como derivaremos algumas grandezas termodinâmicas para o campo escalar na linguagem do algoritmo *worm*.

## 4.6 Algoritmo *worm*

Nesta seção discutiremos o algoritmo *worm* para o campo escalar real. As idéias envolvidas aqui são as mesmas do Cap. 3, e, como veremos, as expressões que obteremos são idênticas ou parecidas com o caso do algoritmo *worm* para o modelo de Ising.

Como vimos no Cap. 3, tínhamos um problema ao calcular a magnetização do modelo de Ising usando o algoritmo *worm*, o qual foi solucionado acoplando um spin fantasma. No campo escalar real, enfrentaremos o mesmo problema com o cálculo do campo médio  $\langle \varphi \rangle$ . Igualmente ao modelo de Ising, a solução deste impasse está no acoplamento de um campo externo. Este campo externo terá apenas a função de gerar  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  na fase com simetria quebrada. O valor do campo externo deverá ser

pequeno suficiente para que não interfira de maneira significativa nos resultados. Em particular, ele deve ser pequeno o suficiente de maneira que  $\langle \varphi \rangle \approx 0$  na fase simétrica.

Partindo da ação Euclidiana, Eq. (4.65), acoplamos um campo externo  $J(x)$ ,

$$S = \int d^4x \left[ \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi) (\partial_\mu \varphi) + \frac{\mu_0^2 \varphi^2(x)}{2} + \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x) + J(x) \varphi(x) \right]. \quad (4.107)$$

Seguindo o mesmo procedimento da Sec. 4.4, pode escrevê-la como:

$$S = \sum_x \left[ -a^{d-2} \sum_\mu (\varphi(x) \varphi(x + a\hat{\mu})) + da^{d-2} \varphi^2(x) + \frac{a^d}{2} \mu_0^2 \varphi^2(x) + a^d \frac{\lambda}{4} \varphi^4(x) + a^d J(x) \varphi(x) \right]. \quad (4.108)$$

Considerando o campo externo uniforme  $J(x) = J$ ,

$$\sum_x \sum_\mu \varphi(x) \varphi(x + a\hat{\mu}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i \varphi_j, \quad (4.109)$$

teremos, em duas dimensões,

$$S = - \sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i \varphi_j + \sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 - J_L \varphi_i \right), \quad (4.110)$$

onde usamos as definições

$$J_L \equiv -a^2 J, \quad (4.111)$$

$$\mu_L^2 \equiv \mu_0^2 a^2, \quad (4.112)$$

$$\lambda_L \equiv \lambda a^2. \quad (4.113)$$

Agora introduziremos o sítio fantasma  $\varphi_g$ , veja Sec. 3.2.3,

$$\sum_i J_L \varphi_i \rightarrow J_L \sum_{\langle i,g \rangle} \varphi_i \varphi_g, \quad (4.114)$$

logo

$$S = - \sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i \varphi_j - J_L \sum_{\langle i,g \rangle} \varphi_i \varphi_g + \sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right). \quad (4.115)$$

Desta forma, escrevemos a função de partição para o campo escalar real, veja Eq. (4.104), como

$$Z = \int d\varphi_1 d\varphi_2 \dots d\varphi_N e^{\sum \varphi_i \varphi_j} e^{J_L \sum \varphi_i \varphi_g} e^{-\sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right)}, \quad (4.116)$$

onde omitimos  $\langle i, j \rangle$  por razões de simplicidade. Usando a Eq. (3.9), temos

$$\exp \left\{ \sum \varphi_i \varphi_j \right\} = \sum_{\{N_b\}} \Pi_b \frac{1}{N_b!} (\varphi_i \varphi_j)^{N_b}, \quad (4.117)$$

$$\exp \left\{ J_L \sum \varphi_i \varphi_g \right\} = \sum_{\{M_b\}} \Pi_b \frac{J_L^{M_b}}{M_b!} (\varphi_i \varphi_g)^{M_b}, \quad (4.118)$$

onde  $N_b$  corresponde aos bonds “normais” no plano (estamos em duas dimensões) e  $M_b$  corresponde aos bonds fantasmas. Temos então:

$$Z = \int d\varphi_1 \dots d\varphi_N \left\{ \sum_{\{N_b, M_b\}} \Pi_b \frac{J_L^{M_b}}{N_b! M_b!} (\varphi_i \varphi_g)^{M_b} (\varphi_i \varphi_j)^{N_b} e^{-\sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right)} \right\}. \quad (4.119)$$

Podemos reescrever a equação acima como,

$$\begin{aligned} Z = & \sum_{\{N_b, M_b\}} \Pi_b \frac{J_L^{M_b}}{N_b! M_b!} \int \left\{ (\varphi_1 \varphi_g)^{M_{1,g}} (\varphi_2 \varphi_g)^{M_{2,g}} (\varphi_3 \varphi_g)^{M_{3,g}} \right. \\ & \dots (\varphi_1 \varphi_a)^{N_{1,a}} (\varphi_1 \varphi_b)^{N_{1,b}} (\varphi_1 \varphi_c)^{N_{1,c}} (\varphi_1 \varphi_d)^{N_{1,d}} \dots \\ & \left. \exp \left[ -\sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right) \right] \right\} d\varphi_1 \dots d\varphi_N, \end{aligned} \quad (4.120)$$

onde os sítios  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  são os quatros vizinhos do sítio 1. Em uma forma mais compacta temos

$$Z = \sum_{\{N_b, M_b\}} \Pi_b \frac{J_L^{M_b}}{N_b! M_b!} \Pi_i Q(k_i), \quad (4.121)$$

onde a função  $Q(k_i)$  é definida como

$$Q(k_i) \equiv \int d\varphi_i \varphi_i^{k_i} \exp \left[ -\sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right) \right], \quad (4.122)$$

onde

$$k_i \equiv \sum_{i,\nu} N_{i,\nu} + M_i, \quad (4.123)$$

é a soma de todos os bonds, “normais” e “fantasmas”.

Para completarmos a analogia da Teoria Quântica de Campos com a Mecânica Estatística, introduziremos o parâmetro  $\beta \equiv 1$  na equação acima, este parâmetro

tem o papel da constante Boltzmann. Em analogia ao modelo de Ising, Eq. (3.68), temos

$$W\{N_b, M_b\} \equiv \Pi_b \frac{J_L^{M_b} \beta^{N_b+M_b}}{N_b! M_b!} \Pi_i Q(k_i), \quad (4.124)$$

onde  $W\{N_b, M_b\}$  corresponde ao peso estatístico de uma configuração de bonds  $\{N_b, M_b\}$ :

$$W\{N_b, M_b\} \equiv \Pi_b \frac{J_L^{M_b}}{N_b! M_b!} \Pi_i Q(k_i). \quad (4.125)$$

Desta forma, temos que a função de partição do campo escalar real é dada por:

$$Z = \sum_{\{N_b, M_b\}} W\{N_b, M_b\}. \quad (4.126)$$

Como podemos ver, o que difere a função de partição do campo escalar da função de partição do modelo de Ising é a função  $Q(k_i)$  e o fato de, no modelo de Ising o análogo ao campo  $\varphi_i$ , o spin  $s_i$ , assumir apenas os valores  $\pm 1$ , já no caso do campo escalar  $\varphi_i$  assume qualquer valor entre  $\pm\infty$ . As integrais das funções  $Q(k_i)$ , Eq. (4.122), são calculadas neste trabalho computacionalmente usando o método de quadratura de Gauss.

O estimador da função de partição no modelo de Ising é  $Z\{N_b, M_b\} = \delta_{i,j}$ , onde  $i$  e  $j$  são as extremidades do *worm*. Para o campo escalar, uma vez que as funções  $Q(k_i)$  não assumem apenas os valores 0 e 2, teremos o estimador

$$Z\{N_b, M_b\} = \delta_{i,j} \frac{Q(k_i)}{Q(k_i + 2)}. \quad (4.127)$$

Este mesmo fator multiplicativo aparece nos estimadores do campo médio e energia. Utilizando

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (4.128)$$

$$\langle \varphi \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial J}, \quad (4.129)$$

onde  $\langle \varphi \rangle$  é o análogo da magnetização, temos

$$E_{\{N_b, M_b\}} = -\delta_{i,j} \left( \sum N_b + M_b \right) \frac{Q(k_i)}{Q(k_i + 2)}, \quad (4.130)$$

$$\varphi_{\{N_b, M_b\}} = \delta_{i,j} \frac{(\sum M_b)}{J} \frac{Q(k_i)}{Q(k_i + 2)}. \quad (4.131)$$

Como podemos ver, estas equações são análogas às Eqs. (3.90) e (3.92). Continuando com as analogias, considerando a Eq. (3.58) podemos escrever o calor específico para o campo escalar da seguinte forma

$$C = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2, \quad (4.132)$$

assim sendo, uma vez que obtemos uma sequência de  $N$  medidas da energia por meio da Eq. (4.130), digamos  $\{E_1, E_2, E_3, \dots, E_N\}$ , temos

$$\langle E \rangle = \frac{E_1 + E_2 + \dots + E_N}{N}, \quad (4.133)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{E_1^2 + E_2^2 + \dots + E_N^2}{N}. \quad (4.134)$$

Por fim, façamos um breve discussão a respeito de algumas propriedades da função de correlação. De acordo com a Eq. (3.60), temos que a função de correlação entre o sítio  $i_1$  e  $i_2$  é dada por

$$G(i_1 - i_2) = \frac{1}{Z} \sum_{\{N_b\}} \left( \prod_b \frac{\beta^{N_b}}{N_b!} \right) \left( \prod_i Q(\bar{k}_i) \right). \quad (4.135)$$

Como vimos ao longo do Cap. 3, a função de correlação  $G(i_1 - i_2)$  assume valor não nulo apenas quando os sítios  $i_1$  e  $i_2$  são as extremidades do *worm*. Assim, se nosso algoritmo, ao gerar novas configurações de bonds  $\{N_b\}$ , atualizar as extremidades  $i$  e  $j$  do *worm*, temos que o estimador da função de correlação será dado por

$$G(i_1 - i_2) = \delta_{i_1, i_1} \delta_{j, i_2}. \quad (4.136)$$

A função de correlação para os sítios  $i$  e  $j$ , onde estes sítios estão separados por uma distância  $r$ , é definida como [5, 24]

$$G(\vec{r}) = \langle \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \rangle \langle \varphi_j \rangle, \quad (4.137)$$

que pode ser reescrita como, usando  $\langle \varphi_i \rangle = \langle \varphi_j \rangle = \langle \varphi \rangle$ ,

$$G(\vec{r}) = \langle (\varphi_i - \langle \varphi \rangle) (\varphi_j - \langle \varphi \rangle) \rangle. \quad (4.138)$$

Desta última expressão podemos notar o seguinte comportamento da função de correlação: se as flutuações do campo  $\varphi$  no sítio  $i$  estiverem correlacionadas com as flutuações no sítio  $j$  o produto  $(\varphi_i - \langle \varphi \rangle) (\varphi_j - \langle \varphi \rangle)$  será um número positivo se  $\varphi_i$  flutuar na mesma direção que  $\varphi_j$  ou um número negativo se  $\varphi_i$  e  $\varphi_j$  flutuarem em direções opostas, como consequência a função de correlação possuirá um valor não nulo. Agora, se as flutuações nos sítios  $i$  e  $j$  estiverem descorrelacionadas o

produto  $(\varphi_i - \langle \varphi \rangle)(\varphi_j - \langle \varphi \rangle)$  hora será positivo, hora será negativo, desta forma, ao calcularmos a média, a função de correlação será nula. Este comportamento é independente do quão perto (ou longe) estamos de um ponto crítico. Entretanto, analisemos a influência de um ponto crítico na função de correlação. Já comentamos neste trabalho que, para o modelo de Ising, à medida que nos aproximamos de um ponto crítico vindo de altas temperaturas, surgem regiões na rede com mesma orientação de spin. Para o campo escalar temos o mesmo comportamento, entretanto, agora temos regiões (ilhas) nas quais os valores dos campos, para sítios dentro de uma destas regiões, estão correlacionados\*. À medida que nos aproximamos de um ponto crítico o tamanho destas ilhas aumentam de modo que no ponto crítico a rede inteira torna-se correlacionada. Considere então um ponto ( $A$ ) dentro de uma determinada ilha, os campos dos sítios nas proximidades de  $A$  (pontos pertencentes a mesma ilha) estarão correlacionados com o campo  $\varphi_A$  e, à medida que nos afastamos de  $A$  a correlação tende a se anular, uma vez que teremos saído da região de correlação a qual o ponto  $A$  pertence. Desta forma concluímos que, a função de correlação decai com a distância. Podemos concluir também que a taxa com a qual a função de correlação decai diminui à medida que nos aproximamos de um ponto crítico, uma vez que o tamanho das ilhas de correlação aumentam. Uma função que reflete os comportamentos de  $G(r)$  discutidos acima é  $e^{-r/\xi}$ , onde  $\xi$  é um parâmetro associado ao tamanho das ilhas de correlação e conhecido como comprimento de correlação. Notem que, à medida que nos aproximamos de um ponto crítico,  $\xi$  assume valores maiores e como consequência, a função de correlação decresce mais lentamente. De fato, na teoria de campo médio a função de correlação possui a forma

$$G(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r}, \quad (4.139)$$

esta expressão é válida para 3 dimensões, a expressão geral para  $d$  dimensões é dada por [24]

$$G(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}. \quad (4.140)$$

Uma vez que no ponto crítico a rede inteira torna-se correlacionada, temos que (com base na Eq. (4.140)) o comprimento de correlação  $\xi$  tende a infinito à medida que nos aproximamos de um ponto crítico.

Precisaríamos agora derivar expressões para as taxas de aceitação e descrever o funcionamento do programa de computador que simulará o campo escalar. Entretanto, estas taxas de aceitação e esta descrição são idênticas às encontradas nas

---

\*Para ser mais preciso, no modelo de Ising também temos ilhas de correlação ao invés de ilhas de spins com mesma orientação.

Secs. 3.2.4 e 3.2.5 com um única diferença, as funções  $Q(k_i)$ . Esta diferença reside no fato de que, para o modelo de Ising as funções  $Q(k_i)$  assumem o valor 2 para configurações válidas de bonds e se anulam para as demais configurações<sup>†</sup>. Já no campo escalar, estas funções são dadas por (Eq. 4.122), que repetimos aqui para não desviar a atenção:

$$Q(k_i) \equiv \int d\varphi_i \varphi_i^{k_i} \exp \left[ - \sum_i \left( 2\varphi_i^2 + \frac{\mu_L^2}{2} \varphi_i^2 + \frac{\lambda_L}{4} \varphi_i^4 \right) \right], \quad (4.141)$$

onde  $k_i$  é a soma dos bonds em torno do sítio  $i$ .

Façamos agora um resumo do que que foi até aqui neste capítulo. Vimos que quantizar a dinâmica dos campos, i.e., assumí-los como operadores obedecendo regras de comutação da mecânica quântica, nos leva a interpretar os campos como operadores de criação e aniquilação de partículas. Vimos também que a abordagem de Feynman da mecânica quântica nos permite utilizar um objeto clássico (a ação) dado em termos de variáveis de campo que não são operadores. A utilização desta ação clássica no espaço Euclidiano permite fazer analogias entre a teoria quântica de campos e a Mecânica Estatística. Por fim, derivamos o algoritmo *worm* para o campo escalar. Agora, estamos preparados para simular o campo escalar via método de Monte Carlo utilizando os algoritmos discutidos. O próximo capítulo apresenta inicialmente resultados para o modelo de Ising em duas dimensões e, na sequência, para do campo escalar em duas dimensões.

## 4.7 Omissões

Para finalizar este capítulo, vamos discutir omissões importantes nesta dissertação com relação às simulações realizadas para a teoria do campo escalar. Inicialmente, é a questão da renormalização da divergência ultravioleta que está presente na teoria. Em duas dimensões, há uma única divergência, que é logarítmica. Ainda mais, há somente um diagrama de Feynman divergente, o girino (*tadpole*), mostrado na Fig. 4.3 abaixo. Isto significa que para  $a \rightarrow 0$ , a teoria apresenta divergências. Por exemplo, ao calcularmos uma função de correlação de dois pontos, obteremos um valor infinito para ela neste limite. Quando uma teoria apresenta um número finito de gráficos de Feynman divergentes ultravioleta, a teoria é dita super-renormalizável<sup>‡</sup>. Como é amplamente conhecido, resultados finitos são obti-

<sup>†</sup>Relembrando: uma configuração válida para a função de partição é aquela na qual todos os sítios da rede possuem uma quantidade par de bonds. Uma configuração válida para a função de correlação  $g(i-j)$  é aquela na qual todos os sítios da rede possuem uma quantidade par de bonds com exceção dos sítios  $i$  e  $j$ , os quais devem possuir um número ímpar de bonds.

