



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.011/07

**Simulação de Monte Carlo: de Modelos de Spin à
Teoria de Campos na Rede**

Marcelo Pereira de Souza Pinheiro

Orientador

Gastão Krein

Dezembro de 2007

Agradecimentos

- Primeiramente ao Gastão Krein por ter aceito ser meu orientador. Foi extremamente enriquecedor observá-lo abordar problemas de física. Separar o alvo em partes, resolver tanto quanto possível as partes e por fim, olhar o todo. Essa lição, certamente, transcende a física e a carrego comigo.
- Principalmente aos meus pais pelo amor, companherismo e suporte.
- Segundamente aos pos-docs Gino Ananos e André Taurines, por terem discutido Monte Carlo e teorias na rede.
- Terceiramente ao Wanderson Wanzeller por várias coisas importantes e não importantes.
- Ao meu irmão que deu uma mão no português.
- Aos amigos EM Sampa: Ricardo Rossine e Rodrigo Amorim.
- A todos os colegas, funcionários e amigos do IFT, em especial: Gabriela Campos, Anderson Rael, Carlos Roberto Mafra, Wiliam Hipólito, Douglas Fregolente, Clóvis Maia e Nadiane Cassol.

Resumo

Revisamos o método de Monte Carlo aplicado a modelos de spin discretos e a uma teoria de campos escalar na rede, com especial ênfase no algoritmo de Metropolis. Inicialmente consideramos um modelo de spins de Ising com interações de longo alcance em uma rede complexa de mundo pequeno. Em vista da não extensividade do modelo, generalizamos o modelo de Metropolis para a termoestatística não extensiva de Tsallis. Simulações numéricas são implementadas com o algoritmo generalizado para redes bi- e tridimensionais. A seguir, revisamos o método de regularização na rede para a teoria quântica de um campo escalar autointeragente. Empregamos o algoritmo de Metropolis para simular a teoria na rede e estudamos o comportamento das constantes de acoplamento renormalizadas quártica and sêxtupla em função da constante de acoplamento não renormalizada. Apresentamos resultados de simulações para redes Euclidianas em duas e três dimensões nos regimes de acoplamento intermediário e forte.

Área de conhecimento: 1.05.01.04-5 (Física Estatística e Termodinâmica), 1.05.03.01-3 (Teoria Geral de Partículas e Campos)

Palavras-chave: Método de Monte Carlo, Modelo de Ising, Transições de Fase e Fenômenos Críticos, Redes Pequeno-Mundo, Mecânica Estatística Não-Extensiva, Teoria Quântica do Campo Escalar, Integrais de Trajetória, Renormalização

Abstract

We review the application of the Monte Carlo method to a discrete spin model and to a scalar field theory on the lattice with special emphasis on the Metropolis algorithm. Initially we consider an Ising spin model with long range interactions on a complex small world network. In view of the nonextensive nature of the model, we have generalized the Metropolis algorithm to the Tsallis nonextensive thermostatics. Numerical simulations with the generalized algorithm are implemented for two- and three-dimensional lattices. Next we review the lattice regularization method for the quantum theory of a selfinteracting scalar field. We use the Metropolis algorithm to simulate the theory on the lattice and study the behavior of the renormalized quartic and sextic coupling constants as a function of the unrenormalized coupling constant. Results of simulations are presented for Euclidean lattices in two and three dimensions at intermediate and strong couplings.

Key-Words: Monte Carlo Method, Ising Model, Phase Transitions and Critical Phenomena, Small-World Networks, Non-Extensive Statistical Mechanics, Quantum Scalar Field Theory, Path Integrals, Renormalization

Sumário

1	Introdução	3
2	Teoria Básica	6
2.1	Mecânica Estatística	6
2.1.1	Termoestatística de Boltzmann-Gibbs	6
2.1.2	Termoestatística Generalizada de Tsallis	8
2.1.3	Transição de Fase e Fenômenos Críticos	12
2.2	Teoria Quântica de Campos	15
2.2.1	Integrais de Caminho na Mecânica Quântica	15
2.2.2	IC na TQC Escalar	21
2.2.3	Renormalização	30
2.3	Teoria Quântica de Campos na Rede	31
2.3.1	Teoria Quântica de Campos Euclidiana	31
2.3.2	Discretização do Espaço Euclidiano	32
2.4	Conexão entre Mecânica Estatística e Teoria Quântica de Campos	33
3	O Método de Monte Carlo	34
3.1	Integração por MC	34
3.1.1	Método da Aceitação-Rejeição	34
3.1.2	Método da Média	35
3.2	Monte Carlo no Equilíbrio	36
3.2.1	Amostragem por Importância	36
3.2.2	Taxa de Aceitação	37
3.3	Algoritmos	38
3.3.1	Algoritmos Locais	38
3.3.2	Algoritmos Globais	40
3.3.3	Técnica da Repesagem	42
3.4	Monte Carlo usando a Termoestatística Generalizada de Tsallis	43
3.4.1	Metropolis-Salazar-Toral	44
3.5	Erros	46
3.5.1	Erros Estatísticos	46
3.5.2	Erros Sistemáticos	49
3.6	Geradores de Números Aleatórios	49
3.6.1	Congruencial Linear	50
3.6.2	Registradores deslocados	51
3.6.3	Espaçamento de Fibonacci	51
3.6.4	Geradores Combinados	52

4	Simulação Computacional	53
4.1	Rede	53
4.1.1	Redes Complexas – Rede de Mundo Pequeno	53
4.2	Simulando Modelos de Spin	55
4.2.1	Modelo de Ising	55
4.2.2	Modelo de Ising em uma Rede de Mundo Pequeno	63
4.2.3	Modelo de Ising com a Termodinâmica de Tsallis	68
4.3	Simulando a Teoria de Campo Escalar na Rede	73
5	Conclusões e Perspectivas Futuras	79
A	Integração Numérica	81
A.1	Regra 3/8 de Simpson	81
	Bibliografia	82

Capítulo 1

Introdução

A atual civilização técnica, surgida do espírito do iluminismo, vem impondo à humanidade desafios técnicos e científicos cada vez mais complexos. Na ânsia de entender muitos sistemas e processos que compõem o mundo moderno, usamos cada vez mais as próprias tecnologias e avanços de que nossa época dispõe. Particularmente, nas décadas mais recentes, a tecnologia computacional tem contribuído de várias maneiras para o desenvolvimento técnico-científico, permitindo a construção de modelos matemáticos cada vez mais sofisticados para descrever processos naturais e industriais. Uma das grandes beneficiárias desse progresso é a pesquisa fundamental, que não tem o objetivo direto de desenvolver aplicações industriais, mas objetiva formular teorias, tão simples quanto possível, mas que sejam também passíveis de um tratamento computacional.

Um dos mais populares métodos computacionais da Física é o chamado “Método de Monte Carlo”, que também tem sido utilizado em vários outros campos do conhecimento humano – ótimas referências sobre o assunto são os livros-texto de Newman e Barkema [1] e de Landau e Binder [2]. O método visa descrever as flutuações térmicas aleatórias de um sistema físico através de uma amostragem estatística. Nesta dissertação, nosso principal objetivo é revisar esse método tendo em vista aplicações em duas classes de modelos. Especificamente, vamos revisar a aplicação do método à mecânica estatística de um modelo de variáveis discretas de spins e de um modelo de variáveis contínuas de campo escalar.

Aproveitando o grande interesse a respeito de modelos de spin em nossos dias, tomaremos inicialmente o modelo de Ising [3] como cenário para revisar o método de Monte Carlo como usualmente aplicado em problemas de mecânica estatística. O modelo de Ising é ao mesmo tempo simples e continua sendo de interesse atual. O modelo consiste em um sistema de átomos arranjados em uma rede cristalina regular e descritos por variáveis de spins que assumem dois únicos valores, $+1$ e -1 . E ainda, cada uma dessas variáveis só interage com as primeiras adjacentes (interação de primeiros vizinhos), de forma que a energia de spins paralelos e antiparalelos seja diferente. Desde sua criação, o modelo se tornou a base para grande parte das pesquisas no campo dos fenômenos críticos e transição de fase. O modelo foi proposto por Lenz como tema da tese de doutorado de E. Ising [4] sobre magnetismo, e a primeira solução analítica do modelo foi publicada por Ising na Ref. [3]. Essa solução não apresentava transição de fase, fato que levou a especulações da não existência do fenômeno também para dimensões mais altas. Porém, em 1936, Peierls demonstrou [5] que em duas dimensões o modelo, tomado como uma aproximação do modelo de Heisenberg [6], apresentava transição de fase. O modelo de Ising bidimensional, resolvido analiticamente em 1944 por Onsager [7], foi o pioneiro em explicar os fenômenos das transições de fase em termos de interações interatômicas. Mas, apesar da simplicidade do modelo, apenas os casos em uma e duas dimensões puderam ser resolvidos analiticamente. Encontrar soluções exatas para o modelo de Ising em dimensões superiores, justifica parcialmente sua atualidade. O fato de muitos sistemas e processos poderem ser mapeados nesse modelo, o torna uma ferramenta poderosa na investigação de assuntos que, inclusive, transcendem a física e as ciências naturais.

Uma das aplicações que evidencia a atualidade do modelo de Ising em física, está relacionado ao estudo de redes complexas [8]. Nesta dissertação, vamos estudar o modelo em um tipo particular de rede complexa, chamada rede de mundo pequeno. A hipótese mundo pequeno, foi levantada por Milgram em 1967 [9]. Ele sugeriu que as pessoas são ligadas por pequenas cadeias de elos sociais, em média, com seis graus de separação. Os experimentos conduzidos por Milgram na década de 60, que suporta sua hipótese, vem sendo confirmado recentemente por

Watts [10]. Há um duplo interesse em utilizar o modelo de Ising nesse tipo de rede. Por um lado, a simplicidade do modelo auxilia na compreensão de propriedades das redes de mundo pequeno. Por outro lado, alguns sistemas complexos podem ser mapeados no modelo de Ising nesse tipo de rede, ou seja, podem ser mapeados em um modelo mais simples.

Além de revisar alguns resultados do modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno encontrado na literatura, vamos propor o uso de um algoritmo ainda não explorado nesse contexto. Esse algoritmo é baseado na termoestatística generalizada de Tsallis [11, 12]. Tal teoria, uma generalização da termoestatística de Boltzmann-Gibbs, tem encontrado inúmeras aplicações em sistemas com interações de longo alcance, em equilíbrio termodinâmico, para os quais as hipóteses de Boltzmann não podem ser aplicadas imediatamente. Essa dificuldade vem do fato que para sistemas com interações de longo alcance, as variáveis termodinâmicas são não extensivas, violando o limite termodinâmico de Boltzmann-Gibbs. As idéias de Tsallis também são relevantes para o estudo de sistemas complexos e fora do equilíbrio, como sistemas com turbulência, sistemas biológicos entre outros. Neste trabalho, argumentamos que essa termoestatística generalizada, bem como o método computacional que faz uso dela, são adequadas para tratar o modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno. Pois, nesse tipo de rede existe interação entre átomos ou spins com distâncias superiores aos primeiros adjacentes. Portanto, esse modelo contendo interações de longo alcance, se qualifica para ser tratado pela teoria de Tsallis. Os resultados obtidos na presente dissertação para o modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno com o algoritmo de Monte Carlo utilizando a termoestatística de Tsallis são inéditos na literatura.

Na continuação, vamos fazer uma revisão da aplicação do método de Monte Carlo a uma teoria quântica de campos, tomando como exemplo a teoria de campo escalar real. O objetivo aqui é mostrar como as idéias do método de Monte Carlo, de aplicação razoavelmente fácil a um modelo com variáveis discretas como no modelo de Ising, são generalizadas a um modelo de variáveis contínuas de um modelo de teoria quântica de campos, o qual obviamente é de uma complexidade muito maior. Essa revisão está baseada no trabalho de Cooper, Freedman e Preston [13]. Nesse trabalho, os autores estudaram o comportamento da constante de acoplamento quártica da teoria $\lambda\phi^4$ no regime intermediário e forte da constante de acoplamento renormalizada, do ponto de vista computacional. Tendo como motivação avaliar a exatidão de cálculos analíticos que utilizam uma expansão perturbativa e fazem uso de técnicas de aproximação, tornando suas conclusões, até certo ponto, controvertidas. O mesmo tipo de aproximação foi usada no estudo analítico da constante de acoplamento sêxtupla [14]. Naturalmente, realizar cálculos computacionais para avaliar a exatidão desses resultados tem a mesma motivação da constante quártica.

Os cálculos das constantes de acoplamento renormalizadas, como veremos, não fazem uso direto das funções de Green, que são invariavelmente empregadas em diferentes cálculos perturbativos. Por esse motivo, neste trabalho iremos construir em detalhes a formulação da teoria de campos na rede discreta, que faz uso do potencial efetivo para calcular quantidades renormalizadas. Nesse caso, diferente das aplicações em mecânica estatística aqui estudadas, a teoria deve ser formulada de tal forma a se adequar ao uso computacional. Vamos revisar os cálculos de Monte Carlo para a constante de acoplamento renormalizada quártica e sêxtupla em duas e três dimensões. Objetivando, não só aprender como o método computacional pode ser usado nesse contexto, mas melhorar os cálculos dessas constantes renormalizadas da teoria $\lambda\phi^4$ nas regiões intermediária e forte encontrados na literatura.

O domínio da técnica numérica de cálculo do potencial efetivo contribui para o entendimento da estrutura do vácuo da teoria quântica de campos, na medida que o mínimo dessa quantidade nos dá informação sobre os autoestados de mais baixa energia da teoria. Assim, se torna particularmente útil no estudo da quebra espontânea de simetria, que não iremos, no entanto, abordar neste trabalho. O mecanismo de Higgs é baseado em uma versão mais elaborada da teoria $\lambda\phi^4$ em duas dimensões e também não iremos aborda-la aqui, mas justifica o interesse nesse tipo de simulação. Além dessas motivações, esse estudo serve como uma introdução para simular teorias de campos na rede mais complexas como as teorias de calibre, como a eletrodinâmica quântica (QED) e a cromodinâmica quântica (QCD).

Vamos apresentar a estrutura da dissertação. No capítulo 2, vamos construir as teorias das quais fazemos uso na simulação computacional. Começando com a mecânica estatística, vamos nos concentrar em uma generalização da termoestatística de Boltzmann-Gibbs feita por Tsallis [12]. Com essa formulação, aumentamos a gama de sistemas e problemas que podem ser tratados com algoritmos de Monte Carlo. Vamos também revisar o fenômeno da transição de fase e os fenômenos críticos, pois é muito comum simular esses tópicos em sistemas estatísticos e na física da matéria condensada. Ainda no segundo capítulo, vamos montar passo a passo a teoria quântica de campos a fim de chegarmos a uma formulação na rede, ou seja, factível de ser simulada em computadores. Acabamos o

segundo capítulo comentando a conexão existente entre a mecânica estatística e a teoria de campos.

O terceiro capítulo é dedicado ao método de Monte Carlo. Nele, fazemos uma apresentação geral do método e explicaremos quando ele pode ser usado. Partindo da integração numérica por Monte Carlo, muito usada na resolução de integrais multidimensionais, vamos enfatizar o uso da técnica em sistemas no equilíbrio termodinâmico. Em seguida, vamos apresentar os principais algoritmos usados nas simulações de sistemas estatísticos e teorias de campos. Daremos, particular atenção a um algoritmo baseado na termoestatística de Tsallis. As principais técnicas de tratamento de erros estatísticos também são abordadas, bem como os algoritmos mais famosos de geração de números aleatórios.

No capítulo 4, mostramos as simulações computacionais, que dividimos em três partes. Na primeira nos dedicamos a explicar a idéia de rede nas simulações de Monte Carlo. Discutimos o que são condições de contorno e a diferença entre redes regulares e complexas. Trataremos em mais detalhes um tipo específico de redes complexa chamada de redes de mundo pequeno, pois simularemos modelos de spin nessas redes. Na segunda parte nos concentramos em simulação de modelos de spin, especificamente no modelo de Ising. Depois de apresentar o famoso modelo de Ising, vamos aplicar o algoritmo de Metropolis, mostrando o comportamento do modelo frente a transição de fase em duas e três dimensões em uma rede regular. Em seguida, a mesma simulação é apresentada em uma rede de mundo pequeno. O próximo passo, é apresentar a simulação de Ising com um algoritmo que faz uso da termoestatística de Tsallis em uma rede regular, e depois em uma rede de mundo pequeno. O resultado referente a simulação do modelo com a termoestatística de Tsallis em uma rede de mundo pequeno é original na literatura. No último tópico do capítulo 4, mostraremos como podemos estudar o comportamento da constante de acoplamento renormalizada de uma teoria de campos $\lambda\varphi^4$ através de uma simulação de Monte Carlo. Além de reproduzir os resultados para a constante de acoplamento $\lambda_R^{(4)}$ em duas dimensões no regime intermediário e forte, também, analisaremos a constante de acoplamento sêxtupla, $\lambda_R^{(6)}$. Em seguida mostramos a mesma simulação em três dimensões. No capítulo 5, apresentamos as conclusões gerais do trabalho bem como as perspectivas para futuros trabalhos.

Capítulo 2

Teoria Básica

Aqui, fazemos uma revisão da teoria da mecânica estatística seção 2.1 e da teoria quântica de campos seção 2.2, com ênfase nos assuntos relevantes à simulação computacional realizada nessa dissertação. Não há necessidade de revisar toda a mecânica estatística, tanto por ser um campo muito amplo e rico quanto pelo fato de haver ótimas referências [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Aqui nos restringimos a uma rápida revisão, subseção 2.1.1, que permitirá a formulação de uma generalização específica da termoestatística de Boltzmann-Gibbs, subseção 2.1.2. E ainda, faremos uma breve introdução a teoria das transições de fase subseção 2.1.3. Essa revisão servirá como base para o método computacional estudado no capítulo 3. Na segunda parte deste capítulo, o foco será na teoria de campo escalar e sua formulação na rede. Construiremos essa teoria em detalhes, explorando a analogia com a formulação de integrais de caminho da mecânica quântica. Por fim, comentaremos a conexão formal entre a mecânica estatística e a teoria quântica de campos seção 2.3.

2.1 Mecânica Estatística

Mecânica estatística é a teoria que estuda sistemas compostos de muitos graus de liberdade. O objetivo é derivar propriedades macroscópicas, expressas em termos de quantidades termodinâmicas, a partir de leis que governam o comportamento microscópico das partículas constituintes do sistema. Normalmente é possível escrever as equações de movimento dessas partículas de forma direta. Porém, a quantidade dessas equações, necessária para descrever todo o sistema, torna impraticável sua resolução.

2.1.1 Termoestatística de Boltzmann-Gibbs

Nesta dissertação estamos interessados na mecânica estatística no equilíbrio, que pode ser formulada por meio da chamada função de partição. A idéia é que essa função contenha toda a informação essencial sobre o sistema considerado. Aqui, vamos apresentar a forma geral da função de partição para um sistema clássico:

$$Z = \sum_{i=1}^{\Omega} e^{-\mathcal{H}_i/k_B T} , \quad (2.1)$$

onde $\mathcal{H}$ é a Hamiltoniana, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e Ω são os estados possíveis do sistema. Chamamos a atenção para a soma sobre todos os estados em (2.1). Isso evidencia a dependência de Z com o tamanho do sistema e com o número de graus de liberdade por partículas. Para sistemas com poucas partículas interagentes, a função de partição pode ser escrita de forma exata e, conseqüentemente, as propriedades do sistema podem ser calculadas de forma fechada. Por exemplo, consideramos um sistema constituído de 100.000 partículas interagentes (uma pequena fração do número de Avogadro), com dois estados possíveis por partícula. Nesse caso a função de partição teria 2^{100000} termos! A probabilidade de um determinado estado do sistema ocorrer também é escrita com a função de partição. Especificamente, a probabilidade do sistema estar em uma

configuração ou estado i é

$$p_i = \frac{e^{-\mathcal{H}_i/k_B T}}{Z} . \quad (2.2)$$

Energia Livre de Helmholtz

É importante mencionar a possibilidade de estabelecer uma conexão direta entre a função de partição e as quantidades termodinâmicas. Fazemos isso diferenciando a energia livre de Helmholtz, que pode ser escrita por

$$F = -k_B T \ln Z . \quad (2.3)$$

Essa relação provê a conexão entre a mecânica estatística e a termodinâmica.

Energia Interna

Podemos obter a energia interna de um sistema através da energia livre via

$$U = -T^2 \frac{\partial(F/T)}{\partial T} . \quad (2.4)$$

Essa energia interna é expressa como função das variáveis extensivas tais como S (entropia), V (volume), N (número de moles) etc. Muitas vezes é conveniente trocar essas variáveis por suas conjugadas, variáveis intensivas. Para isso, existem potenciais termodinâmicos definidos por transformadas de Legendre da energia interna. Podemos citar, dentre outros:

$$F = U - TS , \quad (2.5)$$

$$H = U + PV , \quad (2.6)$$

e

$$G = U - TS + PV , \quad (2.7)$$

onde F é a energia livre de Helmholtz, H é a entalpia e G a energia livre de Gibbs.

Ensemble

Os graus de liberdade usuais, tais como posição e movimento das partículas ou momento magnético (spin), são constituintes do chamado espaço de fase. Esse é um espaço multidimensional em que um ponto especifica o microestado completo (especificado pelo grau de liberdade de todas as partículas). Médias sobre o espaço de fase podem ser calculadas considerando um grande número de sistemas idênticos, mantidas as mesmas condições. Chamamos esses sistemas idênticos de ensembles. Diferentes vínculos são relevantes para diferentes ensembles. Se a temperatura é mantida fixa, o conjunto de sistemas pertencerá ao ensemble canônico e terá diferentes distribuições de energia para diferentes sistemas. Se a energia for fixada, o ensemble é chamado de microcanônico. Nesses casos, o número de partículas é mantido constante, mas se o número de partículas puder flutuar, o ensemble é chamado de grã-canônico.

Entropia

No início desta seção, falamos do objetivo da mecânica estatística, que, em outras palavras, é prover uma interpretação física para entropia. Nesse sentido, devemos garantir que a maximização da probabilidade corresponda à maximização da entropia termodinâmica. Ainda devemos levar em conta que a entropia é aditiva (extensiva) enquanto que o número de microestados é multiplicativo. Dessa forma, requeremos que a entropia seja uma quantidade aditiva, que meça o número de microestados do sistema. A resposta a requisição é identificar a entropia com o logaritmo do número de microestados, pois o logaritmo do produto é a soma dos logaritmos. Portanto,

$$S = k_B \ln \Omega , \quad (2.8)$$

onde Ω é o número de microestados. Escrevendo a energia livre de Helmholtz como (2.3) e a entropia como

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B \ln Z + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{\Omega} E_i p_i , \quad (2.9)$$

utilizamos (2.2) para escrever

$$-\frac{1}{k_B T} E_i = \ln(Z p_i) . \quad (2.10)$$

Com essa equação inserida em (2.9), obtemos uma expressão para a entropia em termos da distribuição de probabilidades:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \ln p_i . \quad (2.11)$$

Essa formulação muitas vezes é conhecida como entropia de Shannon. Tomando $p_i = 1/\Omega$ em (2.11) recaímos na forma (2.9).

2.1.2 Termoestatística Generalizada de Tsallis

Um tema muito estudado há pelo menos três décadas é a fenomenologia de sistemas para os quais a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) e a termodinâmica padrão apresentam sérias dificuldades ou anomalias. Existe uma longa lista desses fenômenos [11], que, em geral, envolve interações de longo alcance, memória microscópica de longo alcance e sistemas com estrutura (multi)fractal. Em especial, estamos interessados em sistemas não-extensivos para os quais os potenciais termodinâmicos não crescem linearmente com o tamanho do sistema. Para tais sistemas físicos é possível usar definições generalizadas da entropia, a fim de obter potenciais termodinâmicos não-extensivos.

Formalismo

Uma das generalizações mais bem-sucedidas da estatística de BG foi proposta por Tsallis em 1988 [12]. Sua expressão para energia é

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q}{q - 1} \left(\sum_{i=1}^{\Omega} p_i = 1; q \in \mathbf{R} \right) , \quad (2.12)$$

onde k é uma constante positiva, Ω é o número de estados microscópicos acessíveis ao sistema e q é o parâmetro entrópico. No limite $q \rightarrow 1$ recobramos a entropia de BG, utilizando a expansão

$$p_i^{q-1} = e^{(q-1) \ln p_i} \simeq 1 + (q-1) \ln p_i \quad (2.13)$$

em

$$k \frac{1 - \sum_{i=1}^{\Omega} p_i p_i^{q-1}}{q - 1} = k \frac{1 - \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \ln p_i}{q - 1} , \quad (2.14)$$

resulta em

$$S_{BG} = -k_B \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \ln p_i . \quad (2.15)$$

No limite $q \rightarrow 1$, k é a constante de Boltzmann k_B . Presumivelmente, a constante k coincide com k_B para todos os valores de q , e por isso, daqui em diante vamos trabalhar com $k = k_B = 1$.

O parâmetro entrópico caracteriza o grau de não extensividade do sistema em questão. Dessa, forma se A e B são dois sistemas independentes, no sentido que as probabilidades de $A + B$ se fatorizam nas probabilidades de A

e B (i.e., $p_{ij}(A+B) = p_i(A)p_j(B)$), então podemos inverter (2.12) $\left(\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q = 1 - (q-1)S_q\right)$, que aplicada em

$$S_q(A+B) = \frac{1 - \left[\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q(A)\right] \left[\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q(B)\right]}{q-1}, \quad (2.16)$$

resulta na seguinte expressão para entropia

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B). \quad (2.17)$$

Exigindo a propriedade de não negatividade da chamada q -entropia ($S_q \geq 0$), observamos três cenários: $q < 1$, $q = 1$ e $q > 1$. Esses correspondem, respectivamente, a superaditividade (superextensividade), aditividade (extensividade) e subatividade (subextensividade).

Vamos também, introduzir para uma quantidade física arbitrária Q , o seguinte q -valor esperado não normalizado

$$\langle Q \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q Q_i, \quad (2.18)$$

bem como o q -valor esperado normalizado

$$\langle\langle Q \rangle\rangle_q \equiv \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q Q_i}{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q}. \quad (2.19)$$

Verificamos que $\langle Q \rangle_1$ e $\langle\langle Q \rangle\rangle_1$ coincidem com o valor médio padrão $\langle Q \rangle$ de Q . E também que

$$\langle\langle Q \rangle\rangle = \frac{\langle Q \rangle_q}{\langle 1 \rangle_q}, \quad (2.20)$$

notando que quando $\langle\langle 1 \rangle\rangle_q = 1$ ($\forall q$), em geral $\langle 1 \rangle_q \neq 1$. Daqui para frente, vamos sempre trabalhar com o q -valor esperado normalizado, portanto usaremos a seguinte notação:

$$\langle Q \rangle_q \equiv \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q Q_i}{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q}, \quad (2.21)$$

ou seja, $\langle Q \rangle_q$ em vez de $\langle\langle Q \rangle\rangle_q$ (2.19).

Ensemble Canônico

Para obter a distribuição de equilíbrio termodinâmico associado com um sistema físico conservativo em contato com um termostato, nós devemos extrair S_q sobre os vínculos apropriados. Esses vínculos são [23]

$$\sum_{i=1}^{\Omega} p_i = 1 \quad (\text{vínculo da norma}) \quad (2.22)$$

e

$$\langle \varepsilon_i \rangle_q \equiv \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q} = U_q \quad (\text{vínculo da energia}), \quad (2.23)$$

onde ε_i são os autovalores do Hamiltoniano do sistema e U_q é a energia interna generalizada. Outra vez, tomando o limite $q \rightarrow 1$ recaímos, respectivamente, no valor médio e energia interna padrão.

Vamos fazer o procedimento de otimização de S_q em algum detalhe:

$$\frac{\delta}{\delta p_j} \left[S_q - \lambda_1 \sum_{i=1}^{\Omega} p_i - \lambda_2 \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q} \right] = 0 \quad (2.24)$$

$$-\frac{1}{q-1}p_i^{q-1} - \lambda_1 - \lambda_2 \frac{p_i^{q-1}\varepsilon_i - U_q p_i^{q-1}}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q} = 0 \quad (2.25)$$

$$p_i = \lambda_1^{\frac{1}{q-1}} \left(\frac{1}{1-q} - \lambda_2 \frac{(\varepsilon_i - U_q)}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q} \right)^{-\frac{1}{q-1}}. \quad (2.26)$$

Somando em j ambos os lados dessa equação obtemos:

$$\lambda_1^{\frac{1}{q-1}} = \sum_{i=1}^{\Omega} \left(\frac{1}{1-q} - \lambda_2 \frac{(\varepsilon_i - U_q)}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q} \right)^{-\frac{1}{q-1}}. \quad (2.27)$$

Substituindo (2.27) em (2.26), podemos escrever o resultado da otimização como

$$p_i = \frac{\left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q) / \sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q \right]^{\frac{1}{1-q}}}{\overline{Z}_q} \quad (2.28)$$

com

$$\overline{Z}_q \equiv \sum_{i=1}^{\Omega} \left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q) / \sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q \right]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (2.29)$$

Na equação final para a probabilidade, associamos o multiplicador de lagrange λ_2 ao inverso da temperatura β . Uma forma simples de obter os multiplicadores de Lagrange λ_1 e λ_2 é fazer o uso do vínculo da energia (2.22) em

$$S_q - \lambda_1 \sum_{i=1}^{\Omega} p_i - \lambda_2 \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q}. \quad (2.30)$$

Extremizando essa quantidade e fazendo uma soma em i , obtemos:

$$\sum_{j=1}^{\Omega} \frac{\partial S_q}{\partial p_j} \delta p_j - \lambda_1 \sum_{j=1}^{\Omega} \frac{\partial p_i}{\partial p_j} \delta p_j - \lambda_2 \sum_{j=1}^{\Omega} \frac{\partial U_q}{\partial p_j} \delta p_j = 0, \quad (2.31)$$

que é igual a

$$\delta S_q - \lambda_1 \delta p - \lambda_2 \delta U_q = 0. \quad (2.32)$$

Comparando esse resultado com a relação termodinâmica:

$$\delta S + \frac{\mu}{T} \delta p - \frac{1}{T} \delta U_q - P \delta V = 0 \quad (2.33)$$

obtemos

$$\lambda_2 = \frac{1}{T} \equiv \beta \quad \lambda_1 = -\frac{\mu}{T}. \quad (2.34)$$

onde μ é o potencial químico e T é a temperatura.

É muito comum escrevermos a probabilidade em termos da chamada temperatura *escort* ou sua inversa β' . Para isso, consideramos (2.28), que pode ser escrita como

$$p_i = \frac{\left[\sum_{j=1}^{\Omega} (p_j)^q + (1-q)\beta U_q - (1-q)\beta \varepsilon_i \right]^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_{k=1}^{\Omega} \left[\sum_{j=1}^{\Omega} (p_j)^q + (1-q)\beta U_q - (1-q)\beta \varepsilon_k \right]^{\frac{1}{1-q}}}, \quad (2.35)$$

dividindo o numerador e o denominador pela quantidade $\sum_{j=1}^{\Omega} (p_j)^q + (1-q)\beta U_q$, temos

$$p_i(\beta) = \frac{[1 - (1-q)\beta' \varepsilon_i]^{\frac{1}{1-q}}}{Z'_q} \quad \left(Z'_q \equiv \sum_{j=1}^{\Omega} [1 - (1-q)\beta' \varepsilon_j]^{\frac{1}{1-q}} \right) \quad (2.36)$$

com

$$\beta' = \frac{\beta}{\sum_{j=1}^{\Omega} (p_j)^q + (1-q)\beta U_q} \quad \left(T' \equiv \frac{1}{k\beta'} \right) \quad (2.37)$$

onde β' é uma função crescente de β . Também vamos definir a probabilidade *escort* como

$$P_i^{(q)} \equiv \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q} \quad (2.38)$$

com

$$\sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} = 1 \quad . \quad (2.39)$$

Elevando ambos os lados dessa equação a potência $1/q$ e depois somando ambos no índice i ,

$$\left[\sum_{j=1}^{\Omega} p_j^q \right]^{1/q} = \left[\frac{p_i^q}{P_i^{(q)}} \right]^{1/q} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\Omega} [P_i^{(q)}]^{1/q}} \quad , \quad (2.40)$$

obtemos a relação inversa

$$p_i = \frac{[P_i^{(q)}]^{1/q}}{\sum_{i=1}^{\Omega} [P_i^{(q)}]^{1/q}} \quad . \quad (2.41)$$

Elevando os dois lados dessa equação a q e depois somando ambos os lados no índice i , obtemos

$$\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q = \frac{1}{\left[\sum_{i=1}^{\Omega} [P_i^{(q)}]^{1/q} \right]^q} \quad . \quad (2.42)$$

Dessa forma, podemos escrever a entropia generalizada em termos da probabilidade *escort*:

$$S_q = \frac{1 - \left[\sum_{i=1}^{\Omega} (P_i^{(q)})^{1/q} \right]^{-q}}{q-1} \quad . \quad (2.43)$$

O valor esperado de uma quantidade Q_q pode ser calculado através da seguinte equação:

$$Q_q \equiv \frac{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q Q_i}{\sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q} = \sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} Q_i \quad . \quad (2.44)$$

Na última igualdade, fazemos uso da probabilidade *escort* para que Q_q tenha a forma do valor médio usual. Dessa forma, a energia interna pode ser escrita como

$$U_q = \sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} \varepsilon_i . \quad (2.45)$$

Com a definição (2.43) e os vínculos (2.39) e (2.45), podemos resolver o problema de otimização para a probabilidade *escort*:

$$\frac{\delta}{\delta P_j^{(q)}} \left[S_q - \lambda_1 \sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} - \lambda_2 \sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} \varepsilon_i \right] = 0 . \quad (2.46)$$

Esse procedimento resulta em

$$P_i^{(q)} = \frac{\left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q) / \left[\sum_{i=1}^{\Omega} \left(P_i^{(q)} \right)^{1/q} \right]^q \right]^{\frac{q}{1-q}}}{\sum_{k=1}^{\Omega} \left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_k - U_q) / \left[\sum_{i=1}^{\Omega} \left(P_i^{(q)} \right)^{1/q} \right]^q \right]^{\frac{q}{1-q}}} . \quad (2.47)$$

Usando o mesmo artifício utilizado anteriormente em (2.35), podemos escrever essa probabilidade como

$$P_i^{(q)} = \frac{[1 - (1-q)\beta' \varepsilon_i]^{\frac{q}{1-q}}}{\sum_{k=1}^{\Omega} [1 - (1-q)\beta' \varepsilon_k]^{\frac{q}{1-q}}} \quad (2.48)$$

onde

$$\beta' = \frac{\beta}{\left[\sum_{i=1}^{\Omega} \left(P_i^{(q)} \right)^{1/q} \right]^{-q} + (1-q)\beta \sum_{i=1}^{\Omega} P_i^{(q)} \varepsilon_i} . \quad (2.49)$$

Fazendo uso da definição $T' \equiv 1/\beta'$ e das equações (2.43) e (2.45), podemos reescrever essa equação como

$$T = \frac{T' - (1-q)U_q}{1 + (1-q)S_q} . \quad (2.50)$$

2.1.3 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

Uma das principais utilidades do método computacional de Monte Carlo (assunto do próximo capítulo) consiste na resolução de problemas sem solução exata. Entre uma grande lista de exemplos estão problemas relacionados a transição de fase e cálculos de diagramas de fase. Por essa razão, dedicamos essa seção a uma introdução a esses tópicos. O conhecimento e classificação das transições de fase tiveram um grande desenvolvimento na segunda metade do século XX, sendo ainda um tema atual [24, 25, 26, 27, 28]. Em parte, esse recente desenvolvimento se deve ao grande avanço experimentado na computação a partir da década de 50.

Parâmetro de Ordem

Um conceito fundamental para montar uma teoria quantitativa da transição de fase é identificar uma quantidade física que distinga as diferentes fases do sistema. Essa quantidade, conhecida como parâmetro de ordem, deve ser uma média termodinâmica, podendo ser escalar ou multicomponentes. Em geral é zero em uma fase desordenada (invariavelmente a altas temperaturas) e não-zero em uma fase ordenada. Vale a pena ressaltar que não há um esquema geral para definir parâmetros de ordem, sendo necessário avaliar o sistema físico em questão. Para sistemas ferromagnéticos, onde há quebra de simetria abaixo da temperatura crítica T_c , o parâmetro de ordem é a magnetização. Já para sistemas sem quebra de simetria, devemos escolher alguma quantidade sensível as fases ordenada e desordenada.

Função de Correlação

Um objeto útil relacionado à transição de fase é a função de correlação de dois pontos de uma quantidade Q , definido como

$$G_Q(r', r) \equiv \langle Q(r')Q(r) \rangle . \quad (2.51)$$

Essa função mede a probabilidade de achar valores iguais da quantidade Q nas posições r e r' . Geralmente perto do ponto crítico, a função de correlação pode ser escrita na forma

$$G(r', r) \sim e^{-\frac{(r'-r)}{\xi}} , \quad (2.52)$$

onde ξ é o comprimento de correlação, que nos indica o alcance da influência de uma região do espaço com relação a outra. Observamos em (2.52), que a correlação de uma determinada quantidade tende a zero quando a distância tende a infinito. No caso de sistemas magnéticos, a função de correlação pode ser medida por experimentos de espalhamento de nêutrons [29].

Função de Autocorrelação

Também podemos medir a probabilidade de achar valores iguais de uma quantidade Q na mesma posição mas em tempos diferentes. Essa medida é chamada de função de autocorrelação e definida por:

$$C_Q(t', t) \equiv \langle Q(t')Q(t) \rangle - \langle Q(t') \rangle^2 . \quad (2.53)$$

Quando $t' = t$, temos o desvio padrão de Q . Em geral, trabalhamos com a função de autocorrelação normalizada, que é definida dividindo (2.53) por $C_Q(t, t)$.

Tempo de Autocorrelação

A função de autocorrelação carrega uma informação importante, particularmente interessante a simulação computacional. Podemos dela extrair o tempo que um determinado sistema precisa para alcançar o equilíbrio termodinâmico. Isso é conseguido, definindo o tempo de correlação exponencial τ_{exp} :

$$C_Q(t', t) \equiv \lim_{|t'-t| \rightarrow \infty} e^{-\frac{|t'-t|}{\tau_{exp}}} \quad \text{ou} \quad \tau_{exp} \equiv \lim_{|t'-t| \rightarrow \infty} \frac{|t' - t|}{-\ln C_Q(t', t)} . \quad (2.54)$$

A mesma informação pode ser conseguida com a definição do tempo de autocorrelação integrado τ_{int} . Esse é definido por:

$$\tau_{int} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(|t' - t|) \frac{C_Q(t', t)}{C_Q(t, t)} , \quad (2.55)$$

ou

$$\tau_{int} \equiv \frac{1}{2} \sum_{|t'-t|=-\infty}^{\infty} \frac{C_Q(t', t)}{C_Q(t, t)} . \quad (2.56)$$

O fator 1/2 em (2.56) é usado por conveniência. Isso garante que $\tau_{int} \approx \tau_{exp}$ se $C_Q(t', t) \simeq \exp(-|t' - t|/\tau)$ com $\tau \gg 1$. Uma justificativa dessas definições pode ser encontrada em [1].

Tipos de Transição

Aqui, vamos nos concentrar em sistemas que estão no equilíbrio termodinâmico e apresentam transição ordem-desordem. Nesse caso, o parâmetro de ordem é uma derivada da energia livre. Um “pulo” do parâmetro de ordem significa uma descontinuidade da derivada primeira da energia livre. Por isso, essa transição recebe o nome de transição de fase de primeira ordem. Esse tipo de transição envolve o calor latente. Assim, o sistema absorve ou libera uma quantidade fixa de energia (em geral grande). Pelo fato dessa energia não poder ser instantaneamente transferida entre o sistema e seu entorno, à transição de primeira ordem são associadas com regimes de fase misturada. Nesse regime, algumas partes do sistema têm a transição completada, enquanto outras partes não. Se

o parâmetro de ordem for contínuo na transição de fase, ele será conhecido como transição de fase de segunda ordem ou transição contínua ou ainda transição crítica. As transições de fase de segunda ordem estão associadas à mudança de simetria do sistema e, devido à ausência do calor latente, são mais fáceis de serem estudadas.

Expoentes e Comportamento Críticos

Nesta dissertação, vamos nos ater a sistemas que apresentam transição de fase de segunda ordem, que exibem o fenômeno cooperativo. Esse fenômeno diz respeito ao longo alcance da função de correlação na vizinhança do ponto crítico, ou em outras palavras, o fato do comprimento de correlação $\xi \rightarrow \infty$ na T_c . Por causa desse caráter cooperativo, algumas características da transição se tornam independentes das interações básicas. Assim, sistemas completamente diferentes como um magneto e um fluido podem ter um comportamento similar na vizinhança da T_c , sendo descrito por leis de potencia nessa região. Para tornar a exposição menos abstrata, vamos tomar como exemplo a já mencionada transição ferromagnética de um magneto. Nesse caso, desde que o sistema esteja submetido a um campo magnético externo zero, a magnetização m muda de um valor não-zero em $T < T_c$ para zero em T_c . Identificamos m como o parâmetro de ordem genuíno dessa transição. Nesse exemplo m , o calor específico C , a susceptibilidade magnética χ e o comprimento de correlação ξ variam, respectivamente, como

$$m = m_0 t^\beta , \quad (2.57)$$

$$\chi = \chi_0 t^{-\gamma} , \quad (2.58)$$

$$C = C_0 t^{-\alpha} , \quad (2.59)$$

e

$$\xi = \xi_0 t^{-\nu} , \quad (2.60)$$

onde $t = |1 - T/T_c|$ é a temperatura reduzida e as letras gregas são denominados expoentes críticos. Essas expressões são assintóticas, tendo sua validade para $T \approx T_c$ ou $t \rightarrow 0$. Extrapolando essas equações, dizemos que os expoentes críticos são os mesmos em $T = T_c$. Essas leis de potência são endossadas tanto por resultados experimentais quanto por alguns poucos modelos exatamente solúveis.

Universalidade e Escala

O fenômeno de diferentes sistemas, que exhibe expoentes críticos iguais dentro de alguma precisão, com suas respectivas transições de fase é chamado de universalidade. Podemos identificar dois sistemas pertencendo a uma mesma classe de universalidade, se tiverem mesma dimensão e mesma dimensão do parâmetro de ordem. Resultados experimentais sugerem que todos os sistemas em uma mesma classe de universalidade têm os mesmos expoentes críticos. Devemos ainda mencionar as leis de escala, que são relações entre os expoentes críticos. A primeira dessas relações foi conjecturada em 1963 por Essan e Fisher, mas é conhecida como relação de Rushbrooke:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (2.61)$$

Atualmente existe a teoria de escala [30, 28], que além dessa relação, ainda prediz outras, tais como:

$$\text{Josephson: } \nu d = 2 - \alpha , \quad (2.62)$$

$$\text{Widom: } \gamma = (\delta - 1)\beta , \quad (2.63)$$

e

$$\text{Fisher: } \gamma = (2 - \eta)\nu , \quad (2.64)$$

onde η e δ são expoentes críticos adicionais. E os nomes, indica como as relações de escala são conhecidas.

Declínio crítico

O tempo gasto pelo sistema para mudar de configuração perto do ponto crítico cresce significativamente por causa da divergência do comprimento de correlação ξ . Esse fenômeno é conhecido como declínio crítico (*critical slowing down*, em inglês). O tempo de autocorrelação é relacionado com o comprimento de correlação pela lei de potência:

$$\tau \propto \xi^z, \quad (2.65)$$

onde z é o expoente crítico dinâmico. A equação (2.65) mostra que com a aproximação do ponto crítico, o tempo de autocorrelação diverge, pois é proporcional a ξ .

2.2 Teoria Quântica de Campos

Existem duas abordagens para Teoria Quântica de Campos (TQC): a Quantização Canônica e Integrais de Caminho (que são integrais funcionais). Discutiremos a formulação de Integrais de Caminho (IC) da Mecânica Quântica (MQ), pois essa é a chave para formulação de IC da TQC.

2.2.1 Integrais de Caminho na Mecânica Quântica

Na formulação usual da MQ, os estados de um sistema são associados a vetores do espaço de Hilbert. Observáveis são representados por operadores Hermiteanos atuando nesse espaço. A evolução temporal do sistema é dada pela equação de Schrödinger, ou de forma equivalente por

$$|q, t\rangle = e^{i\mathcal{H}t} |q\rangle \quad (2.66)$$

onde $\mathcal{H}$ é o operador Hamiltoniano (independente do tempo). A amplitude de probabilidade ou transição (de um sistema no autoestado $|q, t\rangle$ em um tempo t ser achado em uma outra posição q' em um tempo t') é definido pela função de Green

$$G(q', t'; q, t) \equiv \langle q', t' | q, t \rangle = \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t)} | q \rangle. \quad (2.67)$$

Essa função é o elemento de matriz do operador de evolução temporal $e^{-i\mathcal{H}(t'-t)}$ e contém toda a informação física a respeito do sistema considerado.

Uma propriedade das exponenciais é a satisfação da lei de composição. Sendo a função de Green formada de um “sanduíche” de exponenciais, é imediato que essa também satisfaça tal lei:

$$\begin{aligned} G(q', t'; q, t) &= \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t'')} e^{-i\mathcal{H}(t''-t)} | q \rangle \\ &= \int dq'' \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t'')} | q'' \rangle \langle q'' | e^{-i\mathcal{H}(t''-t)} | q \rangle \\ &= \int dq'' G(q', t'; q'', t'') G(q'', t''; q, t). \end{aligned} \quad (2.68)$$

Para ilustrar o significado físico da função de Green vamos, recorrer ao experimento das duas fendas de Young, figura 2.1. Considerando o aparato: onde f é a fonte emissora de partículas, a é um ponto no anteparo e b_1 e b_2 são buracos ou fendas em um plano entre f e a . Sabemos que a amplitude de detectar a partícula no ponto a é dada por

$$A(\text{detectada em } a) = \sum_i A(f \rightarrow b_i \rightarrow a), \quad (2.69)$$

ou seja, pela soma das amplitudes de probabilidade de sair de f chegar a a passando por b_1 com b_2 . Vamos considerar também uma configuração mais complexa, figura 2.2, em que temos dois planos entre f e a . Nesse caso, a amplitude de probabilidade é dada por:

$$A(\text{detectada em } a) = \sum_{i,j} A(f \rightarrow b_i \rightarrow c_j \rightarrow a). \quad (2.70)$$

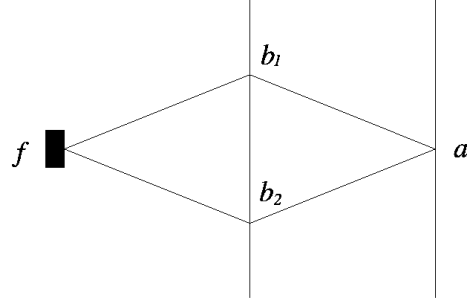


Figura 2.1: Representação pictórica do experimento da dupla fenda de Young.

Podemos pensar num caso limite em que temos um contínuo de planos entre f e a , cada um com infinitos buracos, figura 2.3. Essa configuração pode ser construída aproximando o caminho por segmentos de reta, e, depois, fazendo esses irem a zero. Muitas vezes, esse procedimento é chamado de construção poligonal.

Queremos expressar a amplitude de probabilidade de propagação de um ponto q para um ponto q' no intervalo de tempo $t' - t$, ou seja, expressar a função de Green, também chamada de propagador, em termos de integrais. Para isso, vamos dividir o intervalo $[t, t']$ em N segmentos infinitesimais de comprimento

$$\varepsilon = \frac{(t' - t)}{N} . \quad (2.71)$$

Então, ficamos com $t_1, t_2, \dots, t_{N-1}$ tempos intermediários, onde $t < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < t'$. Dessa forma, podemos escrever

$$\langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t)} | q \rangle = \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t_{N-1})} e^{-i\mathcal{H}(t_{N-1}-t_{N-2})} \dots e^{-i\mathcal{H}(t_1-t)} | q \rangle \quad (2.72)$$

onde

$$t \equiv t_0 \qquad t' \equiv t_N . \quad (2.73)$$

e

$$q \equiv q_0 \qquad q' \equiv q_N . \quad (2.74)$$

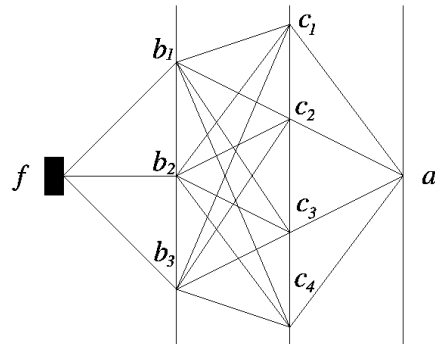


Figura 2.2: Representação pictórica do experimento de várias fendas, uma extensão do experimento de Young.

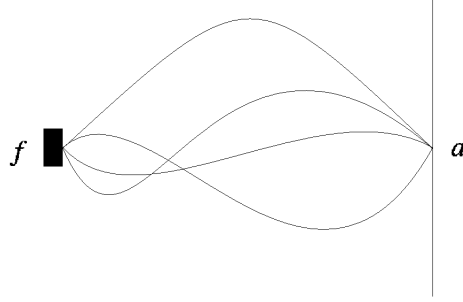


Figura 2.3: Representação pictórica do experimento de Young para infinitas fendas. Nesse caso, existem infinitos caminhos entre a fonte f e o ponto a no aparato.

Agora podemos inserir $N - 1$ conjuntos completos de q em (2.67):

$$G(q', t'; q, t) = \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(t'-t_{N-1})} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-i\mathcal{H}(t_{N-1}-t_{N-2})} | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | e^{-i\mathcal{H}(t_1-t)} | q \rangle . \quad (2.75)$$

A discussão é muito simplificada se considerarmos Hamiltonianos da forma

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) , \quad (2.76)$$

Pois, não estando envolvidos produtos de p com q , não há problemas de ordenamento associados com a falta de comutatividade desses operadores.

Vamos usar a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]+\frac{1}{12}[B,[B,A]]+\dots} \quad (2.77)$$

que, com os termos dependentes de comutadores desprezados, equivale a desprezar termos de $O(\varepsilon^2)$. Assim, ficamos com $e^A e^B \approx e^{A+B}$ e, podemos escrever

$$e^{-i\mathcal{H}\varepsilon} = e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2 - i\varepsilon V(q)} \approx e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2} e^{-i\varepsilon V(q)} . \quad (2.78)$$

Com o resultado acima, podemos resolver o termo geral:

$$\langle q_{i+1} | e^{-i\mathcal{H}\varepsilon} | q_i \rangle \approx \langle q_{i+1} | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2} e^{-i\varepsilon V(q)} | q_i \rangle = e^{-i\varepsilon V(q_i)} \langle q_{i+1} | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2} | q_i \rangle . \quad (2.79)$$

Inserindo uma completeza no espaço de momentos antes e outra depois de $e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2}$, podemos usar o produto escalar

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq} \quad (2.80)$$

para calcular o elemento de matriz (2.79). E, então, escrevemos

$$\begin{aligned} \langle q_{i+1} | e^{-i\mathcal{H}\varepsilon} | q_i \rangle &= e^{-i\varepsilon V(q_i)} \int d^3 p'_i \int d^3 p_i \langle q_{i+1} | p'_i \rangle \langle p'_i | e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p^2} | p_i \rangle \langle p_i | q_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-i\varepsilon V(q_i)} \int d^3 p'_i \int d^3 p_i e^{ip'_i q_{i+1}} e^{-ip_i q_i} e^{-\frac{i\varepsilon}{2m}p_i^2} \langle p'_i | p_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-i\varepsilon V(q_i)} \int d^3 p_i e^{-i\varepsilon \left[\frac{p_i^2}{2m} - p_i \left(\frac{q_{i+1} - q_i}{\varepsilon} \right) \right]} . \end{aligned} \quad (2.81)$$

Substituindo essa equação em (2.75), temos

$$G(q', t'; q, t) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{N-1} \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i e^{-i\varepsilon V(q_i)} \int \prod_{j=0}^{N-1} d^3 p_j e^{-i\varepsilon \left[\frac{p_j^2}{2m} - p_j \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\varepsilon} \right) \right]} . \quad (2.82)$$

Notamos que essa integral é do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 + bx + c} = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{b^2}{4a} + c} . \quad (2.83)$$

Então, fazendo as integrações sobre os momentos, ficamos com

$$G(q', t'; q, t) = \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon} \right)^{N-1} \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i e^{i\varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - V(q_i) \right]} . \quad (2.84)$$

Obtemos o limite do contínuo por fazer $N \rightarrow \infty$ e mantendo $N\varepsilon$ fixo, ou de forma equivalente tomando $\varepsilon \rightarrow 0$. Escrevemos a IC como

$$G(q', t'; q, t) \propto \int Dq e^{i \int_t^{t'} dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \quad (2.85)$$

onde

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q) \quad (2.86)$$

é a Lagrangiana clássica e a IC é sobre todas as funções de $q(t)$, que obedece as condições de contorno de (2.74).

Prosseguindo com o desenvolvimento formal, o próximo passo é calcular as amplitudes estado fundamental - estado fundamental na presença de uma fonte J ,

$$G^J(q', t'; q, t) \equiv \langle q', t' | q, t \rangle^J \propto \int Dq e^{i \int_t^{t'} dt [\mathcal{L}(q, \dot{q}) + Jq]} . \quad (2.87)$$

Consideramos os tempos t_+ e t_- tais que $t' > t_+ > t_- > t$. Tomamos $J(t) \neq 0$ para tempos no intervalo $[t_-, t_+]$ e $J(t) = 0$ para todos os tempos fora desse intervalo. Usando a completeza de $|q_-, t_- \rangle$ e $|q_+, t_+ \rangle$, temos

$$G^J(q', t'; q, t) = \int dq_+ \int dq_- \langle q', t' | q_+, t_+ \rangle \langle q_+, t_+ | q_-, t_- \rangle^J \langle q_-, t_- | q, t \rangle . \quad (2.88)$$

Considerando $|E_n \rangle$ como autovalores de energia

$$\mathcal{H} |E_n \rangle = E_n |E_n \rangle \quad (2.89)$$

e introduzindo a função de onda correspondente

$$\psi_n(q, t) = \langle q, t | E_n \rangle = \langle q | e^{-i\mathcal{H}t} | E_n \rangle = e^{-iE_n t} \langle q | E_n \rangle \quad (2.90)$$

ficamos com:

$$\begin{aligned} \langle q', t' | q_+, t_+ \rangle &= \sum_n \langle q', t' | E_n \rangle \langle E_n | q_+, t_+ \rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n t'} \langle q' | E_n \rangle \langle E_n | q_+, t_+ \rangle = \sum_n \psi_n(q', t') \psi_n^*(q_+, t_+) , \end{aligned} \quad (2.91)$$

$$\begin{aligned} \langle q_-, t_- | q, t \rangle &= \sum_n \langle q_-, t_- | E_n \rangle \langle E_n | q, t \rangle \\ &= \sum_n e^{iE_n t} \langle q_-, t_- | E_n \rangle \langle E_n | q \rangle = \sum_n \psi_n(q_-, t_-) \psi_n^*(q, t) . \end{aligned} \quad (2.92)$$

A conexão com a amplitude de probabilidade estado fundamental - estado fundamental é conseguida através de dois passos. O primeiro é fazer a continuação analítica para tempos imaginários, isto é, fazer a transformação $t \rightarrow it$. E o segundo passo é tomar o limite $t' \rightarrow -i\infty$ e $t \rightarrow i\infty$. Depois desses passos, reparamos que o decaimento exponencial em (2.91) e (2.92) assegura que apenas contribuições da função de onda do estado fundamental ψ_0 sobrevivem:

$$\lim_{t' \rightarrow -i\infty} \langle q', t' | q_+, t_+ \rangle = \lim_{t' \rightarrow -i\infty} \psi_0(q', t') \psi_0^*(q_+, t_+) \quad (2.93)$$

$$\lim_{t \rightarrow i\infty} \langle q_-, t_- | q, t \rangle = \lim_{t \rightarrow i\infty} \psi_0(q_-, t_-) \psi_0^*(q, t) . \quad (2.94)$$

Nesse caso, a função de Green com fonte fica:

$$\lim_{\substack{t' \rightarrow -i\infty \\ t \rightarrow i\infty}} \frac{G^J(q', t'; q, t)}{\psi_0(q', t') \psi_0^*(q, t)} = \int dq_+ \int dq_- \psi_0^*(q_+, t_+) \langle q_+, t_+ | q_-, t_- \rangle^J \psi_0(q_-, t_-) . \quad (2.95)$$

Retornando para o tempo real, com $t \rightarrow it$, temos

$$\lim_{\substack{t' \rightarrow \infty \\ t \rightarrow -\infty}} \frac{G^J(q', t'; q, t)}{\psi_0(q', t') \psi_0^*(q, t)} = \int dq_+ \int dq_- \psi_0^*(q_+, t_+) \langle q_+, t_+ | q_-, t_- \rangle^J \psi_0(q_-, t_-) . \quad (2.96)$$

A expressão do lado direito está no intervalo onde J não é nulo. Em geral estamos interessados no caso em que $J \neq 0$, não para intervalos de tempo finito, mas para todos os tempos. Isso é conseguido tomando $t_+ \rightarrow \infty$ e $t_- \rightarrow -\infty$. Vamos denotar a amplitude do estado fundamental - estado fundamental por:

$$W[J] \propto \lim_{\substack{t' \rightarrow \infty \\ t \rightarrow -\infty}} G^J(q', t'; q, t) . \quad (2.97)$$

Aqui não faz diferença quais valores escolhemos para q' e q . Finalmente, podemos escrever a amplitude estado fundamental - estado fundamental como IC:

$$W[J] \propto \int Dq e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt [\mathcal{L}(q, \dot{q}) + Jq]} . \quad (2.98)$$

Uma quantidade relevante em TQC é o valor esperado do estado fundamental de um produto de operadores de campo. Vamos considerar o análogo de tal objeto na MQ, representado pelo elemento de matriz:

$$\langle q', t' | \hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) | q, t \rangle \quad (2.99)$$

com $t_a > t_b > \dots > t_n$. Onde os $\hat{Q}_H(t)$'s são operadores de coordenadas na formulação de Heisenberg (dependente do tempo) e $|q, t\rangle$ são autoestados desses operadores:

$$\hat{Q}_H(t) |q, t\rangle = q |q, t\rangle . \quad (2.100)$$

Para escrevermos o elemento de matriz dos operadores de coordenada como IC, procedemos como que para função de Green. Mas aqui, quando dividimos o elemento de matriz em intervalos de tempo iguais $t_1, t_2, \dots, t_{N-1}$, por meio de inserções do conjunto completo $\int dq |q, t\rangle \langle q, t|$, escolhemos os t 's dos operadores de coordenadas ($t_a, t_b, \dots, t_n$) de tal forma que coincidam com os tempos intermediários ($t_1, t_2, \dots, t_{N-1}$). Dessa forma:

$$\begin{aligned} \langle q', t' | \hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) | q, t \rangle &= \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i \langle q', t' | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle q_{N-1}, t_{N-1} | q_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \\ &\quad \langle q_{a+1}, t_{a+1} | \hat{Q}_H(t_a) | q_a, t_a \rangle \dots \langle q_{b+1}, t_{b+1} | \hat{Q}_H(t_b) | q_b, t_b \rangle \dots \\ &\quad \langle q_{n+1}, t_{n+1} | \hat{Q}_H(t_n) | q_n, t_n \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q, t \rangle \\ &= \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i q_a q_b \dots q_n \langle q', t' | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \quad (2.101) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\langle q_{N-1}, t_{N-1} | q_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle q_{a+1}, t_{a+1} | q_a, t_a \rangle \dots \\ &\langle q_{b+1}, t_{b+1} | q_b, t_b \rangle \dots \langle q_{n+1}, t_{n+1} | q_n, t_n \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q, t \rangle \quad (2.102) \end{aligned}$$

lembrando que $t_a > t_b > \dots > t_n$. Para Hamiltonianos da forma (2.76), o termo geral $\langle q_{i+1}, t_{i+1} | q_i, t_i \rangle$ é dado por (2.81). Assim, ficamos com o seguinte elemento de matriz:

$$\langle q', t' | \hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) | q, t \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{N/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} d^3 q_i \ q_a q_b \dots q_n \ e^{i \varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - V(q_i) \right]} \ . \quad (2.103)$$

Tomando o limite do contínuo $N \rightarrow \infty$ com $N\varepsilon$ fixo, obtemos a seguinte IC:

$$\langle q', t' | \hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) | q, t \rangle \propto \int Dq \ q_a q_b \dots q_n \ e^{i \int_{t'}^t dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \ . \quad (2.104)$$

Mas se $t_a < t_b < \dots < t_n$, então, teremos como resultado:

$$\langle q', t' | \hat{Q}_H(t_n) \dots \hat{Q}_H(t_b) \hat{Q}_H(t_a) | q, t \rangle \propto \int Dq \ q_a q_b \dots q_n \ e^{i \int_{t'}^t dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \ . \quad (2.105)$$

Podemos sintetizar (2.104) e (2.105) utilizando o operador de ordenamento temporal, definido como:

$$T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \right) = \begin{cases} \hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) & \text{para } t_a > t_b \\ \hat{Q}_H(t_b) \hat{Q}_H(t_a) & \text{para } t_b > t_a \end{cases} \ . \quad (2.106)$$

Finalmente, podemos escrever

$$\langle q', t' | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | q, t \rangle \propto \int Dq \ q_a q_b \dots q_n \ e^{i \int_{t'}^t dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \ . \quad (2.107)$$

Para fazer conexão com o valor esperado do estado fundamental do produto de operadores ordenados temporalmente, introduzimos t_+ e t_- sendo $t' > t_+ > t_- > t$. E como antes, usando a completeza de $|q_+, t_+\rangle$ e $|q_-, t_-\rangle$, escrevemos

$$\begin{aligned} \langle q', t' | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | q, t \rangle &= \int dq_+ \int dq_- \langle q', t' | q_+, t_+ \rangle \\ &\quad \langle q_+, t_+ | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | q_-, t_- \rangle \\ &\quad \langle q_-, t_- | q, t \rangle \ . \end{aligned} \quad (2.108)$$

Introduzindo os autoestados de energia e procedendo da mesma forma como que de (2.88) à (2.103), teremos

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{t' \rightarrow \infty \\ t \rightarrow -\infty}} \frac{\langle q', t' | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | q, t \rangle}{\psi_0(q', t') \psi_0^*(q, t)} &= \int dq_+ \int dq_- \psi_0^*(q_+, t_+) \\ &\quad \langle q_+, t_+ | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | q_-, t_- \rangle \\ &\quad \psi_0(q_-, t_-) \\ &\equiv \langle E_0 | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | E_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.109)$$

onde $\langle E_0 | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | E_0 \rangle$ denota o valor esperado no estado fundamental do produto de operadores ordenados temporalmente. Combinando (2.106) com (2.108), temos

$$\langle E_0 | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | E_0 \rangle \propto \int Dq \ q_a(t_a) q_b(t_b) \dots q_n(t_n) e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \ . \quad (2.110)$$

Podemos fazer a conexão dessa equação com a amplitude estado fundamental - estado fundamental. Para isso, consideramos a derivada funcional de $W[J]$ com respeito a $J(t_a), J(t_b), \dots, J(t_n)$:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta^n W[J]}{\delta J(t_a) \delta J(t_b) \dots \delta J(t_n)} \right|_{J(t)=0} &\propto (i)^n \int Dq \ q_a(t_a) q_b(t_b) \dots q_n(t_n) e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{L}(q, \dot{q})} \\ &= (i)^n \langle E_0 | T \left(\hat{Q}_H(t_a) \hat{Q}_H(t_b) \dots \hat{Q}_H(t_n) \right) | E_0 \rangle \ . \end{aligned} \quad (2.111)$$

Isso significa que se conhecermos a amplitude estado fundamental-estado fundamental, então, poderemos também conhecer os valores esperados do produto de operadores ordenados temporalmente. Por essa razão, chamamos $W[J]$ de gerador funcional.

2.2.2 IC na TQC Escalar

Consideramos uma TQC escalar relativística em que temos operadores de campos $\hat{\varphi}(\vec{x}, t)$, na formulação de Heisemberg. Definimos os autoestados $\varphi(\vec{x})$ desse operador por

$$\hat{\varphi}(\vec{x}, t) |\varphi(\vec{x}), t\rangle = \varphi(\vec{x}) |\varphi(\vec{x}), t\rangle \quad , \quad (2.112)$$

onde $|\varphi(\vec{x}), t\rangle$ são os autoestados de $\hat{\varphi}(\vec{x}, t)$. Todas as contas e resultados encontrados no contexto da MQ podem ser diretamente estendidas para TQC escalar. Assim, vamos simplesmente escrever os principais resultados em analogia a seção anterior.