<sup>‡</sup>Quando o número de amplitudes divergentes é divergente, a teoria é dita renormalizável

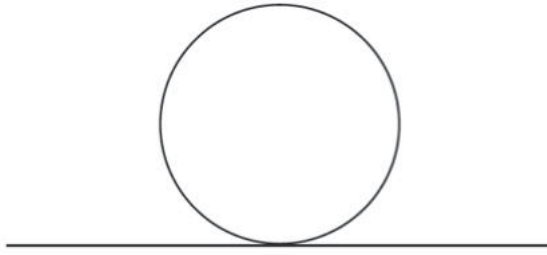


Figura 4.3: Diagrama girino (*tadpole*) - único diagrama de Feynman divergente na teoria em duas dimensões.

dos renormalizando as constantes do modelo [2]. No presente caso, com somente o diagrama girino sendo divergente, é a constante  $\mu_L^2$  que precisa ser renormalizada. Como nosso objetivo maior nesta dissertação é a implementação do algoritmo *worm*, não vamos nos deter na renormalização do modelo. Essa omissão não é porque a renormalização envolve complicações muito grandes, mas sim porque ela iria nos desviar do objetivo maior. Portanto, quando nos referimos à linha crítica do modelo, ela se refere aos parâmetros não renormalizados (parâmetros *bare*). Isso, no entanto, não implica que nossas simulações são sem uso para a determinação do ponto crítico em termos de quantidades renormalizadas, pois o processo de renormalização na rede requer o conhecimento do comportamento crítico das quantidades não renormalizadas. Uma discussão detalhada sobre a renormalização neste modelo pode ser encontrada na Ref. [35].

Uma outra questão que deve ser chamada à atenção é que a determinação da linha crítica feita nesta dissertação não emprega nenhum método de extrapolação para volume infinito. A determinação é feita de maneira qualitativa apenas. Como será visto no próximo Capítulo, essa determinação é feita variando o tamanho da rede. Sabendo que o calor específico diverge no ponto crítico, à medida que o tamanho da rede aumenta, deve-se observar um pico cada vez mais acentuado em torno do valor crítico de  $\mu_L^2$ , para um dado valor de  $\lambda_L$ . A determinação do valor crítico  $\mu_{LC}^2$  é feita por inspeção nos arquivos de dados.

## Capítulo 5

### Resultados de Simulações

Neste capítulo vamos apresentar resultados obtidos por meio de simulações de Monte Carlo para o campo escalar real. Aplicamos o algoritmo *worm* primeiramente no modelo de Ising com o intuito de praticar a sua implementação em um modelo mais simples que o de uma teoria de campos e verificar seu desempenho. Essa verificação se deu por meio de comparações com resultados obtidos com o algoritmo de Metropolis e também com a solução exata, analítica do modelo [24, 26, 27, 28]. Tanto as simulações do modelo de Ising quanto do campo escalar real foram realizadas em redes bidimensionais com condições de contorno periódicas, i.e., transformamos o plano bidimensional da rede em um toróide, Fig. 5.1. Em ambos casos utilizamos a subrotina geradora de números aleatórios *ran2*, extraída da Ref. [33]. As integrais que aparecem nas funções  $Q(k_i)$  no cálculo das taxas de aceitação para o campo escalar foram calculadas numericamente utilizando o método de quadratura de Gauss. Com exceção dessas duas subrotinas (*ran2* e *gauss*), todos os outros programas foram escritos integralmente pelo autor da presente dissertação.

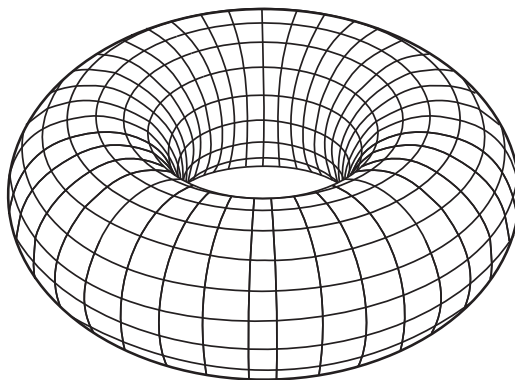


Figura 5.1: Superfície bidimensional com condição de contorno periódica.

## 5.1 Modelo de Ising

Na presente Seção, vamos apresentar os resultados de simulações para o modelo de Ising empregando os algoritmos de Metropolis e *worm*. As equações a seguir fornecem os resultados analíticos obtidos por Onsager e Yang para a energia e magnetização (por spin) em função de  $\beta = 1/kT$  :

$$e = -J \coth(2\beta J) \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \kappa' \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - \kappa^2 \sin^2(\phi))^{-1/2} \right], \quad (5.1)$$

$$m = \left\{ 1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4} \right\}^{1/8}, \quad (5.2)$$

com

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}, \quad (5.3)$$

$$\kappa' = 2 \tanh^2(2\beta J) - 1. \quad (5.4)$$

A temperatura crítica do modelo pode ser obtida a partir da Eq. (5.2) e é dada por (para  $J = 1$ ):

$$e^{2\beta_C} - e^{-2\beta_C} = 2 \rightarrow kT_C = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,269. \quad (5.5)$$

Em nossas simulações, calculamos a energia e magnetização em função de  $kT$ . As simulações foram realizadas com condição inicial típica de altas temperaturas, i.e., orientação aleatória de spins para o algoritmo de Metropolis e todos os bonds iguais a zero para o algoritmo *worm*. Cada varredura (ou atualização) da rede, tanto com o algoritmo de Metropolis quando com o *worm*, é dita como unidade de tempo de Monte Carlo. Em ambos casos, utilizamos um tempo total de  $10^5$ . O valor utilizado para o campo magnético externo foi de  $B = 0,01$ .

As Figs. 5.2 e 5.3 mostram os resultados de nossas simulações para a energia e magnetização. Nestas figuras temos os resultados obtidos com os algoritmos de Metropolis e *worm*, bem como os correspondentes resultado analíticos dados pelas Eqs. 5.1) e Eq. (5.2).

Através de uma análise visual da Fig. 5.2, é possível afirmar que o algoritmo *worm* é melhor que o algoritmo de Metropolis. Melhor no sentido de que este fornece resultados mais próximos da curva teórica obtida por Onsager, principalmente para temperaturas menores que a temperatura crítica.

O algoritmo de Metropolis possui maior eficiência no regime de altas temperaturas, mas esta eficiência é degradada a temperaturas baixas. Esta característica do

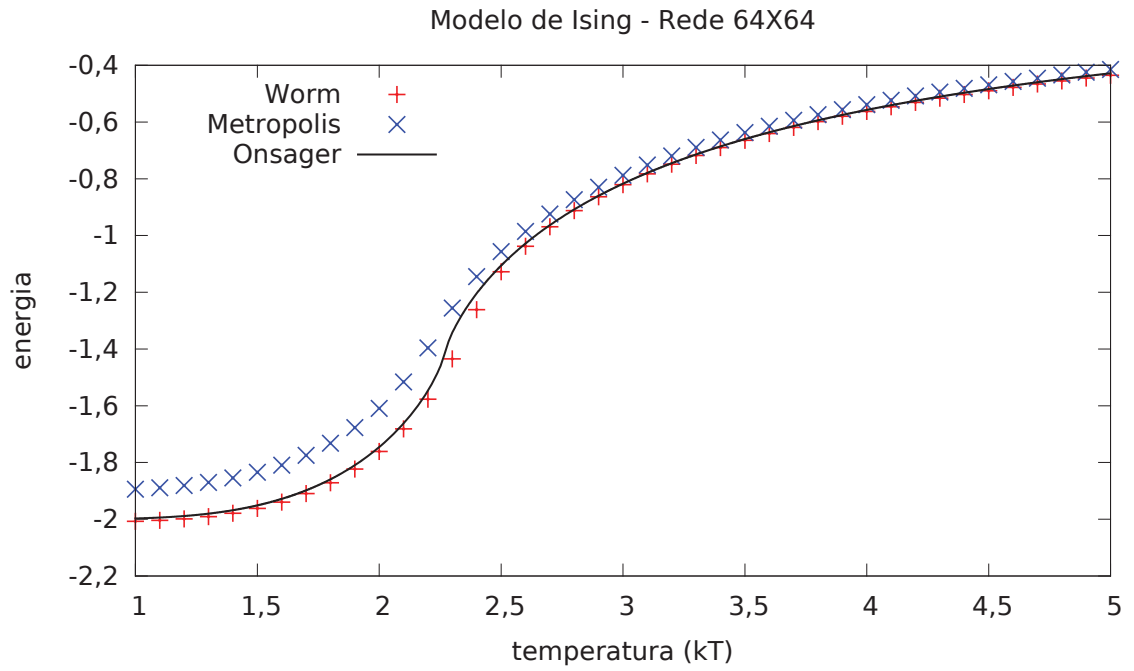


Figura 5.2: Modelo de Ising - Energia em função da temperatura - Rede  $64 \times 64$ .

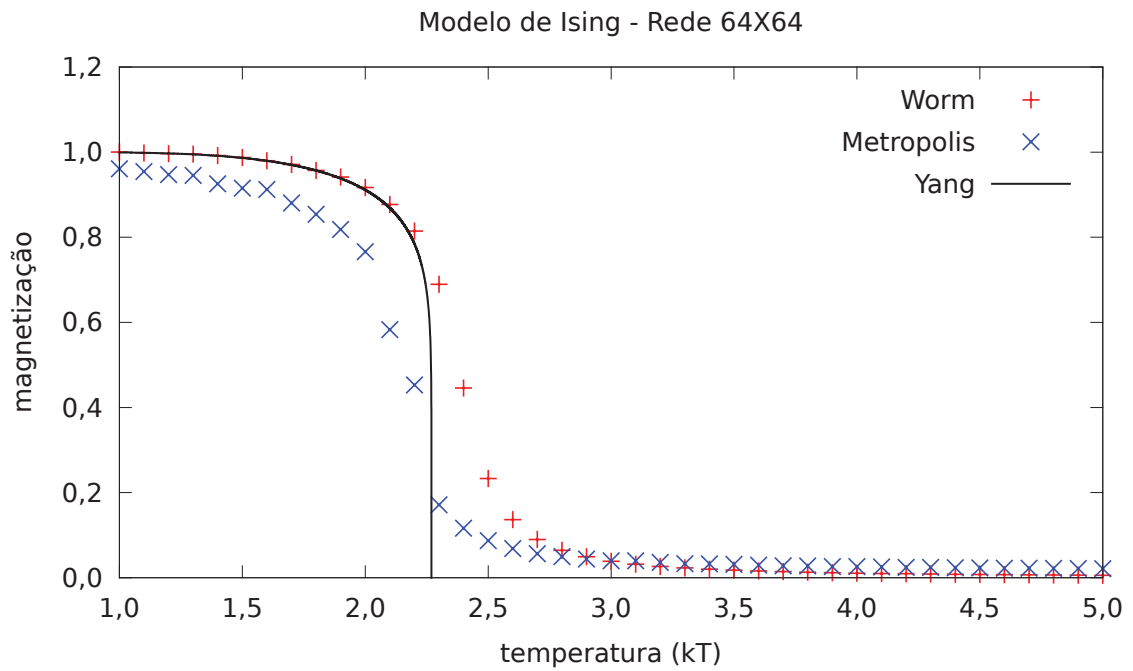


Figura 5.3: Modelo de Ising - Magnetização em função da temperatura - Rede  $64 \times 64$ .

algoritmo de Metropolis é um reflexo da dinâmica de atualização de configurações, que consiste em flipar um único spin da rede por vez. Para altas temperaturas, o sistema possui ordenamento aleatório de spins, desta forma, flipar um único spin nos fornece bons resultados. Entretanto à medida que diminuimos a temperatura em direção da temperatura crítica, surgem “ilhas” com mesma orientação de spins ao longo da rede e, por isso, a dinâmica de atualização das configurações spin-por-spin torna-se pouco eficaz. Por outro lado, nos algoritmos tipo *cluster* [12, 13], em que as configurações são atualizadas flipando ilhas inteiras, são muito mais eficientes nas proximidades da temperatura crítica. No entanto, esses algoritmos, por serem não locais, são muito mais difíceis de programa-los em arquiteturas paralelizadas. O algoritmo *worm*, por sua vez, soluciona tanto o problema da ineficiência do algoritmo de Metropolis no ponto crítico como também possui eficiência comparável a algoritmos do tipo *cluster* [14] e, por ser local, é facilmente paralelizável. A eficiência de um algoritmo pode ser medida por meio do chamado expoente dinâmico  $z$ , que se relaciona com o tempo de correlação  $\tau$  como

$$\tau \propto L^z,$$

onde  $L$  é o tamanho da rede, tanto para o algoritmo *worm* quanto para algoritmo do tipo *cluster* temos  $z = 0,25$  [5, 14]. Vale comentar que, apesar do algoritmo de Metropolis ser mais eficiente à altas temperaturas, o algoritmo *worm* ainda sim fornece resultados melhores.

Examinando a Fig. (5.3), também podemos afirmar que o algoritmo *worm* é melhor que o algoritmo de Metropolis: a curva obtida pelo algoritmo *worm* tende a 0 mais rapidamente que a do algoritmo de Metropolis para  $T > T_C$ , e tende mais rapidamente a 1 para  $T < T_C$ . Além da análise qualitativa temos que a magnetização obtida pelo algoritmo *worm* está em maior concordância com a curva analítica dada pela Eq. (5.2) do que a magnetização obtida pelo algoritmo de Metropolis. É importante notar que com uma rede finita é impossível obter exatamente a mesma curva que a da solução analítica, que é obtida no limite termodinâmico de uma rede infinita.

## 5.2 Campo Escalar Real

Nesta Seção apresentaremos nossos resultados obtidos via simulações de Monte Carlo do campo escalar real em duas dimensões. O intuito destas simulações é mapear o espaço definido pelas constantes  $(\lambda_L, \mu_L^2)$  de modo a identificar nesse espaço as regiões com  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ . Estas duas regiões são separadas por uma “*linha crítica*”, definida por valores  $(\lambda_{LC}, \mu_{LC}^2)$ . Ao variarmos os parâmetros  $\lambda_L$

e  $\mu_L^2$  de modo a cruzarmos esta linha crítica temos uma transição de fase, com características similares às transições de fase termodinâmicas. As duas regiões, com  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ , são chamadas respectivamente de fase simétrica e fase com quebra espontânea de simetria, conforme discutido ao final da Seção 4.3.

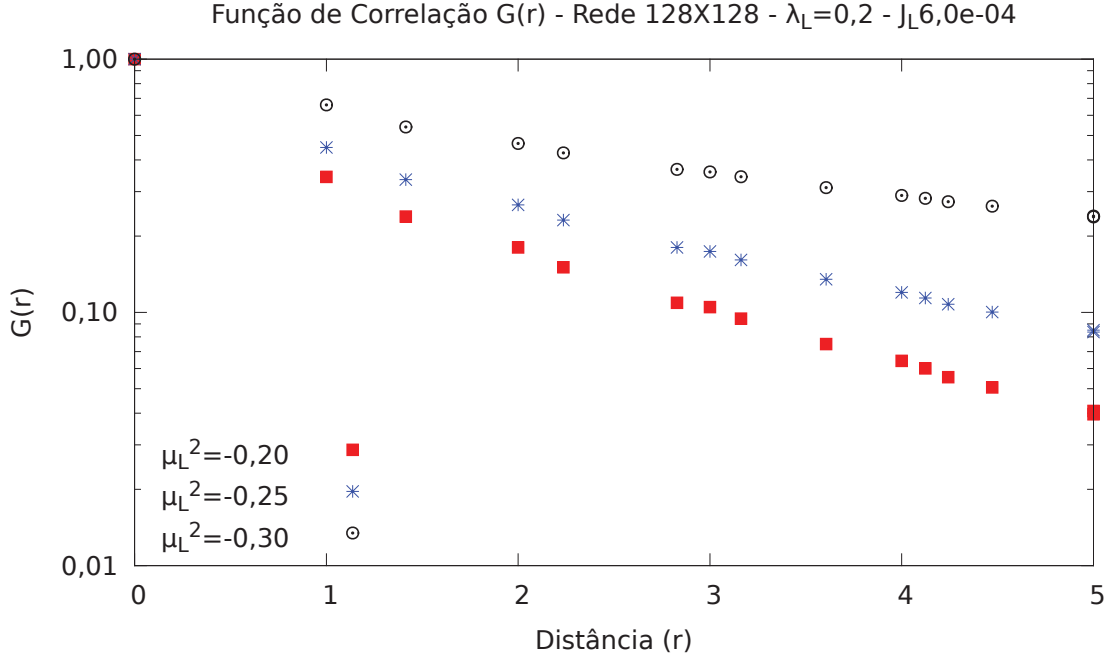


Figura 5.4: Função de correlação para  $\lambda_L = 0,2$  e diferentes valores de  $\mu_L^2$ .