Nesse sentido, a generalização de (2.85) para a TQC é

$$\langle \varphi'(\vec{x}), t' | \varphi(\vec{x}), t \rangle \propto \int D\varphi \, e^{i \int_t^{t'} dt \int d^3\vec{x} \mathcal{L}} \quad . \quad (2.113)$$

A IC é sobre todas as funções $\varphi(\vec{x}, t)$, satisfazendo as condições de contorno

$$\varphi(\vec{x}, t') = \varphi'(\vec{x}) \quad \quad \quad \varphi(\vec{x}, t) = \varphi(\vec{x}) \quad . \quad (2.114)$$

Quando consideramos o termo de fonte externa, podemos discutir a amplitude de transição do estado fundamental em um tempo $-\infty$ para o estado fundamental em um tempo $+\infty$. No caso da TQC, vamos nos referir a estados fundamentais como estados do vácuo, pois partículas podem ser criadas e aniquiladas e esperamos que o estado de menor energia da teoria não contenha partículas. Denotamos a amplitude vácuo-a-vácuo na presença de fonte como $W[J]$. Em analogia à (2.98), assumimos

$$W[J] \propto \int D\varphi \, e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3\vec{x} [\mathcal{L}(\varphi) + J\varphi(\vec{x}, t)]} \quad (2.115)$$

e à (2.111) escrevemos

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_a) \delta J(x_b) \dots \delta J(x_n)} \right|_{J(x)=0} &= (i)^n g^{(n)}(x_a, x_b, \dots, x_n) \\ &= (i)^n \int D\varphi \, \varphi'(x_a) \varphi'(x_b) \dots \varphi'(x_n) e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3\vec{x} \mathcal{L}(\varphi)} \\ &= (i)^n \langle 0 | T (\varphi'(x_a) \varphi'(x_b) \dots \varphi'(x_n)) | 0 \rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.116)$$

onde $x \equiv (x_0, \vec{x})$, com $x_0 = t$ e $|0\rangle$ denota os estados do vácuo. Vamos nos referir a valores esperados do vácuo do produto cronológico de n operadores de campo como uma função de Green de n partículas, usando a notação:

$$g^{(n)}(x_a, x_b, \dots, x_n) = \langle 0 | T (\varphi'(x_a) \varphi'(x_b) \dots \varphi'(x_n)) | 0 \rangle \quad . \quad (2.117)$$

Assim, finalmente, escrevemos:

$$\left. \frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_a) \delta J(x_b) \dots \delta J(x_n)} \right|_{J(x)=0} = (i)^n g^{(n)}(x_a, x_b, \dots, x_n) \quad . \quad (2.118)$$

Gerador Funcional da Teoria Livre

Consideramos o Lagrangiano de Klein-Gordon, que é o Lagrangiano para teoria de campo escalar real livre:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi(x) \partial^\mu \varphi(x) - m^2 \varphi^2(x)) . \quad (2.119)$$

A equação de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \varphi)} = 0 , \quad (2.120)$$

para essa teoria resulta na equação de Klein-Gordon:

$$(\square + m^2) \varphi(x) = 0 , \quad (2.121)$$

onde $\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu$. Para contornarmos as ambigüidades no cálculo do gerador funcional vamos seguir o procedimento: primeiro fazemos a continuação para o espaço Euclidiano, calculamos o gerador funcional $W_E[J]$ nesse espaço e depois fazemos a continuação de volta para o espaço de Minkowski, obtendo por fim $W[J]$. Utilizando a transformação:

$$x^2 = x_0^2 - |\vec{x}|^2 \rightarrow -|\vec{x}|^2 - x_4^2 = -(|\vec{x}|^2 + x_4^2) \equiv -\tilde{x}^2 , \quad (2.122)$$

podemos realizar a continuação analítica do Lagrangeano:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi(x) \partial^\mu \varphi(x) - m^2 \varphi^2(x)) &= \frac{1}{2} (\partial_0 \varphi(x) \partial_0 \varphi(x) - \partial_i \varphi(x) \partial^i \varphi(x) - m^2 \varphi^2(x)) \\ &\quad \downarrow x_0 \rightarrow -ix_4 \\ \mathcal{L}_E = \frac{1}{2} (\partial_i \varphi(\tilde{x}) \partial_i \varphi(\tilde{x}) + \partial_4 \varphi(\tilde{x}) \partial_4 \varphi(\tilde{x}) + m^2 \varphi^2(\tilde{x})) &= \frac{1}{2} (\tilde{\partial}_\mu \varphi(\tilde{x}) \tilde{\partial}_\mu \varphi(\tilde{x}) + m^2 \varphi^2(\tilde{x})) , \end{aligned} \quad (2.123)$$

onde $\tilde{\partial}_\mu \varphi \tilde{\partial}_\mu \varphi \equiv \partial_0 \varphi \partial_0 \varphi + \partial_i \varphi \partial_i \varphi$ com $i = 1, 2, 3$ e $\tilde{x} \equiv (x_1, x_2, x_3, x_4)$. Chamamos a atenção para o fato que a mudança do espaço implica na mudança da métrica. A métrica $g^{\mu\nu}$ do espaço de Minkowski ($\mathbf{M}^4$) é definida por

$$x \cdot y \equiv g^{\mu\nu} x^\mu y^\nu = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 , \quad (2.124)$$

enquanto que, a do espaço Euclidiano ($\mathbf{R}^4$) é $\delta^{\mu\nu}$:

$$\tilde{x} \cdot \tilde{y} \equiv \delta^{\mu\nu} \tilde{x}^\mu \tilde{y}^\nu = \tilde{x}^1 \tilde{y}^1 + \tilde{x}^2 \tilde{y}^2 + \tilde{x}^3 \tilde{y}^3 + \tilde{x}^4 \tilde{y}^4 . \quad (2.125)$$

Assim, as componentes covariantes e contravariantes do vetor Euclidiano são idênticas:

$$\tilde{x}_\mu = \tilde{x}^\mu . \quad (2.126)$$

Agora, podemos escrever o gerador funcional Euclidiano como:

$$W_E[J] = N \int D\varphi e^{\int d^4 \tilde{x} (\frac{1}{2} \tilde{\partial}_\mu \varphi \tilde{\partial}_\mu \varphi + \frac{m^2}{2} \varphi^2 + J\varphi)} . \quad (2.127)$$

O primeiro termo da exponencial pode ser escrito como

$$\int d^4 \tilde{x} \tilde{\partial}_\mu \varphi \tilde{\partial}_\mu \varphi = \int d^4 \tilde{x} \tilde{\partial}_\mu (\varphi \tilde{\partial}_\mu \varphi) - \int d^4 \tilde{x} \varphi \tilde{\partial}_\mu \tilde{\partial}_\mu \varphi . \quad (2.128)$$

Podemos converter a primeira integral do lado direito em uma integral de superfície, usando a versão 4-dimensional do teorema de Gauss. Esse termo de superfície vai a zero se $\varphi \rightarrow 0$ no infinito. Ficamos com

$$\int d^4 \tilde{x} \tilde{\partial}_\mu \varphi \tilde{\partial}_\mu \varphi = - \int d^4 \tilde{x} \varphi \tilde{\partial}_\mu \tilde{\partial}_\mu \varphi \equiv \int d^4 \tilde{x} \varphi \square \varphi , \quad (2.129)$$

que substituída em (2.127) resulta em

$$W_E[J] = N \int D\varphi e^{\int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} \left(\frac{1}{2} \varphi \tilde{\square} \varphi + \frac{m^2}{2} \varphi^2 + J\varphi \right)} . \quad (2.130)$$

Definindo

$$\begin{aligned} A(\tilde{x}', \tilde{x}) &\equiv \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}'_\mu} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_\mu} + m^2 \right) \delta(\tilde{x}' - \tilde{x}) \\ &= (\tilde{p}^2 + m^2) \delta(\tilde{x}' - \tilde{x}) , \end{aligned} \quad (2.131)$$

podemos escrever (2.130) como

$$W_E[J] = N \int D\varphi e^{-\frac{1}{2} \int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} \varphi(\tilde{x}') A(\tilde{x}', \tilde{x}) \varphi(\tilde{x}) + \int d^4\tilde{x} J(\tilde{x}) \varphi(\tilde{x})} . \quad (2.132)$$

Essa integral tem solução:

$$W_E[J] = e^{\frac{1}{2} \int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} J(\tilde{x}') A^{-1}(\tilde{x}', \tilde{x}) J(\tilde{x})} . \quad (2.133)$$

Denotando o propagador de Feynman Euclidiano para o campo escalar como

$$\Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) \equiv A^{-1}(\tilde{x}', \tilde{x}) , \quad (2.134)$$

podemos reescrever (2.133) como

$$W_E[J] = e^{\frac{1}{2} \int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} J(\tilde{x}') \Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) J(\tilde{x})} . \quad (2.135)$$

A inversa A^{-1} é conseguida com a transformada de Fourier. Para tanto, consideramos a representação da função δ de Dirac

$$\delta(\tilde{x}' - \tilde{x}) = \int \frac{d^4\tilde{p}}{(2\pi)^4} e^{i\tilde{p}(\tilde{x}' - \tilde{x})} . \quad (2.136)$$

Substituindo (2.136) em (2.131), ficamos com

$$A(\tilde{x}', \tilde{x}) = \int \frac{d^4\tilde{p}}{(2\pi)^4} e^{i\tilde{p}(\tilde{x}' - \tilde{x})} (\tilde{p}^2 + m^2) . \quad (2.137)$$

Sua inversa (2.134) é dada por

$$\begin{aligned} \Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) &= \int \frac{d^4\tilde{p}}{(2\pi)^4} e^{i\tilde{p}(\tilde{x}' - \tilde{x})} \frac{1}{(\tilde{p}^2 + m^2)} \\ &\equiv \int \frac{d^4\tilde{p}}{(2\pi)^4} e^{i\tilde{p}(\tilde{x}' - \tilde{x})} \tilde{\Delta}_F^E(\tilde{p}) . \end{aligned} \quad (2.138)$$

Estando completo o cálculo de $W_E[J]$, vamos fazer a continuação de volta para o espaço de Minkowski. Sabendo que

$$\begin{aligned} x_4 &\rightarrow ix_0 \\ p_4 &\rightarrow -ip_0 \end{aligned} \quad \left\{ \begin{aligned} \tilde{p}^2 &\rightarrow -p^2 \\ d^4\tilde{p} &\rightarrow -id^4p \\ d^4\tilde{x} &\rightarrow id^4x \end{aligned} \right. ,$$

podemos escrever o propagador de Feynman como:

$$\Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) \rightarrow i\Delta_F(x' - x) \equiv i \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} e^{ip(x' - x)} \frac{1}{p^2 - m^2} , \quad (2.139)$$

sendo $\frac{1}{p^2 - m^2} \equiv \tilde{\Delta}_F(p)$, e finalmente

$$W[J] = e^{-\frac{i}{2} \int d^4x' \int d^4x J(x') \Delta_F(x' - x) J(x)} . \quad (2.140)$$

Podemos também, expandir o gerador funcional em série de potências:

$$\begin{aligned}
W[J] &= N \left\{ 1 - \frac{i}{2} \int d^4x' \int d^4x J(x') \Delta_F(x' - x) J(x) \right. \\
&\quad + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{2} \right)^2 \left[\int d^4x' \int d^4x J(x') \Delta_F(x' - x) J(x) \right]^2 \\
&\quad + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i}{2} \right)^3 \left[\int d^4x' \int d^4x J(x') \Delta_F(x' - x) J(x) \right]^3 \\
&\quad \left. + \dots \right\} .
\end{aligned} \tag{2.141}$$

Funções de Green da Teoria Livre

Tendo calculado o gerador funcional para teoria livre (2.140), podemos calcular a função de Green correspondentes, fazendo as derivadas funcionais como em (2.116). Assim,

$$\begin{aligned}
g^{(1)}(x_1) &= \left. \frac{1}{i} \frac{\delta W[J]}{\delta J(x_1)} \right|_{J(x)=0} \\
&= -\frac{N}{2} \int d^4x \Delta_F(x_1 - x) J(x) W[J] \Big|_{J(x)=0} = 0 .
\end{aligned} \tag{2.142}$$

$$\begin{aligned}
g^{(2)}(x_1, x_2) &= \left. \frac{1}{(i)^2} \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2)} \right|_{J(x)=0} \\
&= \frac{N}{2} \left\{ i \Delta_F(x_1 - x_2) W[J] + \right. \\
&\quad \left. \int d^4x \Delta_F(x_1 - x) J(x) \int d^4x \Delta_F(x_2 - x) J(x) W[J] \right\} \Big|_{J(x)=0} \\
&= \frac{N}{2} i \Delta_F(x_1 - x_2) .
\end{aligned} \tag{2.143}$$

$$\begin{aligned}
g^{(3)}(x_1, x_2, x_3) &= \left. \frac{1}{(i)^3} \frac{\delta^3 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \delta J(x_3)} \right|_{J(x)=0} \\
&= \frac{N}{2} \left\{ -\frac{i}{2} \Delta_F(x_1 - x_2) \int d^4x \Delta_F(x_3 - x) J(x) W[J] \right. \\
&\quad + \Delta_F(x_3 - x) \int d^4x \Delta_F(x_2 - x) J(x) W[J] \Delta_F(x_2 - x_3) \int d^4x \Delta_F(x_1 - x) J(x) W[J] \\
&\quad \left. - \frac{i}{2} \int d^4x \Delta_F(x_1 - x) J(x) \int d^4x \Delta_F(x_2 - x) J(x) \int d^4x \Delta_F(x_3 - x) J(x) W[J] \right\} \Big|_{J(x)=0} \\
&= 0 .
\end{aligned} \tag{2.144}$$

$$\begin{aligned}
g^{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= \frac{1}{(i)^4} \frac{\delta^4 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \delta J(x_3) \delta J(x_4)} \Big|_{J(x)=0} \\
&= \frac{N}{2} \left\{ -\Delta_F(x_2 - x_3) \Delta_F(x_1 - x_4) W[J] \right. \\
&\quad -\Delta_F(x_2 - x_1) \Delta_F(x_3 - x_4) W[J] \\
&\quad -\Delta_F(x_3 - x_1) \Delta_F(x_2 - x_4) W[J] \\
&\quad \left. + (\text{Termos que vão a zero quando } J(x) = 0) \right\} \Big|_{J(x)=0}
\end{aligned} \tag{2.145}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{N}{2} \left\{ \Delta_F(x_1 - x_2) \Delta_F(x_3 - x_4) + \Delta_F(x_1 - x_3) \Delta_F(x_2 - x_4) \right. \\
&\quad \left. + \Delta_F(x_1 - x_4) \Delta_F(x_2 - x_3) \right\} .
\end{aligned} \tag{2.146}$$

Continuando esses cálculos para ordens mais altas, fica claro que se n for ímpar a função $g^{(n)} = 0$. Se n for par, $g^{(n)}$ pode ser escrita como a soma de produtos de funções de 2-pontos, $g^{(2)}$:

$$\begin{aligned}
g^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \quad n \text{ par} \\
g^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= g^{(2)}(x_1, x_2) \dots g^{(2)}(x_{n-1}, x_n), \quad n \text{ ímpar} .
\end{aligned} \tag{2.147}$$

Esse importante resultado é conhecido como Teorema de Wick. Dessa forma, podemos escrever a série (2.141) como:

$$W[J] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i)^n}{n!} \int \prod_{i=1}^n d^4 x_i \, g^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) J(x_1) J(x_2) \dots J(x_n) . \tag{2.148}$$

Gerador Funcional da Teoria com Interação

Antes de tratarmos a teoria com interação $\lambda\varphi^4$, vamos obter a forma do gerador funcional para uma teoria de campo escalar com uma interação qualquer. Para tanto, consideramos o Lagrangiano que pode ser dividido em duas partes:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_{int} \tag{2.149}$$

onde

$$\mathcal{L}_0 \equiv \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 \tag{2.150}$$

e $\mathcal{L}_{int}$ é a parte que contém a interação. Nesse caso, podemos escrever o gerador funcional (2.115) como

$$\begin{aligned}
W[J] &= \int D\varphi \, e^{i \int d^4 x [\mathcal{L}_0(\varphi) + \mathcal{L}_{int}(\varphi) + J(x)\varphi(x)]} \\
&= \int D\varphi \, e^{i \int d^4 x [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x)\varphi(x)]} e^{i \int d^4 x \mathcal{L}_{int}(\varphi)} .
\end{aligned} \tag{2.151}$$

O último termo exponencial pode ser expandido, resultando em

$$\begin{aligned}
W[J] &= \int D\varphi \, e^{i \int d^4 x [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x)\varphi(x)]} \left\{ 1 + i \int d^4 x \mathcal{L}_{int}(\varphi) \right. \\
&\quad \left. + \frac{(i)^2}{2!} \int d^4 x' \int d^4 x \mathcal{L}_{int}[\varphi(x')] \mathcal{L}_{int}[\varphi(x)] + \dots \right\} .
\end{aligned} \tag{2.152}$$

Notando que

$$\frac{\delta}{\delta J(x)} e^{i \int d^4 x' [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x')\varphi(x')]} = i\varphi(x) e^{i \int d^4 x' [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x')\varphi(x')]} , \tag{2.153}$$

podemos escrever

$$\left(\int d^4x \mathcal{L}_{int}(\varphi) \right) e^{i \int d^4x' [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x')\varphi(x')]} = \int d^4x \mathcal{L}_{int} \left(\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) e^{i \int d^4x' [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x')\varphi(x')]} . \quad (2.154)$$

Observamos que o operador $\mathcal{L}_{int} \left(\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)$ é independente de $\varphi(x)$, e portanto, pode ser passado para fora da integral funcional em (2.152). Então, temos

$$W[J] = e^{i \int d^4x \mathcal{L}_{int} \left(\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)} W_0[J] \quad (2.155)$$

onde

$$W_0[J] \equiv \int D\varphi e^{i \int d^4x' [\mathcal{L}_0(\varphi) + J(x')\varphi(x')]} . \quad (2.156)$$

No caso da teoria $\lambda\varphi^4$ em que o Lagrangiano de interação é dado por

$$\mathcal{L}_{int} = -\frac{\lambda}{4!} \varphi^4 \quad (2.157)$$

obtemos o gerador funcional por substituir (2.157) em (2.155):

$$\begin{aligned} W[J] &= e^{i \int d^4x \left[-\frac{\lambda}{4!} \left(\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^4 \right]} W_0[J] \\ &= W_0[J] - \frac{i\lambda}{4!} \int d^4x \frac{\delta^4 W_0}{\delta J(x)^4} + O(\lambda^2) . \end{aligned} \quad (2.158)$$

Utilizando o gerador funcional livre $W_0[J]$ como em (2.141), vamos calcular o termo de primeira ordem em λ :

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^4 W_0[J] &= \left\{ -3[\Delta_F(0)]^2 + 6i\Delta_F(0) \left[\int d^4x' \Delta_F(x'' - x') J(x') \right]^2 \right. \\ &\quad \left. + \left[\int d^4x' \Delta_F(x'' - x') J(x') \right]^4 \right\} W_0[J] . \end{aligned} \quad (2.159)$$

Funções de Green da Teoria com Interação

De posse do gerador funcional da teoria com interação (2.158), podemos calcular as funções de Green da teoria $\lambda\varphi^4$. Nesse caso:

$$\begin{aligned} g^{(1)}(x_1) &= \left. \frac{1}{i} \frac{\delta W[J]}{\delta J(x_1)} \right|_{J(x)=0} \\ &= \left. \frac{1}{i} \frac{\delta W_0[J]}{\delta J(x_1)} \right|_{J(x)=0} + \dots \Big|_{J(x)=0} = 0 . \end{aligned} \quad (2.160)$$

$$\begin{aligned}
g^{(2)}(x_1, x_2) &= \frac{1}{(i)^2} \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2)} \Big|_{J(x)=0} = - \left\{ \frac{\delta^2 W_0[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2)} \Big|_{J(x)=0} \right. \\
&\quad - \frac{i\lambda}{4!} \int d^4 x'' \frac{\delta^2}{\delta J(x_1) \delta J(x_2)} \left\{ -3[\Delta_F(0)]^2 \right. \\
&\quad \left. + 6i\Delta_F(0) \left[\int d^4 x' \Delta_F(x'' - x') J(x') \right]^2 \right. \\
&\quad \left. \left[\int d^4 x' \Delta_F(x'' - x') J(x') \right]^4 \right\} W_0[J] \Big|_{J(x)=0} + O(\lambda^2) \Big\} \\
&= - \left\{ -i\Delta_F(x_1 - x_2) - \frac{i\lambda}{4!} \int d^4 x'' 6i\Delta_F(0) 2\Delta_F(x'' - x_2) \Delta_F(x'' - x_1) W_0[J] \right. \\
&\quad \left. + \dots \right\} \Big|_{J(x)=0} + O(\lambda^2) \\
&= +i\Delta_F(x_1 - x_2) - \frac{\lambda}{2} \Delta_F(0)^4 x'' \Delta_F(x'' - x_2) \Delta_F(x'' - x_1) + O(\lambda^2) \\
&\equiv g_0^{(2)}(x_1 - x_2) - \frac{\lambda}{2} \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_2) \Delta_F(x'' - x_1) + O(\lambda^2) . \tag{2.162}
\end{aligned}$$

Através de cálculos similares, chegamos em:

$$g^{(3)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{(i)^3} \frac{\delta^3 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \delta J(x_3)} \Big|_{J(x)=0} = 0 \tag{2.163}$$

e

$$\begin{aligned}
g^{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= \frac{1}{(i)^4} \frac{\delta^4 W[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \delta J(x_3) \delta J(x_4)} \Big|_{J(x)=0} \\
&= g_0^{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) - \frac{\lambda}{2} \left\{ \right. \\
&\quad g_0^{(2)}(x_1 - x_2) \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_4) \Delta_F(x'' - x_3) \\
&\quad + g_0^{(2)}(x_3 - x_4) \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_2) \Delta_F(x'' - x_1) \\
&\quad + g_0^{(2)}(x_1 - x_3) \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_4) \Delta_F(x'' - x_2) \\
&\quad + g_0^{(2)}(x_2 - x_4) \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_3) \Delta_F(x'' - x_1) \\
&\quad \left. + g_0^{(2)}(x_2 - x_3) \Delta_F(0) \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_4) \Delta_F(x'' - x_1) \right\} \\
&\quad - i\lambda \int d^4 x'' \Delta_F(x'' - x_4) \Delta_F(x'' - x_3) \Delta_F(x'' - x_2) \Delta_F(x'' - x_1) \\
&\quad + O(\lambda^2) . \tag{2.164}
\end{aligned}$$

onde $g_0^{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4)$ é a função de Green para o campo livre dado por (2.146).

O gerador funcional (2.141), também pode ser passado para o espaço de momento utilizando uma transformada de Fourier do propagador de Feynman, (2.139). Escrito dessa forma, podemos representar o gerador funcional diagramaticamente. Dessa representação pictórica, podemos definir as chamadas regras de Feynman no espaço

do momento. O mesmo pode ser feito para teoria com interação. Por exemplo, no caso da teoria $\lambda\varphi^4$, o gerador funcional (2.158) pode ser representado diagramaticamente no espaço do momento. Portanto, podemos derivar novas regras de Feynman para essa teoria. Dessa forma, cada teoria tem regras e gráficos de Feynman específicos.

Gráficos de Feynman são extremamente úteis para cálculos em teoria de perturbação. Pois é relativamente fácil descobrir quais são os gráficos correspondentes a cada ordem em teoria de perturbação que devem ser calculados. Nesta dissertação não vamos nos dedicar a cálculos perturbativos, por isso não vamos derivar as regras de Feynman para teorias livre ou interagentes. Muitos livros derivam as regras de Feynman através do formalismo canônico, tais como [31, 32, 33, 34]. Outros derivam do formalismo funcional, utilizado nessa dissertação, tais como [35, 36, 37]. Existem dois tipos de diagramas. O primeiro, são gráficos que não podem ser desmembrados em sub-gráficos. Ou seja, não podem ser desconectados por um único corte de uma linha interna. Esses são chamados de gráficos conectados. O segundo tipo pode ser desmembrado e é conhecido como não-conectados. Podemos associar a cada um desses tipos funções de Green conectadas e não-conectadas, respectivamente. Vamos continuar o desenvolvimento teórico, definindo mais alguns objetos que serão usados nos cálculos apresentados nessa dissertação.

Gerador Funcional para as Funções de Green Conectadas

Prosseguimos definindo o gerador funcional para as funções de Green conectadas $X[J]$ como:

$$W[J] \equiv e^{iX[J]} \quad \text{ou} \quad X[J] \equiv \frac{1}{i} \ln W[J] . \quad (2.165)$$

As funções de Green conectadas $G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ são definidas através da expansão funcional

$$X[J] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i)^{n-1}}{n!} \int \prod_{i=1}^n d^4x_i G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) J(x_1) J(x_2) \dots J(x_n) . \quad (2.166)$$

Assim, em analogia com (2.118), escrevemos

$$\left. \frac{\delta^n X[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \dots \delta J(x_n)} \right|_{J(x)=0} = (i)^{n-1} G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) . \quad (2.167)$$

No caso da teoria livre, em que (2.140), teremos

$$X[J] = -\frac{1}{2} \int d^4x' \int d^4x J(x') \Delta_F(x' - x) J(x) . \quad (2.168)$$

A única função de Green conectada não nula é $G^{(2)}$, equação (2.143):

$$G^{(2)}(x_1, x_2) = i\Delta_F(x_1 - x_2) = g^{(2)}(x_1, x_2) .$$

Já no caso da teoria com interação há mais funções de Green não nulas além da função de dois pontos [32].

Ação Efetiva

Definindo o chamado campo clássico como:

$$\varphi_{cl}(x) = \frac{\delta X[J]}{\delta J(x)} . \quad (2.169)$$

A ação efetiva $\Gamma[\varphi_{cl}]$ é definida como a transformada de Legendre de $X[J]$:

$$\Gamma[\varphi_{cl}] = X[J] - \int d^4x J(x) \varphi_{cl} . \quad (2.170)$$

Podemos obter uma derivada funcional de $\Gamma[\varphi_{cl}]$ com respeito a φ_{cl}

$$\frac{\delta\Gamma[\varphi_{cl}]}{\delta\varphi_{cl}} = \frac{\delta X[J]}{\delta\varphi_{cl}} - \int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\varphi_{cl}} \varphi_{cl}(x) - J(x) \quad (2.171)$$

$$= \int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\varphi_{cl}} \varphi_{cl}(x) + \int d^4x \delta J(x) - \int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\varphi_{cl}} \varphi_{cl}(x) - J(x) \quad (2.172)$$

$$= -J(x) . \quad (2.173)$$

No caso da teoria livre, obtemos $\varphi_{cl}(x)$ de (2.168). Assim,

$$\varphi_{cl}(x) = - \int d^4x' \Delta_F(x-x') J(x') . \quad (2.174)$$

onde $\Delta_F(x-x')$ é a função de Green para o operador $(\square + m^2)$. Isso pode ser observado da equação (2.139), de onde podemos deduzir

$$(\square + m^2)\Delta_F(x-x') = -\delta(x-x') . \quad (2.175)$$

Utilizando (2.175) podemos escrever

$$(\square + m^2)\varphi_{cl} = J(x) . \quad (2.176)$$

Essa é a equação de campo clássico ou de Klein-Gordon na presença de uma fonte J . Por essa razão, nos referimos a φ_{cl} como campo clássico. A ação efetiva pode ser calculada explicitamente para o campo livre

$$\begin{aligned} \Gamma[\varphi_{cl}] &= -\frac{1}{2} \int d^4x \varphi_{cl}(x) (\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \varphi_{cl}(x) \\ &= \frac{1}{2} \int d^4x (\partial_\mu \varphi_{cl} \partial^\mu \varphi_{cl} - m^2 \varphi_{cl}^2) . \end{aligned}$$

Em geral, podemos fazer a expansão funcional

$$\Gamma[\varphi_{cl}] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i)^n}{n!} \int \prod_{i=1}^n d^4x_i \Gamma^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \varphi_{cl}(x_1) \varphi_{cl}(x_2) \dots \varphi_{cl}(x_n) , \quad (2.177)$$

onde os coeficientes da expansão $\Gamma^{(n)}$ são chamados de função de Green *one-particle-irreducible* (1PI). O nome vem do fato dos gráficos de Feynman envolvidos no cálculo de $\Gamma^{(n)}$ serem todos conectados e não poderem ser desconectados por um corte de uma única linha interna [36].

Potencial Efetivo

A ação efetiva também pode ser expandida em potências do momento. Nesse caso, temos

$$\Gamma[\varphi_{cl}] = \int d^4x \left(-V_{ef}(\varphi_{cl}) + \frac{A(\varphi_{cl})}{2} \partial_\mu \varphi_{cl} \partial^\mu \varphi_{cl} + \dots \right) , \quad (2.178)$$

onde os coeficientes da expansão são funções de φ_{cl} . $V_{ef}(\varphi_{cl})$ é o chamado potencial efetivo.

O potencial efetivo é uma função, tal que sua minimização resulta no valor exato do campo clássico. Essa função concorda com a energia potencial clássica para baixas ordens em teoria de perturbação, mas é modificada para ordens mais altas através de correções quânticas. Utilizando (2.177) em (2.173), temos

$$\frac{dV_{ef}}{d\varphi_{cl}} = J . \quad (2.179)$$

Em particular, se o conjunto dos termos de fonte forem zero, φ_{cl} tem o significado de valor esperado do vácuo , logo

$$\frac{dV_{ef}}{d\varphi_{cl}} = 0 . \quad (2.180)$$

O mínimo absoluto do potencial efetivo é o estado fundamental ou vácuo do campo φ_{cl} .

No caso da teoria livre, equação (2.176), podemos identificar o potencial efetivo como

$$V_{ef}(\varphi_{cl}) = \frac{m^2}{2} \varphi_{cl}^2 . \quad (2.181)$$

Nesse caso, a minimização do potencial efetivo mostra que o valor esperado do vácuo do operador de campo é zero. Em teorias com interação, em geral, esse valor esperado do vácuo é não nulo. Também é útil a expansão do potencial efetivo em termos da função de Green. Isso é obtido usando a inversa de $\Gamma^{(n)}$, conseguida com a transformada de Fourier para o espaço de momentos:

$$\tilde{\Gamma}^{(n)}(p_1, p_2, \dots, p_n) \delta(p_1, p_2, \dots, p_n) = \int \prod_{i=1}^n d^4 x_i e^{p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_n x_n} \Gamma^{(n)}(p_1, p_2, \dots, p_n) . \quad (2.182)$$

Utilizando essa equação em (2.177), temos

$$V(\varphi_{cl}) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i)^n}{n!} \tilde{\Gamma}^{(n)}(0, 0, \dots, 0) \varphi_{cl}^n . \quad (2.183)$$

2.2.3 Renormalização

A teoria de campo livre pode ser resolvida analiticamente. Ou seja, todas as funções de Green dessa teoria podem ser calculadas de forma fechada. Isso não ocorre em uma teoria com interação. Por exemplo, no caso considerado acima, em que incluímos um termo $\lambda \varphi^4$ no Lagrangiano do campo livre, o melhor que podemos fazer é uma análise perturbativa na constante de acoplamento λ . Porém, os termos na série perturbativa envolvem integrais divergentes sobre as coordenadas de momento. Dessa forma, a previsão para as quantidades físicas são números infinitos, soluções inaceitáveis do ponto de vista da física. Não é só na teoria $\lambda \varphi^4$ que nos deparamos com essas soluções. Em muitas TQC's interagentes notamos essas divergências. Felizmente, existem vários esquemas para “domar” essas divergências, procedimento conhecido como regularização da TQC. Um dos esquemas mais populares e simples é o chamado *sharp cut-off*. Nesse, impomos um *cut-off* em algum valor finito Λ nas integrais de momento. Dessa forma, as quantidades físicas se tornam dependentes desse *cut-off*. Esse método é bastante simples, mas não é invariante de Lorentz, requerimento indispensável para teorias relativísticas. Porém, podemos citar dois esquemas que satisfazem tal condição: regularização de Pauli-Villars e a regularização dimensional. Porém, nesta dissertação vamos usar um outro esquema de remoção das divergências, a formulação da teoria na rede discreta. Essa é completamente equivalente a impor um *cut-off* nas integrais de momento. A constante a , usada como espaçamento da rede, é relacionada com a constante de corte Λ através de

$$a \sim \frac{1}{\Lambda} . \quad (2.184)$$

O procedimento de regularização consiste em fazer a constante de acoplamento e a massa dependentes da constante do *cut-off*. Depois, requeremos que na função de Green, a dependência do *cut-off* desapareça. Em algumas teorias é possível fazer o *cut-off* independente ajustando apenas a massa (m), constante de acoplamento (λ) e o campo (φ). Nesse caso, chamamos a teoria de renormalizável. Porém, em muitas teorias esse procedimento não é possível, sendo essas referidas como não-renormalizáveis. No processo de remoção do *cut-off*, as constantes da teoria que aparecem na Lagrangiana são chamadas de constantes nuas. O procedimento da regularização deixa algumas arbitrariedades nos valores dos campos, constante de acoplamento e massa. Essas arbitrariedades são eliminadas usando dados experimentais para fixar o valor de tais quantidades.

Em resumo, o objetivo do procedimento de renormalização é achar a constante de acoplamento nua e massa nua, de tal forma que a massa física (renormalizável) e constante de acoplamento renormalizável sejam independentes do *cut-off*, lembrando que diferentes esquemas de regularização levam à mesma física. E, ainda, necessitamos de dados experimentais para fixar os parâmetros da teoria. Em geral, requeremos de todas as teorias que descrevam a natureza física que sejam teorias renormalizáveis. Essa condição é muito restritiva. Por exemplo, o potencial φ^4 tem essa propriedade, mas se o trocarmos por φ^6 , destruímos a renormalisabilidade da teoria.

2.3 Teoria Quântica de Campos na Rede

2.3.1 Teoria Quântica de Campos Euclidiana

A formulação da TQC na rede tem como principal objetivo viabilizar cálculos numéricos. Com isso, podemos calcular observáveis ou, pelo menos, quantidades que nos permitam estudar o comportamento da teoria em questão. Essa formulação na rede conta primeiramente com a formulação da TQC no espaço Euclidiano.

Todo o formalismo construído no espaço de Minkowski pode ser construído no espaço Euclidiano. Para isso, consideramos

$$|\varphi(\vec{x}), x_4\rangle = e^{\mathcal{H}x_4} |\varphi(\vec{x})\rangle \quad (2.185)$$

em vez de (2.66). Todas as equações que deduzimos e definimos são conseguidas seguindo os mesmos passos que na subseções 2.2.1 e 2.2.2. Mas, obviamente, dessa vez não teremos problemas no cálculo do gerador funcional da teoria livre (2.121).

Também é possível chegar a formulação Euclideana através da formulação do espaço de Minkowski, construída na subseção 2.2.2. Isso é conseguido, usando precisamente o método para contornar o problema referido no parágrafo anterior. Esse método da continuação analítica do tempo para valores puramente imaginários nada mais é que realizar a transformação ¹:

$$x_0 \rightarrow -ix_4 \ , \quad (2.186)$$

onde x_0 é o tempo real, enquanto x_4 é o tempo puramente imaginário, também chamado de tempo Euclideano. A idéia é usar (2.186) em todos resultados da subseção 2.2.2. Vamos aqui, mostrar os resultados da continuação analítica dos principais resultados da subseção 2.2.2.

Já calculamos o gerador funcional Euclideano da teoria livre como (2.135):

$$\mathcal{Z}_0[J] = e^{\frac{1}{2} \int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} J(\tilde{x}') \Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) J(\tilde{x})} \ , \quad (2.187)$$

onde $\Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x})$ é dado por (2.134) e trocamos a nomenclatura W_E por $\mathcal{Z}$. Outra vez $\tilde{x} \equiv (x_1, x_2, x_3, x_4)$. Em analogia a (2.118), as funções de Green Euclideanas da teoria livre são calculadas através de

$$\left. \frac{\delta^n \mathcal{Z}_0[J]}{\delta J(\tilde{x}_a) \delta J(\tilde{x}_b) \dots \delta J(\tilde{x}_n)} \right|_{J(\tilde{x})=0} = \mathcal{G}^{(n)}(\tilde{x}_a, \tilde{x}_b, \dots, \tilde{x}_n) \ , \quad (2.188)$$

onde $\mathcal{G}$ denota a função de Green Euclideana.

No caso da teoria interagente ainda vale a equação (2.149). Mas dessa vez $\mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_E$, equação (2.123). Nesse caso, podemos escrever o gerador funcional Euclideano da teoria com interação como

$$\mathcal{Z}[J] = e^{\frac{1}{2} \int d^4\tilde{x}' \int d^4\tilde{x} J(\tilde{x}') \Delta_F^E(\tilde{x}' - \tilde{x}) J(\tilde{x})} \ . \quad (2.189)$$

Também vamos usar (2.188) para calcular as Funções de Green Euclideanas da teoria com interação, mas trocando $\mathcal{Z}_0$ por $\mathcal{Z}$. Para finalizar a formulação Euclideana, definimos o gerador funcional para funções de Green Euclideanas conectadas:

$$\mathcal{F}[J] \equiv \ln \mathcal{Z}[J] \ , \quad (2.190)$$

e as funções de Green Euclideanas conectadas, $\mathcal{G}_c$:

$$\left. \frac{\delta^n \mathcal{F}[J]}{\delta J(\tilde{x}_a) \delta J(\tilde{x}_b) \dots \delta J(\tilde{x}_n)} \right|_{J(\tilde{x})=0} = \mathcal{G}_c^{(n)}(\tilde{x}_a, \tilde{x}_b, \dots, \tilde{x}_n) \ . \quad (2.191)$$

¹Essa transformação também é conhecida como rotação de Wick.

2.3.2 Discretização do Espaço Euclidiano

Para alcançarmos a formulação na rede precisamos ainda, discretizar o espaço-tempo Euclidiano ($\mathbf{R}^d$). Fazemos isso, por introduzir uma rede hipercubica $\aleph$, tal que

$$\aleph = a\mathbf{Z}^d = \{\tilde{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d) \in \mathbf{Z}\} , \quad (2.192)$$

onde a é o parâmetro de rede, como já mencionamos. O campo escalar $\varphi(\tilde{n})$ é definido por pontos $\tilde{n} \in \aleph$. Sendo essa, uma forma natural de regularizar a teoria em questão. O próximo passo é discretizar o Lagrangeano da teoria. Para isso, devemos introduzir a operação da diferença finita. Essa operação é o análogo discreto da operação de derivada. Definimos a diferença finita progressiva, como:

$$\tilde{\partial}_\mu \varphi(\tilde{n}) = \frac{\varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu}) - \varphi(\tilde{n})}{a} , \quad (2.193)$$

onde $\hat{\mu}$ é o vetor unitário que indica a direção μ . Com essa definição, podemos realizar as seguintes transformações:

$$\tilde{x} \rightarrow \tilde{n} \quad \text{e} \quad \partial_\mu \varphi(\tilde{x}) \rightarrow \tilde{\partial}_\mu \varphi(\tilde{n}) , \quad (2.194)$$

a fim de escrevermos o Lagrangiano do campo livre na rede d -dimensional:

$$\mathcal{L}_{rede}^0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \left[\frac{\varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu}) - \varphi(\tilde{n})}{a} \right]^2 + \frac{m^2}{2} \varphi^2(\tilde{n}) . \quad (2.195)$$

Em geral, trabalharemos também com a ação discreta. Nesse caso, além das transformações (2.194), devemos usar a versão discreta da integral:

$$\int d^d \tilde{x} \rightarrow \sum_{\tilde{n}} a^d . \quad (2.196)$$

Por fim, podemos escrever a ação da teoria livre na rede:

$$\mathcal{S}_{rede}^0 = \sum_{\tilde{n}} a^d \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \left[\frac{\varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu}) - \varphi(\tilde{n})}{a} \right]^2 + \frac{m^2}{2} \varphi^2(\tilde{n}) \right\} . \quad (2.197)$$

Da mesma forma, podemos escrever a Lagrangeana da teoria $\lambda\varphi^4$ na rede:

$$\mathcal{L}_{rede} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \left[\frac{\varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu}) - \varphi(\tilde{n})}{a} \right]^2 + \frac{m^2}{2} \varphi^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(\tilde{n}) , \quad (2.198)$$

bem como sua ação:

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} a^d \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \left[\frac{\varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu}) - \varphi(\tilde{n})}{a} \right]^2 + \frac{m^2}{2} \varphi^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(\tilde{n}) \right\} . \quad (2.199)$$

Podemos, também, escrever a ação como

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} a^d \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d [2\varphi^2(\tilde{n}) - \varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu})\varphi^2(\tilde{n})] + \frac{m^2}{2} \varphi^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(\tilde{n}) \right\} , \quad (2.200)$$

onde utilizamos condições periódicas de contorno, de tal forma que $\sum_{\tilde{n}} \varphi^2(\tilde{n} + a\hat{\mu}) = \sum_{\tilde{n}} \varphi^2(\tilde{n})$. Assim, podemos escrever a ação como:

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} a^d \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \varphi(\tilde{n} + a\hat{\mu})\varphi(\tilde{n}) + (1 + \frac{m^2}{2})\varphi^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(\tilde{n}) \right\} . \quad (2.201)$$

2.4 Conexão entre Mecânica Estatística e Teoria Quântica de Campos

Vamos fechar este capítulo revisando a conexão formal existente entre a ME e a TQC Euclidiana [32]. Essa analogia estabelecida entre duas diferentes teorias tem sido benéfica a ambas. Nesse sentido, a TQC tem feito profundas previsões a respeito do comportamento de sistemas mecânico estatísticos por meio de propriedades dos diagramas de Feynman. Por outro lado, muitos conceitos e métodos desenvolvidos no âmbito da ME, tem sido aplicado com sucesso a TQC. Esta dissertação explora essa idéia, a medida que, formulamos a TQC de maneira que possamos aplicar métodos computacionais originalmente desenvolvidos para simular sistemas estudados pela ME. Portanto, observamos que, o gerador funcional Euclideano, escrito como

$$Z[J] = \int D\varphi e^{-(S_E - \int d^4x J\varphi)} , \quad (2.202)$$

tem a mesma estrutura formal do somatório sobre as possíveis configurações da função de partição (2.1), com a fonte J desempenhando o papel de um campo externo na ME. e^{-S_E} corresponde ao fator de Boltzmann e a ação S corresponde a $\beta\mathcal{H}$. Assim, o uso da letra Z para o gerador funcional Euclideano foi proposital. O próprio método de calcular as funções de Green a partir de Z é uma mímica do artifício usado em ME para calcular as funções de correlação com respeito a variáveis termodinâmicas. Por exemplo, em uma teoria de campo escalar, o valor esperado do vácuo é o análogo da magnetização em um magneto.

A formulação da TQC na rede, que trabalha com um espaço-tempo discreto e finito, reduz os graus de liberdade da TQC no espaço tempo de Minkovisk (com, em princípio, infinitos graus de liberdade) a um número finito. Dessa forma convertemos todas as integrais da teoria em somatórios, condição indispensável para realização de cálculos numéricos. Com essa formulação, portanto, poderemos realizar simulações computacionais com o método de Monte Carlo, que é o assunto do próximo capítulo.

Capítulo 3

O Método de Monte Carlo

Toda técnica numérica em que a geração de números aleatórios desempenhe um papel fundamental é denominado de método de Monte Carlo (MC). Diferentes fenômenos físicos podem ser explorados usando esse método, inclusive problemas que são naturalmente discretizados, como, por exemplo, o movimento de átomos individuais, que pode ser analisado diretamente, bem como o movimento de partículas colóides em um fluido e o movimento Browniano. Esses sistemas são bem adaptados para simulações de MC, que faz uso de números aleatórios para realizar um passeio aleatório. O movimento de um fluido também pode ser estudado com essa técnica, mas, para isso, devemos discretizar o fluido em blocos. Esses blocos serão como partículas individuais maiores que as moléculas individuais da substância. Propriedades no equilíbrio de sistemas de partículas interagentes como modelos para materiais magnéticos, ligas metálicas, superfícies absorventes, polímeros, fluidos simples e complexos, entre outros, têm sido exaustivamente estudadas com esse método. Antes de discutirmos o método como ferramenta para estudar sistemas clássicos de muitas partículas, vamos usá-lo para calcular integrais em altas dimensões.

3.1 Integração por MC

Uma das aplicações mais simples e efetivas do método de MC são a resolução de integrais definidas intratáveis analiticamente. Vamos discutir dois métodos: da aceitação-rejeição e o da média com amostragem simples e com amostragem por importância. Por simplicidade vamos descrever esses métodos na resolução de integrais unidimensionais

$$I = \int_a^b dx f(x) , \quad (3.1)$$

sendo imediata a generalização para integrais multidimensionais.

3.1.1 Método da Aceitação-Rejeição

Esse é o método mais simples e direto de calcular uma integral com MC. Ele consiste em definir uma caixa que deve ter uma base entre os limites de integração a e b e uma altura entre y_1 e y_2 , com $(y_2 - y_1) > f(x)$, a ser definida. Em seguida sorteamos os números aleatórios x_i e y_i N vezes, com distribuição uniforme entre

$$a \leq x_i \leq b \quad y_1 \leq y_i \leq y_2 , \quad (3.2)$$

dessa forma, estamos na verdade sorteando pontos uniformemente na caixa. O próximo passo é contar o número de pontos, N_0 , que caem abaixo de $f(x)$ para cada valor de x . Uma estimativa para integral é dada pela fração de pontos que caem abaixo da curva vezes a área da caixa:

$$I = \frac{N_0}{N} (b - a) (y_2 - y_1) . \quad (3.3)$$

Essa estimativa se torna muito precisa quando $N \rightarrow \infty$.

3.1.2 Método da Média

Esse método é mais eficiente que o anterior e consiste de uma aplicação do Teorema do Valor Médio para Integrais. Tal teorema diz que se $f(x)$ for contínua sobre $[a, b]$, então existe um número c , com $a < c < b$, tal que

$$\int_a^b dx f(x) = (b - a) f(c) . \quad (3.4)$$

O intervalo $[a, b]$ pode ser subdividido em N subintervalos de tamanhos iguais. Dessa forma, podemos escrever a integral (3.1) como

$$I \approx (b - a) \langle f(x) \rangle \quad (3.5)$$

onde

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) . \quad (3.6)$$

Esse método consiste em gerar um conjunto de números aleatórios, $x_1, x_2, \dots, x_N$, uniformemente distribuídos no intervalo de interesse, $[a, b]$. Avaliar o valor da função a ser integrada em cada um desses pontos e finalmente calcular a média desses valores obtidos. Dessa forma, obtemos uma aproximação da integral definida e uma estimativa para o erro é

$$\text{erro} = (b - a) \frac{\langle f(x)^2 \rangle - \langle f(x) \rangle^2}{N} \quad (3.7)$$

onde

$$\langle f(x)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)^2 . \quad (3.8)$$

As duas técnicas discutidas até aqui são exemplos de MC com amostragem simples. Vemos claramente que a segunda necessita gerar menos números aleatórios que a primeira e é aí que está o ganho de performance. Agora, vamos ver uma implementação ainda mais eficiente do último método, o método da média com amostragem por importância.

Amostragem por importância é uma técnica de reduzir a variância que pode ser usada no método de MC. A idéia por trás dessa técnica é que certos valores de variáveis aleatórias contribuem mais para uma quantidade que está sendo estimada do que outros. Se esses valores “importantes” (que contribuem mais) forem enfatizados, isto é, sorteados com mais frequência, então a variância pode ser reduzida. Nessa abordagem multiplicamos e dividimos o integrando de (3.4) por uma função $p(x)$, tal que

$$\int_a^b dx p(x) = 1 \quad (3.9)$$

e ficamos com

$$I = \int_a^b dx \frac{f(x)}{p(x)} p(x) . \quad (3.10)$$

Fazendo uma mudança de variável de x para y com $dx p(x) = dy$ e $y(x) = \int dx p(x)$, escrevemos

$$I = \int_a^b dy \frac{f(x)}{p(x)} . \quad (3.11)$$

Escolhendo $p(x)$ como uma função que se comporta como $f(x)$, o integrando será aproximadamente constante. Na verdade o que estamos fazendo é gerar uma distribuição de acordo com $p(x)$. Ou, em outras palavras, quando $p(x) \approx f(x)$ vamos gerar mais pontos onde $f(x)$ é grande, gastando menos tempo gerando pontos onde $f(x)$ é pequeno.

3.2 Monte Carlo no Equilíbrio

Nesta subseção fazemos uma rápida revisão das idéias gerais por trás da simulação de MC no equilíbrio termodinâmico. Neste contexto, as três idéias cruciais são a amostragem por importância, o balanceamento detalhado e a taxa de aceitação. Em seguida vamos introduzir alguns dos principais algoritmos utilizados no estudo dos fenômenos críticos. Depois faremos uma revisão de tratamento de erro e finalmente uma rápida introdução aos principais métodos para geração de números aleatórios.

3.2.1 Amostragem por Importância

Usualmente, o objetivo de uma simulação de MC de um sistema térmico é o cálculo de valores esperados $\langle Q \rangle$ de um observável Q . Sabemos que esse cálculo é feito através da média sobre todos os estados μ do sistema, pesando cada um desses com a probabilidade de Boltzmann

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} . \quad (3.12)$$

Como já comentamos, em uma simulação computacional sempre trabalhamos com um sistema de tamanho reduzido. Então, para simularmos sistemas grandes, o melhor que podemos fazer é trabalhar com um subconjunto de estados, o que introduz uma inacurácia no cálculo. A amostragem por importância é fundamental nesse tipo de simulação, pois trabalha no sentido de reduzir essa inacurácia. Assim, devemos conhecer quais estados contribuem mais para soma na equação (3.12), a fim de selecionarmos esses estados para simulação e descartarmos os demais. Essa é a idéia essencial por trás da simulação de MC no equilíbrio termodinâmico, e a técnica de selecionar os estados mais importantes de um grande conjunto é chamado de amostragem por importância.

Sabemos que os estados em sistemas termodinâmicos não são experimentados com igual probabilidade, mas de acordo com a distribuição de probabilidade de Boltzmann, equação (2.2). Assim, podemos fazer uma mímica desse efeito na simulação tornando as estimativas mais acuradas para os valores esperados dos observáveis de interesse. Por essa razão, pegamos um conjunto de estados do sistema em que a probabilidade de um particular estado aparecer seja proporcional ao peso de Boltzmann. Essa é a forma mais comum da amostragem por importância, e a maioria dos algoritmos dessa dissertação usa essa idéia. Podemos nos perguntar como executar esse procedimento de selecionar estados, cada um aparecendo com a probabilidade de Boltzmann. Essa não é uma questão simples e a solução do problema é fazer uso de um processo Markoviano.

Processos Markovianos

Processo Markoviano é um mecanismo para geração de um conjunto de estados. Assim dado um sistema em um estado μ , ele gera um novo estado do sistema ν . A probabilidade de gerar um estado ν a partir de μ é chamada probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$, e deve satisfazer duas condições para um processo Markoviano: não deve variar com o tempo; deve depender apenas de propriedades dos estados em questão μ e ν , e não de estados que o sistema esteve no passado. Isso significa que a probabilidade de um processo Markoviano gerar o estado ν a partir de um estado μ é a mesma toda vez que é dado o estado μ , a despeito do que tenha acontecido anteriormente. A probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$ também deve satisfazer o vínculo

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 , \quad (3.13)$$

notando que a probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \mu)$, do novo estado gerado ser o antigo, não é necessariamente zero. Numa simulação de MC usamos um processo Markoviano repetidamente para gerar uma cadeia de Markov de estados, $P(\mu \rightarrow \nu \rightarrow \lambda)$. Para realizar isso, vamos impor mais duas condições em nossa cadeia de Markov: a condições da ergodicidade e do balanço detalhado.

Condição Ergótica

Para gerarmos estados com a correta probabilidade de Boltzmann, devemos impor ao nosso processo Markoviano a condição ergótica, que é a probabilidade de alcançar qualquer estado do sistema a partir de um outro, bastando para isso esperarmos o bastante. Sabemos que cada estado do sistema aparece com alguma probabilidade, diferente de zero, na distribuição de Boltzmann. Supondo que um estado ν seja inacessível a partir de outro μ , a probabilidade de achar ν na cadeia de Markov de estados será zero, violando o nosso requerimento inicial. Com isso, fica evidente que o não-requerimento dessa condição implica um uso incorreto da probabilidade de Boltzmann.

O Balanço Detalhado

A outra condição que o processo Markoviano deve satisfazer é a do balanceamento detalhado. Essa assegura que a distribuição de probabilidade alcançada pelo sistema no equilíbrio seja a de Boltzmann. Sabemos que no equilíbrio é crucial que a taxa de transição para um dado estado, e desse para um outro estado qualquer, seja igual. Matematicamente isso pode ser expresso por

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) . \quad (3.14)$$

Fazendo uso do vínculo (3.13), podemos escrever a equação de Chapman-Kolmogorov:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) . \quad (3.15)$$

Nesse caso, dizemos que p_{μ} é a probabilidade de equilíbrio termodinâmico. Infelizmente, satisfazer essa equação não é suficiente para garantir que a distribuição de probabilidade de um estado qualquer do sistema tenda para p_{μ} . Isso está bem demonstrado e discutido em [37]. Aqui, vamos nos deter em mostrar a solução desse problema, que é a satisfação da condição adicional

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) . \quad (3.16)$$

Essa é a condição do balanço detalhado. E diz que, em média, a probabilidade do sistema ir do estado μ para ν é a mesma de ir do estado ν para μ . Do ponto de vista simulacional, a condição do balanceamento detalhado é o análogo computacional da simetria de reversão temporal, em que as mecânicas clássica e quântica são baseadas. Se desejarmos que a distribuição no equilíbrio seja a de Boltzmann, então podemos escolher p_{μ} como sendo a probabilidade de transição, que, nesse caso, deve satisfazer

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} . \quad (3.17)$$

Agora estamos em condição de pensar em algoritmos para efetuar simulações no equilíbrio termodinâmico. Mas, antes disso, vamos estudar uma maneira de avaliar a eficiência dos algoritmos usados em uma simulação.

3.2.2 Taxa de Aceitação

Podemos quebrar a probabilidade de transição em duas partes:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu) . \quad (3.18)$$

A quantidade $g(\mu \rightarrow \nu)$ é a probabilidade de seleção, que é a probabilidade do algoritmo gerar um novo estado ν a partir de um estado μ , e $A(\mu \rightarrow \nu)$ é a taxa de aceitação (conhecida também como probabilidade de aceitação). Essa última diz que o algoritmo gasta uma fração de tempo $A(\mu \rightarrow \nu)$ para trocar o estado do sistema μ para o estado ν . O restante do tempo o sistema permanece no estado μ . Podemos escolher a taxa de aceitação para ser um número entre zero e um; escolher zero equivale a escolher o maior valor possível $P(\mu \rightarrow \mu) = 1$, e significa que o

sistema nunca deixará o estado μ . Temos a liberdade da escolha da probabilidade de seleção $g(\mu \rightarrow \nu)$ desde que se mantenha o vínculo (3.17)

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu)} . \quad (3.19)$$

A taxa $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu)$ pode ser qualquer valor escolhido entre zero e ∞ , o que significa que tanto $g(\mu \rightarrow \nu)$ quanto $g(\nu \rightarrow \mu)$ podem assumir qualquer valor desejado. Nosso outro vínculo, a regra da soma (3.13), é ainda satisfeita. Se a taxa de aceitação for baixa, então, o algoritmo passará a maior parte do tempo num mesmo estado. O problema é encontrar um algoritmo que se mova rapidamente sobre o espaço de fase, passando por diferentes estados. A solução para esse problema é fazer a taxa de aceitação tão perto quanto possível da unidade. Uma possível implementação, passa por notar que a equação (3.19) fixa apenas a taxa $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu)$ para transição de dois estados quaisquer. Com isso, podemos multiplicar $A(\mu \rightarrow \nu)$ e $A(\nu \rightarrow \mu)$ por um mesmo fator, e a equação ainda será obedecida. O único vínculo é que ambas as taxas devem permanecer entre zero e um. Na prática, tomamos a maior das duas como 1 e a outra tomamos o valor necessário para que as duas satisfaçam (3.17). Isso garante que a taxa de aceitação seja tão grande quanto possível e ainda satisfaça as condições relevantes. Dessa forma, em uma das direções o movimento será sempre aceito.

3.3 Algoritmos

O objetivo dessa seção é descrever alguns algoritmos que, através de processos Markovianos, atualizem as configurações do sistema, em particular de spins ou dos campos. Todos os algoritmos aqui discutidos geram uma nova configuração do sistema a partir de uma dada configuração, satisfazendo a ergodicidade e o balanço detalhado. Em geral, podemos dividir os algoritmos em duas classes: algoritmos locais e globais.

Os algoritmos de atualização local consideram um subconjunto de sítios - usualmente um único sítio - e atualiza esse ponto de acordo com uma certa prescrição. Logo, diferentes subconjuntos ou subredes são consideradas antes que todo o espaço seja processado. Já nos algoritmos de atualização global todos os sítios são atualizados de uma só vez de acordo com uma prescrição, não dependendo de qualquer subrede ou subconjunto. Esses algoritmos normalmente introduzem uma grande autocorrelação. Há também formas híbridas de algoritmos, sendo muitas vezes vantajoso misturar algoritmos locais com globais.

3.3.1 Algoritmos Locais

Metropolis

O algoritmo de Metropolis foi introduzido em [38], e é o método de MC mais usado e famoso. Sua popularidade se deve à simplicidade e geral aplicabilidade do método. Gerando configurações a partir de uma distribuição p_μ em um intervalo $[a, b]$, esse algoritmo pode ser implementado localmente ou globalmente seguindo os passos:

1. Preparamos um estado inicial do sistema $\mu_0 = \mu$, com a restrição de que satisfaça $p_\mu > 0$.
2. Utilizando μ , sorteamos um novo estado ν a partir de alguma distribuição $g(\mu \rightarrow \nu)$ com a restrição de que satisfaça $g(\mu \rightarrow \nu) = g(\nu \rightarrow \mu)$.
3. Calculamos a razão $A = p_\nu/p_\mu$.
4. Se $A > 1$ (ou equivalentemente $p_\nu > p_\mu$) aceitamos o estado ν , fazemos $\nu = \mu$ e voltamos ao passo 2. Caso contrário sorteamos uma variável aleatória ζ entre $[a, b]$. Se $\zeta < A$ aceitamos ν , fazemos $\nu = \mu$ e voltamos ao passo 2; se $\zeta > A$ descartamos ν e voltamos ao passo 2.

Esse algoritmo é ergótico na medida em que qualquer estado pode ser alcançado devido à aleatoriedade do processo de escolha de novos estados. Isso gera uma cadeia de Markov μ . Vamos demonstrar que ele satisfaz a condição do balanço detalhado (3.16).

A probabilidade de transição de um estado μ para ν é dada por (3.18), onde

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, \frac{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)}{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)} \right] . \quad (3.20)$$

onde , como já visto, $g(\mu \rightarrow \nu)$ é a probabilidade de seleção e $A(\mu \rightarrow \nu)$ é a taxa de aceitação. Vamos mostrar que a equação do balanço detalhado é satisfeita considerando três casos para um par de estados quaisquer (μ, ν) .

1. Quando $p_\mu g(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)$:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, \frac{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)}{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)} \right] = \min[1, 1] = 1 \quad (3.21)$$

$$A(\nu \rightarrow \mu) = \min \left[1, \frac{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)}{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)} \right] = \min[1, 1] = 1 \quad (3.22)$$

Assim ficamos com

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) \quad \text{e} \quad P(\nu \rightarrow \mu) = g(\nu \rightarrow \mu) \quad , \quad (3.23)$$

que satisfaz a condição do balanço detalhado

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\mu g(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu g(\nu \rightarrow \mu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad . \quad (3.24)$$

2. Quando $p_\mu g(\mu \rightarrow \nu) > p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)$:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, \frac{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)}{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)} \right] = \frac{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)}{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)} \quad (3.25)$$

$$A(\nu \rightarrow \mu) = \min \left[1, \frac{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)}{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)} \right] = 1 \quad . \quad (3.26)$$

Assim ficamos com

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \frac{p_\nu}{p_\mu} g(\nu \rightarrow \mu) \quad \text{e} \quad P(\nu \rightarrow \mu) = g(\nu \rightarrow \mu) \quad , \quad (3.27)$$

que satisfaz a condição do balanço detalhado

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\mu \frac{p_\nu}{p_\mu} g(\nu \rightarrow \mu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad . \quad (3.28)$$

3. Quando $p_\mu g(\mu \rightarrow \nu) < p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)$:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, \frac{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)}{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)} \right] = 1 \quad (3.29)$$

$$A(\nu \rightarrow \mu) = \min \left[1, \frac{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)}{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)} \right] = \frac{p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)}{p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)} \quad . \quad (3.30)$$

Assim ficamos com

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) \quad \text{e} \quad P(\nu \rightarrow \mu) = \frac{p_\mu}{p_\nu} g(\mu \rightarrow \nu) \quad , \quad (3.31)$$

que também satisfaz a condição do balanço detalhado

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\mu g(\mu \rightarrow \nu) = p_\mu \frac{p_\nu}{p_\mu} P(\nu \rightarrow \mu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad . \quad (3.32)$$

Essa demonstração vale tanto para a implementação local quanto para global do algoritmo Metropolis. A diferença entre a implementação local e global do algoritmo é que no primeiro caso, na equação (3.20), $p_\nu g(\nu \rightarrow \mu)$ não é muito diferente de $p_\mu g(\mu \rightarrow \nu)$. Enquanto que em uma implementação global a diferença entre esses termos é muito grande . Nesse caso a probabilidade de aceitação é muito pequena, sendo seu uso quase sempre proibitivo. Normalmente, a forma global do algoritmo Metropolis aparece combinado com algum outro algoritmo (tanto global quanto local) que gera configurações tais que mantenham a taxa de aceitação razoavelmente grande.

Banho Térmico

O Banho Térmico é um variante do algoritmo Metropolis, exclusivamente local. Foi primeiro proposto por Creutz [39] no contexto das teorias de calibre na rede. Esse método é muito usado em circunstâncias onde a abordagem tipo Metropolis apresenta taxa de aceitação baixa.

Consideramos uma dada configuração μ , composta de N variáveis aleatórias $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N$, genericamente representada por μ_x . O objetivo é sortear cada variável μ_x , uma por uma, mantendo todas as outras fixas. Isso é conseguido por sortear a partir das probabilidades condicionais $p_{\mu-\mu_x}$, onde μ_x é o grau de liberdade mudado e $\mu - \mu_x$ o resto do sistema que é mantido fixo. Essas variáveis sorteadas, estão em contato, sendo essa a origem do nome desse algoritmo. Notamos que a aplicabilidade desse método é restrita a sistemas em que é possível sortear a partir das probabilidades condicionais $p_{\mu-\mu_1}, p_{\mu-\mu_2}, \dots, p_{\mu-\mu_N}$. Vamos então, apresentar o algoritmo do Banho Térmico que gera uma nova configuração ν a partir de uma configuração conhecida μ :

- Sorteamos μ_1 a partir da probabilidade condicional $p_{\mu-\mu_1}$. Esse procedimento gera uma nova configuração $\mu^{(1)}$. Vamos sempre representar essas configurações intermediárias com um índice superior entre parênteses.
- Sorteamos μ_2 a partir da probabilidade condicional $p_{\mu^{(1)}-\mu_2}$. Esse procedimento gera uma nova configuração $\mu^{(2)}$.
- ⋮
- Sorteamos μ_N a partir da probabilidade condicional $p_{\mu^{(N-1)}-\mu_N}$. Esse procedimento completa a varredura em todas as variáveis aleatórias, gerando a configuração desejada ν .

Esse algoritmo satisfaz a condição ergótica, pois claramente podemos ver que podemos ir de um estado a qualquer outro em N passos ou menos. Se escolhermos as probabilidades condicionais como sendo a probabilidade de Boltzmann é possível demonstrar a satisfação do balanço detalhado. Para tanto consideramos a probabilidade $p_{\mu-\mu_1}$ de fazer uma transição de um estado μ para um estado intermediário $\mu^{(1)}$. Notamos que a probabilidade $p_{\mu^{(1)}-\mu_1}$ de ir de volta de $\mu^{(1)}$ para μ não depende da condição inicial, apenas da final, diferente do algoritmo Metropolis. Então usando (2.2), temos

$$\frac{P(\mu \rightarrow \mu^{(1)})}{P(\mu^{(1)} \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\mu^{(1)}-\mu_1}}{p_{\mu-\mu_1}} = \frac{e^{-\beta E_{\mu^{(1)}}}}{Z} \frac{Z}{e^{-\beta E_{\mu}}} = e^{-\beta(E_{\mu^{(1)}} - E_{\mu})}, \quad (3.33)$$

exatamente como o balanço detalhado demanda (3.17).

3.3.2 Algoritmos Globais

Existem algoritmos que podem ser implementados de forma global, como vimos, caso do Metropolis. Outros são genuinamente globais, isto é, não podem ser implementados de forma local. Nesta subseção, vamos nos concentrar em uma classe de algoritmos pertencente a essa segunda espécie. Esses são chamados de algoritmo de *cluster* e estão entre os mais eficientes para simulação de modelos de spin. Os algoritmos de *cluster* exploram a idéia introduzida por Fortuin e Kasteleyn [40, 41] de mapear um modelo, originalmente o de Potts, em um modelo de percolação. Dessa forma, a função de partição do sistema pode ser reescrita permitindo formular algoritmos globais que são capazes de atualizar conjuntos (ou *clusters*) de spin de uma só vez. Essa é uma maneira de reduzir o fenômeno do *critical slowing down*, que veremos adiante.

Swendsen-Wang

O primeiro uso do mapeamento de Fortuin-Kasteleyn (FK) em uma simulação de MC foi feito por Swendsen e Wang em [42]. Nesse método, dividimos a rede em vários conjuntos de spins ou campos que estejam no mesmo estado. Esses conjuntos são chamados de *clusters*. E esse método, inaugural da classe dos chamados algoritmos de *cluster*, é conhecido como *multi-clusters* ou Swendsen-Wang. Antes de mostrarmos o algoritmo esquematicamente, devemos mencionar o funcionamento de dois procedimentos nele empregado. O primeiro diz respeito ao

mapeamento de FK, onde cada interação entre os spins ou campos em uma rede são transformados em ligações em uma outra rede. Isso é feito por examinar cada par de vértices vizinhos, onde encontramos os spins ou campos. Se esses vértices vizinhos não estiverem no mesmo estado, nada é feito. Por outro lado, se estiverem no mesmo estado, uma ligação é introduzida entre os vizinhos com uma probabilidade P_{ad} . Essa probabilidade de adicionar uma ligação varia de modelo para modelo e deve ser escolhida para satisfazer o balanço detalhado. O segundo procedimento, vem da necessidade de atualização coletiva de sítos. Mas, antes realizar essa atualização, precisamos antes identificar todos os *clusters* na rede de ligações. Vamos apenas citar dois métodos populares para identificação de *clusters*: o *backtrack* [43] e o Hoshen-Kopelman [44]. O algoritmo de Swendsen-Wang pode ser implementado, seguindo os passos:

1. Realizamos o primeiro procedimento mencionado acima. Isso resultara em uma rede de ligações.
2. Depois devemos usar algum método para identificar os clusters existentes na rede de ligações.
3. Todos os *clusters* são atualizados para novos estados escolhidos aleatoriamente.
4. Por fim, apagamos as ligações para obtermos o novo estado ou configuração do sistema.

A probabilidade de adicionar ligações P_{ad} entre sítios, em geral, depende da temperatura, o que afeta o resultado da distribuição dos *clusters*. Assim, a temperaturas muito altas, os *clusters* tendem a ser pequenos, pois P_{ad} se torna muito pequena. A temperaturas muito baixas os *clusters* se alteram pouco, então o sistema tende a oscilar entre as mesmas estruturas. Na região perto do ponto crítico, ricas estruturas de *clusters* são produzidas e cada nova configuração será muito diferente da anterior. Essa é a razão pela qual o *critical slowing down* é reduzido. Esse algoritmo também satisfaz a condição ergótica. Só que o fato de atingirmos qualquer configuração do sistema através da atualização dos spins ou campos, aqui é conseguido por meio da construção dos *clusters* (ou o passo 1). Todos os sítios são considerados para a formação dos clusters, o que garante que qualquer estado pode ser atingido a partir de uma configuração específica. O algoritmo satisfaz a condição do balanço detalhado por construção. Como mencionamos, P_{ad} é escolhido para satisfazer tal condição.