Inicialmente fixamos alguns valores de  $\lambda_L$ , e, para cada um destes valores, realizamos simulações nas quais calculamos as funções de correlação para três valores de  $\mu_L^2$  diferentes, veja Figs. 5.4, 5.5 e 5.6. Em duas dimensões a função de correlação tem um comportamento qualitativo da forma  $G(r) \propto e^{-r/\xi}$ , onde  $r$  é a distância entre dois sítios e  $\xi$  é chamado de comprimento de correlação. Nas proximidades de um ponto crítico temos que o comprimento de correlação aumenta consideravelmente [24]. Podemos entender este comportamento do comprimento de correlação por meio de uma análise qualitativa do modelo de Ising\*, onde o comprimento de correlação está associado ao tamanho das “ilhas” de spins (regiões da rede com mesma orientação de spin) formadas à medida que nos aproximamos da temperatura crítica ( $T_C$ ). Para uma temperatura muito alta, tais ilhas não existem e, desta forma, o comprimento de correlação é zero. Para uma temperatura igual ou

\*Utilizamos o modelo de Ising com a intenção de simplificar a exposição, uma vez que, as conclusões obtidas no modelo de Ising são válidas para o campo escalar no limite de acoplamento forte: o campo escalar real equivale ao modelo de Ising no limite de  $\lambda_L \rightarrow \infty$ , em que todos os valores do campo  $\varphi(x)$  são suprimidos com exceção de  $\varphi(x) = \pm 1$  [30].

inferior a  $T_C$ , toda a rede possui em média a mesma orientação de spin, desta forma o comprimento de correlação possui valor muito grande (ou infinito para uma rede infinita)

Desta forma, temos que para estas simulações em questão, Figs. 5.4, 5.5 e 5.6, a simulação representada por quadrados vermelhos possui valor de  $\mu_L^2$  mais distante do valor crítico  $\mu_{L_C}^2$ , quando comparamos com a simulação representada pelas bolinhas pretas. Já a simulação representada pelas estrelas em azul, é para um valor intermediário de  $\mu_L^2$ . Afim de determinarmos a linha crítica  $(\lambda_{L_C}, \mu_{L_C}^2)$ , calculamos o calor específico em função de  $\mu_L^2$  para determinados valores de  $\lambda_L$ . Desta forma, temos que  $\mu_{L_C}^2$  corresponde ao ponto que resulta em um pico no gráfico do calor específico, uma vez que este diverge no ponto crítico para uma rede infinita. Calculamos o calor específico por meio da Eq. (4.132):

$$C = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2.$$

Na Mecânica Estatística esta expressão é deduzida a partir de

$$C \equiv \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}.$$

No presente contexto, o papel da temperatura é desempenhado por  $\mu_L^2$ , i.e., o calor específico mede a flutuação da energia com respeito a variação do parâmetro  $\mu_L^2$  – isto não é inteiramente diferente da Mecânica Estatística, pois na temperatura crítica o parâmetro proporcional a  $\varphi^2$  no potencial clássico se anula, quando o potencial muda de poço duplo para poço simples. Com base na Fig. 5.24 podemos ver que o calor específico é nulo para  $\mu_L^2 > \mu_{L_C}^2$  e não nulo para  $\mu_L^2 < \mu_{L_C}^2$ .

Outro modo de caracterizar a transição de fase consiste em olhar para o gráfico do campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ , onde observamos um comportamento análogo ao da magnetização do modelo de Ising, i.e.,  $\langle \varphi \rangle = 0$  para  $\mu_L^2$  maior que  $\mu_{L_C}^2$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  para  $\mu_L^2$  menor que  $\mu_{L_C}^2$ .

Como podemos ver nas Figs. 5.4, 5.5 e 5.6, adotamos como valor para o campo externo  $J_L = 0,0006$ . De acordo com a discussão realizada na Seção 3.2.3. O campo externo tem a função de gerar  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  na fase com quebra de simetria; se  $J_L < 0$ ,  $\langle \varphi \rangle < 0$  e se  $J_L > 0$ ,  $\langle \varphi \rangle > 0$ . Note que  $J_L$  deve ser pequeno o suficiente para que não interfira na dinâmica do problema. Entretanto, existe uma limitação técnica que não nos permite utilizar  $J_L$  arbitrariamente pequeno porque o ruído nas simulações aumenta substancialmente. Neste sentido, usamos o menor valor possível de  $J_L$ , que no nosso caso é  $J_L \geq 0,0006$ . Para ilustrar este ponto, na Fig. 5.7 mostramos a função de correlação para  $\lambda_L = 0,2$  com três valores distintos de  $J_L$ . Como podemos ver, para estes valores de  $J_L$  o desvio das 3 curvas é mínimo.

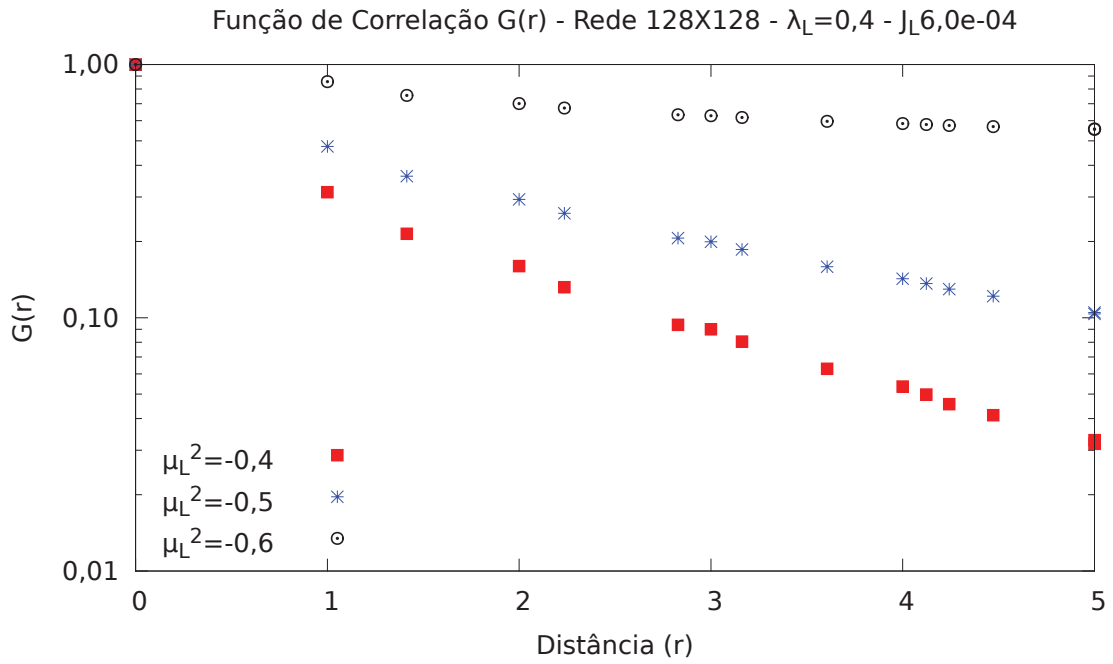


Figura 5.5: Função de correlação para  $\lambda_L = 0,4$  e diferentes valores de  $\mu_L^2$ .

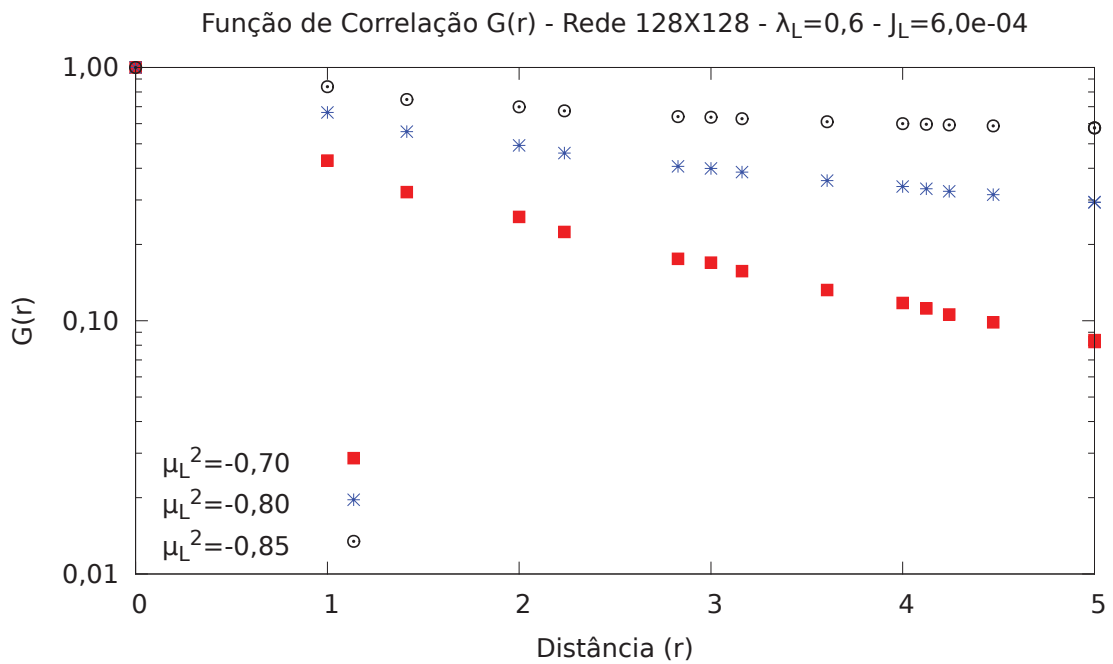


Figura 5.6: Função de correlação para  $\lambda_L = 0,6$  e diferentes valores de  $\mu_L^2$ .

Podemos avaliar o impacto do campo externo  $J_L$  em uma transição de fase observando a Fig. 5.8. *A posteriori*, sabemos que o valor crítico de  $\mu_L^2$  para  $\lambda_L = 1.0$  está

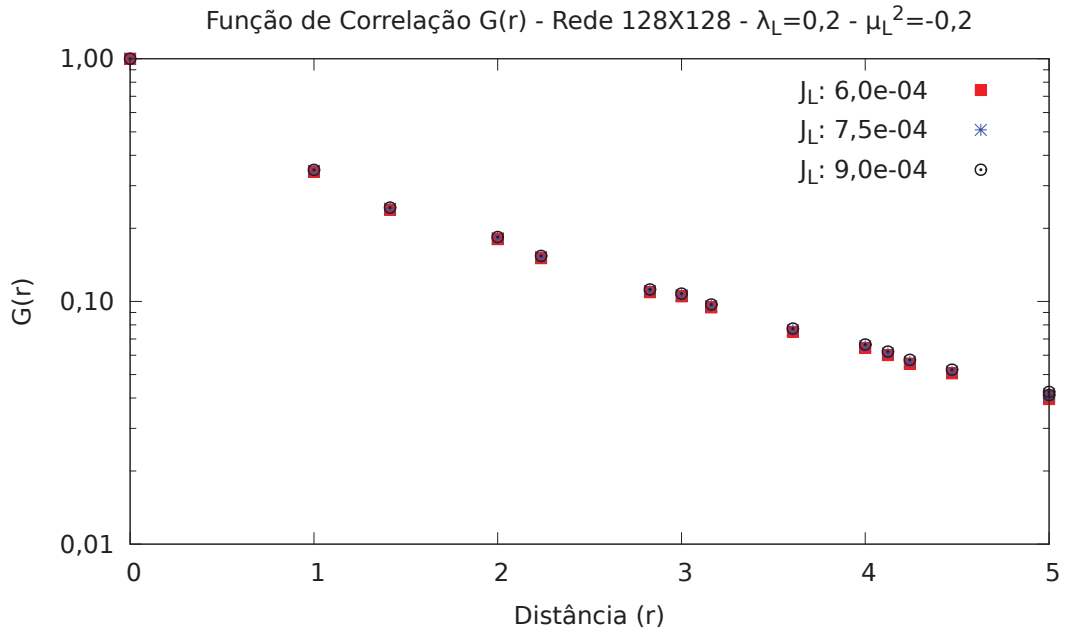


Figura 5.7: Função de correlação:  $\lambda_L = 0,2$ . Notem que a curvas das funções de correlação são praticamente iguais para os três valores de  $J_L$  utilizados.

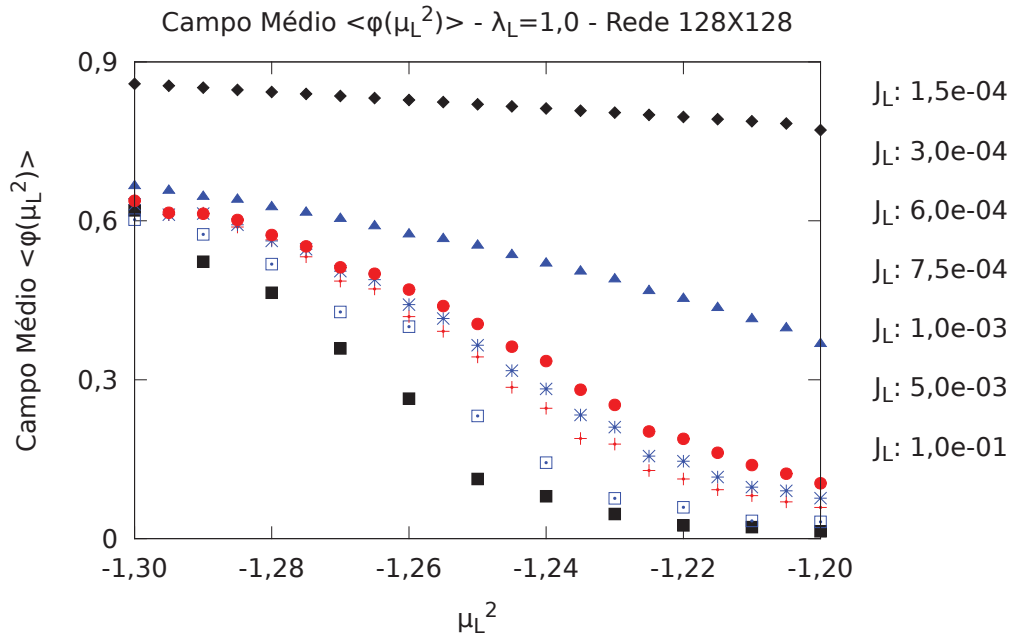


Figura 5.8: Dependência de  $J_L$  em  $\langle \varphi \rangle$ . Notem que para os valores mais altos de  $J_L$  temos que  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  tanto acima quanto abaixo de  $\mu_{LC}^2 = -1,265$ .

entre  $-1,26$  e  $-1,24$  (esta informação também pode ser intuída da Fig. 5.8). Fica claro observando os resultados mostrados na Fig. 5.8 que para os valores mais altos de  $J_L$  o campo não é zero no intervalo de valores  $\mu_L^2$  mencionados. Valores altos de  $J_L$  forçam um valor de  $\langle\varphi\rangle \neq 0$ , da mesma forma que no modelo de Ising em que a presença de um campo magnético externo força o sistema a ficar magnetizado tanto acima quanto abaixo da temperatura crítica. Entretanto, à medida que diminuimos o valor de  $J_L$ , este funciona apenas como uma perturbação ao sistema e a curva de  $\langle\varphi(\mu_L^2)\rangle$  começa a descrever uma transição de fase determinada pela dinâmica intrínseca ao modelo.

Neste trabalho, realizamos simulações para alguns valores de  $\lambda_L$ , em cada uma destas simulações obtemos gráficos para a energia, campo médio e calor específico. Iniciemos a apresentação para os valores de  $\lambda_L$  já mencionados até o momento. Na Fig. 5.9 temos um gráfico do campo médio em função de  $\mu_L^2$  onde utilizamos três valores de campo externo ( $J_L = 0,0006$ ,  $J_L = 0,0075$  e  $J_L = 0,0009$ ). Como podemos ver, os resultados são praticamente iguais para estes três valores de  $J_L$ . Esta simulação pertence a uma primeira versão de nosso programa, onde cada ponto do gráfico corresponde a uma média de 10000 medidas do campo médio. Nesta primeira versão, não realizamos análise de erros. Uma simulação como esta (Fig. 5.9) leva em torno de 12 dias para ser completada nos computadores do GridUNESP. Em uma nova versão de nosso programa, realizamos análise de erros. Com esta nova versão repetimos esta mesma simulação (Fig. 5.10), onde, por motivos de economia de tempo, utilizamos 2000 medidas no cálculo de cada ponto do gráfico (esta simulação leva em torno de três dias para ser completada nos computadores do GridUNESP). Notamos que a simulação com menor número de medidas possui uma curva ruidosa. Podemos observar em ambas simulações uma transição de fase, uma vez que, para valores mais altos de  $\mu_L^2$  temos  $\langle\varphi\rangle = 0$  e para valores mais baixos temos  $\langle\varphi\rangle \neq 0$ .

Para determinarmos aproximadamente o valor de  $\mu_{LC}^2$ , examinemos o gráfico do calor específico, Fig. 5.11. A simulação com pontos pretos foi realizada com 2000 medidas no cálculo dos valores médios de cada ponto, já a simulação com pontos vermelhos utilizamos 3600 medidas. Olhando para o ponto  $\mu_L^2 = -0,8$  vemos que a simulação com maior número de medidas possui uma barra de erro menor. Determinando o valor crítico de  $\mu_L^2$  como sendo a média dos valores críticos de cada simulação temos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,809375$ . Na Fig. 5.12 temos o gráfico da energia, como podemos ver, a barra de erros no cálculo da energia é imperceptível.

No Cap. 4 falamos a respeito da simetria do potencial clássico do campo escalar com interação  $\lambda_L\varphi^4$  sob a transformação  $\varphi \rightarrow -\varphi$ . Vimos que o valor médio do

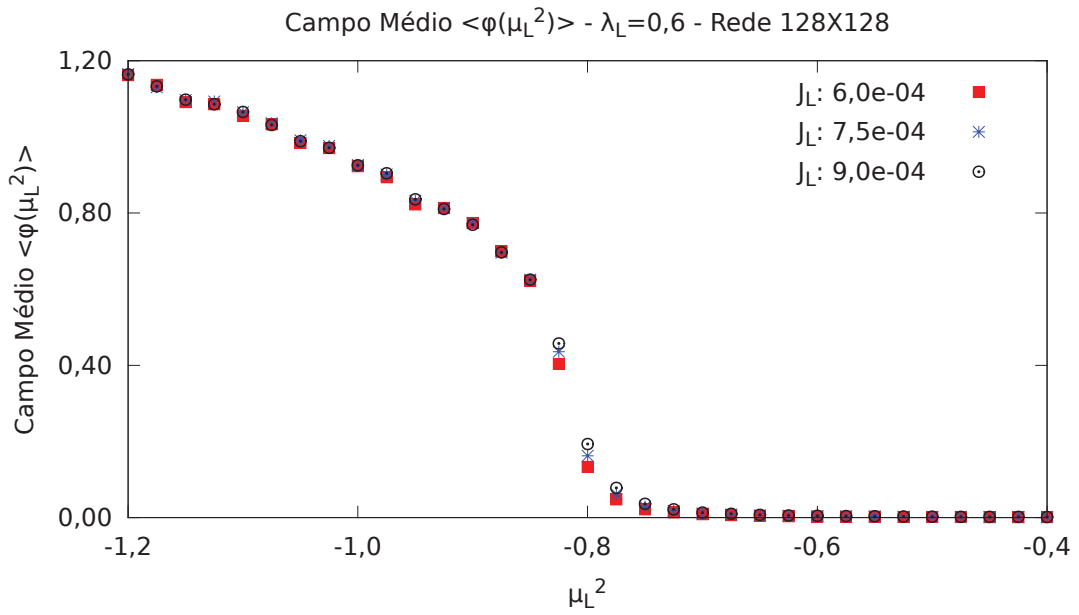


Figura 5.9: Campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,6$ . Como podemos ver, temos uma transição de fase em torno de  $\mu_L^2 \approx -0,8$ . Cada ponto do gráfico corresponde a uma média de 10000 medidas.

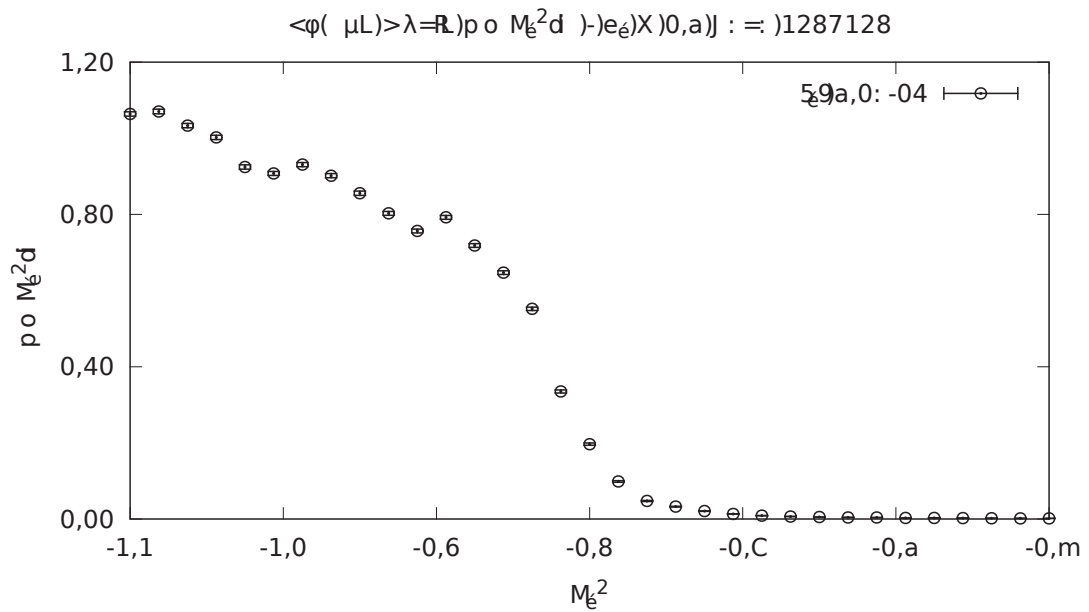


Figura 5.10: Campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,6$ . Cada ponto corresponde a uma média de 2000 medidas.

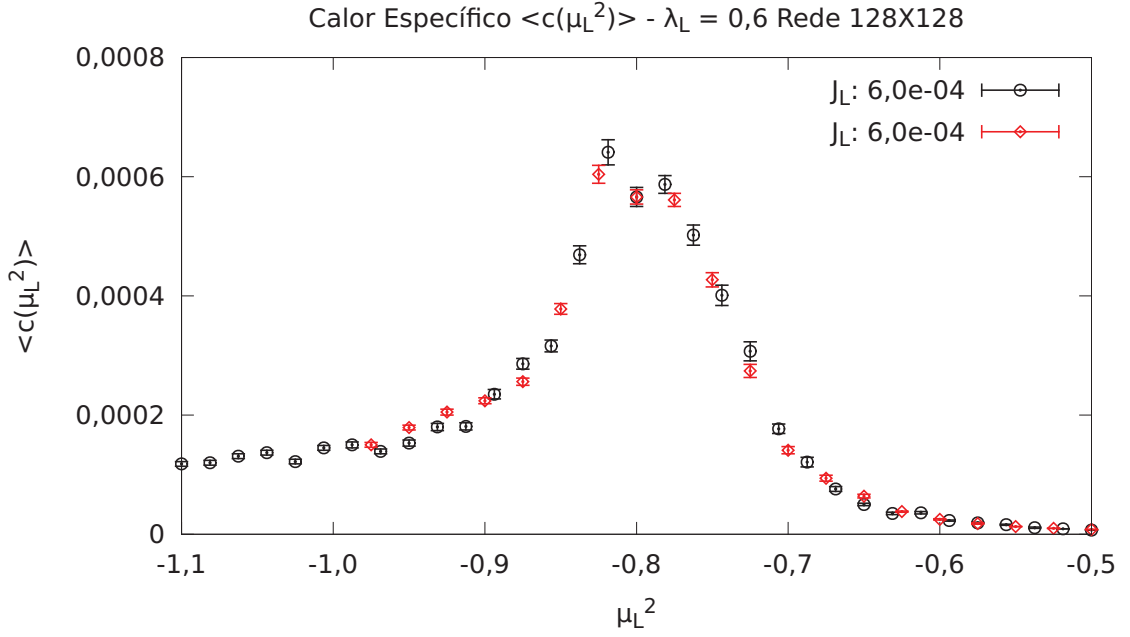


Figura 5.11: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,6$ . Na simulação com pontos pretos, cada ponto corresponde a uma média de 2000 medidas, já a simulação com pontos vermelhos utilizamos 3600 medidas. Como podemos ver, a simulação com maior número de medidas possui barras de erros menores. Ponto crítico para  $\lambda_L = 0,6$ :  $\mu_{Lc}^2 \approx -0,809375$ .

campo  $\varphi$  corresponde ao mínimo deste potencial, onde este potencial é dado por, veja Eq. (4.69),

$$V(\varphi) = \frac{\mu_0^2 \varphi^2(x)}{2} + \frac{\lambda_L}{4} \varphi^4(x). \quad (5.6)$$

Se incluirmos o campo externo  $J_L$  teremos

$$V(\varphi) = \frac{\mu_0^2 \varphi^2(x)}{2} + \frac{\lambda_L}{4} \varphi^4(x) + J_L \varphi(x). \quad (5.7)$$

Podemos agora comparar os resultados preditos por este potencial clássico com nossos resultados (quânticos) obtidos via simulação de Monte Carlo. Em particular, olhemos para a Fig. 5.9. Nesta figura temos uma simulação para  $\lambda_L = 0,6$  e podemos ver que o valor esperado do campo  $\varphi$  para  $\mu_L^2 = -0,4$  é  $\langle \varphi \rangle = 0$ . Agora considere a Fig. 5.13. Nesta figura temos plotado o potencial clássico para alguns valores de  $J_L$ , como podemos ver  $\langle \varphi \rangle \approx 0,8$  para  $J_L = 0$ . Isto mostra o papel das flutuações quânticos no valor esperado do campo. Por meio da Fig. 5.13 podemos observar também que a utilização do valor  $J_L = 0,0006$  para o campo externo altera a curva

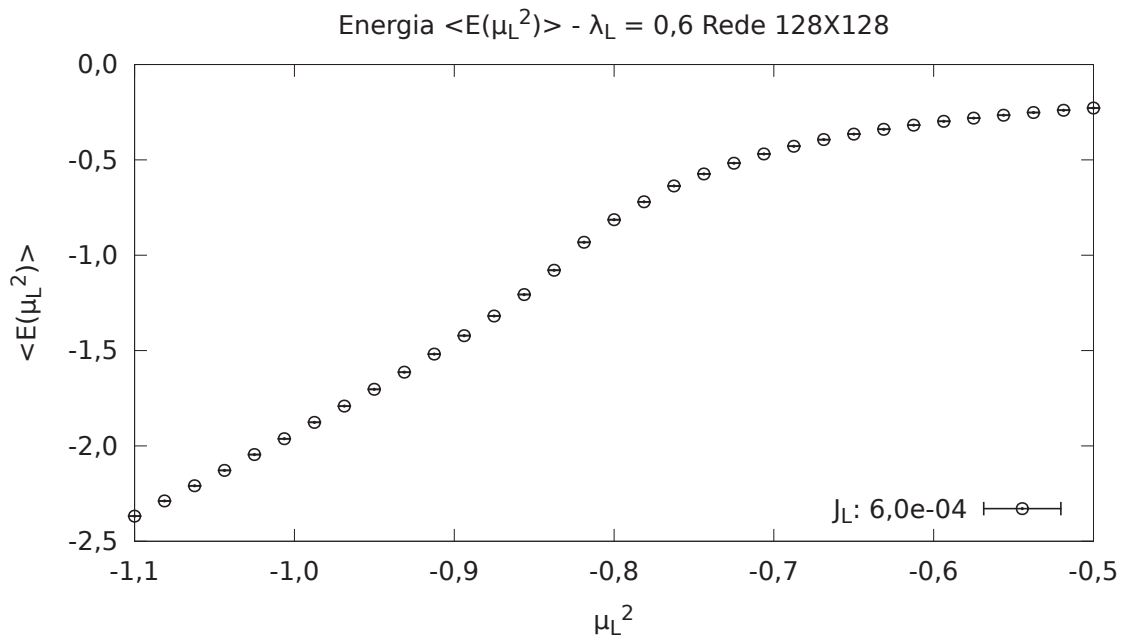


Figura 5.12: Energia  $\langle E(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,6$ .

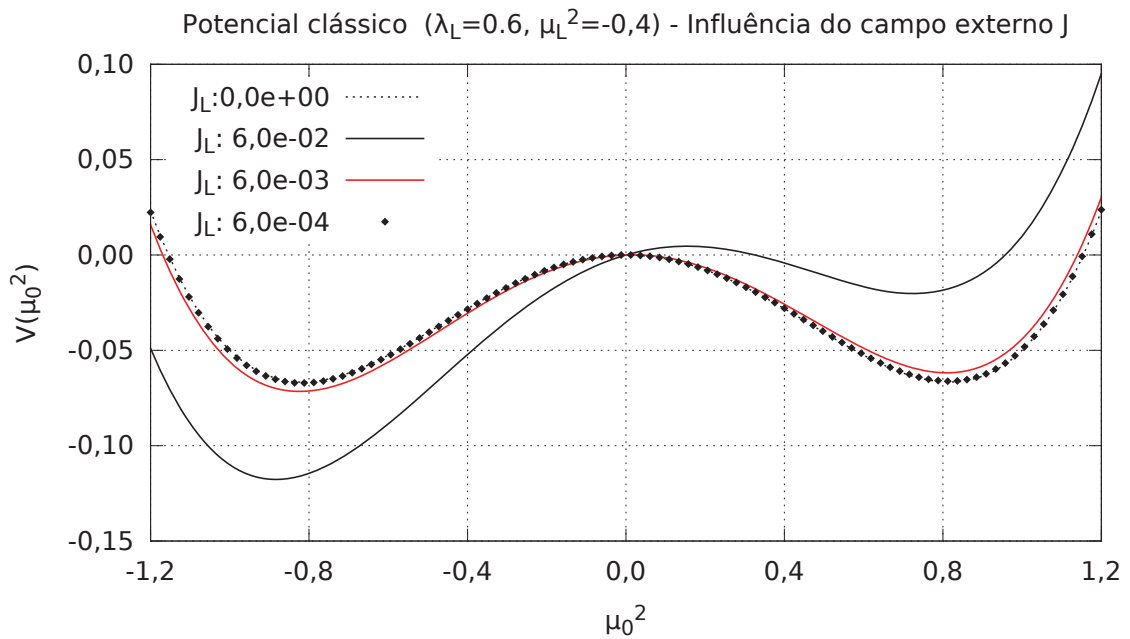


Figura 5.13: Potencial clássico. Aqui podemos ver que o uso valor  $J_L = 0,0006$  para o campo externo causa uma modificação desprezível na curva do potencial clássico.

do potencial de maneira desprezível, o mesmo não podemos dizer para  $J_L = 0,06$  e  $J_L = 0,006$ .

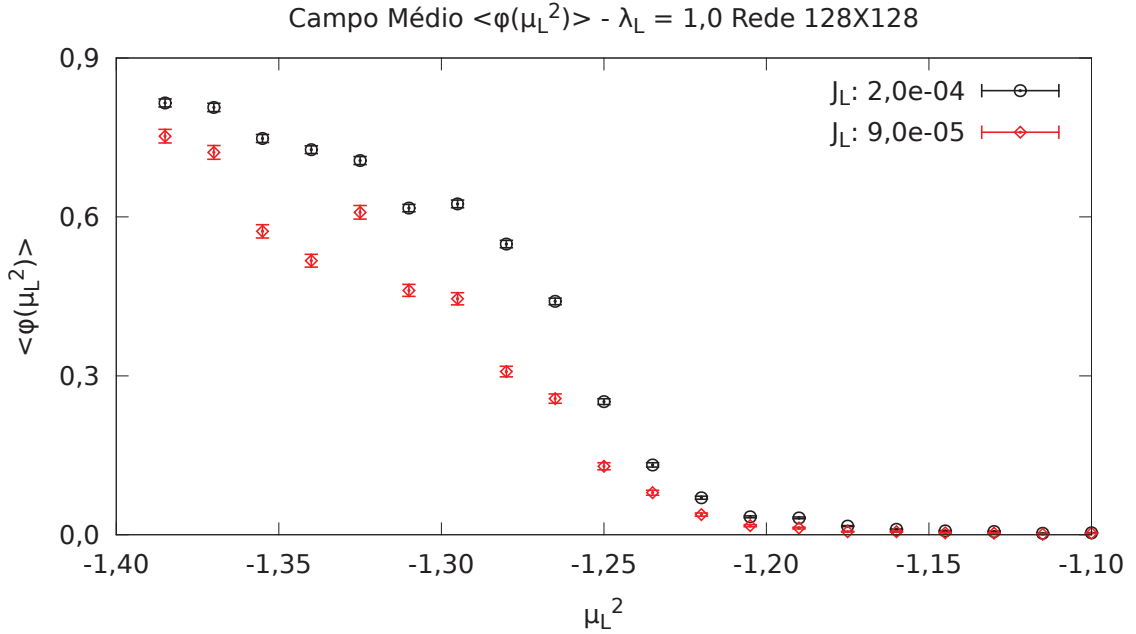


Figura 5.14: Campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 1,0$ . Para ambas simulações (e para os próximos gráficos com  $\lambda_L = 1,0$ ) utilizamos 3600 medidas no cálculo dos valores do campo médio.

Analisemos agora os resultados para  $\lambda_L = 1,0$  (Fig. 5.14). Nestas simulações testamos valores menores para  $J_L$  ( $J_L = 0,0002$  e  $J_L = 0,00009$ ). Como podemos ver, apesar de ambas simulações utilizarem a mesma quantidade de medidas no cálculo dos valores do campo médio (3600 medidas), para  $J_L = 0,00009$  os resultados são mais ruidosos. Obviamente, uma maneira de contornar essa deficiência é utilizar uma quantidade maior de medidas. Na Fig. 5.14 podemos estimar o valor crítico de  $\mu_L^2$  como sendo algo em torno de  $-1,25$ , entretanto, para estimar com maior precisão  $\mu_{L_C}^2$  devemos olhar para Fig. 5.15. Nesta figura temos o gráfico do calor específico para  $\lambda_L = 1,0$ . Como podemos ver, estas simulações possuem picos distintos, desta forma calculamos o valor crítico de  $\mu_L^2$  como sendo a média do valor crítico de  $\mu_L^2$  de cada simulação. Para  $\lambda_L = 1,0$  obtemos  $\mu_{L_C}^2 \approx -1,265$ .

Na Fig. 5.16 temos os resultados da energia para  $\lambda_L = 1,0$ . Podemos notar que, existe uma mudança de inclinação da curva da energia quando passamos da fase simétrica ( $\mu_0^2 > \mu_{L_C}^2$ ) para a fase com quebra de simetria ( $\mu_0^2 < \mu_{L_C}^2$ ). Esta mudança de inclinação é menor no caso onde  $\lambda_L = 1,0$  do que em  $\lambda_L = 0,6$ .