Wolff

Outro algoritmo de *cluster*, inspirado no método de Swendsen-Wang, que também utiliza o mapeamento de FK foi proposto por Wolff em [45]. Na verdade, esse método é uma resposta ao problema de otimização observado no método de SW. Nesse, observamos que muitos esforços são empregados em procedimentos que envolvem *clusters* pequenos, que não contribuem para o *critical slowing down*. Então, a alternativa de Wolff é gerar um único *cluster* a cada passo, sendo o algoritmo também conhecido como *single-cluster*. O único *cluster* é construído de acordo com as mesmas regras do método de SW. Isso é, apenas sítios vizinhos no mesmo estado podem ser ligados com uma probabilidade P_{ad} , também escolhida para satisfazer o balanço detalhado. Uma das principais diferenças entre os algoritmos de SW e Wolff, é que no primeiro todos os sítios eram visitados e considerados para o procedimento de ligação da rede. Ao contrario, no algoritmo de Wolff selecionamos um sítio aleatoriamente em torno do qual o *cluster* será construído. Portanto, nem todos os sítios da rede são considerados para ligação a cada passo. Vamos então, apresentar o algoritmo de Wolff:

1. Escolhemos um sítio da rede aleatoriamente. Esse é chamado sítio semente.
2. Procuramos sítios com mesmo estado e vizinhos ao sítio semente. Esses são ligados com uma probabilidade P_{ad} .
3. Para cada sítio ligado no passo anterior, repetimos o passo 2 até que não possamos fazer mais ligações.
4. Atualizamos o *cluster* para novos estados escolhidos aleatoriamente.
5. Por fim, apagamos as ligações para obtermos o novo estado ou configuração do sistema.

Esse algoritmo, da mesma forma como o SW, satisfaz a condição do balanço detalhado por construção. O critério da ergodicidade também é satisfeito, pois qualquer sítio da rede pode ser escolhido como sítio semente. Isso garante que a partir de um dado estado, qualquer estado pode ser atingido em um tempo finito.

3.3.3 Técnica da Repesagem

O desenvolvimento dessa técnica foi estimulado pelo fato de experimentarmos uma grande limitação na resolução da simulação de MC na região crítica. Nessa região e em suas vizinhanças é necessário tomar uma quantidade muito maior de medidas para caracterizar precisamente as quantidades médias. Uma resposta a esse problema foi dada pela repesagem. Essa é uma técnica complementar, no sentido que pode ser feita depois de completa a simulação por algum algoritmo discutido anteriormente. A idéia fundamental dessa abordagem é utilizar uma função distribuição, num ensemble apropriado, para prever o comportamento do sistema em uma temperatura em que não foi simulado. Aqui, vamos abordar duas encarnações dessa técnica, ambas devido a Ferrenberg e Swendsen: o método do Histograma [46], que utiliza uma única simulação em uma particular temperatura para calcular observáveis em outras temperaturas; e o método do Multihistograma [47], que permite interpolar várias simulações diferentes cada qual em diferentes temperaturas.

Histograma

Nos métodos de atualização descritos anteriormente geramos configurações de acordo com a distribuição de Boltzmann, ou seja, amostrando por importância os estados. Isso significa que a frequência com que cada estado aparece obedecerá à distribuição de Boltzmann. Em geral, a cada nível de energia estão associados vários estados do sistema. Quanto maior o número de estados compatíveis com uma dada energia, maior a chance dessa energia aparecer. Portanto, o número de vezes que uma dada energia é encontrada será proporcional ao produto do fator de Boltzmann pela degenerescência daquele nível de energia, expresso como $\Omega(E)$. Nesse caso, podemos escrever a probabilidade de encontrar o sistema com energia E a uma dada temperatura β como

$$p_\beta(E) = \frac{\Omega(E)e^{(-\beta E)}}{Z(\beta)} \quad \left(Z(\beta) \equiv \sum_E \Omega(E)e^{-\beta E} \right) . \quad (3.34)$$

Se construirmos um histograma ($H_\beta(E)$) enquanto fazemos uma simulação de MC a uma temperatura fixa β , teremos

$$H_\beta(E) \propto \Omega(E)e^{-\beta E} . \quad (3.35)$$

$H_\beta(E)/N$, onde N é o número de medidas feitas, fornecerá uma estimativa para $p_\beta(E)$. O próximo passo é “repesar” o histograma em uma outra temperatura β_0 , em que temos a probabilidade

$$p_{\beta_0}(E) = \frac{\Omega(E)e^{-\beta_0 E}}{\sum_{E'} \Omega(E')e^{-\beta_0 E'}} . \quad (3.36)$$

A idéia central desse método consiste em separar o efeito de temperatura (que é um parâmetro da simulação) dos efeitos entrópicos, característicos do sistema e independentes da temperatura. Isso é conseguido por inverter a relação (3.35), que vamos aplicar em (3.36)

$$p_{\beta_0}(E) = \frac{H_\beta(E)e^{\beta E}e^{-\beta_0 E}}{\sum_{E'} H_\beta(E')e^{\beta E'}e^{-\beta_0 E'}} = \frac{H_\beta(E)e^{(\beta-\beta_0)E}}{\sum_{E'} H_\beta(E')e^{(\beta-\beta_0)E'}} \quad (3.37)$$

Conhecendo $p_{\beta_0}(E)$, podemos calcular valores esperados em uma temperatura β_0 com

$$\langle Q(E) \rangle = \sum_E Q(E) p_{\beta_0}(E) . \quad (3.38)$$

Multihistograma

O método do Multihistograma [47] é uma técnica muito mais complicada que a do Histograma. No método anterior, a idéia central era usar (3.34) e (3.36) para separar a densidade de estados, independentes da temperatura, dos termos dependentes da temperatura:

$$\Omega(E) = \frac{H_\beta(E)}{N} Z(\beta) e^{\beta E} . \quad (3.39)$$

A versão dessa equação no método do Multihistograma tem um índice referente ao número n de temperaturas (β_i 's) simuladas:

$$\Omega_i(E) = \frac{H_{\beta_i}(E)}{N_i} Z(\beta_i) e^{\beta_i E} , \quad (3.40)$$

onde $i = 1, 2, \dots, n$. N_i é o número de medidas realizadas para cada temperatura. Aqui, é central notar que os $\Omega_i(E)$'s fornecem uma estimativa para a função $\Omega(E)$. Um problema a ser resolvido é achar a melhor estimativa para a densidade de estados. Podemos usar o seguinte método: tem-se x_i medidas ($i = 1, 2, \dots, n$) de uma quantidade x , cada qual com algum erro σ_i associado, então a melhor estimativa de x é

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i / \sigma_i^2}{\sum_{j=1}^n 1 / \sigma_j^2} . \quad (3.41)$$

Não vamos provar essa equação, existindo para isso a referência [47]. Na mesma referência, também podemos encontrar os detalhes das contas que leva à equação da densidade de estados. Aqui, sem mostrar os detalhes, vamos escrever duas importantes relações:

$$\Omega(E) = \frac{\overline{H_{\beta_i}(E)}}{N_i} Z(\beta_i) e^{\beta_i E} \quad \text{ou} \quad \overline{H_{\beta_i}(E)} = \Omega(E) Z^{-1}(\beta_i) e^{-\beta_i E} , \quad (3.42)$$

onde $\Omega(E)$ é a densidade de estados exata e $\overline{H_{\beta_i}(E)}$ é o histograma médio (ou “ideal”, não o medido) em uma temperatura β_i . E a variância é

$$\sigma_i^2 = \frac{\Omega^2(E)}{H_{\beta_i}(E)} . \quad (3.43)$$

Utilizando (3.41), (3.43), (3.42) e (3.40) podemos calcular a melhor estimativa para a densidade de estados:

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \frac{\sum_{i=1}^n \Omega_i(E) / \sigma_i^2}{\sum_{j=1}^n 1 / \sigma_j^2} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n \Omega_i(E) \overline{H_{\beta_i}(E)}}{\sum_{j=1}^n \overline{H_{\beta_j}(E)}} = \frac{\sum_{i=1}^n H_{\beta_i}(E)}{\sum_{j=1}^n N_j Z^{-1}(\beta_j) e^{-\beta_j E}} . \end{aligned} \quad (3.44)$$

Devemos notar que estamos diante de uma equação inhomogênea, uma vez que temos $\Omega(E)$ em ambos os lados da equação, pois

$$Z(\beta_k) = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta_k E} . \quad (3.45)$$

Implementar o método do Multihistograma envolve resolver iterativamente a equação (3.45), que pode ser escrita como

$$Z(\beta_k) = \sum_E \frac{\sum_{i=1}^n H_{\beta_i}(E)}{\sum_{j=1}^n N_j Z^{-1}(\beta_j) e^{-(\beta_j - \beta_k)E}} . \quad (3.46)$$

De posse desse valor podemos calcular a função de partição em qualquer outra temperatura β_0 através de uma simples generalização:

$$Z(\beta_0) = \sum_E \frac{\sum_{i=1}^n H_{\beta_i}(E)}{\sum_{j=1}^n N_j Z^{-1}(\beta_j) e^{-(\beta_j - \beta_0)E}} . \quad (3.47)$$

Agora, podemos calcular p_{β_0} e outra vez calculamos os valores esperados em uma temperatura β_0 com (3.38).

3.4 Monte Carlo usando a Termostatística Generalizada de Tsallis

O desenvolvimento dos métodos de MC para criar configurações baseadas na distribuição TGT se justifica por duas razões. Há um interesse em explorar médias termodinâmicas sobre distribuições termostatísticas não extensivas para sistemas complexos; e também há interesse no desenvolvimento de otimizações e algoritmos com amostragem

acentuada para cálculos de médias termodinâmicas de BG usando passos de MC que utilizam a distribuição de Tsallis. Esse segundo foi bem abordado no artigo de Andricioaei e Straub em [48]. Nosso foco, porém, será no uso da TGT aplicada a modelos de spin.

Por ser um assunto que tem um desenvolvimento relativamente recente (apenas uma década), vamos comentar em uma perspectiva histórica o desenvolvimento das simulações de MC que utilizam a TGT. A primeira simulação de MC que utilizava a TGT foi realizada por Penna, no contexto do recozimento simulado generalizado para o problema do “marinheiro bêbado” [49]. Nesse trabalho, o algoritmo Metropolis teve a taxa de aceitação modificada para incluir a dependência no parâmetro q . A taxa de aceitação e a definição do valor médio usados na época foram

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, [1 - (1 - q)\beta(\varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu)]^{\frac{1}{1-q}} \right] \quad (3.48)$$

e

$$\langle Q \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W p_i^q Q_i \quad (3.49)$$

respectivamente. Essa taxa de aceitação não satisfaz a condição do balanço detalhado, que é imprescindível em uma simulação de MC. Dois anos mais tarde, Andricioaei e Straub [48] propuseram uma nova taxa de aceitação obtida da condição do balanço detalhado.

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[1, \left[\frac{1 - (1 - q)\beta\varepsilon_\nu}{1 - (1 - q)\beta\varepsilon_\mu} \right]^{\frac{q}{1-q}} \right] \quad (3.50)$$

Outra vez, as médias no equilíbrio para um observável são calculadas como (2.49).

Notamos que esses algoritmos não utilizam as mesmas definições que utilizamos na subseção 2.1.2. Isso porque a versão da TGT apresentada na subseção 2.1.2 é, na verdade, uma reformulação [50] do trabalho original [12]. Essa reformulação foi o produto do estudo e análise da questão fundamental de como definir e obter as expressões corretas das médias termodinâmicas. Essa controvérsia apareceu quando se começou a desenvolver as técnicas, consagradas na TBG, para TGT. Podemos mencionar o grupo de renormalização do espaço real, aproximações de campo médio e os métodos de MC como algumas dessas técnicas. Os trabalhos pioneiros de simulação de MC usando TGT mencionados acima são anteriores a reformulação citada, [50]. Todos os métodos e algoritmos de MC posteriores a [50] utilizam as definições para TGT tal como apresentamos na subseção 2.1.2.

Em um trabalho de 1999, Lima, Martins e Penna [51] compararam a técnica do *Broad Histogram* para modelos de spin (o caso estudado foi o modelo de Ising em duas dimensões) com as tradicionais técnicas de simulação multi-spin (em particular o algoritmo de Metropolis), mas com duas taxas de aceitação diferentes (3.48) e (3.50). No trabalho, os autores concluem que há uma grande concordância entre os resultados provenientes do *Broad Histogram* com as simulações de MC que utilizam as taxas de aceitação (3.50). Essa conclusão aponta na direção que a condição do balanço detalhado deve ser respeitado e portanto, devemos usar a probabilidade de aceitação de Andricioaei-Straub. O algoritmo do Broad Histogram, que determina o número de microestados, usando uma equação de balanço entre os níveis de energia dos primeiros vizinhos, não pode ser aplicado a sistemas com interação de longo alcance [51]. Para suplantarmos a restrição na aplicabilidade desse método, em 2000 Salazar e Toral [52, 53] desenvolveram dois métodos. O primeiro, conhecido como método do Histograma por *histogram by overlapping windows*, é baseado no cálculo numérico da densidade de estados a uma dada energia. O segundo é o algoritmo de Metropolis acoplado a um procedimento de integração numérica, vamos chamar esse método de Metropolis-Salazar-Toral. Nesta dissertação mostraremos em detalhes o segundo método, que tem a vantagem de ser muito familiar ao algoritmo de Metropolis-Andricioaei-Straub [48] com um procedimento de integração padrão do cálculo numérico adicional.

3.4.1 Metropolis-Salazar-Toral

Como já mencionado, o principal problema em uma simulação de MC que utiliza a TGT é que não podemos resolver a equação da probabilidade (2.47) de forma trivial para $q \neq 1$. No caso $q = 1$, recaímos na TBG, equação (2.2), tendo a nossa disposição todos os algoritmos discutidos na seção (3.3.1). O método proposto em [52] trabalha em dois passos que discutiremos a seguir.

Metropolis-Andricioaei-Straub

Esse algoritmo utiliza a probabilidade *escort* (2.48) e a definição da média termodinâmica (2.44) como arcabouço teórico. Dessa forma, quando calculamos a taxa de aceitação a uma temperatura *escort* ou fictícia β' , notamos que os fatores de normalização $Z_q(\beta')$ se cancelam e ficamos com

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} 0 & \text{para } 1 - (1 - q)\beta'\varepsilon_\nu < 0 \\ \min \left[1, \left[\frac{1 - (1 - q)\beta'\varepsilon_\nu}{1 - (1 - q)\beta'\varepsilon_\mu} \right]^{\frac{q}{1 - q}} \right] & \text{do contrário} \end{cases} . \quad (3.51)$$

Essa taxa de aceitação satisfaz a condição do balanço detalhado como função do parâmetro β' . Mas se não fizermos a transformação $\beta' \rightarrow \beta$, não há como determinar a temperatura real da simulação β .

Procedimento de Integração

Para realizar a transformação $\beta' \rightarrow \beta$, ou de forma equivalente $T' \rightarrow T$, vamos usar a equação (2.50):

$$T = \frac{T' - (1 - q)U_q(T')}{1 + (1 - q)S_q(T')} . \quad (3.52)$$

Onde a energia interna $U_q(T')$ é obtida na simulação de MC, realizada a uma temperatura fixa T' . A entropia $S_q(T')$ pode ser obtida da relação termodinâmica [54]:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q}{\partial U_q} . \quad (3.53)$$

Combinando (3.53) e (3.52), ficamos com

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_q(T')}{\partial U_q(T')} = \frac{1 + (1 - q)S_q(T')}{T' - (1 - q)U_q(T')} , \quad (3.54)$$

que pode ser integrado entre dois pontos arbitrários A e B :

$$\int_{S_q(A)}^{S_q(B)} \frac{1}{1 + (1 - q)S_q(T')} dS_q(T') = \int_{U_q(A)}^{U_q(B)} \frac{1}{T' - (1 - q)U_q(T')} dU_q(T') . \quad (3.55)$$

Aqui vemos claramente que a integral do lado direito não pode ser resolvida analiticamente. Portanto resolvendo o lado esquerdo

$$\frac{1}{1 - q} \ln [1 + (1 - q)S_q(T')] \Big|_{T'=A}^{T'=B} = \int_{U_q(A)}^{U_q(B)} \frac{1}{T' - (1 - q)U_q(T')} dU_q(T') , \quad (3.56)$$

obtemos:

$$S_q(B) = \frac{[1 + (1 - q)S_q(A)] e^{(1 - q) \int_{U_q(A)}^{U_q(B)} \frac{1}{T' - (1 - q)U_q(T')} dU_q(T')} - 1}{1 - q} . \quad (3.57)$$

Portanto, para escrevermos um valor para entropia generalizada no ponto B , temos que saber o valor da entropia no ponto de integração inicial A , determinando $S_q(A)$. Esse valor $S_q(A)$, depende do sistema que estamos considerando, que em geral tem seus casos limites conhecidos, $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$. A principal desvantagem desse método é que precisamos simular o sistema em vários valores de T' para que possamos resolver a integral, que permite transformar $T' \rightarrow T$, com acurácia. Contudo, pode-se usar técnicas de extrapolação, como a repesagem com Multihistogramas, que auxiliam a reduzir o número de pontos simulados.

3.5 Erros

Nessa seção vamos discutir os erros em uma simulação de MC, que assim como erros experimentais, são divididos em duas classes: erros estatísticos e sistemáticos. Erros estatísticos são provenientes dos processos aleatórios envolvidos no sistema simulado e, portanto, inerentes ao método de MC. Esses são erros de medida para medida como por exemplo flutuações térmicas do sistema. Podemos sempre estimar erros estatísticos tomando muitas medidas da quantidade de interesse e calculando a distribuição desses valores. Por outro lado, erros sistemáticos ocorrem devido a procedimentos usados para realizar a medida, eles são mais sutis e afetam toda a simulação.

3.5.1 Erros Estatísticos

Podemos distinguir em dois tipos as quantidades calculadas a partir dos ensambles gerados em uma simulação de MC: quantidades primárias e secundárias. A primeira delas pode ser calculada através da média aritmética de uma quantidade obtida diretamente da simulação. Assim uma quantidade Q_i calculada N vezes tem

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i \quad (3.58)$$

como estimativa para o observável $\langle Q \rangle$. Dizemos que $\langle Q \rangle$ é um observável primário por ser estimado a partir de uma quantidade que é obtida da simulação de forma direta, no caso Q_i . Nesse caso o erro será

$$\text{erro} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} . \quad (3.59)$$

Para estimar a variância σ a partir dos observáveis, consideramos o desvio $\delta Q_i = Q_i - \bar{Q}$. Concluímos diretamente que $\overline{\delta Q_i} = 0$ e $\langle \delta Q \rangle = 0$. Então, estamos interessados no desvio quadrático médio

$$\overline{\delta Q^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\delta Q_i)^2 = \overline{Q^2} - (\bar{Q})^2 . \quad (3.60)$$

O valor esperado dessa quantidade é

$$\langle \overline{\delta Q^2} \rangle = \langle \overline{Q^2} - (\bar{Q})^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \langle Q^2 \rangle - \frac{1}{N^2} \langle Q \rangle^2 , \quad (3.61)$$

que está relacionado com $\sigma = \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}{N}}$ por

$$\langle \overline{\delta Q^2} \rangle = \left(1 - \frac{1}{N} \right) \sigma^2 . \quad (3.62)$$

Combinando (3.59) com (3.62), temos

$$\text{erro} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \langle \overline{\delta Q^2} \rangle} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (\delta Q_i)^2} = \sqrt{\frac{1}{N-1} [\overline{Q^2} - (\bar{Q})^2]} . \quad (3.63)$$

Essa expressão assume que nossas amostras Q_i 's sejam estatisticamente independentes ou descorrelacionadas, que em geral, não é verdade. Esse erro é sempre subestimado, o que motiva chamá-lo de erro ingênuo.

Como veremos no próximo capítulo, existe um cálculo que permite estimar com quantos passos de MC uma medida se descorrelaciona, chamado de cálculo da função de autocorrelação. Na verdade, essa função em geral irá assintoticamente a zero, sendo possível estimar através de um gráfico dessa função *vs* passos de MC, um valor de descorrelacionamento. Esse valor, em geral, não é tal que a função seja exatamente zero e, além disso, nem sempre é possível trabalhar com quantidades descorrelacionadas. Como, por exemplo, em simulações de sistemas na região crítica, a função de autocorrelação leva muito tempo para ir a zero sendo necessário fazer cálculos com quantidades correlacionadas nessa região. Vamos apresentar o método binning para calcular quantidades primárias correlacionadas.

Binning

Nesse método, também conhecido como *blocking*, subdividimos as N medidas de uma quantidade Q em n grupos ou blocos. Calculamos a média em cada um desses blocos com (3.58), calculando seu erro através de (3.63). Em outras palavras, para cada bloco calculamos

$$\overline{Q'} = \frac{1}{N_{bin}} \sum_{i=1}^{N_{bin}} Q'_i \quad (3.64)$$

$$\text{erro}' = \sqrt{\frac{1}{N_{bin} - 1} \left(\overline{Q'^2} - (\overline{Q'})^2 \right)}, \quad (3.65)$$

onde os Q'_i 's são os valores das medidas pertencentes a um único bloco e $N_{bin} = N/n$. Podemos implementar esse algoritmo da seguinte forma:

1. Calculamos o erro ingênuo com (3.63).
2. Dividimos as medidas em blocos de tamanho $n = 2$. Calculamos a média (3.64) $(\overline{Q'})$ e o erro (3.65) (erro') em cada bloco. Obviamente ficamos com $N_{bin} = N/2$.
3. O próximo passo é comparar o erro obtido no passo 1 com o erro obtido pelo passo 2. Se os erros forem grosseiramente iguais, as configurações já estarão suficientemente descorrelacionadas. Nesse caso, o erro ingênuo é aceitável e vamos ao próximo passo. Caso contrário, devemos guardar o erro' como erro e voltar ao passo 2, mas, dessa vez incrementando 2 ao n anterior. Por exemplo, processar o passo 2 (cálculo de $\overline{Q'}$) com $n = 4$ ($N_{bin} = N/4$).
4. Para reduzir de fato a correlação, tomamos as médias dos N_{bin} blocos como valores das medidas. Assim, fica caracterizado que esse é um método de reamostragem simples.

Em poucas palavras, o que fazemos com esse algoritmo é procurar um valor de N_{bin} para o qual o erro não seja muito diferente do erro com $2N_{bin}$. Quando encontramos esse N_{bin} estimamos o observável e seu erro através de (3.64) e (3.65) respectivamente. Algumas pessoas costumam aplicar o método binning para quantidades secundárias, mas nesse caso o método é muito menos rigoroso e seu uso não é aconselhável.

Quantidades secundárias são funções de uma quantidade primária. Vamos representar quantidades secundárias por $f(\langle Q \rangle)$, onde $\langle Q \rangle$ é uma quantidade primária. Abaixo vamos apresentar dois métodos para calcular quantidades secundárias: *Bootstrap* e *Jackknife*.

Bootstrap

Esse é um método de reamostragem aleatória. Dado um conjunto de medidas, não necessariamente independentes, de um observável primário, podemos implementar esse método com:

1. Dos N valores da lista de medidas do observável, selecionamos n valores aleatoriamente, sendo permitido repetições dos valores da lista original.
2. Repetimos o passo 1 m vezes, guardando cada uma das m reamostragens.
3. Calculando o valor médio da quantidade primária para cada uma das m seqüências de valores da quantidade primária, como n medidas cada, através de

$$(\overline{Q})_\alpha = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i \right)_\alpha \quad (3.66)$$

onde $\alpha = 1, 2, \dots, m$ está indexando as seqüências reamostradas.

4. Calculamos as quantidades secundárias através das quantidades primárias por

$$\overline{f(\overline{Q})} = \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^m f[(\overline{Q})_{\alpha}] \quad (3.67)$$

e o erro com

$$\text{erro} = \sqrt{\frac{1}{m-1} \left[f[(\overline{Q})]^2 - (\overline{f(\overline{Q})})^2 \right]} . \quad (3.68)$$

Jackknife

Nesse método, diferentemente do *Bootstrap*, precisamos trabalhar com um conjunto de medidas descorrelacionadas. Podemos implementar o método seguindo os passos:

1. Calculamos a partir das N quantidades primárias, N quantidades médias $\overline{Q}$ da seguinte forma. Removemos a primeira medida do conjunto original e calculamos o $(\overline{Q})_1$ a partir desse subconjunto. Devolvemos a primeira medida ao subconjunto e removemos a segunda, outra vez calculando $(\overline{Q})_2$ desse novo subconjunto. Esse procedimento deve ser repetido até a N -ésima medida. Ficamos com N médias $(\overline{Q})_1, (\overline{Q})_2, \dots, (\overline{Q})_N$. Podemos expressar essa reamostragem sequencial como

$$(\overline{Q})_{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq \alpha}}^N Q_i ,$$

onde $\alpha = 1, 2, \dots, N$.

2. De posse dessas quantidades médias podemos estimar a quantidade secundária

$$\overline{f(\overline{Q})} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N f[(\overline{Q})_{\alpha}] , \quad (3.69)$$

bem como seu erro

$$\text{erro} = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \left[f[(\overline{Q})_{\alpha}] - \overline{f(\overline{Q})} \right]^2} . \quad (3.70)$$

Ambos os métodos *Jackknife* e *Bootstrap* fornecem boas estimativas de erro para grandes conjuntos de dados. Assim, se pudéssemos ter uma quantidade infinita de dados teríamos a estimativa exata.

Como mencionado, muitas vezes e em especial nesta dissertação, é necessário trabalhar com medidas correlacionadas. Nesse caso, não é possível fazer uma estimativa razoável do erro usando o método *Jackknife*. Mas ainda temos a opção de usar esse método combinado com um procedimento que descorrelacione as medidas. Uma alternativa muito popular é um algoritmo híbrido que utiliza o método *Jackknife* acoplado com o *Binning*.

Jackknife-binning

Aqui, começamos com um procedimento de reamostragem simples e depois fazemos uma reamostragem sequencial. Podemos implementar esse método da seguinte forma:

1. Subdividimos as N medidas em $N_{bin} = N/n$ blocos, onde n é o tamanho dos blocos.
2. Calculamos n médias com a definição:

$$(\overline{Q})_{\alpha} = \frac{1}{N-n} \left(\sum_{i=1}^{n\alpha-n} Q_i + \sum_{i=n\alpha+1}^N Q_i \right) , \quad (3.71)$$

com $\alpha = 1, 2, \dots, N_{bin}$. Essa equação representa a média aritmética de $N_{bin} - 1$ blocos. O bloco que não entra na média é indexado com o rótulo α . Assim, $(\overline{Q})_1$ é a média aritmética de todos os blocos menos o primeiro.

3. De posse dessas quantidades médias podemos estimar a quantidade secundária, bem como seu erro com

$$\overline{f(\overline{Q})} = \frac{1}{N_{bin}} \sum_{\alpha=1}^{N_{bin}} f[(\overline{Q})_{\alpha}] \quad (3.72)$$

e

$$\text{erro} = \sqrt{\frac{N_{bin} - 1}{N_{bin}} \sum_{\alpha=1}^{N_{bin}} [f[(\overline{Q})_{\alpha}] - \overline{f(\overline{Q})}]^2}. \quad (3.73)$$

4. Repetimos os procedimentos acima para diferentes valores de n , como no método *Binning*. Isto é, iniciando com um determinado valor de n , calculamos uma estimativa para medida e seu erro. Depois, incrementamos n , e outra vez calculamos as estimativas para medida e erro. Repetimos esse procedimento até que os erros referentes a sucessivos n 's sejam grosseiramente iguais.

Vale a pena notar que os métodos *Bootstrap*, *Jackknife* e *Jackknife-binning* também podem ser usados para calcular quantidades primárias. Bastando para isso trocarmos

$$f[(\overline{Q})_{\alpha}] \rightarrow (\overline{Q})_{\alpha} \quad \text{e} \quad \overline{f(\overline{Q})} \rightarrow \overline{Q} \quad (3.74)$$

nas formulas referentes a estimativa da quantidade Q e seu respectivo erro.

3.5.2 Erros Sistemáticos

Como em um experimento, esses erros são bem mais difíceis de serem calibrados do que erros estatísticos, pois não aparecem nas flutuações das medidas de uma quantidade. Assim, não há um método geral para estimar erros sistemáticos. Cada fonte de erro deve ser considerada e entendida caso a caso, para que se desenvolva uma estratégia para o estimar ou exaurir. Como exemplo de fonte de erros sistemáticos em uma simulação de MC no equilíbrio temos o fato de esperarmos um tempo finito para que o sistema atinja o equilíbrio. No próximo capítulo vamos mostrar um método de resolver esse problema, que utiliza o cálculo do tempo de estabilização.

3.6 Geradores de Números Aleatórios

Números aleatórios desempenham um papel central em uma simulação de MC. Métodos de produção desses números são amplamente conhecidos e usados para catalogar enormes seqüências desses números. Podemos pensar que não seja interessante dedicar uma seção desta dissertação a discutir a produção de tais números. Porém, em uma simulação computacional de MC nos deparamos com um problema de ordem prática. A velocidade de produção de números aleatórios através de todos os métodos conhecidos é extremamente baixa se comparada a velocidades típicas de cálculos em máquinas digitais. Isso inviabiliza esses métodos como parte constituinte do cálculo. O uso de tabelas, por sua vez, também não é uma alternativa viável, pois a velocidade de acesso a dispositivos de armazenamento de dados em um computador é muito lenta se comparado a velocidades dos cálculos, além da quantidade de números necessária para simulação também ser proibitiva do ponto de vista da armazenagem dos dados. A solução do problema é produzir números aleatórios diretamente do computador usando *software*. Sendo algoritmos sempre determinísticos, as seqüências de números aleatórios são na verdade pseudo-aleatórios. A qualidade das seqüências geradas deterministicamente é limitada e é primordial entender tal limitação. Essa talvez seja uma boa razão para a existência dessa seção. A partir desse ponto sempre que nos referirmos a números aleatórios estamos na verdade falando de números pseudo-aleatórios.

Nas simulações realizadas nessa dissertação sempre utilizamos geradores que são uniformemente distribuídos entre 0 e 1. Isso significa que cada número entre 0 e 1 tem a mesma probabilidade de ocorrer, mas na prática

apenas um conjunto discreto de valores são possíveis. Esse efeito se deve a representação de números em um computador ser feita por uma quantidade finita de bits. Aqui, pelo nosso interesse, vamos focar nossa exposição em geradores com distribuição uniforme, além de podermos construir geradores com distribuição não uniforme a partir desses. Um gerador de números aleatórios considerado detentor de “boas propriedades” deve possuir algumas características [55], tais como:

1. Boa distribuição: diz respeito a qualidade da aleatoriedade da seqüência. Existem vários testes a que o algoritmo deve ser submetido antes que a seqüência gerada seja considerada possuidora de uma boa distribuição.
2. Período grande: o período é o número de números da seqüência a partir do qual ela começa a se repetir. Em geral, um período de repetição grande da seqüência é uma propriedade desejável.
3. Portabilidade: o algoritmo do gerador de números aleatórios deve poder ser escrito em diferentes linguagens de programação de médio e alto nível. As seqüências geradas por programas escritos em diferentes linguagens deve ser a mesma e ainda em diferentes máquinas, desde que seja de mesma arquitetura.
4. Eficiência: aqui quer dizer o tempo para geração dos números. Lembrando que, em geral, as chamadas as sub-rotinas dos geradores leva mais tempo que a própria geração dos números.

Vamos descrever de forma sucinta três dos principais métodos para geração de números aleatórios. São eles o Congruencial Linear, Registradores Deslocados e o Espaçamento de Fibonacci.

3.6.1 Congruencial Linear

Esse é um método simples e popular primeiramente introduzido por Lehmer em [56], definido pela relação de recorrência:

$$x_{i+1} = (ax_i + b) \bmod m \quad (i \geq 0) , \quad (3.75)$$

onde a ($0 \leq a < m$), b ($0 \leq b < m$) e m ($m > 0$) são números inteiros constantes e $\bmod$ é a operação modulo¹. x_0 ($0 \leq x_0 < m$) é chamado de semente e x_{i+1} é um inteiro entre 1 e m . O maior número aleatório que pode ser produzido por essa equação é $m - 1$ e a seqüência de números mais longa contém m elementos, todos diferentes entre si. Assim, devemos tomar m tão grande quanto possível, por exemplo 2^{32} e 2^{64} para arquiteturas de 32 e 64 bits respectivamente. Normalmente essas escolhas para m não geram seqüências “muito aleatórias” e as escolhas de a e b não são independentes de m para que a série tenha “boas propriedades”. Aqui não entraremos em detalhes sobre a escolha das constantes a , b e m que dependem da arquitetura e linguagem de programação usadas. Detalhes técnicos a esse respeito podem ser apreendidos em [57]. Devemos ainda mencionar que esses geradores são divididos em três classes:

1. $m = 2^N$, $c > 0$
2. $m = 2^N$, $c = 0$
3. $m = \text{primo}$, $c = 0$.

A segunda classe, conhecida como Gerador Congruencial Linear (GCL) Multiplicativo, é especialmente interessante por ser rápido e de fácil implementação, mas apresenta três problemas indesejáveis. O primeiro é com relação ao período muito curto da seqüência gerada. Além disso, muitos testes observaram uma estrutura de rede e grande correlação entre os números aleatórios da seqüência, o que faz esse método não ser considerado muito bom. Em muitos casos, porém, o uso desses geradores é aceitável e certamente são de fácil implementação.

Um exemplo de GCL Multiplicativo é o RAN0 do *Numerical Recipes* (NR) [58]. Para o GCL existe um procedimento que visa melhorar a correlação entre os números da seqüência. Conhecido como algoritmo de embaralhamento, ele mistura os números provenientes da seqüência entre si. Um exemplo dessa abordagem é devido a Maclaren e Marsaglia [59] e uma outra ainda mais conhecida e usada é de Bays e Durham [60]. A rotina RAN1 do NR é a RAN0 com um algoritmo de embaralhamento de Bays-Durham. Outro algoritmo GCL Multiplicativo famoso é o RANECU que tem um período de aproximadamente $10^{18} \approx 2^{60}$ [61]. Muito mais informações sobre GCL e teste de performance podem ser achados em [62].

¹A operação *modulo*, em computação, acha o resto da divisão de um número pelo outro. Assim, dado dois números a e b , a modulo b (abreviado como $a \bmod b$) é o resto da divisão de a por b

3.6.2 Registradores deslocados

O método do Registrador Deslocado (RD) ou Tausworthe [63] foi introduzido para eliminar alguns problemas com correlação do método congruencial. No método RD, uma tabela de números aleatórios é produzida e, então, um novo número aleatório é gerado combinando dois diferentes números dessa tabela. Uma forma simples desses geradores é

$$x_i = (x_{i-q} + x_{i-p}) \bmod 2 . \quad (3.76)$$

A soma combinada com a condição $\bmod 2$ é precisamente a operação XOR ou OR-exclusivo, que pode ser executado de forma muito rápida em computadores. A melhor escolha para os pares de números “mágicos” (p, q) são primos que satisfazem a condição

$$p^2 + q^2 + 1 = \text{primo} . \quad (3.77)$$

Exemplos de pares que satisfazem essa condição são:

1. (98, 27)
2. (250, 103)
3. (1279, 216)
4. (1279, 418)
5. (9689, 84)

A implementação *R250* que utiliza (250, 103), foi amplamente testada e utilizada, sendo esse par o mais popular para essa classe de algoritmos. Uma discussão mais profunda sobre a escolha dos pares “mágicos” está em [64]. O uso desse método perdeu bastante força conforme foi sendo explorado ao longo da década de 90, sendo hoje referido como um gerador de seqüências “pobres”.

3.6.3 Espaçamento de Fibonacci

A principal vantagem desse método é a geração de seqüências muito longas de números aleatórios. A única restrição a esse geradores é que seus fundamentos teóricos não são sólidos, sendo possível que algumas correlações não tenham sido descobertas. Esses geradores podem ser descritos por

$$x_i = (x_{i-q} \star x_{i-p}) \bmod m \quad (3.78)$$

onde q ($r \leq i$), p ($0 < p < q$) e m são constantes e $\star$ pode ser $+$ (mais), $-$ (menos), $\times$ (multiplicação) ou $+$ com $\bmod 2$ (OR-exclusivo). Esse último caso é precisamente o método dos RD e nesse sentido ele é um caso particular dessa classe mais geral, Espaçamento de Fibonacci (EF).

O nome EF é proveniente da similaridade de sua definição com a fórmula de recorrência da série de Fibonacci. A teoria e propriedades dos geradores EF aditivos e subtrativos são essencialmente as mesmas. Se $m = 2^N$, o período máximo desse gerador será $2^{N-1}(2^q - 1)$. O único requerimento para obter o máximo período é que pelo menos uma das sementes seja ímpar. Na década de 90 muito foi apreendido sobre esse tipo de geradores, sendo atualmente considerados os melhores. Eles em geral são mais rápidos que os demais e tem período muito longo. A dificuldade desses geradores está em sua inicialização, onde devemos usar um outro gerador para iniciar a seqüência.

Uma implementação muito conhecida é o algoritmo RAN3 do NR [58]. Em simulações de MC de grande escala um dos algoritmos mais usado e testado é o RANMAR de Marsaglia, Zaman e Tsang [65]. Esses dois primeiros autores propuseram a idéia de incluir um bit transportador c em (2.78):

$$x_i = (x_{i-q} \pm x_{i-p} \pm c) \bmod m . \quad (3.79)$$

Para $m = 2^{24}$ a escolha é $q = 24$ e $p = 10$, resultando em um período de aproximadamente 10^{171} . Esse algoritmo conhecido como RCARRY [66], posteriormente melhorado e corrigido por James [55], foi bastante estudado, sendo inclusive demonstrada sua equivalência com os GCL. Esse, por se tratar de um GCL Multiplicativo

“disfarçado” foi rapidamente encontrado uma estrutura de hiperplano na distribuição gerada. Em 1994, Luscher propõe um método, baseado em técnicas de sistemas dinâmicos, para quebrar esses padrões. O novo algoritmo, RANLUX [67] propõe a eliminação de números da sequência gerada por RCARRY em intervalos $(p - 24)$ maiores que o tempo de correlação do sistema. Assim, quanto maior for p , maior será o intervalo entre os números descartados, conseqüentemente melhor será a qualidade da nova sequência gerada. Esse gerador de alta qualidade trabalha com níveis de satisfação (ou *luxury level* em inglês, por isso o nome RANLUX), que pode ser:

- nível 0, $p = 24$, igual ao RCARRY;
- nível 1, $p = 48$, ainda não passa em todos os testes de aleatoriedade;
- nível 2, $p = 97$, ainda contém correlações;
- nível 3, $p = 223$, passa em todos os testes e possui excelentes propriedades estatísticas;
- nível 4, $p = 389$, grau máximo de aleatoriedade.

Podemos provar que não tornamos a distribuição mais aleatória por aumentar p para valores superiores ao do nível 4 de satisfação. Atualmente, o RANLUX é considerado o melhor gerador de números aleatórios para simulação de MC em grande escala.

3.6.4 Geradores Combinados

Os Geradores Combinados (GC) tem dividido opiniões a seu respeito. De um lado temos como argumento a seu favor seu bom desempenho nos testes de aleatoriedade de seqüências. Por outro lado, seu uso é desencorajado por ser em geral de duas a três vezes mais lento que os demais métodos, além de não haver garantia de boas propriedades estatísticas, pois a teoria dos GC ainda é obscura. Um gerador combinado particularmente bem conhecido é o “gerador de mil dólares”, o RAN2 do NR [58]. A primeira pessoa que conseguir elaborar um teste estatístico onde o RAN2 não passe ganhará mil dólares americanos. Até o termino desta dissertação o RAN2 passou em todos os testes a que foi submetido. Mas, apesar de suas aparentes boas propriedades, o RAN2 é o gerador menos usado do NR, pois é extremamente lento, é oito vezes mais lento que o RAN3, por exemplo.

Capítulo 4

Simulação Computacional

Neste capítulo vamos apresentar os resultados das nossas simulações de modelos de spin e a teoria de campo escalar $\lambda\varphi^4$ na rede. Em ambas as simulações as variáveis em questão, tanto spins quanto os campos, ocupam sítios de uma rede. Por essa razão, vamos discutir brevemente as redes usadas em nossa simulação. Depois, vamos mostrar a simulação de modelos de spin, em especial o modelo de Ising. Nesse, utilizaremos os algoritmos de Metropolis 3.3.1 e Metropolis-Salazar-Toral 3.4.1. Em seguida, vamos mostrar a simulação referente a teoria de campo escalar $\lambda\varphi^4$. Tal simulação objetiva o estudo do comportamento da constante de acoplamento da teoria.

4.1 Rede

Nesta dissertação, todos os modelos físicos simulados são modelos na rede. Entendemos tais modelos como definidos não no espaço-tempo contínuo, mas na rede, que nada mais é que um grafo¹ ou uma aproximação n -complexa do espaço-tempo ou simplesmente do espaço. Como já mencionamos no capítulo anterior, alguns sistemas são naturalmente discretizados, que é o caso das redes cristalinas, muito estudadas em física da matéria condensada. Também é o caso dos modelos de spin em mecânica estatística, aqui estudados, em que é natural supor um espaçamento fixo para os spins da rede. Por outro lado, não é o caso da simulação em teoria de campo. Pois, nesse caso, a discretização do espaço-tempo em uma rede é um artifício que leva a uma formulação em que as singularidades da teoria são removidas. Ou em outras palavras, a formulação na rede é uma forma natural de regularizar a teoria de campo. Uma vez que, trabalhamos com sistemas de tamanho finito, uma importante questão a ser tratada são as extremidades ou contornos da rede. Podemos usar vários tipos de condições de contorno para rede, tais como: condições de contorno periódica, periódica elíptica, aperiódica, anti-simétrica, livre, de campo médio e hipersférica. Aqui vamos usar condições de contorno periódicas, que pode ser implementada dobrando uma rede d -dimensional em um toro $(d+1)$ -dimensional. Para ilustrar essa situação, podemos imaginar uma rede regular bidimensional ($d = 2$) na figura 4.1 sedo dobrada em um toro tridimensional ($d = 3$) na figura 4.2

4.1.1 Redes Complexas – Rede de Mundo Pequeno

Recentemente observamos um crescente esforço no sentido de aplicar redes complexas na descrição de uma vasta gama de sistemas naturais e sociais. Uma revisão dos recentes avanços no campo das redes complexas, focando principalmente na mecânica estatística (topológica e dinâmica) pode ser encontrado em [8]. Aqui vamos nos deter a discutir um tipo específico de rede complexa, a rede de mundo pequeno.

A hipótese do mundo pequeno, em poucas palavras, descreve o fato de que muitas redes, a despeito de seu tamanho, apresentam um caminho relativamente pequeno entre dois nós. À distância entre dois nós é definida com o número de arestas ao longo do menor caminho que os conectam. A manifestação mais popular do fenômeno mundo pequeno é o termo “seis graus de separação” cunhado por Milgram (1967) [9]. Antes de definirmos a rede

¹Em matemática e ciência da computação entende-se por grafo um conjunto de pontos (chamados vértices) conectados por linhas (chamadas de arestas).

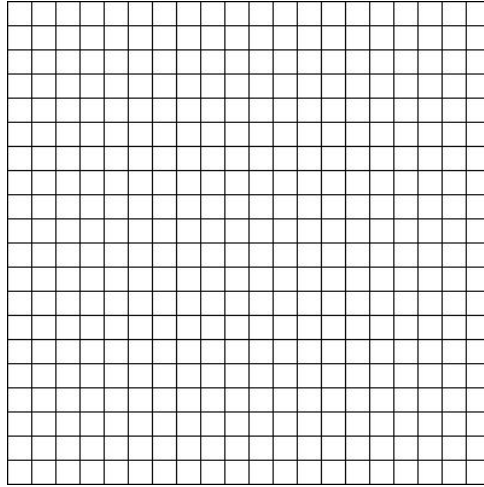


Figura 4.1: Rede regular de duas dimensões.

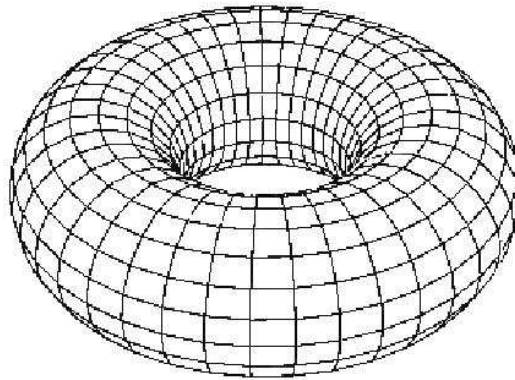


Figura 4.2: Toro em três dimensões.

de mundo pequeno é necessário definir dois conceitos: comprimento do caminho, $\mathcal{L}$ e coeficiente de clusterização, $\mathcal{C}$ [68]. O primeiro deles é uma quantidade não local e seu entendimento é bem intuitivo, representando a média aritmética de todas as menores distâncias entre dois vértices. Já o segundo tem suas raízes na sociologia, onde é bem conhecido o surgimento de confrarias ou panelinhas em redes sociais. O coeficiente de clusterização é uma quantidade mais local e é definido como segue: se c_i é o número de vizinhos de um vértice i da rede, então há a priori $c_i(c_i - 1)/2$ possíveis arestas entre esses vizinhos. Denotando c_i como a fração dessas arestas presentes em um grafo, c é a média dos c_i 's sobre todos os vértices.

Watts e Strogatz propuseram um modelo [69] para uma rede de mundo pequeno, em que uma fração p de arestas entre primeiros vizinhos são aleatoriamente trocadas por novas arestas conectadas a vértices escolhidos de forma também aleatória, criando atalhos de longo alcance. Esse modelo de um só parâmetro interpola dois casos limites, o de redes regulares ($p = 0$) e grafos aleatórios ($p = 1$). No regime mundo pequeno a vizinhança local é preservada (como para a rede regular) e ao mesmo tempo algumas propriedades globais de grafos aleatórios são mantidas. Um variante do modelo de Watts-Strogatz (WS) muito estudado foi proposto por Newman e Watts [70, 71]. Nesse modelo, as arestas são adicionadas entre pares de vértices escolhidos aleatoriamente, nenhuma aresta da rede regular é removida. Muitas vezes é mais fácil de analisar esse modelo do que o WS original, pois

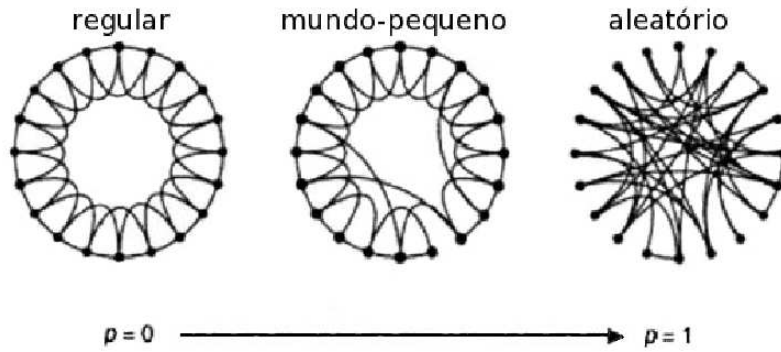


Figura 4.3: grafos.

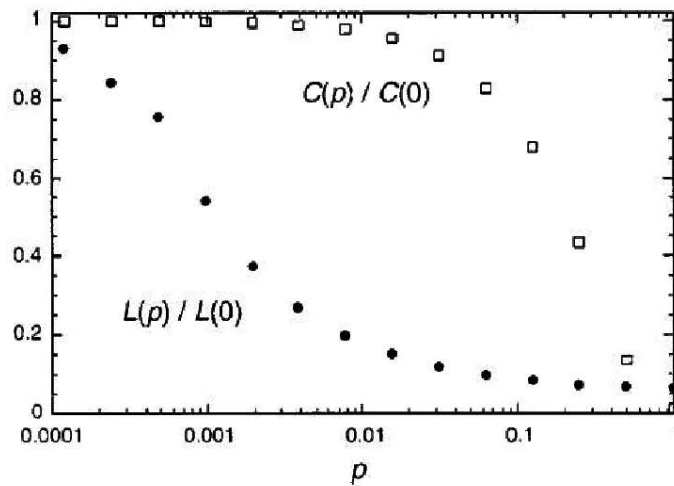


Figura 4.4: custerização e comprimento do passo.

não permite a formação de *clusters* isolados, que é possível no modelo original. No limite de p suficientemente pequeno e número de vértices grande o modelo de Newman-Watts (NW) é equivalente ao modelo de WS.

4.2 Simulando Modelos de Spin

Sistemas de spins são um dos assuntos mais estudados em física, não só pelo interesse intrínseco que suscita, mas também pelo fato de vários problemas poderem ser mapeados neles. Simulações de MC são muito usadas, uma vez que poucos sistemas podem ser resolvidos analiticamente.

4.2.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising é um modelo para um magneto, em que dipolos ou spins s_i são colocados em sítios i de uma rede. Nesse modelo, cada spin pode assumir apenas dois valores $+1$ ou -1 . A figura 4.5 é uma representação pictórica do modelo de Ising em duas dimensões, os valores dos spins são representados através das setas para cima e para baixo. Contando com uma rede de N sítios, então o sistema terá 2^N estados, e a energia de um estado

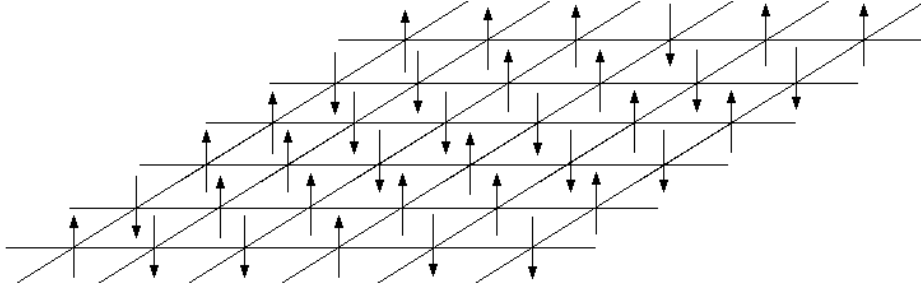


Figura 4.5: Representação pictórica do modelo de Ising em duas dimensões.

particular é dada pela seguinte Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (4.1)$$

onde $s_i = \pm 1$, J é a energia de interação entre spins, $\langle i j \rangle$ denota soma sobre os primeiros vizinhos da rede e H é o campo magnético externo. Aqui vamos implementar o algoritmo de Metropolis com atualização local. Como estamos interessados no estudo da transição de fase de segunda ordem do modelo em duas e três dimensões, vamos trabalhar o sistema com o campo magnético externo zero, $H = 0$. Então podemos implementar o algoritmo de Metropolis seguindo a receita:

1. Escolher um estado inicial;
2. escolher um sítio i ;
3. calcular a diferença de energia ΔE que resulta da troca do spin no sítio i ;
4. gerar um número aleatório r entre $0 < r < 1$;
5. aceitar a troca do spin se $r < e^{-\frac{\Delta E}{K_B T}}$;
6. ir ao próximo sítio e volta ao passo (3).

Uma questão importante nesse tipo de simulação é o chamado tempo de equilíbrio ou termalização do sistema. Esse corresponde ao período de tempo que devemos “esperar” para que o sistema atinja o equilíbrio na temperatura desejada. Uma forma imediata de medir o ponto a partir do qual o sistema já esteja em equilíbrio é plotar alguma quantidade de interesse, como a magnetização por spin, contra o tempo de MC (passos de MC por sítios da rede ou *sweeps*). Esse cálculo deve ser feito a uma temperatura fixa T , e com várias sementes para o gerador de números aleatórios. O uso de diferentes sementes equivale a iniciar o sistema com diferentes configurações. Aqui a utilização de várias configurações é imprescindível, pois em mecânica estatística o sistema pode permanecer temporariamente em um mínimo local da energia. Estamos interessados, porém, no mínimo global de energia, que é a região do espaço de fase que o sistema alcança o equilíbrio termodinâmico. Assim, por exemplo duas configurações iniciais podem evoluir atingindo o equilíbrio em tempos diferentes, pois uma delas pode se deter mais tempo em um mínimo local que a outra. Essa situação é ilustrada na figura 4.6, em que calculamos a magnetização por tempo de MC a temperatura $T = 2.0$ e volume da rede $L = 100^2$. Através do gráfico fica claro que os dois sistemas se estabilizam em torno de 10000 *sweeps*. O ponto fraco dessa técnica é a possibilidade de selecionarmos estados iniciais que evoluam de forma bem parecida, negligenciando estados que se detenham em regiões metaestáveis por um tempo maior. Para contornar esse problema é preciso realizar alguns cálculos com diferentes condições iniciais. Nessa dissertação utilizamos tipicamente 6 condições iniciais diferentes para cada sistema simulado.

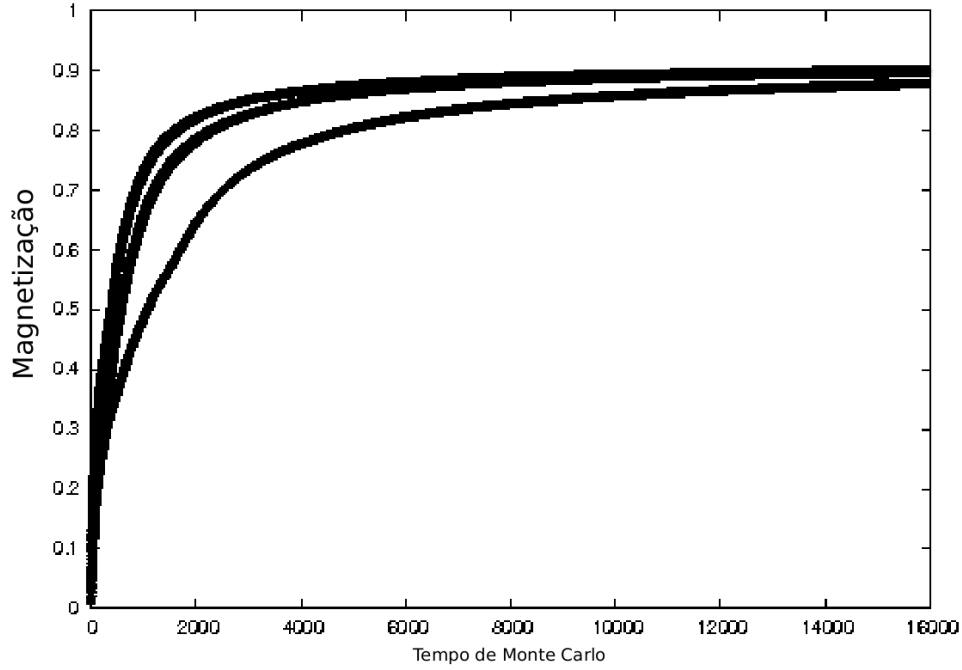


Figura 4.6: Magnetização vs tempo de MC, para três diferentes sementes do gerador de números aleatórios.

Para calcular quantidades médias como a magnetização e energia, devemos saber quantas médias devemos calcular para obter uma boa estimativa para seus valores esperados. Nesse caso, devemos calcular o chamado tempo de correlação τ , que é a medida em tempo de MC que uma configuração leva para se decorrelacionar de uma outra configuração. Existem várias formas de calcular o tempo de correlação, sendo a mais direta e usual através da função de autocorrelação, revisada na seção 2.1.3. A autocorrelação da magnetização é dada pela equação (2.53):

$$C_m(t', t) \equiv \langle m(t')m(t) \rangle - \langle m(t') \rangle^2 . \quad (4.2)$$

onde $m(t)$ é o valor instantâneo da magnetização no tempo t e $\langle m \rangle$ é o valor médio da magnetização. A autocorrelação nos dá a correlação (no caso da magnetização) entre dois diferentes tempos. O valor de $C_m(t', t)$ será não nulo se as flutuações médias forem correlacionadas e zero se não forem. Em um caso ideal, devemos calcular $C_m(t', t)$ sobre um tempo infinito, o que obviamente é impraticável do ponto de vista simulacional. Então, o melhor que podemos fazer é somar sobre todas as medidas m de que dispomos. A figura 4.7 mostra a função de autocorrelação da magnetização do MI em uma rede 100^2 a temperatura $T = 2.4$. Como podemos observar, a autocorrelação tem um valor não nulo para tempos curtos e vai a zero para tempos mais longos. A escala de tempo típica (se houver uma) em que a função de autocorrelação $C_m(t', t)$ cai a zero é a medida do tempo de correlação τ da simulação. Podemos estimar τ através da inspeção direta do gráfico. No caso apresentado na figura 4.7, estimamos $\tau = 200$.

Após o cálculo do tempo de equilíbrio e do tempo de correlação, podemos simular o sistema calculando vários valores esperados. A energia de uma dada configuração pode ser calculada diretamente da Hamiltoniana. O cálculo da magnetização por spin é feito pela soma

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i , \quad (4.3)$$

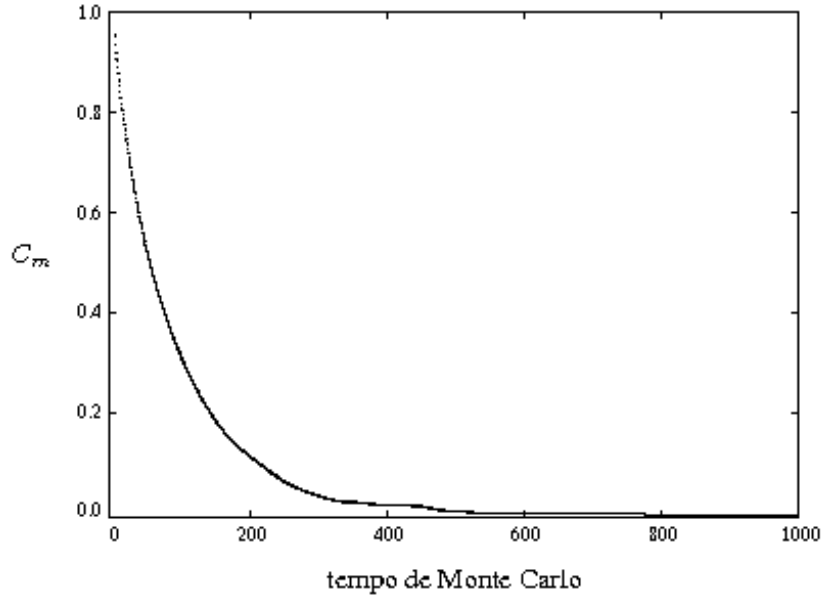


Figura 4.7: Função de autocorrelação da magnetização vs tempo de MC, para o MI em uma rede 100^2 .

onde N é o número de sítios. Depois de calculada a energia e magnetização do sistema, também podemos calcular a média do quadrado dessas quantidades a fim de encontrarmos quantidades como calor específico:

$$c = \frac{1}{NT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (4.4)$$

e susceptibilidade magnética:

$$\chi = \frac{1}{NT} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (4.5)$$

onde T é a temperatura do sistema. Como estamos interessados no fenômeno da transição de fase de segunda ordem 2.1.3, vamos calcular os valores esperados em intervalos apropriados para o estudo desse fenômeno. Mas, antes de mostrarmos os nossos cálculos para várias quantidades, vale a pena lembrar que simulamos sistemas de tamanho finito. E naturalmente, efeitos de tamanho finito aparecem em nossos cálculos. Por essa razão, plotamos duas quantidades, magnetização e susceptibilidade magnética, para vários tamanhos de rede, a fim de ganharmos intuição sobre este efeito, ver figuras 4.8 e 4.9. O parâmetro de ordem e uma quantidade divergente, a susceptibilidade, foram escolhidas pelo fato das demais quantidades terem um comportamento similar a uma delas.

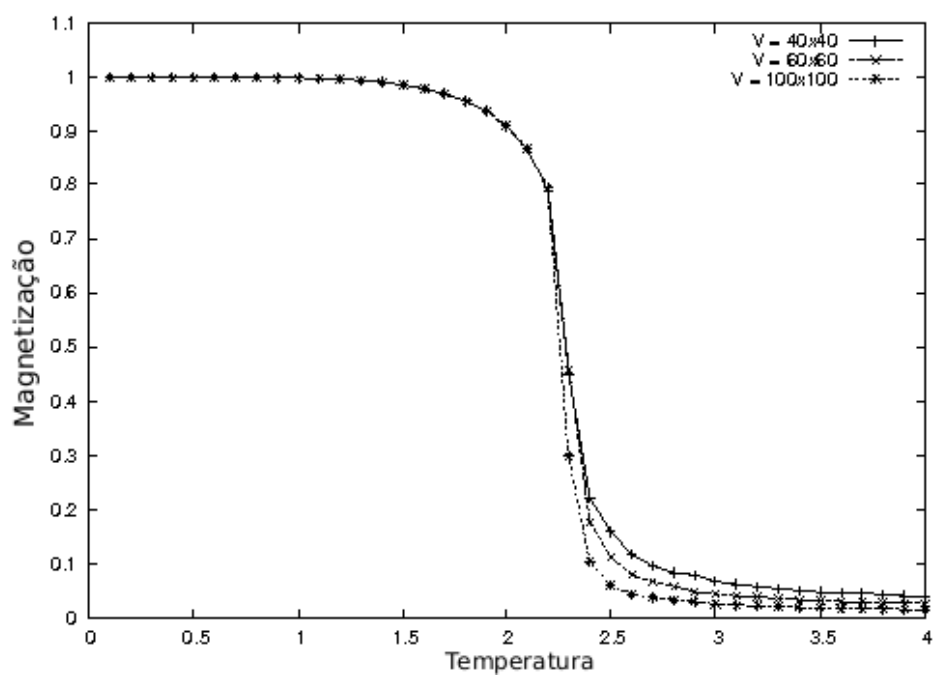


Figura 4.8: Magnetização vs Temperatura para vários volumes de rede.

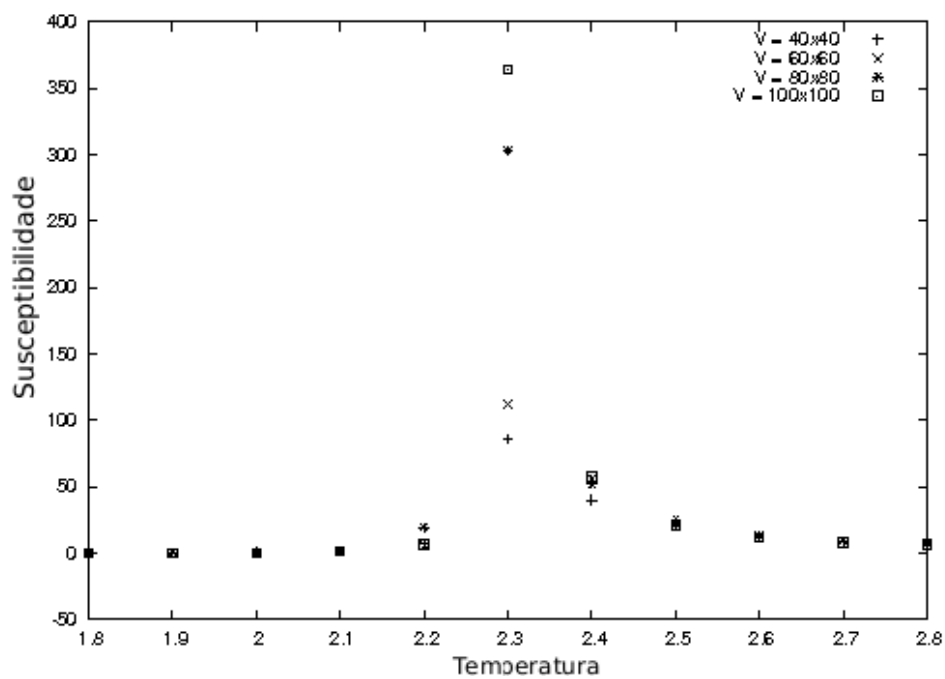


Figura 4.9: Suscetibilidade magnética vs Temperatura para vários volumes de rede.

Observamos na figura 4.9 que os picos ficam mais acentuados com o aumento da rede, mais perto do comportamento divergente apresentado em um sistema infinito. Através desses gráficos fica claro que o aumento do tamanho da rede melhora sensivelmente a qualidade da simulação.

Resultados em 2D e 3D

Abaixo, apresentamos os cálculos para a magnetização, susceptibilidade magnética, calor específico e energia do modelo de Ising bidimensional. O sistema apresentado na figura 4.10 conta com um volume 100^2 . O valor da

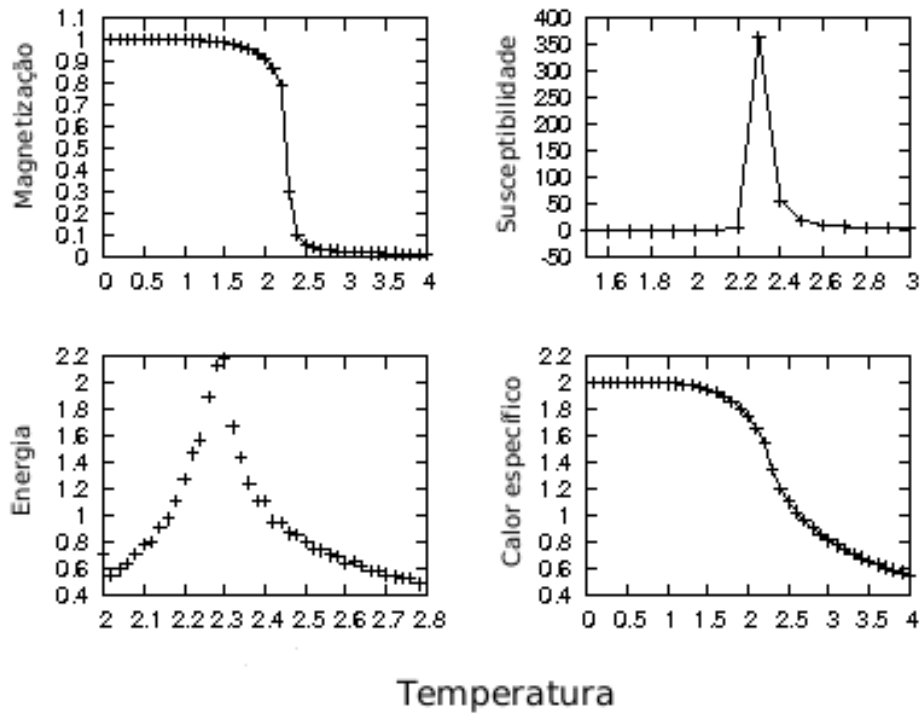


Figura 4.10: Cálculo de alguns observáveis do Modelo de Ising 2D em uma rede 100^2 .

temperatura crítica foi conseguido através do cálculo do cumulante de quarta ordem reduzido do parâmetro de ordem, também conhecido como cumulante de Binder [72],

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} . \quad (4.6)$$

Com o tamanho da rede $L \rightarrow \infty$, $U_4 \rightarrow 0$ para $T > T_c$ e $U_4 \rightarrow 2/3$ para $T < T_c$. Assim, a técnica de determinação da T_c consiste na plotagem do gráfico $U_4 \times T$ para vários tamanhos de rede. Por inspeção do gráfico, pode-se determinar o ponto correspondente à temperatura crítica T_c como o ponto em que todas as curvas se cruzam.