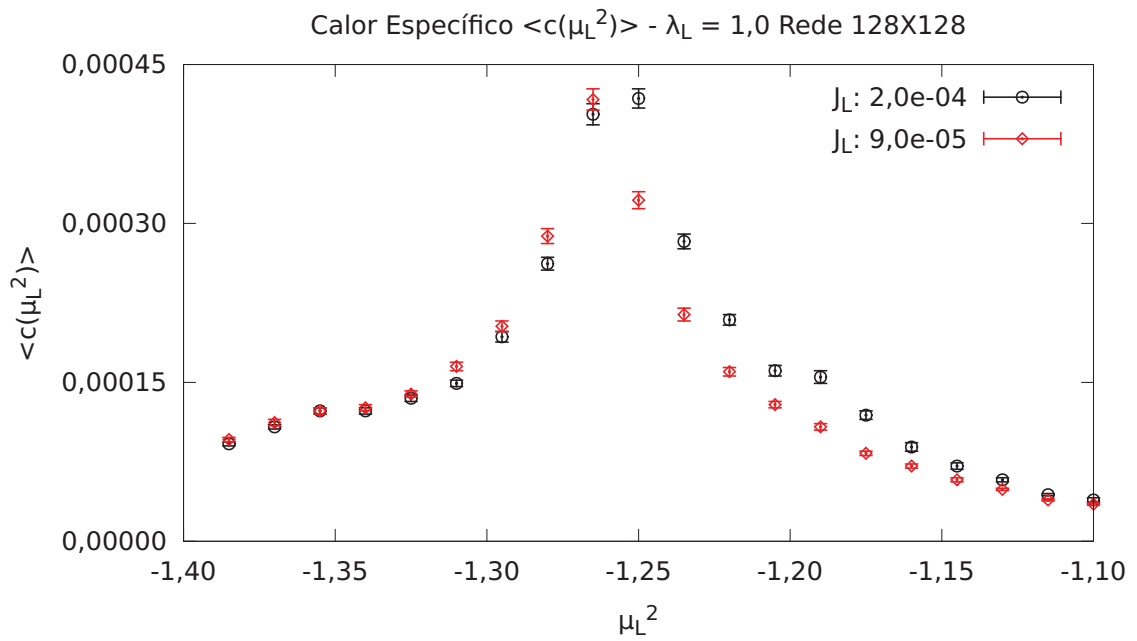


Figura 5.15: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 1,0$ . Para  $\lambda_L = 1,0$  o valor crítico de  $\mu_L^2$  foi estimado em  $\mu_{L_c}^2 \approx -1,265$ .

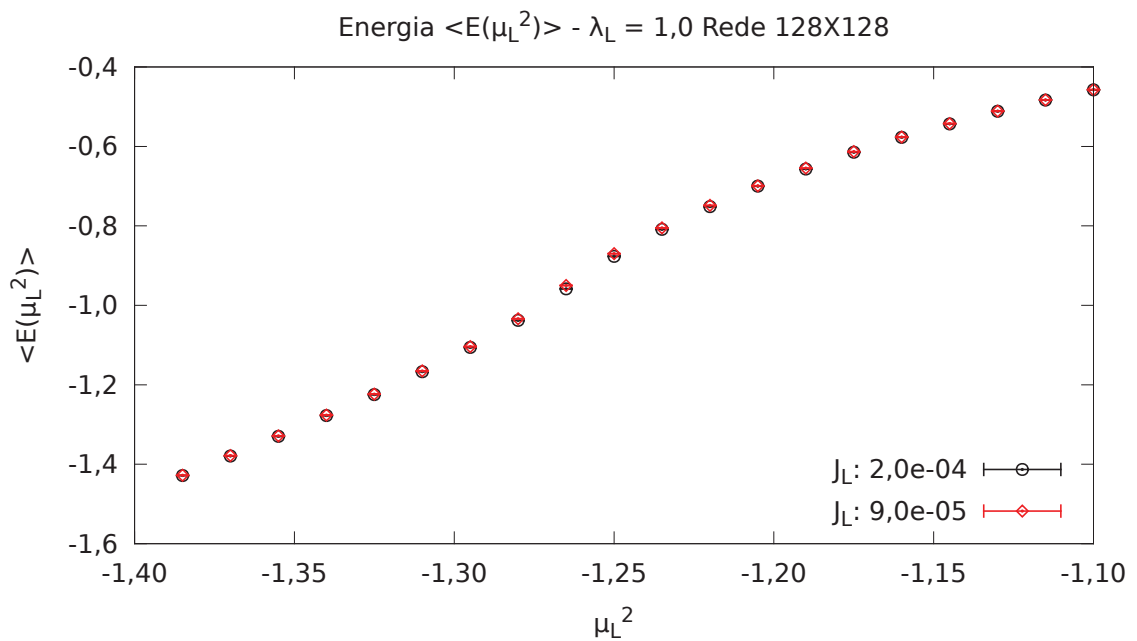


Figura 5.16: Energia  $\langle E(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 1,0$ .

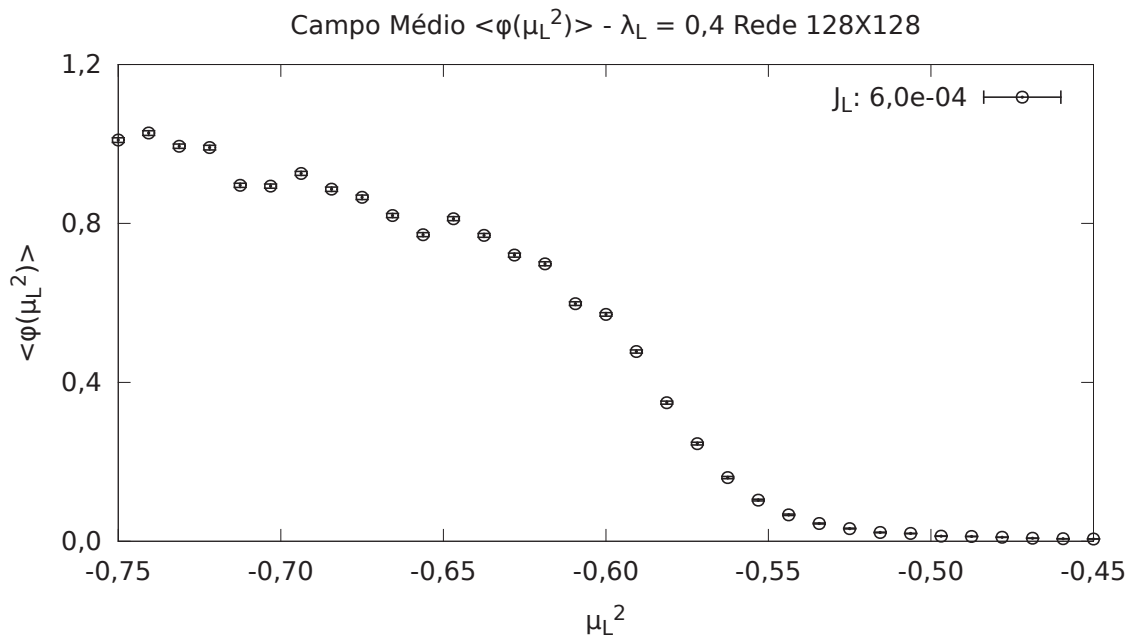


Figura 5.17: Campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,4$ . Nesta simulação utilizamos 2000 medidas no cálculo dos valores do campo médio.

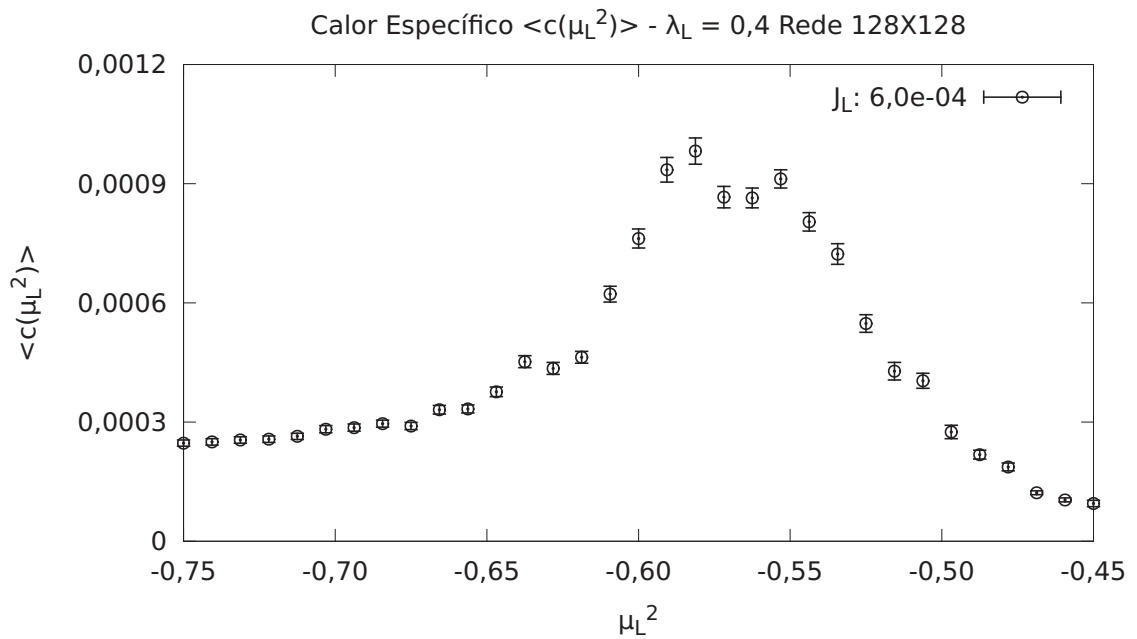


Figura 5.18: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,4$ . Para  $\lambda_L = 0,4$  o valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 \approx -0,580625$ .

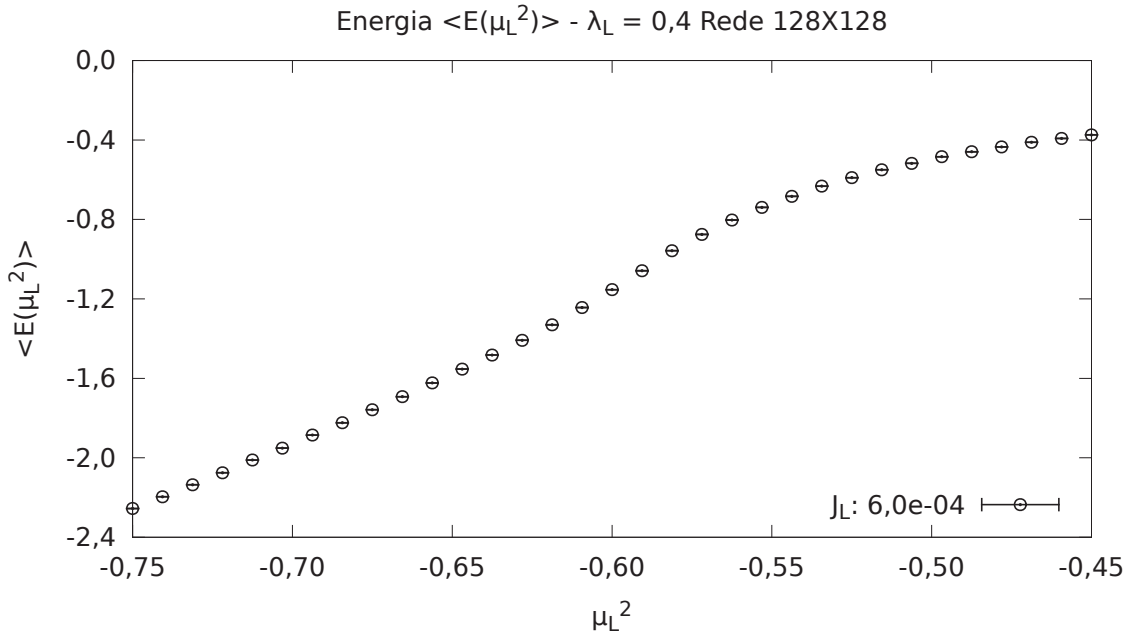


Figura 5.19: Energia  $\langle E(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,4$ .

Os resultados com  $\lambda_L = 0,4$  mostrados nas Figs. 5.17, 5.18 e 5.19 são qualitativamente análogos aos das simulações anteriores, desta forma, a partir deste momento iremos nos concentrar nos resultados obtidos para  $\mu_{0C}^2$ . Para  $\lambda_L = 0,4$  obtemos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,580625$ . Por outro lado, para  $\lambda_L = 0,2$  obtemos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,3240625$  – os resultados para este caso estão mostrados nas Figs. 5.20, 5.21 e 5.22. Novamente, podemos notar uma influência na inclinação da curva da energia à medida que variamos o valor de  $\lambda_L$ . Notamos também que  $\mu_{LC}^2$  diminui à medida que  $\lambda_L$  aumenta. Para relembrar, temos que: para  $\lambda_L = 0,2$  temos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,3240625$ , para  $\lambda_L = 0,4$  temos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,580625$ , para  $\lambda_L = 0,6$  temos  $\mu_{LC}^2 \approx -0,809375$  e, para  $\lambda_L = 1,0$  temos  $\mu_{LC}^2 \approx -1.265$ . Nas Figs. 5.23 e 5.24 mostramos resultados para a energia e o campo médio como função de  $\mu_L^2$  para  $\lambda_L = 0,1$ ,  $\lambda_L = 0,2$  e  $\lambda_L = 0,4$ . Nestas simulações para as energias e os campos médios utilizamos 3600 medidas.

Nos dois parágrafos anteriores comentamos como a inclinação da curva da energia depende do valor de  $\lambda_L$ , Fig. 5.24. Este comportamento se reflete nos gráficos do calor específico. O valor do calor específico para  $\mu_L^2 < \mu_{LC}^2$  depende da inclinação da curva da energia. Como vimos, esta inclinação depende do valor do parâmetro  $\lambda_L$  – Fig. 5.24. Baseados nos resultados mostrados na Fig. 5.25, podemos concluir que, para  $\mu_L^2 < \mu_{LC}^2$ , à medida que  $\lambda_L$  diminui, o valor do calor específico aumenta. Nesta figura, mostramos resultados para o calor específico obtidos por simulações com  $\lambda_L = 0,09$  ( $\mu_{LC}^2 \approx -0,16$ ),  $\lambda_L = 0,07$  ( $\mu_{LC}^2 \approx -0,13$ ) e  $\lambda_L = 0,05$  ( $\mu_{LC}^2 \approx -0,10$ ),

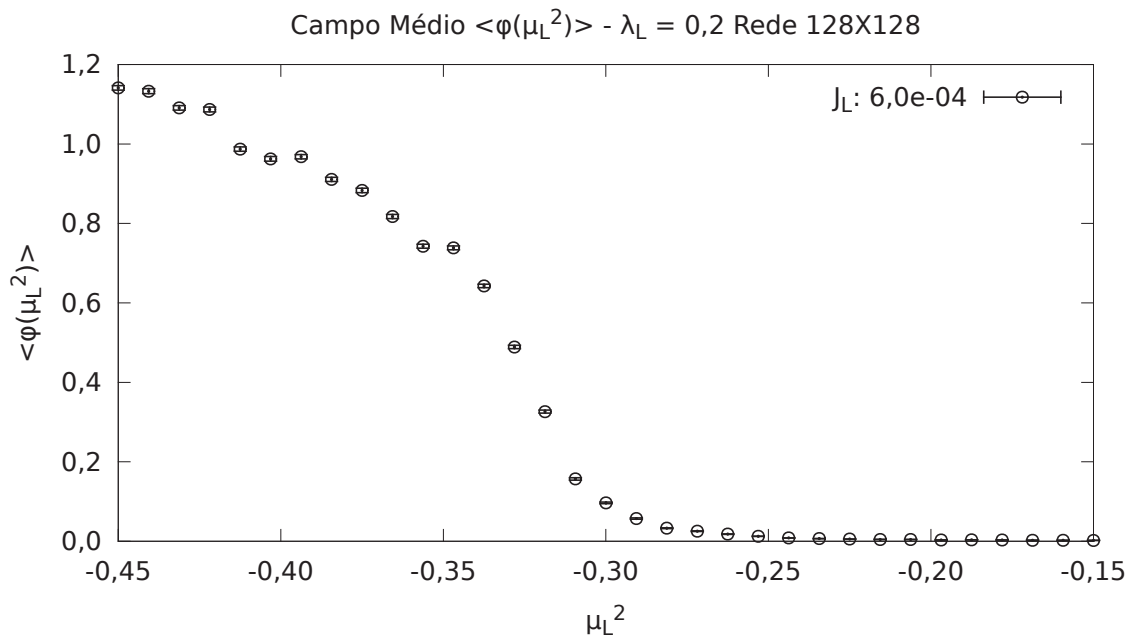


Figura 5.20: Campo médio  $\langle \varphi(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,2$ . Nesta simulação utilizamos 2000 medidas no cálculo dos valores do campo médio.