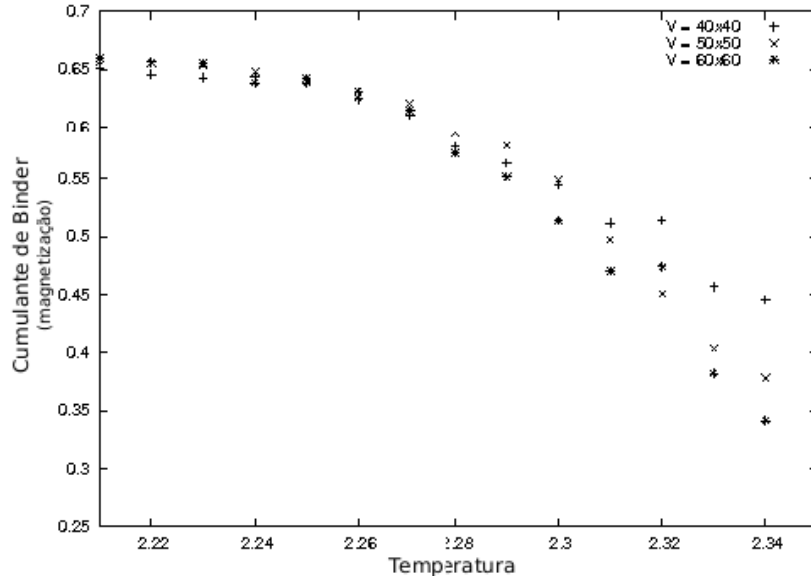


Figura 4.11: Cumulante de Binder do parâmetro de ordem vs Temperatura.

Challa e colaboradores [73, 74] também propuseram o cumulante de quarta ordem reduzido da energia,

$$V_4 = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle^2} \quad (4.7)$$

que pode ser usado para calcular a T_c . Com a aproximação do tamanho infinito da rede infinito, esse cumulante tem um mínimo na T_c . Esse comportamento pode ser ilustrado pelo gráfico 4.12, onde observamos que com o aumento da rede o pico invertido se aproxima do valor da T_c , nesse caso 2.26.

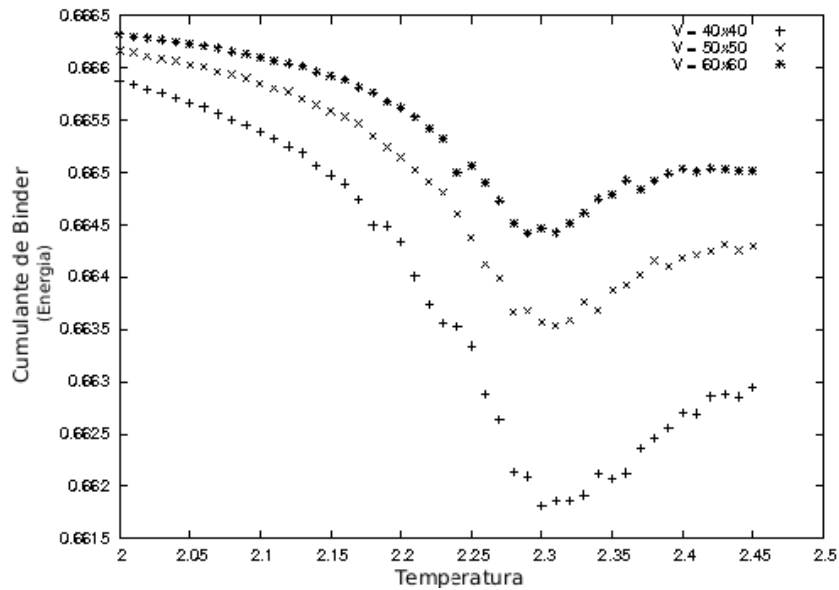


Figura 4.12: Cumulante de Binder da energia vs Temperatura.

Toda a análise apresentada acima, desde os cálculos dos tempos de equilibração e de correlação até os expoentes críticos, pode ser aplicada a qualquer simulação de modelo de spins. Daqui para frente não apresentaremos mais esse tipo de análise completa, ficando implícita a sua utilização. Os gráficos referentes aos cálculos do modelo de Ising 3D, figura 4.13, acompanham o mesmo comportamento do modelo de 2D, figura 4.10. Mas agora, a temperatura crítica calculada através do cumulante de Binder é 4.55. As simulações foram realizadas em uma rede de volume $V = 30^3$.

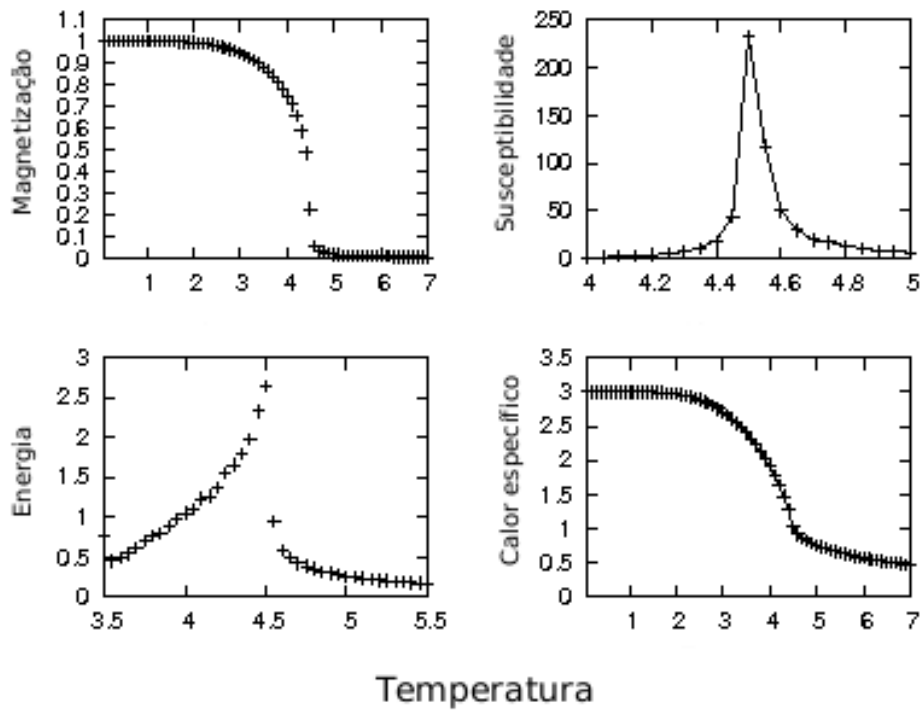


Figura 4.13: Cálculo de alguns observáveis do Modelo de Ising 3D em uma rede 30^3 .

4.2.2 Modelo de Ising em uma Rede de Mundo Pequeno

A Hamiltoniana do MI com o campo magnético externo zero em uma rede de mundo pequeno, pode ser escrita como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i j \rangle} s_i s_j - J \sum_{(i j)} s_i s_j , \quad (4.8)$$

onde $s_i = \pm 1$, J é a energia de interação entre spins, $\langle i j \rangle$ denota soma sobre os primeiros vizinhos da rede e $(i j)$ são os vizinhos de longo alcance aleatórios. Outra vez, tomamos $J = 1$.

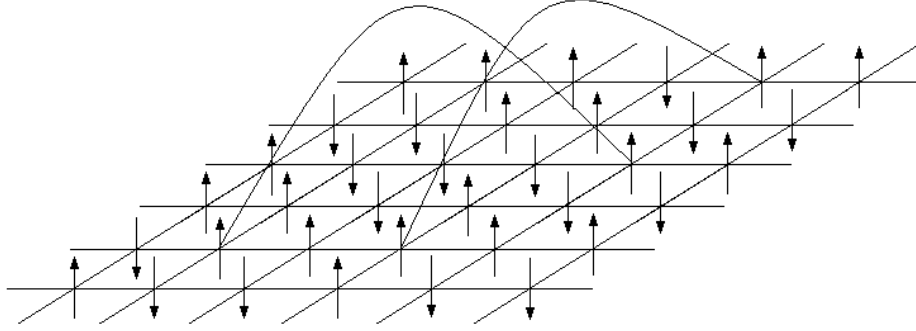


Figura 4.14: Representação pictórica do modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno.

Resultados em 1D – Rede de Mundo Pequeno

É bem conhecido o fato do MI unidimensional em uma rede regular não apresentar uma fase ordenada a temperatura finita [75]. Porém, no caso de uma rede de Mundo Pequeno esse modelo apresenta transição de fase do tipo ordem-desordem. O problema da existência de uma temperatura crítica nesse modelo, foi estudado analiticamente em [76, 77]. Nessa abordagem se faz necessária aproximações devido a dificuldades matemáticas. Outra abordagem para determinação da temperatura crítica é através do método de MC [78, 79]. Devemos chamar a atenção para o fato de que com o método de MC não é possível provar a existência da transição de fase, mas pode-se encontrar indícios da mesma. Aqui, estudamos o MI em uma dimensão em uma rede de NW, que pode ser ilustrado por um anel com ligações extras, figura 4.15. Nas figuras 4.16 e 4.17, mostramos os resultados da simulação de

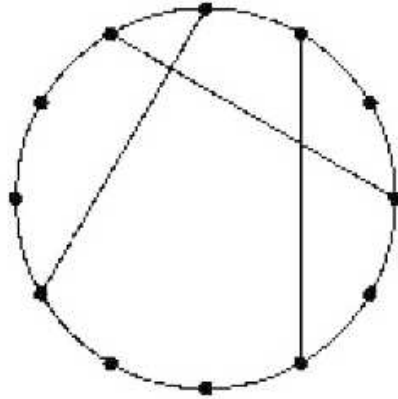


Figura 4.15: Ilustração de uma rede de NW em 1D.

MC do modelo baseada no algoritmo de Metropolis. As simulações foram feitas em um anel com $L = 10^4$ sítios ou vértices. Crescendo seu tamanho para $L > 10^5$ não tivemos alterações significativas nos resultados. Para $p = 0$ obtemos valores da magnetização da ordem de $m \sim 10^{-3}$ para $T \leq 0.3$ e valores menores ainda para $T \geq 0.4$, confirmando resultados de [76]. Como indicado pelo gráfico 4.16, para $p > 0$ observamos valores da magnetização não nulos abaixo das temperaturas crítica. O gráfico 4.17 evidencia que a energia do sistema tem diferentes valores para baixas temperaturas. Isso pode ser visto diretamente da Hamiltoniana 4.8, onde quanto maior for o p maior será o valor da soma sobre os vizinhos de longo alcance aleatórios.

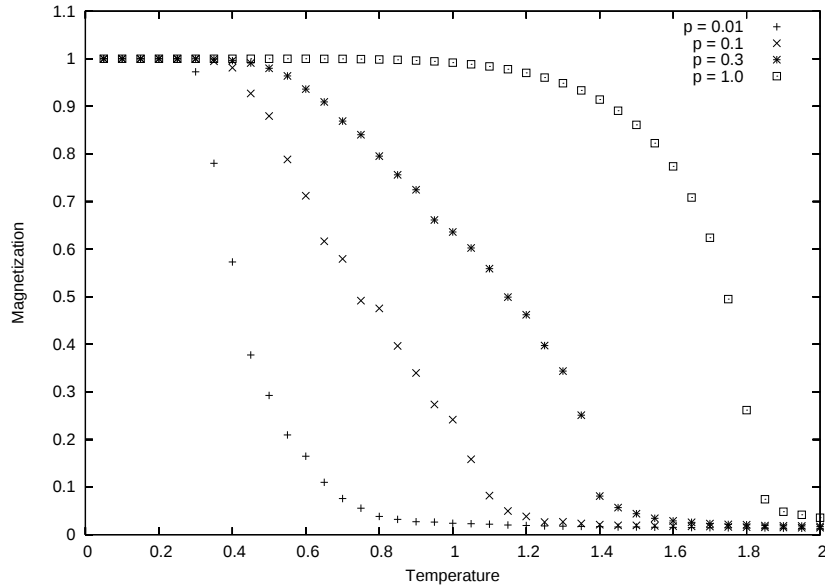


Figura 4.16: Magnetização vs Temperatura.

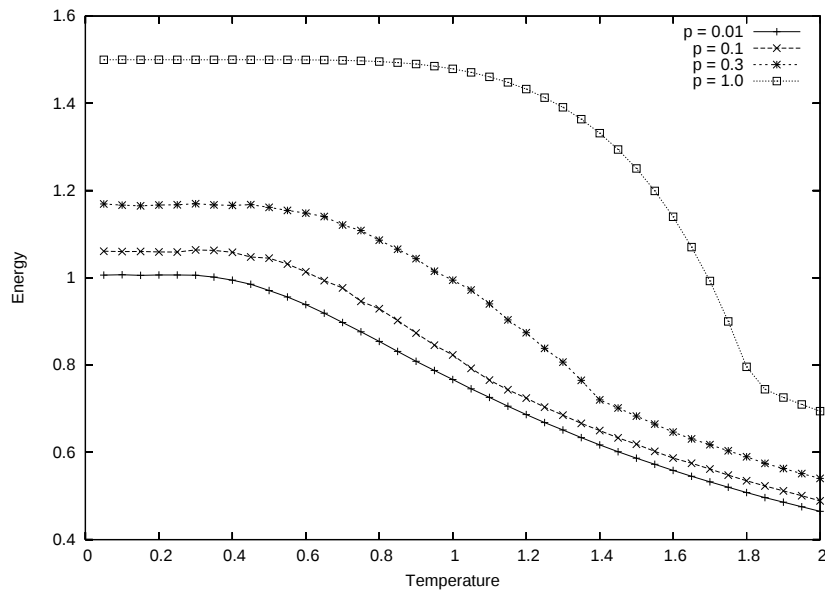


Figura 4.17: Energia vs Temperatura.

Resultados em 2D e 3D – Rede de Mundo Pequeno

Nesse caso, diferente do modelo em uma dimensão, temos transição de fase a temperatura finita $T_c > 0$ para $p = 0$. Isso significa que esperamos uma mudança da transição tipo Ising em $p = 0$ para uma outra no regime mundo pequeno. No modelo em três dimensões ($d = 3$) e $p = 0.02$ encontramos uma T_c acima de 4.55 (valor de T_c para $p = 0$), figura 4.18.

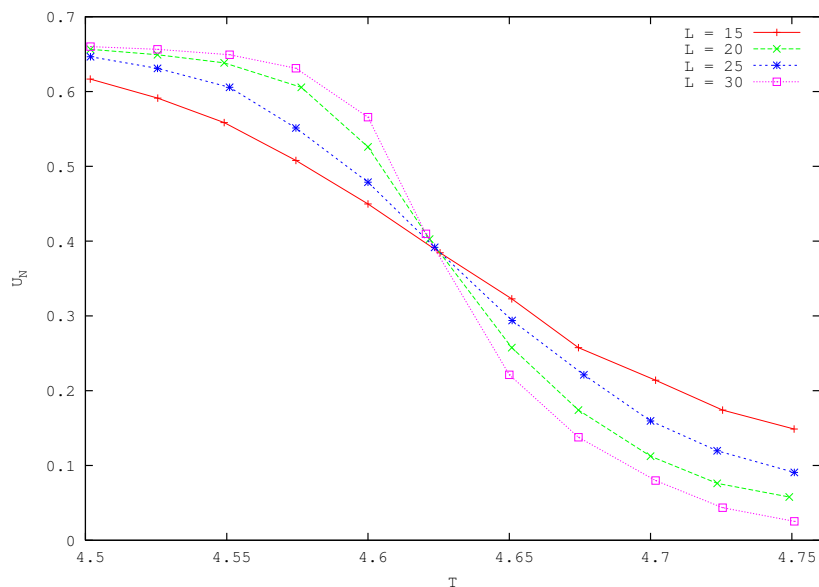


Figura 4.18: Cumulante de Binder vs Temperatura.

Aqui, não vamos fazer os cálculos dos expoentes críticos, que indicam um comportamento tipo campo médio para p entre 0 e 1 [80]. Mas vamos mostrar resultados da T_c para vários valores de p no modelo de Ising 2D e 3D. Os resultados aqui apresentados tem como tamanho de rede 100^2 no caso 2D e 30^3 no caso 3D. Da mesma forma que no caso em 1D, estudado em [76], T_c muda rapidamente na região em que p está próximo de zero e suavemente quando p cresce. Na figura 4.19, plotamos o gráfico T_c/z pelo número percentual de ligações extra p da rede. Onde z é o número médio de coordenação, ou seja, o número de ligações que cada spin em um sítio possui em média. A fim de analisar as mudanças na temperatura crítica com relação a p , definimos a quantidade $\Delta T_c = T_c - T_c^0$, onde T_c^0 é a temperatura de transição para as redes regulares 2D e 3D. Na figura 4.20, mostramos a dependência de ΔT_c em relação a p para o caso 2D e 3D em um gráfico log-log. Da mesma forma que T_c cresce com o crescimento de p , esperamos que a energia crítica $E(T_c)$ também cresça com o aumento de p . Realizando uma análise similar a anterior podemos definir $\Delta E_c = E_c - E_c^0$, onde E_c^0 é a temperatura crítica de uma rede regular ($p = 0$). Os resultados para 2D e 3D também são mostrados no gráfico log-log, figura 4.21.

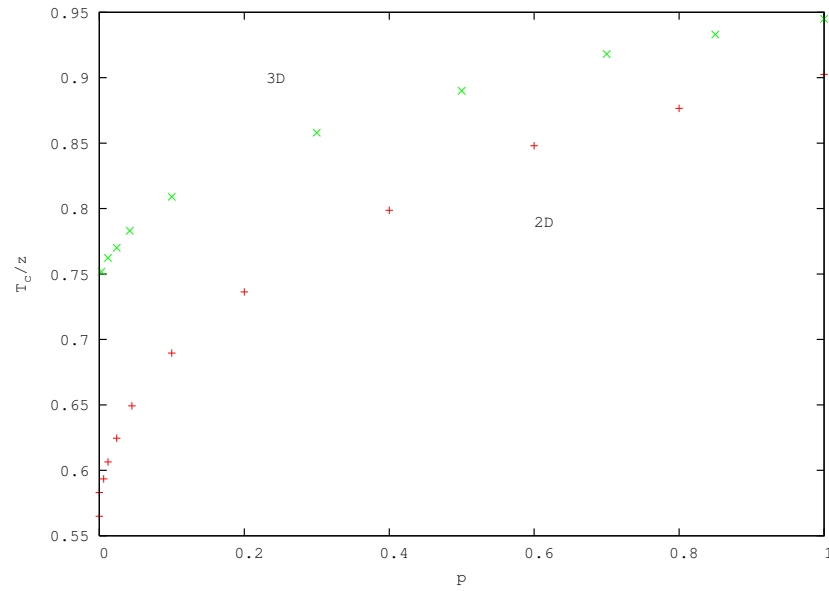


Figura 4.19: Temperatura de transição T_c , normalizada pelo número médio de coordenação z , pela probabilidade de ligação extra p em uma rede 2D e 3D.

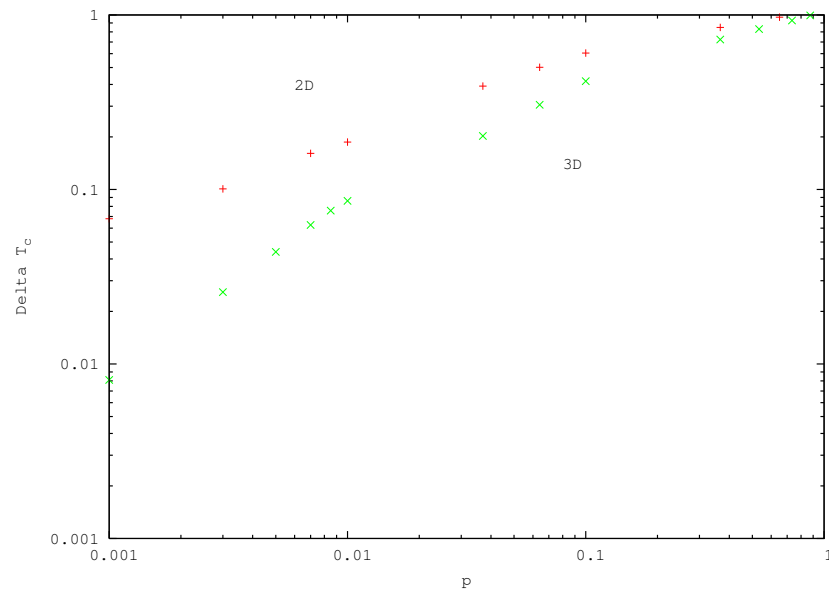


Figura 4.20: Comportamento da probabilidade p com relação a diferença da temperaturas de transição T_c e T_c^0 ($p = 0$).

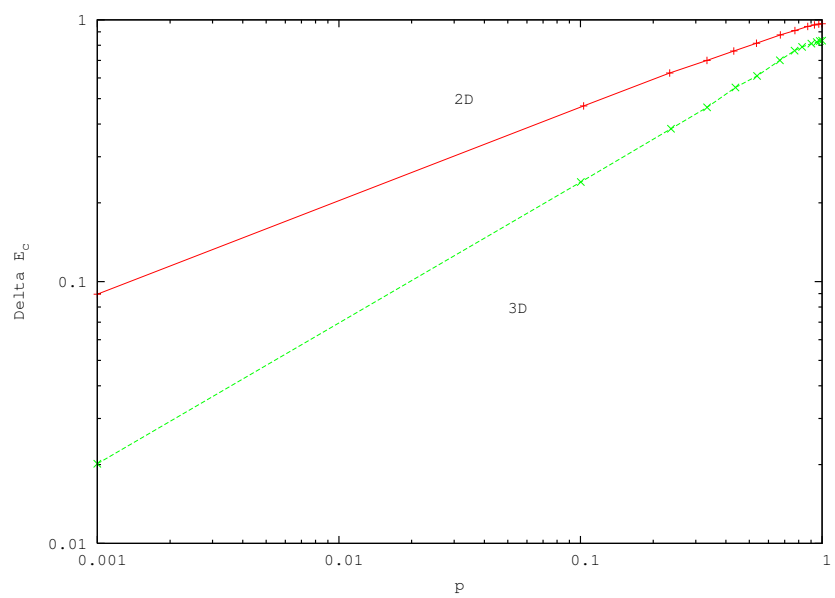


Figura 4.21: Comportamento da probabilidade p com relação a diferença da energia de transição E_c e E_c^0 ($p = 0$).

4.2.3 Modelo de Ising com a Termoestatística de Tsallis

Já mencionamos no subseção 3.4.1 que não é possível realizar simulações de MC de forma direta para sistemas descritos pela termoestatística generalizada de Tsallis. No entanto, na mesma subseção 3.4.1 apresentamos o algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral que permite resolver tais sistemas. Antes de apresentarmos os resultados para o MI em 2D, vamos mostrar as simulações da primeira etapa do referido algoritmo, isto é, usando o algoritmo de Metropolis-Andricioaei-Straub.

Resultados em 2D - Metropolis-Andricioaei-Straub

Lembramos que a probabilidade de transição usada nesse algoritmo é dada por (3.51):

$$P_i = \begin{cases} 0 & , \text{ para } 1 - (1 - q)\beta' \varepsilon_i < 0 \\ \min \left[1, \left[\frac{1 - (1 - q)\beta' \varepsilon_i}{1 - (1 - q)\beta' \varepsilon_j} \right]^{\frac{q}{1 - q}} \right] & , \text{ do contrário} \end{cases} \quad (4.9)$$

A simulação aqui apresentada foi realizada com parâmetro entrópico $q = 0.8$ em 2D. Nas figuras (4.22, 4.23 e 4.24) plotamos a magnetização generalizada, susceptibilidade generalizada e energia generalizada respectivamente, em função do logaritmo da temperatura fictícia T' . O logaritmo foi usado para melhorar a visualização do gráfico. Mostramos esses gráficos para dois volumes de rede diferente, com o objetivo de identificar a sensibilidade do sistema frente a alterações do volume.

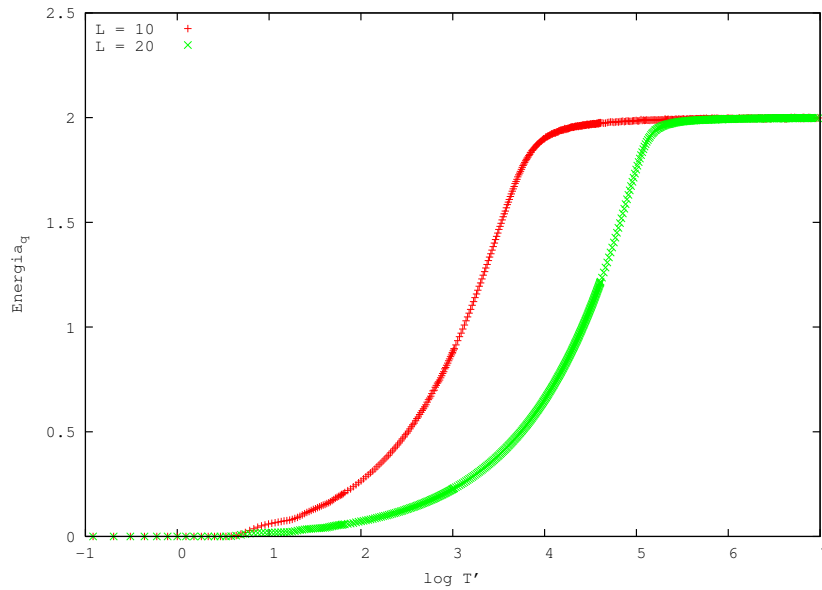


Figura 4.22: Energia genetalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para redes 10^2 e 20^2 com $q = 0.8$.

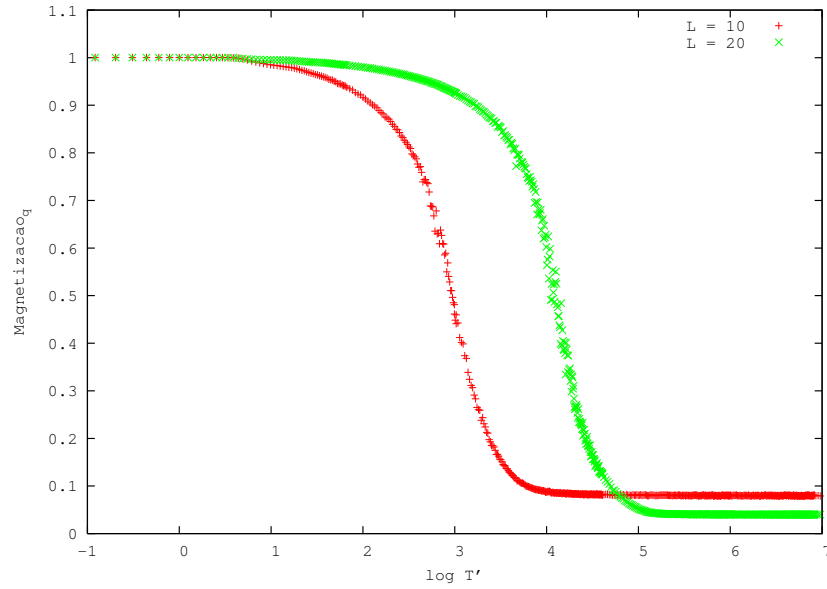


Figura 4.23: Magnetização genetalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para redes 10^2 e 20^2 com $q = 0.8$.

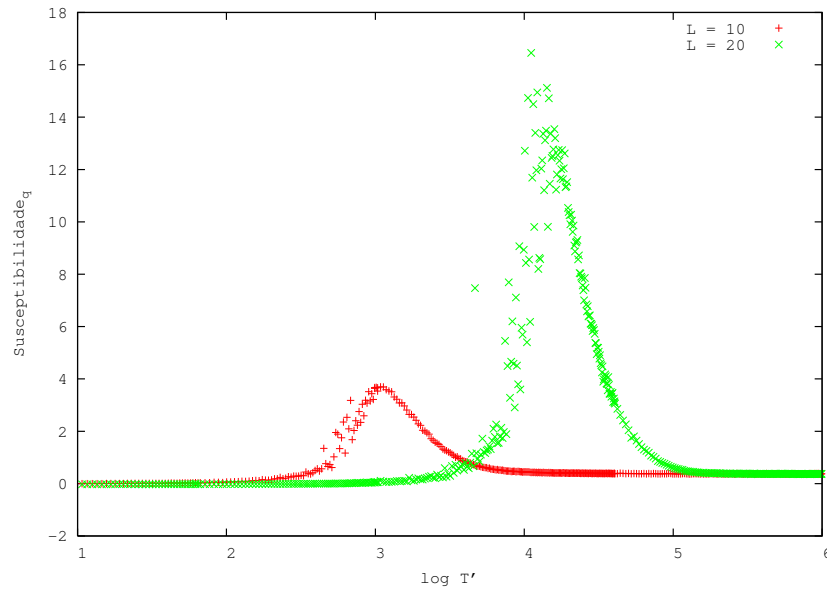


Figura 4.24: Susceptibilidade enetalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para redes 10^2 e 20^2 com $q = 0.8$.

Nas figuras (4.25, 4.26 e 4.27) mostramos o comportamento do sistema para alguns valores do parâmetro entrópico q , para as mesmas quantidades generalizadas analisadas anteriormente. Plotamos o valor $q = 1.0$, onde a estatística de Tsallis correspondente a estatística de Boltzman-Gibbs $T' = T$, e verificamos a concordância com os resultados do algoritmo convencional de Metropolis. Além disso, $q = 1.0$ serve de referência para analisarmos o comportamento das quantidades generalizadas para $q < 1$.

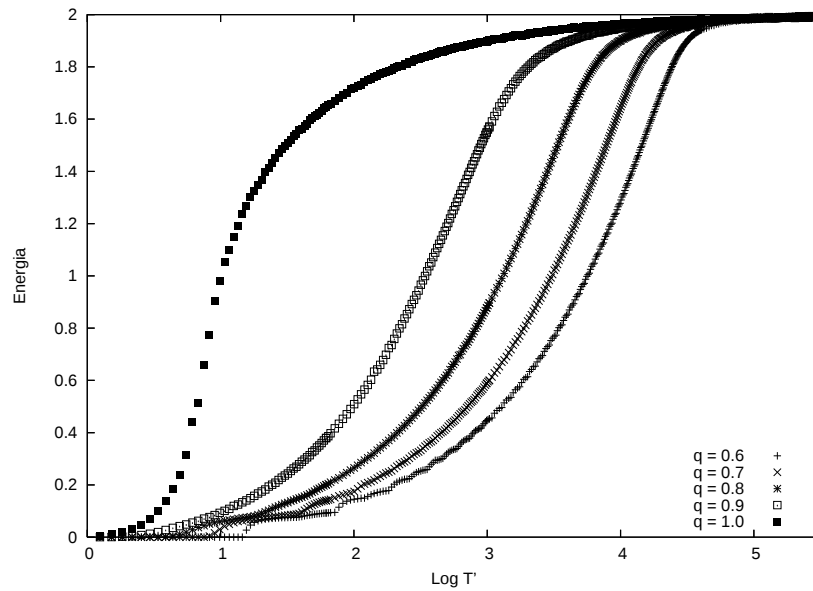


Figura 4.25: Energia genetalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para rede 20^2 com vários valores de q .

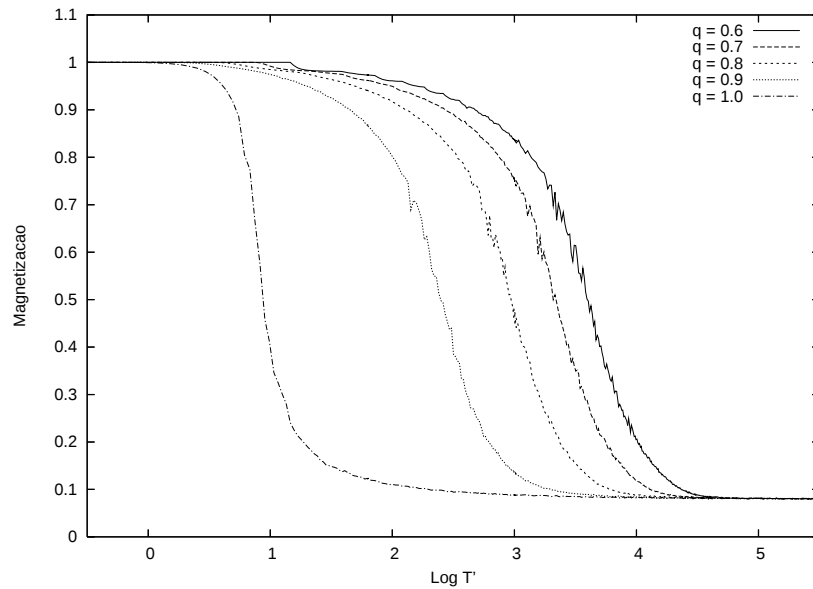


Figura 4.26: Magnetização genetalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para rede 20^2 com vários valores de q .