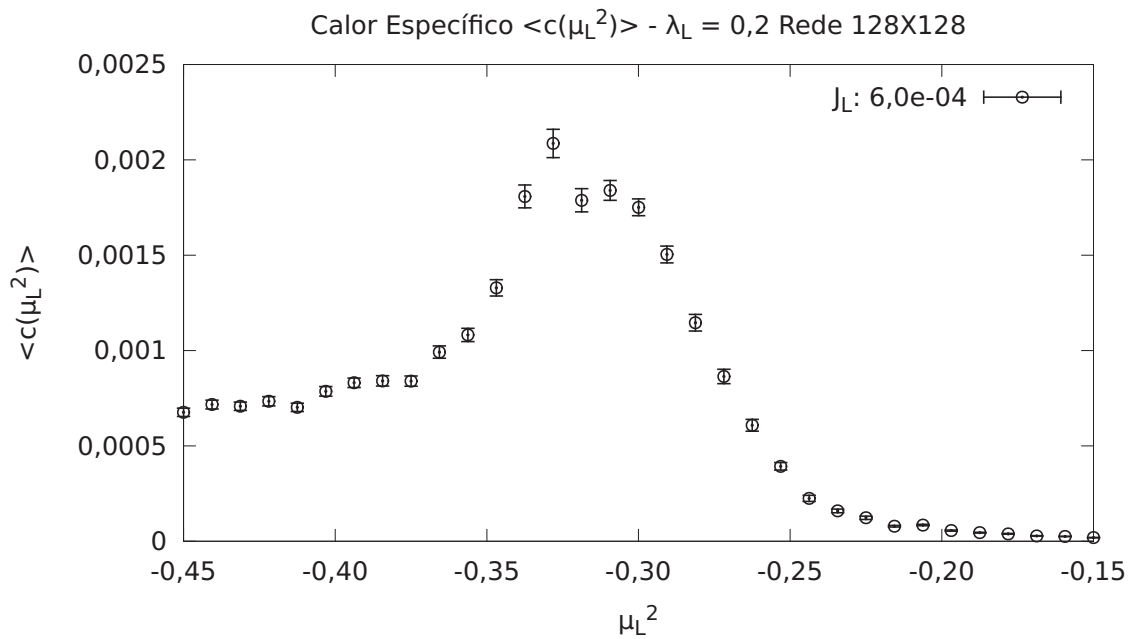


Figura 5.21: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,2$ . Para  $\lambda_L = 0,2$  o valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 = -0,3240625$ .

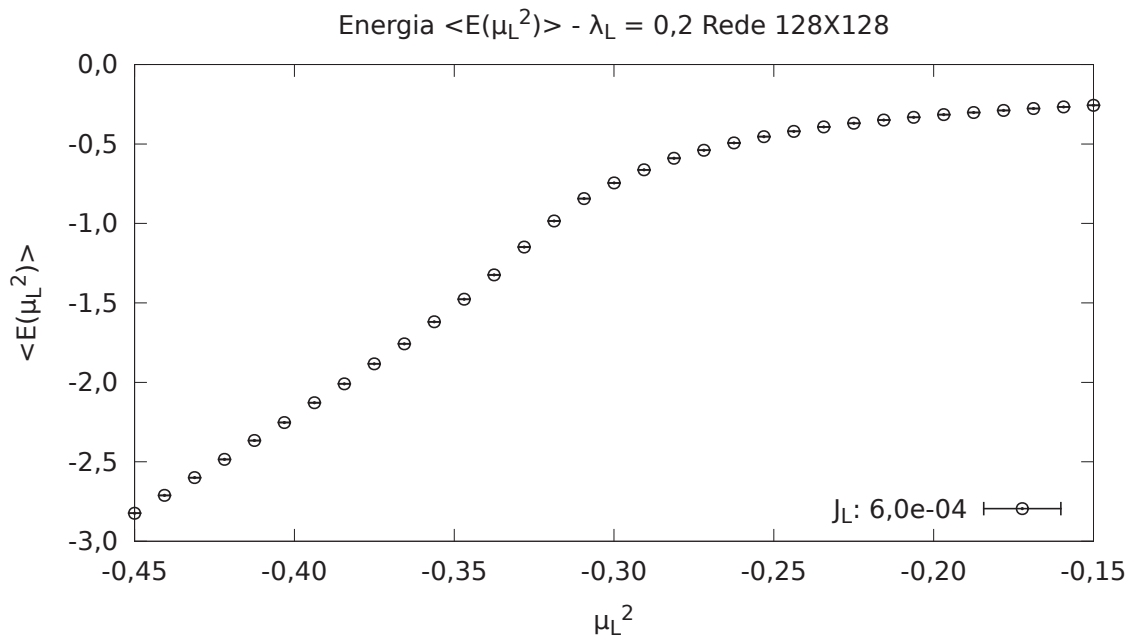


Figura 5.22: Energia  $\langle E(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,2$ .

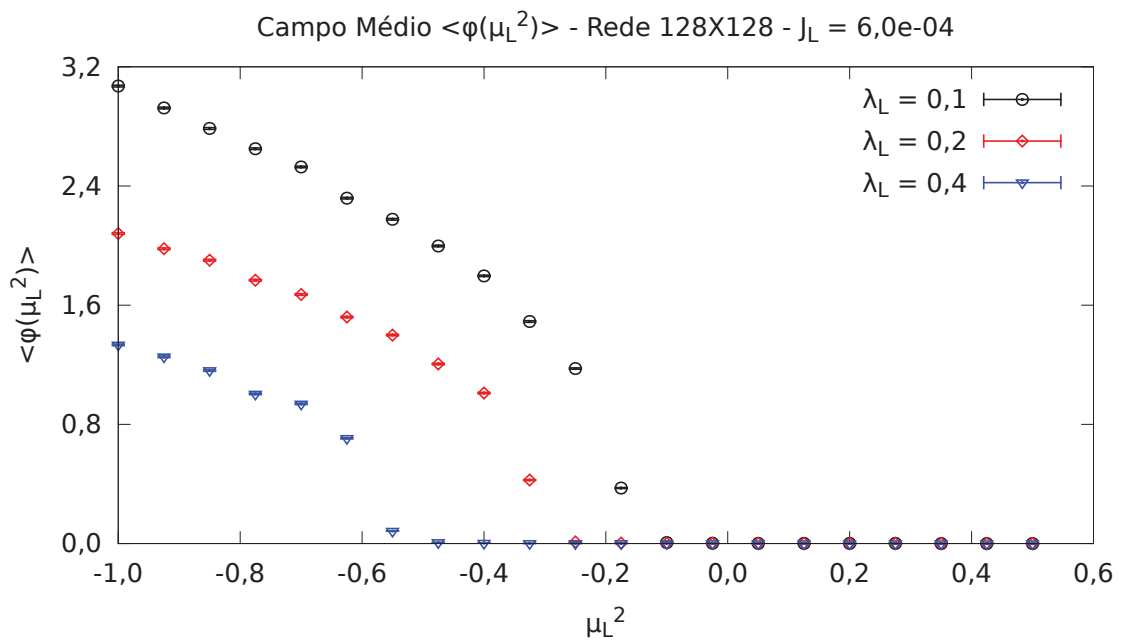


Figura 5.23: Influência da constante  $\lambda_L$  no campo médio. Podemos notar que à medida que  $\lambda_L$  aumenta,  $\mu_{LC}^2$  (ponto no qual  $\langle \varphi \rangle$  deixa de ser nulo) diminui. Nestas simulações utilizamos 3600 medidas no cálculo dos valores do campo médio.

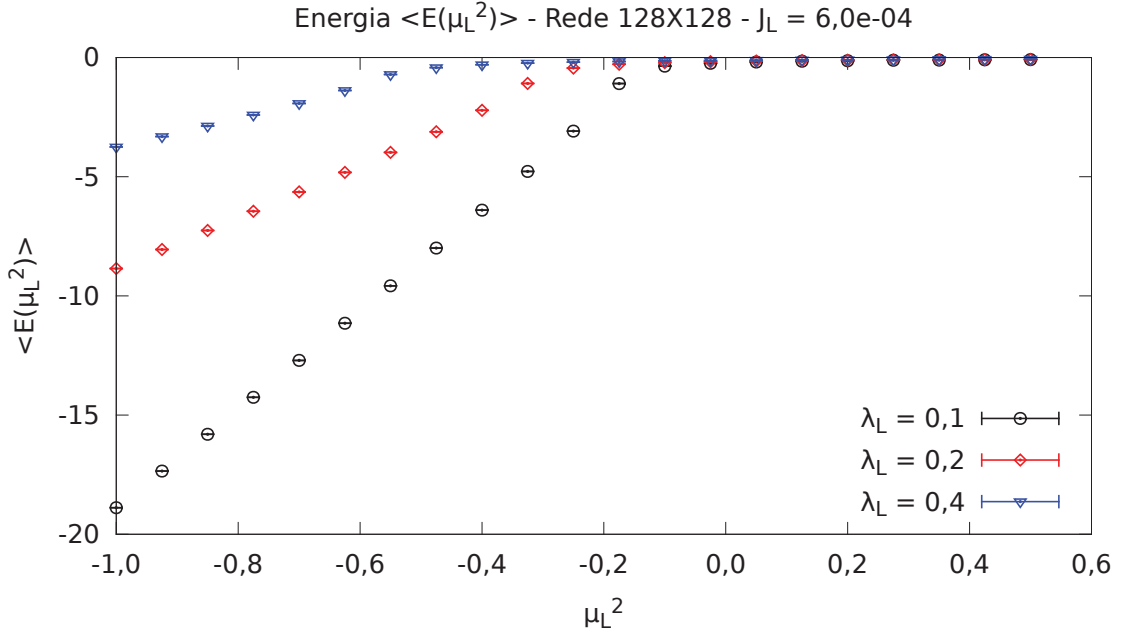


Figura 5.24: Influência da constante  $\lambda_L$  na energia.

onde utilizamos  $J_L = 0,0006$  e 3600 medidas nos cálculos dos valores médios do calor específico. Na Fig. 5.25 omitimos as barras de erro e ligamos os pontos obtidos nas simulações com a intenção de facilitar a visualização.

Não apresentamos os gráficos da energia e campo médio para  $\lambda_L = 0,09$ ,  $\lambda_L = 0,07$  e  $\lambda_L = 0,05$  uma vez que estes gráficos não nos fornecerão análises extras, por este motivo, apresentaremos a partir de então apenas nossos gráficos para calor específico com seus respectivos pontos críticos.

Na Fig. 5.26 mostramos os resultados para o calor específico para  $\lambda_L = 0,9$ . Para este valor de  $\lambda_L$  temos  $\mu_{L_C}^2 \approx -1,15$ . Nas simulações com  $\lambda_L = 0,9$  utilizamos 3600 medidas no cálculo dos valores médios do calor específico e utilizamos três valores de campo externo:  $J_L = 0,0006$ ,  $J_L = 0,0004$  e  $J_L = 0,0002$ . Podemos observar neste gráfico a influência do campo externo nos resultados do calor específico para  $\mu_L^2 > \mu_{L_C}^2$ . Como podemos ver, quanto maior o campo externo, maior é esta flutuação para para  $\mu_L^2 > \mu_{L_C}^2$ . Este mesmo comportamento pode ser observado na Fig. 5.15.

Por fim, mostramos nas Figs. 5.27), 5.28, 5.29) e 5.30) resultados de nossas quatro últimas simulações. Essas correspondem respectivamente a  $\lambda_L = 0,01$ ,  $0,03$ ,  $0,1$ ,  $0,8$ . Os valores críticos para  $\mu_L^2$  estão descritos nas legendas das figuras. Para todas estas simulações utilizamos 3600 medidas para calcular os valores médios do calor específico, com exceção da simulação com  $\lambda_L = 0,01$  onde utilizamos 7200 medidas. Utilizamos mais medidas para  $\lambda_L = 0,01$  uma vez que esta simulação possui

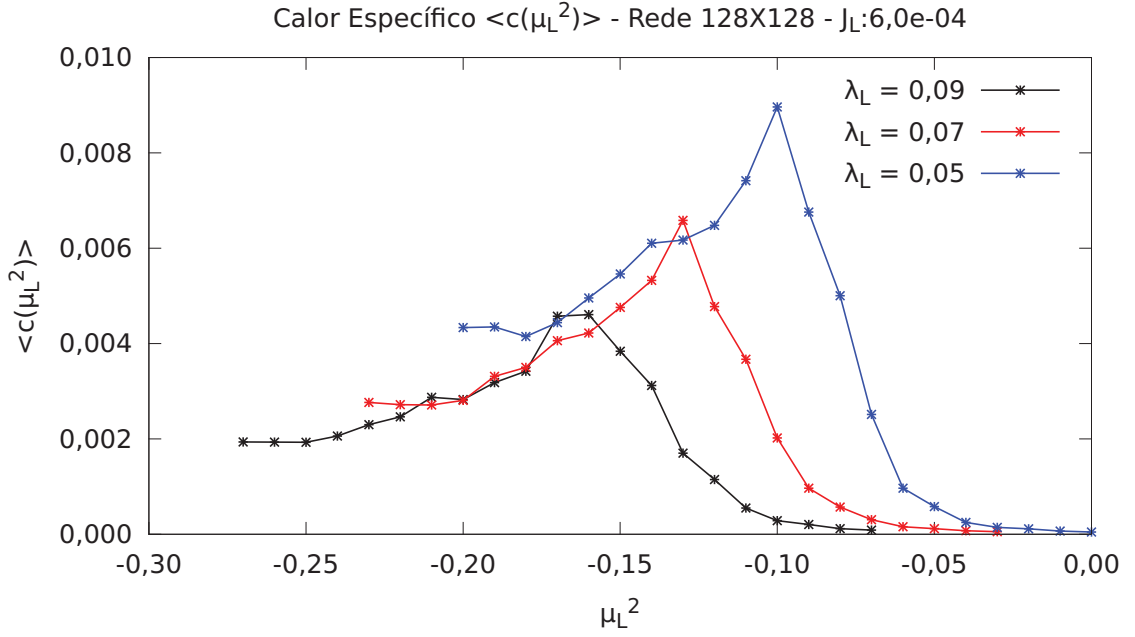


Figura 5.25: Calor específico - Notamos que, ao diminuirmos o valor do parâmetro  $\lambda_L$  obtemos um aumento no valor do calor específico para  $\mu_L^2 < \mu_{L_C}^2$ . Os pontos críticos obtidos os valores de  $\lambda_L$  simulados são: para  $\lambda_L = 0,09$  obtemos  $\mu_{L_C}^2 \approx -0,16$ ; para  $\lambda_L = 0,07$  obtemos  $\mu_{L_C}^2 \approx -0,13$  e para  $\lambda_L = 0,05$  obtemos  $\mu_{L_C}^2 \approx -0,10$ . Nestas simulações utilizamos 3600 medidas nos cálculos dos valores médios do calor específico. Omitimos as barras de erro e ligamos os pontos obtidos nas simulações com a intenção de facilitar a visualização.

uma curva muito ruidosa, entretanto, isso não foi suficiente. Visualmente, podemos verificar que à medida que  $\lambda_L$  diminui, as curvas do calor específico tornam-se mais ruidosas. Este comportamento é um indício de que o algoritmo *worm* possui eficiência reduzida no limite  $\lambda_L \rightarrow 0$ . Conclusão similar foi obtida na Ref. [20].

Em posse dos pontos críticos obtidos neste trabalho podemos construir uma parte da linha crítica, Fig. 5.31. A linha crítica separa no espaço de parâmetros da teoria definido pelas constantes  $(\lambda_L, \mu_L^2)$  as regiões com  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ . Se nosso sistema estiver representado por um ponto em uma destas regiões, e variarmos os parâmetros  $\lambda_L$  e  $\mu_L^2$  de modo que nosso sistema mude de região, teremos uma transição de fase de segunda ordem. Nesta transição ocorre uma mudança do tipo de potencial da teoria, na fase simétrica ( $\langle \varphi \rangle = 0$ ) temos um potencial do tipo poço único (curva vermelha na Fig. 5.32) e na fase com quebra de simetria ( $\langle \varphi \rangle \neq 0$ ) temos um potencial do tipo duplo poço (curva azul na Fig. 5.32). Nossos resultados para a linha crítica estão de acordo com a obtida na Ref. [35] – Tabela II dessa referência. Os autores

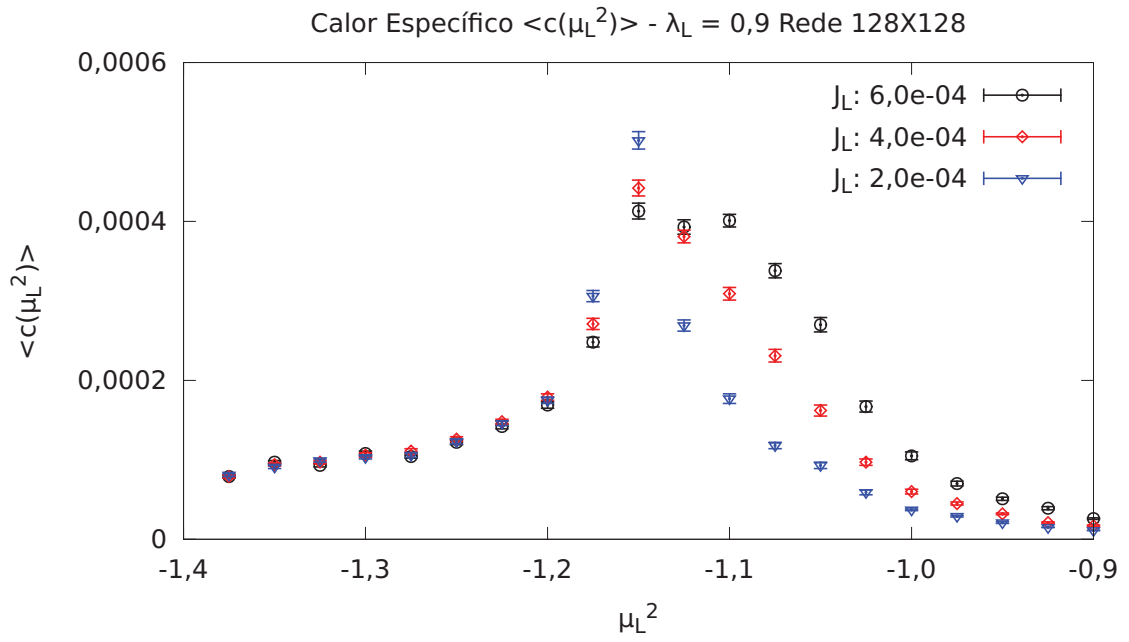


Figura 5.26: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,9$ . Para  $\lambda_L = 0,9$  o valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 \approx -1,15$ .

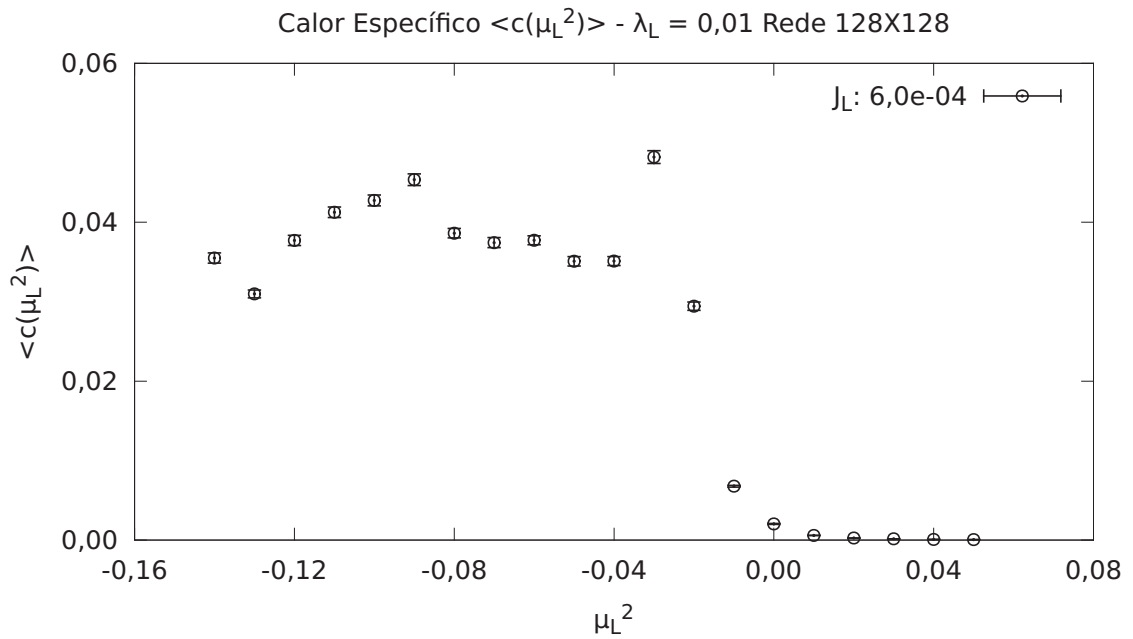


Figura 5.27: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$ :  $\lambda_L = 0,01$ . Para  $\lambda_L = 0,01$  o valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 \approx -0,03$ .

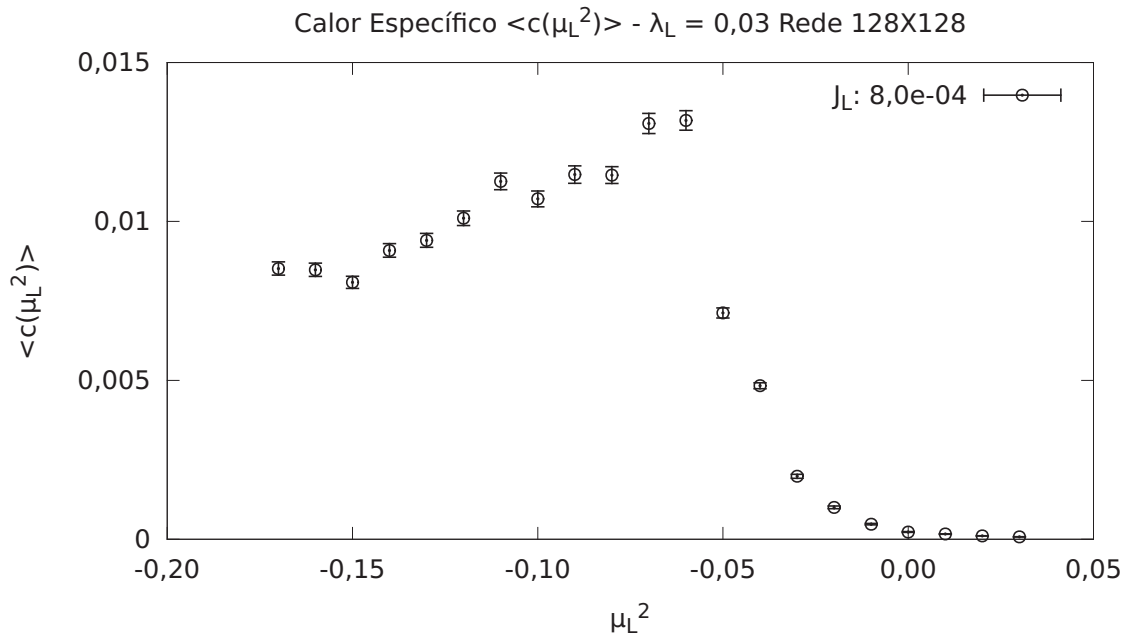


Figura 5.28: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$  para  $\lambda_L = 0,03$ . O valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 \approx -0,065$ .

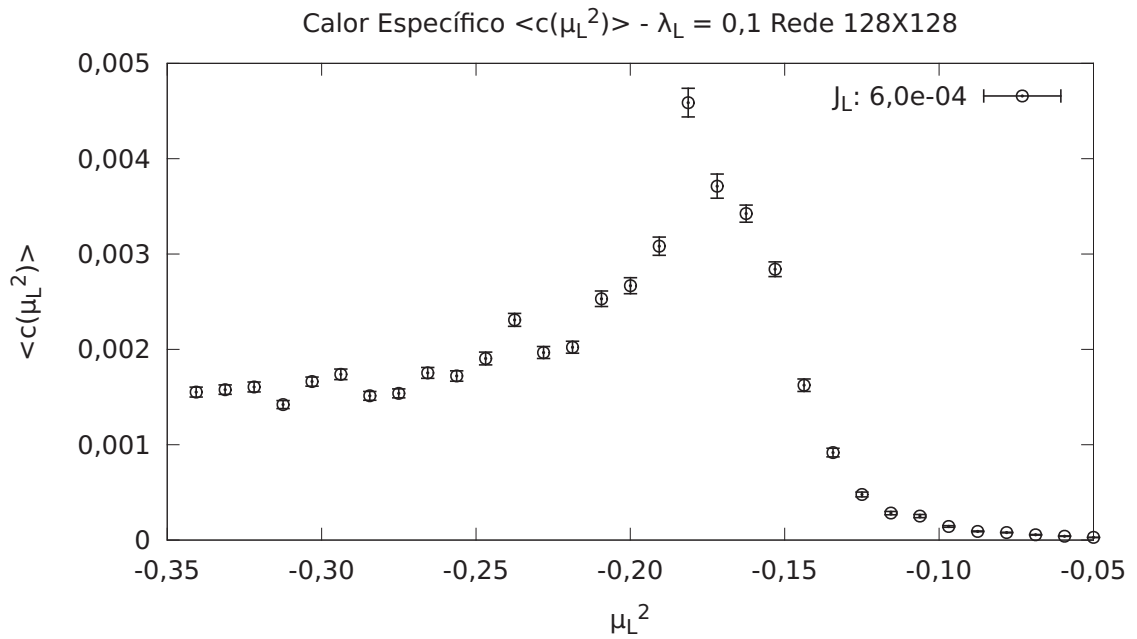


Figura 5.29: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$  para  $\lambda_L = 0,1$ . O valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{LC}^2 \approx -0,180625$ .

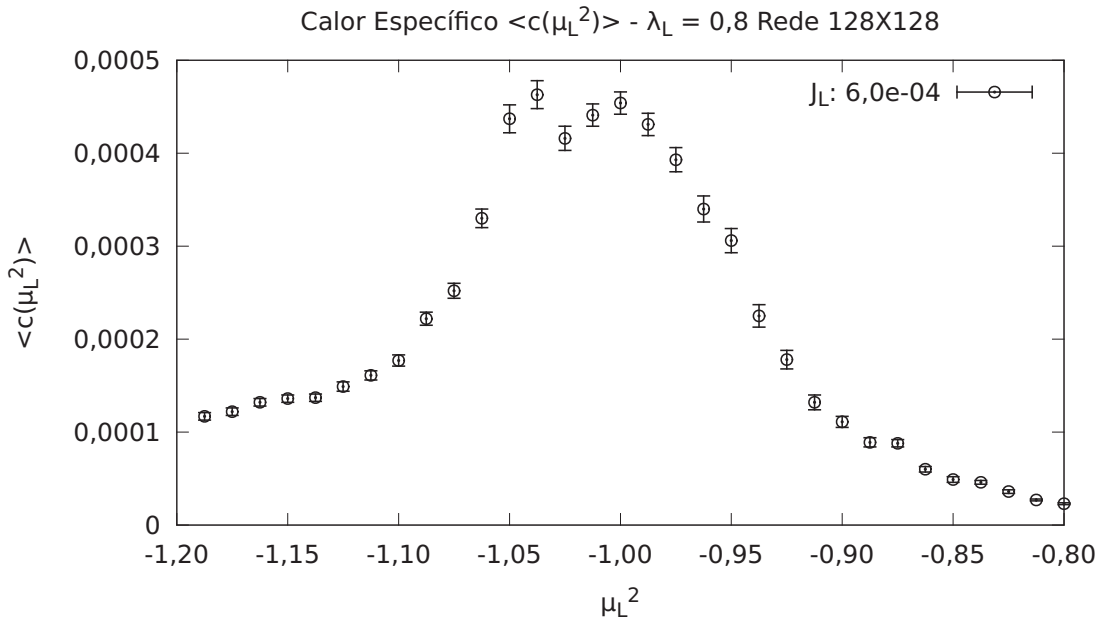


Figura 5.30: Calor específico  $\langle c(\mu_L^2) \rangle$  para  $\lambda_L = 0,8$ . O valor crítico de  $\mu_0^2$  foi estimado em  $\mu_{L_C}^2 \approx -1,03875$ .

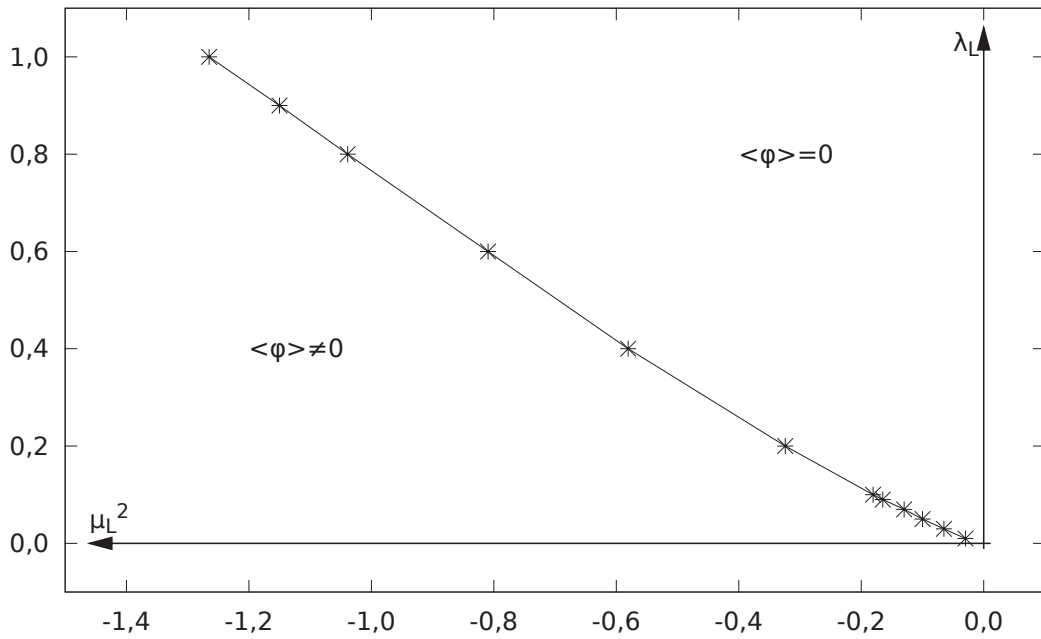


Figura 5.31: Linha crítica - separa no espaço de parâmetros da teoria,  $(\lambda_L, \mu_L^2)$ , as regiões com  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ .

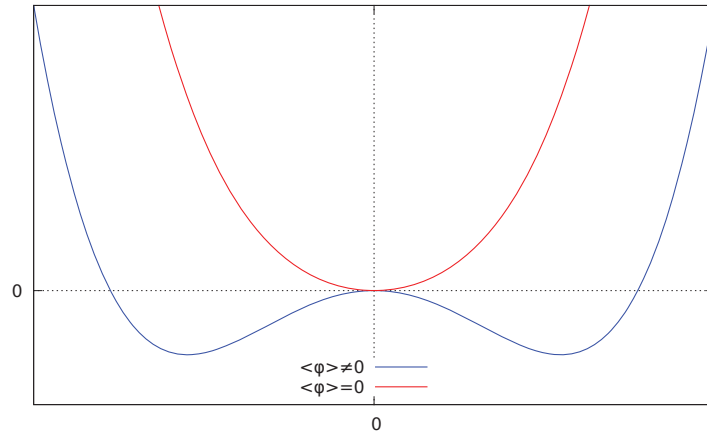


Figura 5.32: Tipos de potenciais: A curva vermelha corresponde a um potencial típico da região na qual  $\langle \varphi \rangle = 0$  e a curva preta corresponde a um potencial típico da região na qual  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ .

da Ref. [35] empregaram uma combinação dos algoritmos de Metropolis e *cluster*. Como exemplo específico, para  $\lambda_L = 1.0$  estimamos  $\mu_{LC}^2 \approx -1,265$ , e os autores da Ref. [35] citam o valor  $\mu_{LC}^2 = -1,27$ .

## Capítulo 6

### Conclusões e Perspectivas Futuras

O objetivo principal deste trabalho foi estudar o campo escalar real com auto-interação  $\varphi^4$ , por meio de simulações de Monte Carlo, utilizando um algoritmo recentemente proposto na Ref. [14] e nomeado por seus criadores como algoritmo *worm*. O algoritmo *worm* é um método revolucionário para simulações de Monte Carlo, no sentido de que, mesmo sendo um algoritmo local possui eficiência comparável com os melhores algoritmos não locais, e, historicamente, os algoritmos não locais possuem eficiência visivelmente maior que os algoritmos locais.

Com intuito de aprendermos este novo método de simulação, deduzimos o algoritmo *worm* para o modelo de Ising, simulamos este modelo em duas dimensões e comparamos os resultados obtidos com um algoritmo consagrado em simulações de Monte Carlo, o algoritmo de Metropolis. O modelo de Ising em duas dimensões possui solução analítica, desta forma, além de compararmos os resultados destes dois algoritmos entre si, os comparamos com resultados analíticos. É sabido que, quanto maior a rede simulada e maior o tempo de simulação, mais precisos serão os resultados simulação, e, conseqüentemente, mais próximos serão dos resultados analíticos (quando houverem). Por este motivo simulamos o modelo de Ising em redes pequenas, com a intenção de verificar qual dos dois algoritmos, *worm* ou Metropolis, desvia dos resultados analíticos primeiro. Os resultados observados foram: o algoritmo *worm* forneceu resultados mais próximos das curvas anlíticas da energia e magnetização que o algoritmo de Metropolis para uma rede bi-dimensional  $64 \times 64$ , Figs. 5.2 e 5.3. Desta forma concluímos que, para o modelo de Ising, o algoritmo *worm* é melhor que o algoritmo de Metropolis.

Uma vez dominado e verificado a eficiência deste novo método, fizemos as generalizações necessárias ao algoritmo *worm* para aplicá-lo no campo escalar real. Nosso objetivo, dentro do estudo do campo escalar real, foi determinar o diagrama de fase definido pelos parâmetros da teoria  $\lambda$  e  $\mu_0^2$  – o primeiro se refere ao autoacoplamento quártico e o segundo refere-se ao termo quadrático não-derivativo da densidade Lagrangeana. Aqui, quando nos referimos a *fases*, estamos empregando a linguagem

e conceitos da Mecânica Estatística para transições de fases termodinâmicas. Deve ficar claro que não estamos fazendo a termodinâmica do campo escalar real, estamos sim investigando a teoria quântica do campo escalar a temperatura zero. O espaço de parâmetros define duas regiões, simétrica e com quebra de simetria. A simetria aqui refere-se à invariância da Lagrangeana frente à troca de sinal do campo  $\varphi \rightarrow -\varphi$ . Na fase simétrica temos que o valor esperado do campo no vácuo é nulo  $\langle \varphi \rangle = 0$  e na fase com quebra de simetria temos  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ . A transição entre estas duas fases é caracterizada por uma transição de fase de segunda ordem, e desta forma, temos um pico na curva do calor específico no ponto de fronteira destas duas regiões. Neste sentido, para determinarmos o diagrama de fase do campo escalar real, fixamos alguns valores de  $\lambda$  e procuramos os valores de  $\mu_0^2$  que fornecessem picos na curva do calor específico. A análise é feita em termos de quantidades adimensionais,  $\lambda_L = \lambda a^2$  e  $\mu_L^2 = \mu_0^2 a^2$ , onde  $a$  é o espaçamento da rede. Desta forma, determinamos pontos  $(\lambda_C, \mu_{L_C}^2)$  que constituem uma linha, chamada de linha crítica, que separa as fases simétrica e com quebra de simetria.

A linha crítica obtida neste trabalho pode ser encontrada na Fig. 5.31. Para fins comparativos, mostramos os resultados correspondentes obtidos na Ref. [35] obtidos com outro algoritmo de simulação. A figura mostra que nossos resultados estão em concordância com a linha crítica nesta referência. Observamos que, de fato, existem fases nas quais  $\langle \varphi \rangle = 0$  e  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ , como indicadas na Fig. 5.31. A análise desta figura mostra que, para um determinado valor de  $\lambda_L$ ,  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  para  $\mu_L^2 < \mu_{L_C}^2$  – este comportamento pode ser observado em uma série de simulações realizadas neste trabalho, e.g., Fig. 5.23. Nesta figura apresentamos simulações para três valores distintos de  $\lambda_L$  : 0, 1, 0, 2 e 0, 4. Os resultados mostrados na Fig. 5.23 indicam que o valor crítico de  $\mu_L^2$  desloca-se para esquerda à medida que aumentamos o valor de  $\lambda_L$ . É possível concluir também que, com base em todos os valores de  $\lambda_L$  simulados, variando de  $\lambda_L = 0,01$  a  $\lambda_L = 1,0$ , os valores críticos de  $\mu_L^2$  são negativos e tendem a zero à medida que tomamos o limite de  $\lambda_L \rightarrow 0$ .

Resultados de simulação para a energia estão mostrados na Fig. 5.24. Observamos que a influência do parâmetro  $\lambda_L$  na inclinação na curva da energia é tal que à medida que o valor de  $\lambda_L$  diminui, a inclinação da curva da energia na fase com simetria quebrada (para  $\mu_L^2 < \mu_{L_C}^2$ ) torna-se maior. Este comportamento é refletido no valor do calor específico para  $\mu_L^2 < \mu_{L_C}^2$ , mostrado na Fig. 5.25. Esta figura mostra que, quanto menor o valor de  $\lambda_L$ , maior é o valor do calor específico. Para obtermos os resultados mencionados acima, foi necessário acoplar um campo externo uniforme  $J_L$  na lagrangeana do campo escalar real, onde, este campo externo tinha a função de perturbar fracamente o sistema de modo gerar  $\langle \varphi \rangle \neq 0$  na fase com

quebra de simetria. Como a função de  $J_L$  é apenas perturbar fracamente o sistema, utilizamos valores tão pequenos quanto possível para  $J$ . De modo geral, concluímos que valores de  $J_L \leq 0,0006$  fornecem resultados tais que  $\langle \varphi \rangle \approx 0$  na fase simétrica ( $\mu_0^2 > \mu_{0C}^2$ ), como desejado.

Como conclusão geral de nosso trabalho, podemos afirmar que o algoritmo *worm* é aplicável ao campo escalar real, sendo eficiente e preciso para detectar os pontos críticos da teoria. Entretanto, verificamos, assim como U. Wolff [20] verificou, que o algoritmo *worm* possui eficiência reduzida para valores de  $\lambda_L$  próximos de zero, uma vez que os resultados tornam-se mais ruidosos neste limite, veja Fig. 5.27. O sucesso da aplicação do algoritmo *worm* à teoria do campo escalar real (com execução do limite  $\lambda_L \rightarrow 0$ ) nos motiva em estendê-lo ao campo escalar complexo e/ou aplicá-lo na QCD. Uma das primeiras tentativas nessa direção foram feitas na Ref. [19]. Nesta referência os autores determinaram o diagrama de fase da QCD em função da temperatura e potencial químico no limite de acoplamento forte. Nossos próximos passos serão nesta direção.

## Apêndice A

### Equivalência de Ensembles: Microcanônico e Canônico

No ensemble microcanônico consideramos sistemas em contato com um reservatório térmico e com energia definida entre  $E$  e  $E + \Delta E$ . Dizemos então que temos um valor médio para a energia  $\langle E \rangle$ .

No ensemble canônico os sistemas são capazes de trocar energia com o reservatório térmico. Desta forma, o sistema pode ganhar ou perder energia, e, a priori, qualquer valor de energia. Entretanto calculemos o valor médio da energia ( $U$ ) no ensemble canônico, temos

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_m E_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}}.$$

Calculemos a derivada parcial de  $U$  com relação a  $\beta$ , temos então

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} U &= \frac{1}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \sum_m E_m e^{-\beta E_m} \right) + \sum_m E_m e^{-\beta E_m} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{1}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \right) \\ &= -\frac{\sum_m E_m^2 e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} + \left( \frac{\sum_m E_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \right)^2. \end{aligned}$$

Temos então que

$$\frac{\partial}{\partial \beta} U = \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle \equiv -\langle (\Delta E)^2 \rangle,$$

ou seja,  $\partial U / \partial \beta$  é igual ao desvio médio quadrático  $\langle (\Delta E)^2 \rangle$ . Notemos agora que

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \beta},$$

ou seja,

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = -kT^2 \frac{\partial U}{\partial T}.$$

Da definição de calor específico temos

$$C_V \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V,$$

desta forma

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = kT^2C_V.$$

Para compararmos se o desvio de energia de um sistema descrito pelo ensemble canônico, é significativo frente a energia média de um sistema descrito no ensemble microcanônico, devemos calcular a razão entre o desvio médio  $(\langle(\Delta E)^2\rangle)^{1/2}$  e  $\langle E \rangle$ , ou seja,

$$\frac{(\langle(\Delta E)^2\rangle)^{1/2}}{\langle E \rangle} = \frac{(kT^2C_V)^{1/2}}{\langle E \rangle}$$

Sabendo que, tanto o calor específico quanto a energia interna são grandezas extensivas, temos que ambas são proporcionais ao número de partículas  $N$ . Desta forma temos que

$$\frac{(\langle(\Delta E)^2\rangle)^{1/2}}{\langle E \rangle} \propto \frac{1}{N^{1/2}}$$

Podemos concluir então que, no limite termodinâmico, a razão acima tende a zero, em outras palavras, o ensemble canônico é equivalente ao microcanônico no limite termodinâmico já que, o desvio de energia que um sistema pode ter no ensemble canônico é muito pequeno comparado com a energia do ensemble microcanônico.

As idéias acima estão incorporadas nos dois algoritmos utilizados neste trabalho, Metropolis e *worm*. No algoritmo de Metropolis a energia do sistema está relacionada com a orientação dos spins da rede simulada, no processo de atualização deste algoritmo realizamos uma mudança na orientação de apenas um spin da rede, desta forma a variação de energia causada pelo processo de atualização será pequena frente a energia da rede para redes suficientemente grande (limite termodinâmico). Semelhantemente, no algoritmo *worm* a energia de uma configuração é proporcional a soma de *bonds* (o conceito de *bond* é abordado no Cap. 3) e nosso algoritmo aumenta/diminui em uma unidade o número de *bonds* da rede, conseqüentemente a variação de energia será pequena comparada com a energia da rede no limite termodinâmico.

## Apêndice B

### Análise de erros

Dado um sistema descrito pelo hamiltoniano  $H$ , em geral queremos conhecer o valor esperado de um observável. No ensemble canônico temos que o valor esperado de um observável  $\mathcal{O}$  é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{\{\mu\}} \mathcal{O}_{\mu} e^{-\beta H_{\mu}}}{Z},$$

entretanto, numa simulação de Monte Carlo não obtemos o valor esperado de um observável, ao invés disso fazemos uma estimativa do mesmo,

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_j^N \mathcal{O}_j,$$

onde  $N$  é a quantidade de medidas que realizamos sobre o sistema. O estimador  $\bar{\mathcal{O}}$  é um número que flutua em torno do valor esperado. Toda vez que realizarmos um simulação de Monte Carlo iremos obter um valor diferente para  $\bar{\mathcal{O}}$ . Entretanto podemos estar interessados em conhecer qual a faixa na qual os valores de  $\bar{\mathcal{O}}$  são obtidos, quanto menor for essa faixa mais precisa é nossa simulação, ou, menor é o erro de nossa simulação.

A seguir falaremos do método de estimativa de erro utilizadas neste trabalho, que se constitui da união de dois métodos, um método híbrido, *Jackknife-Binning*. Para o método jackknife, assim como o desvio padrão, precisamos utilizar apenas medidas independentes. Para nos certificar-mos que nossas medidas são independentes temos que conhecer de antemão o tempo de correlação, este é o tempo característico de um algoritmo, o qual devemos “esperar” para que nossas medidas se descorrelacionem, esta correlação é intrínseca do algoritmo e está relacionada ao processo de atualização de estados do sistema, desprezar o tempo de correlação implica em uma estimativa subestimada do erro. No método de binning dividimos nossa amostragem de  $N$  medidas em  $k$  blocos dos quais calculamos  $k$  valores médios, em posse dessas médias podemos estimar o erro da nossa amostragem utilizando o desvio padrão. Para

$k$  muito maior que o tempo de correlação os blocos de medidas são descorrelacionados [36] e desta forma contornamos o problema da necessidade de termos medidas independentes, entretanto o método de binning não fornece bons resultados para grandezas como o calor específico, o qual não estimamos em um único instante de tempo de nossa simulação e sim a partir de um conjunto de dados. Por este motivo, utilizaremos um método que se consiste da união dos métodos Binning e Jackknife, a seguir apresentaremos estes dois métodos e logo após apresentaremos o método Jackknife-Binning. A discussão encontrada neste apêndice foi baseada na Ref. [36].

## B.1 Binning

Como já mencionado logo acima, este método consiste em dividir nosso conjunto de  $N$  medidas em  $k$  grupos onde o tamanho de cada grupo é dado por

$$N_b = \frac{N}{k},$$

para cada um desses grupos calculamos um valor médio  $\mathcal{O}_{b,i}$

$$\mathcal{O}_{b,i} = \frac{1}{N_b} \sum_j^{N_b} \mathcal{O}_{j+(i-1)N_b} \quad i = 1, 2, 3, \dots, k;$$

ou seja, da nossa amostragem inicial de  $\mathcal{O}$  com  $N$  dados fizemos uma “reamostragem”,  $\mathcal{O}_b$ , com  $k$  elementos. A partir das medidas  $\mathcal{O}_{b,i}$  calculamos o erro da seguinte forma

$$erro = \sqrt{\frac{\overline{\mathcal{O}_b^2} - \overline{\mathcal{O}_b}^2}{N_b - 1}}.$$

Apesar deste método ser uma alternativa para os casos onde nossas medidas não são independentes, este não fornece bons resultados para grandezas ditas secundárias, i.e., grandezas escritas em termos de uma sequência de dados, ex.: calor específico. Para grandezas secundárias temos o método Jackknife.

## B.2 Jackknife

O método jackknife consiste do seguinte procedimento: de nossa amostragem inicial de  $N$  elementos, removemos o primeiro elemento e calculamos o valor médio  $\overline{\mathcal{O}}_1$ ; devolvemos o primeiro elemento, removemos o segundo e calculamos o valor médio  $\overline{\mathcal{O}}_2$ ; repetimos o procedimento até calcularmos o valor médio  $\overline{\mathcal{O}}_N$ . Para cada um desses elementos calculamos quantidades secundárias  $f_i(\overline{\mathcal{O}}_i)$ , e.g, calor específico. A média dessas quantidades secundárias é dada por

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_i^N f_i(\overline{\mathcal{O}}_i),$$

e a estimativa do erro,

$$erro = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_i (f_i(\bar{\mathcal{O}}_i) - \bar{f})^2}.$$

Como mencionamos anteriormente, este é um método para estimativa de erros, entretanto é necessário estarmos trabalhando com medidas independentes. Caso não estejamos trabalhando com medidas independentes utilizamos o método híbrido Jackknife-Binnig, descrito a seguir.

### B.3 Jackknife-Binnig

No método jackknife, excluíamos uma medida  $i$  e calculávamos o valor médio  $\bar{\mathcal{O}}_i$ . No jackknife-binning dividimos nossa amostragem em  $k$  blocos, excluímos o primeiro e calculamos o valor médio  $\bar{\mathcal{O}}_1$ ; devolvemos o primeiro bloco, excluímos o segundo e calculamos  $\bar{\mathcal{O}}_2$  e assim sucessivamente. Matematicamente temos

$$\bar{\mathcal{O}}_\alpha = \frac{1}{N - N_b} \left( \sum_{i=1}^{N_b\alpha - N_b} \mathcal{O}_i + \sum_{i=1+N_b\alpha}^N \mathcal{O}_i \right),$$

onde  $\alpha = 1, 2, 3, \dots, k$  e  $N_b k = N$ . Uma vez calculadas essas quantidades, calculamos as quantidades secundárias e seus respectivos erros,

$$erro = \sqrt{\frac{k-1}{k} \sum_\alpha (f_\alpha(\bar{\mathcal{O}}_\alpha) - \bar{f})^2},$$

onde

$$\bar{f} = \frac{1}{N_b} \sum_\alpha f_\alpha(\bar{\mathcal{O}}_\alpha).$$

Apesar de apresentarmos aqui expressões para quantidades secundárias, podemos aplicar este método em quantidades primárias, bastando apenas substituir  $f_\alpha(\bar{\mathcal{O}}_\alpha)$  por  $\bar{\mathcal{O}}_\alpha$  e  $\bar{f}$  por  $\bar{\mathcal{O}}$ .

## Referências Bibliográficas

- [1] M. Caffo, S. Turrini e E. Remiddi, *Phys. Rev. D* 30, 483 (1984).
- [2] C. Itzykson e J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, 1980).
- [3] S. Weinberg, *Physica A* 96, 327 (1979).
- [4] B.L. Ioffe, V.S. Fadin e L.N. Lipatov, *Quantum Chromodynamics: Perturbative and Nonperturbative Aspects* (Cambridge University Press, 2010).
- [5] M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press, 1999).
- [6] V. L. Ginzburg e L. D. Landau, *J. Exptl. Theor. Phys. (USSR)* 20, 1064 (1950).
- [7] S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (Westview Press, 2000).
- [8] H. K. Onnes. *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, Nos. 119, 120, 122 (1911).
- [9] Y. Nambu e G. Jona-Lasinio, *Phys. Rev.* 122, 345 (1961); 124, 246 (1961).
- [10] F. Englert e R. Brout, *Phys. Rev. Lett.* 13, 321 (1964); P.W. Higgs, *Phys. Rev. Lett.* 13, 508 (1964); G. S. Guralnik, C. R. Hagen e T. W. B. Kibble, *Phys. Rev. Lett.* 13, 585 (1964).
- [11] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953).
- [12] R.H. Swendsen e J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* 58, 86 (1987).
- [13] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* 62, 361 (1989).
- [14] N. Prokof'ev e B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160601 (2001).
- [15] S. Saccani, S. Moroni e M. Boninsegni, *Phys. Rev. B* 83, 092506 (2011).
- [16] L. Dang e M. Boninsegni, *Phys. Rev. B* 81, 224502 (2010).

- [17] V. Gurarie, L. Pollet, N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov e M. Troyer, *Phys. Rev. B* 80, 214519 (2009).
- [18] O. Goulko e M. Wingate, *Phys. Rev. A* 82, 053621 (2010).
- [19] Ph. de Forcrand e M. Fromm, *Phys. Rev. Lett.* 104, 112005 (2010).
- [20] T. Korzec, I. Vierhaus e U. Wolff. Performance of a worm algorithm in  $\phi^4$  theory at finite quartic coupling *Comp. Phys. Comm.* 182, 1477 (2011).
- [21] I. Vierhaus, *Simulation of  $\phi^4$  theory in the strong coupling expansion beyond the Ising limit*, Diplomarbeit, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I, Humboldt-Universität zu Berlin, 12 de maio de 2010.
- [22] D. V. Schroeder, *An Introduction to Thermal Physics* (Addison Wesley, 2000).
- [23] A. B. Pippard, *The elements of the classical thermodynamics* (Cambridge University Press, 1966)
- [24] K. Huang, *Statistical mechanics* (John Wiley & Sons, 1987).
- [25] H.E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena* (Clarendon Press, 1971).
- [26] L. Onsager, *Phys. Rev.* 65, 117 (1944), *ibid* *Phys. Rev.* 85, 808 (1952).
- [27] C. N. Yang, *Phys. Rev.* 85, 808 (1952).
- [28] B. M. McCoy e T.T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model* (Harvard University Press, 1973).
- [29] C. Gabriel, *Dynamical properties of the worm algorithm* (Tese: Technischen Universität Graz, 2002).
- [30] István Montvay e Gernot Münster, *Quantum fields on a Lattice* (Cambridge University Press, 1994).
- [31] F. Guerra, L. Rosen e B. Simon, *The Annals of Mathematics* 101, 111 (1975).
- [32] K. Symanzik. Euclidean Quantum Field Theory. I. Equations for a Scalar Model. *J. Math. Phys.* 7, 510 (1966).
- [33] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery, *Numerical recipes in C: the art of scientific computing* (Cambridge University Press, Second Edition, 1992).

- [34] Asit K. De, A. Harindranath, J. Maiti and T. Sinha. Investigations in 1+1 dimensional lattice  $\phi^4$  theory. Phys. Rev. D 72, 094503 (2005).
- [35] W. Loinaz e R. S. Willey. Monte Carlo simulation calculation of the critical coupling constant for two-dimensional continuum  $\phi^4$  theory. Phys. Rev. D 58, 076003 (1958).
- [36] Wolfhard Janke, *Statistical analysis of simulations: data correlations and rror estimation* (John von Neumann Institute for Computing, 2002).