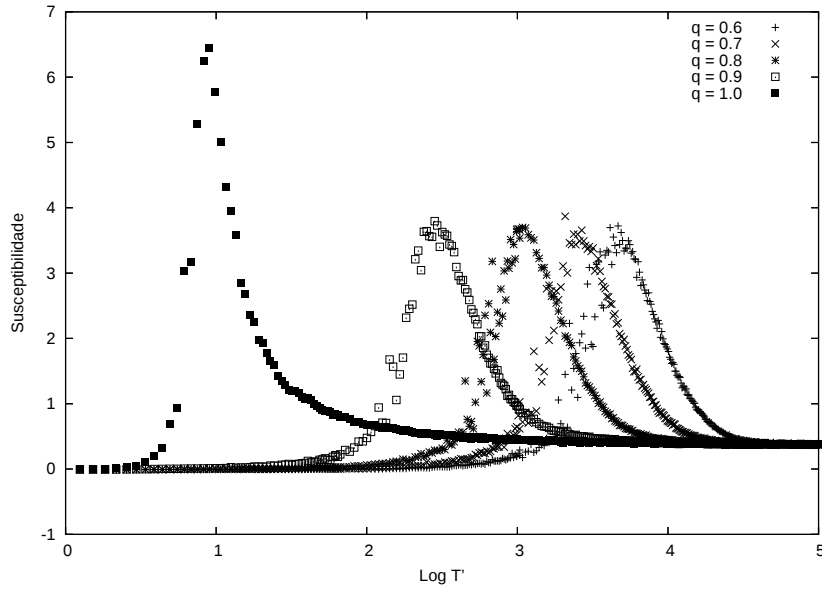


Figura 4.27: Susceptibilidade generalizada vs logaritmo da temperatura fictícia T' para rede 20^2 com vários valores de q .

Resultados em 2D - Metropolis-Salazar-Toral

Tendo os resultados da simulação do algoritmo anterior como um primeiro passo, vamos realizar uma segunda etapa, a fim de completarmos a simulação do MI utilizando a termoestatística de Tsallis. Esse segundo passo, como explicado em 3.4.1, consiste na transformação de $T' \rightarrow T$. Essa transformação pode ser expressa pela combinação das equações (3.52) e (3.56):

$$T = \frac{T' - (1-q)U_q(T')}{1 + (1-q)S_q(T'_0)} e^{(q-1) \int_{T'_0}^{T'} \frac{dU_q}{T' - (1-q)U_q}}. \quad (4.10)$$

No cálculo dessa equação, utilizamos o limite $T'_0 = 0$ para que tenhamos configurações representativas do estado fundamental do MI ². A entropia generalizada referente a temperatura T'_0 pode ser entendida no contexto do ensemble microcanônico. Nesse ensemble, temos como solução para o problema de maximização da entropia:

$$p_i = \begin{cases} \Omega(E)^{-1} & , \varepsilon_i = E \\ 0 & , \text{do contrário} \end{cases}, \quad (4.11)$$

onde $\Omega(E)$ é a degenerescência da energia, ou seja, o número de configurações com a mesma energia E . Nesse caso, a entropia como função da energia é dada por:

$$S_q(E) = \frac{\Omega(E)^{(1-q)} - 1}{1 - q}. \quad (4.12)$$

Para o MI em $T'_0 = 0$, temos $\Omega(E_0) = 2$, onde E_0 é o estado de mais baixa energia. Esses estados são referentes a configurações onde todos os spins tem a mesma orientação (todos para cima ou todos para baixo). Assim, o valor da entropia usado em (4.10) é:

$$S_q(0) = \frac{2^{(1-q)} - 1}{1 - q}. \quad (4.13)$$

Note que, uma vez conhecidos a temperatura crítica e expoentes críticos em termos da temperatura fictícia T' , em princípio podemos agora determinar as temperaturas e expoentes críticos referente à temperatura física T . No

²O MI pode ser pensado como um sistema de dois níveis de energia, com os estados fundamentais da energia em $T = 0$

entanto, este cálculo está além dos objetivos da presente dissertação. Um estudo dessa natureza requer uma análise mais completa de erros, o que não foi feito aqui.

Na figura 4.28 plotamos a função que deve ser integrada para que possamos realizar a transformação $T' \rightarrow T$, para $p = 0.6$ e $q = 0.8$. O gráfico objetiva mostrar que a função que deve ser integrada é suave. Assim, podemos usar alguma técnica de integração numérica, como por exemplo a regra 3/8 de Simpson - ver Apêndice A.

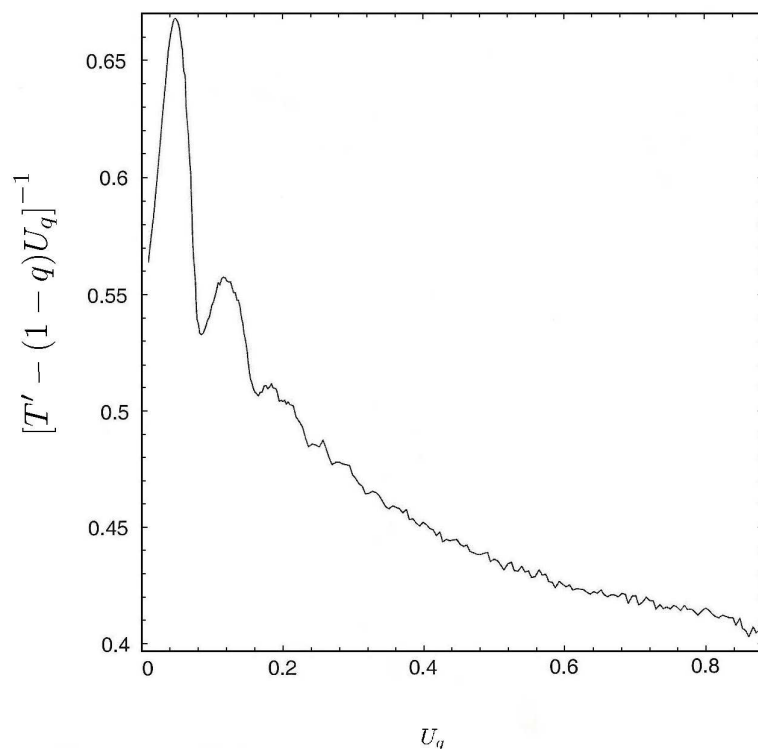


Figura 4.28: Procedimento de integração implícito na equação (4.10) para realizarmos a transformação $T' \rightarrow T$.

Na figura 4.29 mostramos o resultado da simulação usando o algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral em uma rede 20^2 . Tal simulação ainda não aparece na literatura, mas estudos de aspectos não extensivos das redes de mundo pequeno sim [81]. Observamos que há uma região de temperaturas para que os valores da energia não são uma função unívoca, isto é, existe mais de um valor de U_q para um mesmo valor de temperatura. Aqui não investigamos a natureza da não unicidade da energia, mas estudos na literatura [82] mostram que usando critérios de minimização da energia livre, é possível determinar precisamente a energia interna.

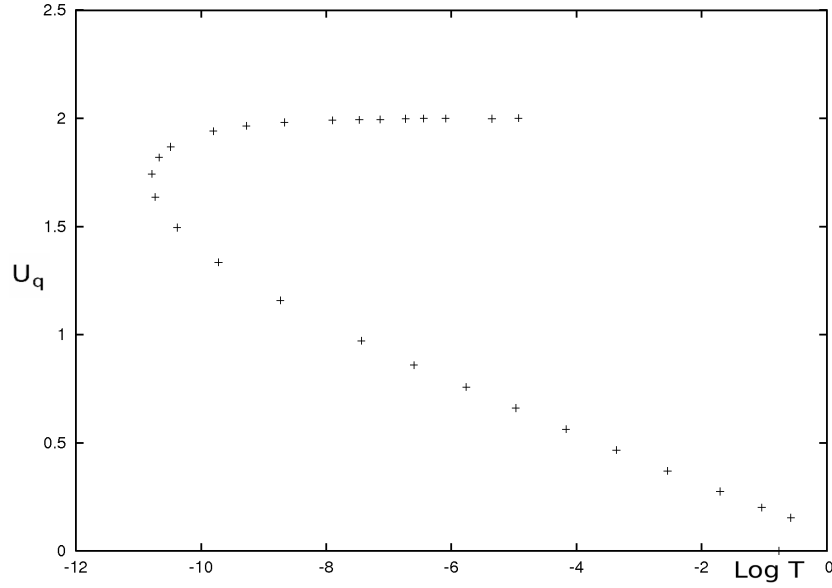


Figura 4.29: Energia generalizada U_q vs temperatura em uma rede 20^2 .

4.3 Simulando a Teoria de Campo Escalar na Rede

Nesta seção, vamos utilizar a teoria de campo escalar na rede desenvolvida no primeiro capítulo. Lembrando que o problema de calcular valores esperados para teoria de campo escalar é exatamente equivalente a achar valores esperados em modelos de mecânica estatística 2.4. Iremos mostrar que quantidades de interesse são expressas em termos de valores esperados do campo. Dessa forma, podemos utilizar os métodos de MC estudados no capítulo 2.

Constante de Acoplamento Renormalizada

Vamos, então, reescrever a ação da teoria $\lambda\varphi^4$ na rede d -dimensional (2.201):

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} a^d \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \varphi_0(\tilde{n} + a\hat{\mu})\varphi_0(\tilde{n}) + \left(1 + \frac{m_0^2}{2}\right)\varphi_0^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda_0}{4!}\varphi_0^4(\tilde{n}) \right\}. \quad (4.14)$$

Para o propósito da simulação computacional, é conveniente trabalharmos com quantidades adimensionais. Nesse sentido, podemos rescalar o campo na d -dimensional (φ_0), a massa nua (m_0) e a constante de acoplamento nua (λ_0), respectivamente como: $\varphi = a^{(d/2)-1}\varphi_0$, $m = am_0$ e $\lambda = a^{4-d}\lambda_0$. Podemos, então, reescrever a ação Euclidiana na rede, como:

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \varphi(\tilde{n} + \hat{\mu})\varphi(\tilde{n}) + \left(1 + \frac{m^2}{2}\right)\varphi^2(\tilde{n}) + \frac{\lambda}{4!}\varphi^4(\tilde{n}) \right\}. \quad (4.15)$$

A ação adimensional pode ser, ainda, transformada com a prescrição:

$$\varphi_0 = \frac{\sqrt{2\kappa}}{(2\kappa)^{1/2}}\varphi, \quad m_0^2 = \frac{1-2\lambda}{\kappa} - 2d \quad \text{e} \quad \lambda_0 = \frac{6\lambda}{\kappa^2}. \quad (4.16)$$

Isso implica em

$$\mathcal{S}_{rede} = \sum_{\tilde{n}} \left\{ -2\kappa \sum_{\mu=1}^d \varphi(\tilde{n} + \hat{\mu})\varphi(\tilde{n}) + \varphi^2(\tilde{n}) + \lambda [\varphi^2(\tilde{n}) - 1]^2 - \lambda \right\}. \quad (4.17)$$

Para κ positivo, o acoplamento é do tipo ferromagnético sendo κ análogo a inversa da temperatura, β . O limite $\lambda \rightarrow \infty$ representa um caso especial, chamado limite de Ising. Nesse limite, todas as configurações com $\varphi^2(\tilde{n}) \neq 1$ são suprimidas e os valores dos campos assumem apenas valores $+1$ e -1 .

Estudamos o comportamento da constante de acoplamento renormalizada da teoria escalar φ^4 na rede. Mais precisamente, obtivamos resultados para a constante de quatro e seis pontos da teoria à momento zero. Os cálculos foram realizados em duas e três dimensões na fase simétrica ($\langle \varphi \rangle = 0$), onde abordagens não perturbativas não funcionam. No regime de acoplamento fraco ($\lambda \rightarrow 0$) é possível usar uma abordagem analítica. Isso é conseguido, realizando uma expansão perturbativa em λ , feita através da fatorização do termo de interação da integral funcional:

$$Z[J] = \exp \left[\frac{\lambda}{4!} \sum_{\tilde{n}} \frac{\delta^4}{\delta J^4} Z_0 \right] \quad (4.18)$$

onde

$$Z_0[J] = \int D\varphi e^{-\mathcal{S}_{rede}} \quad (4.19)$$

O funcional $Z_0[J]$ pode ser calculado de forma fechada, pois se trata de uma integral Gaussiana. Assim, a função de partição (4.18) pode ser expandida em série de potência, caracterizando a teoria de perturbação. Notando que essa expansão é válida apenas para constante de acoplamento pequena, $\lambda \ll 1$. No regime de acoplamento forte, também existe um método analítico como alternativa. Quando $\lambda \gg 1$, a expansão em série de potências pode ser feita de outro modo, nesse caso, a expansão é conseguida por fatorar o termo cinético da integral funcional como:

$$Z[J] = \exp \left[\sum_{\tilde{m}} \sum_{\tilde{n}} \frac{\delta}{\delta J(\tilde{n})} G^{-1}(\tilde{n}, \tilde{m}) \frac{\delta}{\delta J(\tilde{m})} \right] Z_0[J] \quad (4.20)$$

onde

$$Z_0[J] = \int D\varphi e^{\sum_{\tilde{n}} \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(\tilde{n}) + J(\tilde{n})} \quad (4.21)$$

Observamos que (4.21) não é uma integral Gaussiana, mas pode ser calculada como o produto de integrais ordinárias na rede:

$$Z_0[J] = \mathcal{N} \prod_{\tilde{n}} \frac{F(x)}{F(0)} \quad (4.22)$$

onde

$$F(x) \equiv \int dz e^{-[\frac{\lambda}{4!} z^4 + xz]} , \quad (4.23)$$

e $\mathcal{N}$ é uma constante. O função $F(x)$ é transcendental e pode ser calculada como série de potências de x :

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} \frac{2^{\tilde{n}} x 2^{\tilde{n}}}{(2\tilde{n})!} \Gamma \left(\frac{\tilde{n}}{2} + \frac{1}{4} \right) . \quad (4.24)$$

Usando essa expansão em série, podemos expandir ambos os termos do lado direito da equação (4.20). Assim, obtemos uma série de potências de $Z[J]$ que assume a forma geral:

$$Z[J] = \mathcal{N} \left[1 + \sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} \lambda^{-k/2} A_k[J] \right] , \quad (4.25)$$

onde $A_k[J]$ são integrais sobre as fontes J . Então, a expansão no acoplamento forte é uma expansão em potências de $\lambda^{-k/2}$. Dessa expansão é possível extrair um conjunto de diagramas simples, que podem ser usados para calcular a função de Green da teoria. No caso da teoria $(\varphi^4)_{d=3}$, o estudo analítico no limite da constante de acoplamento forte mostra que a constante renormalizada se aproxima do limite assintótico. Muitos poucos trabalhos computacionais foram feitos na região da constante de acoplamento intermediária para a forte. Isso, por si só, constitui uma motivação para esse estudo. Além do mais, a teoria $(\varphi^4)_{d=3}$, ao contrário da teoria $(\varphi^4)_{d=4}$,

admite solução não trivial [83, 84, 85]. A maior parte dos esforços tem se concentrado na aplicação do grupo de renormalização e expansão a altas temperaturas para teoria $(\varphi^4)_{d=3}$ no limite de Ising [86]. A fim de contextualizar esse estudo, citamos alguns trabalhos que determinam propriedades das funções de Green 1PI de n -pontos ($n \leq 8$). No caso $d = 3$ uma lista completa é encontrada em [14]. Bender e Boettcher fizeram um estudo analítico na constante sêxtupla de acoplamento em [87]. Nesse trabalho os autores levaram em conta cálculos na constante de acoplamento em uma rede hipercúbica de dimensão arbitrária, usada para obter o limite do contínuo. Em duas dimensões Sokolov e Orlov usaram expansão no grupo de renormalização e técnica de resomação de Padé-Borel-Leroy para calcular λ_6 [88]. Há muito poucos trabalhos usando a abordagem de MC na rede para a constante de acoplamento finita ($\lambda \neq \infty$). Podemos citar, o pioneiro, Wheeler [89] e mais tarde Tsypin [14].

Vimos no capítulo 1, que de acordo com o teorema de Wick, na teoria livre a função de Green para uma ordem arbitrária, pode sempre ser escrita como a soma do produto da função de Green de dois pontos, (2.147). Quando incluímos a interação $\lambda\varphi^4$, notamos desvios do comportamento Gaussiano para ordens altas. Isso significa que necessitamos de funções de Green de ordens mais altas que dois para expressar uma função de Green arbitrária. Porém, idéias referentes à teoria da renormalização sugerem que todas essas ordens altas podem ser expressas em termos das funções de Green de segunda e quarta ordem [36]. Além disso, extraímos da teoria da renormalização que, as quantidades renormalizadas podem ser expressas em termos de funções de Green no espaço de momentos. Não vamos aqui demonstrar essas idéias, nos restringindo apenas a escrever os resultados utilizados na simulação:

$$m_R^2 = Z \tilde{G}^{(2)-1}(p^2) \Big|_{p=0}, \quad (4.26)$$

$$\lambda_R^{(4)} = -Z^2 \left[\tilde{G}^{(2)-1}(p^2) \right]^4 \tilde{G}^{(4)}(p^2) \Big|_{p=0}, \quad (4.27)$$

$$\lambda_R^{(6)} = -Z^3 \left(\tilde{G}^{(2)-1}(p^2) \right)^6 \left[\tilde{G}^{(6)}(p^2) - 10 \tilde{G}^{(4)2}(p^2) \tilde{G}^{(2)-1}(p^2) \right] \Big|_{p=0}, \quad (4.28)$$

onde

$$Z = \frac{\tilde{G}^{(2)}(p^2)}{dp^2} \Big|_{p=0}. \quad (4.29)$$

Essas quantidades renormalizadas podem ser escritas na rede, de tal forma que viabilize os cálculos computacionais. Assim, a versão discreta de (4.29) pode ser escrita como:

$$Z = \frac{\tilde{G}^{(2)}(p^2) - \tilde{G}^{(2)}(0)}{p^2}, \quad (4.30)$$

onde escolhemos p , o menor possível. Isto é, $p = (\frac{2\pi}{L}, 0)$ em duas dimensões e $p = (\frac{2\pi}{L}, 0, 0)$ em três dimensões. Então, a função de Green de dois pontos no espaço de momentos pode ser escrita como:

$$\tilde{G}^{(2)}(p^2) = \langle \tilde{\varphi}(p) \tilde{\varphi}(-p) \rangle = \langle |\tilde{\varphi}(p)|^2 \rangle, \quad (4.31)$$

onde

$$\tilde{\varphi}(p) = \sum_x e^{-ipx} \varphi(x). \quad (4.32)$$

Dessa forma, as quantidades renormalizadas assumem a forma:

$$m_R^2 = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \left[\frac{\langle \tilde{\varphi}^2(0) \rangle - \langle |\tilde{\varphi}(p)|^2 \rangle}{\langle |\tilde{\varphi}(p)|^2 \rangle} \right], \quad (4.33)$$

$$\lambda_R^{(4)} = - \frac{\langle \tilde{\varphi}(0)^4 \rangle - 3 \langle \tilde{\varphi}(0)^2 \rangle^2}{\langle \tilde{\varphi}(0)^2 \rangle^2 \xi_R^d} \quad (4.34)$$

e

$$\lambda_R^{(6)} = 10(\lambda_R^{(4)})^2 - \frac{\langle \tilde{\varphi}(0)^6 \rangle - 15\langle \tilde{\varphi}(0)^4 \rangle \langle \tilde{\varphi}(0)^2 \rangle + 30\langle \tilde{\varphi}(0)^2 \rangle^3}{\langle \tilde{\varphi}(0)^2 \rangle^3 \xi_R^{2d}}. \quad (4.35)$$

Essas expressões não podem ser usadas no regime de acoplamento fraco, pois apresentam erros estatísticos muito grande. Mas, (4.34) e (4.35) apresentam erros estatísticos razoáveis no regime intermediário ao forte [90]. Os resultados para constante de acoplamento renormalizada e constante sêxtupla renormalizada são consistentes com resultados numéricos e analíticos no limite de Ising. Por exemplo, nosso resultado para $\lambda_R^{(6)}$ é 2.03 ± 0.072 , em concordância com o valor de $\lambda_R^{(6)} = 2.05 \pm 0.15$ obtido, também por simulação de MC, por Tsy-pin [14].

Resultados

Na figura 4.30, apresentamos os resultados das simulações referentes a constante de acoplamento nuas $\lambda_R^{(4)}$ e $\lambda_R^{(6)}$ em 2D. Utilizamos uma rede 64^2 como no trabalho [91]. Já na figura 4.31, mostramos os resultados das simulações em 3D, em uma rede 32^3 .

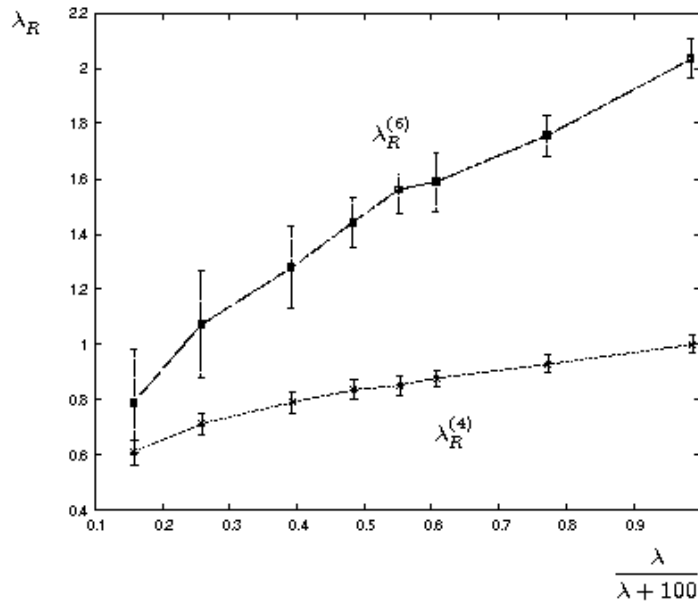


Figura 4.30: Comportamento das constantes de acoplamentos $\lambda_R^{(4)}$ e $\lambda_R^{(6)}$ em 2D.

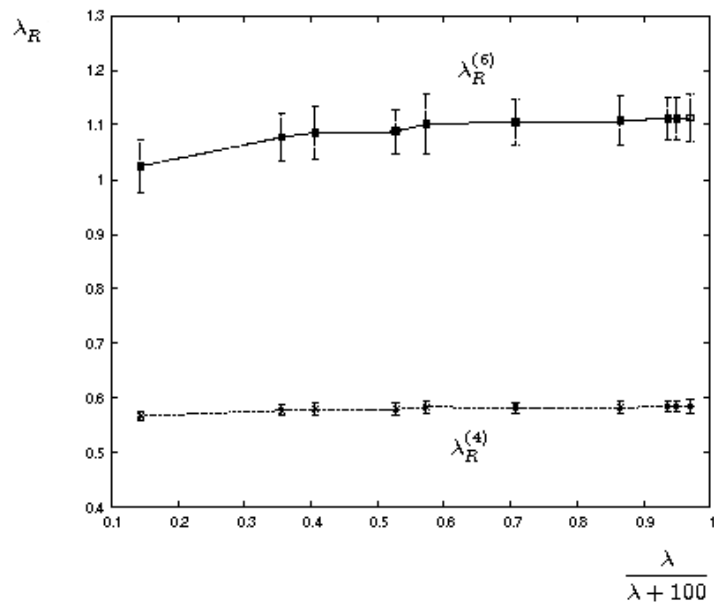


Figura 4.31: Comportamento das constantes de acoplamentos $\lambda_R^{(4)}$ e $\lambda_R^{(6)}$ em 3D.

Em ambos os casos, 2D e 3D, as constantes $\lambda_R^{(4)}$ e $\lambda_R^{(6)}$ se aproximam assintoticamente dos valores da constante em duas e três dimensões calculadas analiticamente. Através das Figuras 4.30 e 4.31 observamos que a variação das constantes renormalizadas são pequenas comparado com a grande variação de λ . Isso significa que o potencial efetivo no regime de acoplamento forte não muda significativamente para grandes variações da constante de acoplamento. Cálculos para ordens mais altas, $\lambda_R^{(2n)}$ ($n > 3$), são de difícil realização devido a grande flutuação dos erros estatísticos no regime de acoplamento forte. Nesse caso, deve-se usar métodos que fazem uso direto do cálculo da função de Green conectada. Um desses métodos é discutido por Drumond e colaboradores em [92, 93]. Eles escrevem uma ação com um termo de fonte, a equação de Langevin descreve a evolução estocástica do campo na teoria [94].

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas Futuras

Nesta dissertação, tivemos como um dos objetivos fazer uma apresentação das teorias necessárias para simular sistemas de mecânica estatística e teoria de campos na rede com o método de Monte Carlo. Damos especial atenção à construção da termoestatística generalizada de Tsallis, por não ser um assunto abordado em livros didáticos. Não fizemos o mesmo com a termoestatística de Boltzman-Gibbs, pois esta faz parte do arcabouço teórico de um físico. Também, fizemos uma introdução geral ao fenômeno da transição de fase, que é um assunto de bastante interesse em sistemas de muitas partículas, e também, relacionados a física da matéria condensada e engenharia de materiais.

No que tange à teoria de campos, também nos esforçamos para fazer uma construção passo a passo até a sua formulação na rede. Essa construção pode ser útil, não só para as investigações da constante de acoplamento renormalizada, mas para simulações de campos bosônicos, e com um pouco mais de esforço, fermiônicos. Assim, essa introdução pode ser útil para simulações da eletrodinâmica quântica (QED) e da cromodinâmica quântica (QCD), todas na rede. Também, comentamos a conexão formal existente entre a mecânica estatística e a teoria de campos. Conexão essa, que permite um intercâmbio de técnicas computacionais entre as duas teorias, ou seja, um método desenvolvido para simulações de modelos de spin, pode ser empregado quase que imediatamente, por exemplo, para teorias de calibre na rede.

Em termos das técnicas computacionais, tentamos uma abordagem a mais geral possível, de tal forma que essa apresentação possa ser útil para simulações de Monte Carlo em outras áreas do conhecimento. O algoritmo de Metropolis sempre pode ser usado quando o uso de uma simulação de Monte Carlo for factível. Essa é uma das razões para termos dado especial atenção a esse algoritmo. Outra razão é por inspirar a construção do algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral, seu equivalente para a termoestatística de Tsallis. O algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral expande as possibilidades de aplicação da técnica de Monte Carlo para sistemas não extensivos. Por completeza do trabalho, além de incluirmos um resumo das principais técnicas de tratamento de erros estatísticos, também explicamos alguns dos métodos mais famosos de geração de números aleatórios.

Com respeito à simulação de modelos de spin, nos dedicamos ao modelo de Ising que, ainda hoje, é muito estudado. O esquema usado para tratar esse modelo na rede de mundo pequeno pode ser diretamente estendido para outros modelos como, por exemplo, os modelos N -vetoriais (spin contínuo). O algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral, também pode ser aplicado com facilidade a modelos de spin contínuo. Nas simulações realizadas na seção 4.2, confirmamos alguns resultados da literatura e propomos a aplicação do algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral no modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno. Essa simulação é justificada pelo fato do modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno ser um sistema com correlação de longo alcance, os quais podem ser tratados através da termoestatística generalizada de Tsallis. Essa aplicação do algoritmo de Metropolis-Salazar-Toral ao modelo de Ising em uma rede de mundo pequeno é um resultado original dessa dissertação e temos a expectativa de fazer, além das simulações em duas dimensões, também em uma e três dimensões. Futuramente, podemos aplicar essa abordagem a sistemas de spins contínuos, como o $O(2)$ (modelo XY), que em sua versão na rede regular apresenta transição de fase topológica.

Por fim, estudamos o comportamento das constantes de acoplamento renormalizadas $\lambda_R^{(4)}$ e $\lambda_R^{(6)}$. Nosso estudo teve o objetivo de mostrar que o modelo de um campo escalar fornece um dos exemplos mais simples de simulação de Monte Carlo da teoria de campos na rede. Sob o ponto de vista prático, melhoramos os resultados numéricos

para o comportamento de $\lambda_R^{(4)}$ na região de acoplamento intermediário e forte, na medida em que aumentamos os tamanhos das redes em duas e três dimensões em comparação com resultados prévios da literatura [87]. Além disso, estudamos o comportamento de $\lambda_R^{(6)}$ em duas e três dimensões, resultados simulacionais inéditos na literatura, que estão em boa concordância com previsões analíticas. Esses cálculos podem ser futuramente estendidos para a teoria φ^4 à temperatura finita.

Como perspectiva futura, além dos projetos mencionados acima, pretendemos de imediato implementar uma análise de erros completa para determinar com precisão a temperatura crítica e os expoentes críticos físicos para o modelo de Ising numa rede mundo pequeno. Também temos a intenção de investigar a natureza da não unicidade da energia interna do modelo em função da temperatura física do modelo.

Apêndice A

Integração Numérica

Consideramos uma função $f(x)$ contínua e conhecida em um intervalo $[a, b]$. Se conhecermos também sua primitiva $F(x)$, podemos escrever a solução através do Teorema Fundamental do Cálculo Diferencial e Integral:

$$\int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b) , \quad (\text{A.1})$$

onde $F'(x) = f(x)$. Porém, em muitas situações práticas nos deparamos com funções com primitivas desconhecidas ou de difícil obtenção. Por vezes, nem mesmo temos a função a ser integrada definida por uma fórmula analítica, e sim por uma tabela de pontos. Nessas situações não podemos utilizar a equação (A.1), tornando-se necessário o uso de técnicas numéricas.

Os métodos de integração numérica são algoritmos calculados por máquinas digitais. Dessa forma, há uma distinção entre a performance de algoritmos para diferentes dimensões. Essas diferenças, em alguns casos, podem ser demonstradas teoricamente ou simplesmente através de testes práticos de desempenho. Para integrais unidimensionais ¹, os métodos mais utilizados são regras de quadratura baseadas em função de interpolação. Esses, podem ser classificados em dois grupos:

- Fórmulas de Newton-Cotes: empregam valores de $f(x)$, onde os valores x são igualmente espaçados. Implementações populares incluem a regra do Trapezóide, regra de Simpson, regra 3/8 de Simpson e regra de Bode.
- Fórmulas de quadratura gaussiana: utiliza pontos diferentemente espaçados, onde este espaçamento é determinado por certas propriedades de polinômios ortogonais. Os algoritmos mais populares fazem uso da fórmula de Gauss-Legendre, fórmula de Gauss-Chebyshev, fórmula de Gauss-Hermite e fórmula de Gauss-Laguerre.

No caso de integrais multidimensionais, o método mais popular é o de Monte Carlo, abordado na seção (3.1). Neste apêndice vamos nos ater à Regra 3/8 de Simpson, pois a utilizamos como parte constituinte do método de Metropolis-Salazar-Toral, seção (3.4.1).

A.1 Regra 3/8 de Simpson

Todas as encarnações de algoritmos baseados nas fórmulas de Newton-Cotes, trabalham com a idéia de dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de mesmo espaçamento $h = (b - a)/n$ e substituir f por um polinômio interpolador de grau n . O polinômio usado é o polinômio interpolador de Gregory-Newton:

$$P_n(x) = y_0 + z\Delta y_0 + \frac{z(z-1)\Delta^2 y_0}{2!} + \dots + \frac{z(z-1)\dots(z-(n-1))\Delta^n y_0}{n!} , \quad (\text{A.2})$$

¹A solução numérica de uma integral simples, em geral unidimensional, é comumente chamada de quadratura.

onde

$$z = \frac{x - x_0}{h} . \quad (\text{A.3})$$

No caso específico da regra 3/8 de Simpson, substituímos f em (A.1) pelo polinômio de Gregory-Newton do terceiro grau ($n = 3$), $P_3(x)$. Assim, temos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_3(x)dx \quad (\text{A.4})$$

$$= \int_a^b \left[y_0 + z\Delta y_0 + \frac{z(z-1)\Delta^2 y_0}{2!} + \frac{z(z-1)(z-2)\Delta^3 y_0}{3!} \right] \quad (\text{A.5})$$

$$= \vdots \quad (\text{A.6})$$

$$= \frac{3h}{8} [y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3] . \quad (\text{A.7})$$

Utilizamos $n = 3$, mas devemos também escrever a fórmula composta que exige um n múltiplo de 3. Essa exigência vem da necessidade de se utilizar quatro pontos para determinar o polinômio do terceiro grau. Obtemos a fórmula composta dividindo o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de espaçamento $h = (b-a)/n$ e aplicando cada conjunto de quatro pontos, isto é, a cada três subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_{i-1}, x_i]$ $\forall i = 1, 2, \dots, n-2$ a equação (A.1):

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8} [y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3] + \frac{3h}{8} [y_3 + 3y_4 + 3y_5 + y_6] + \dots \quad (\text{A.8})$$

$$+ \frac{3h}{8} [y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n] \quad (\text{A.9})$$

$$= \frac{3h}{8} [y_0 + 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + 3y_5 + 2y_6 + \dots \quad (\text{A.10})$$

$$+ 2y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n] . \quad (\text{A.11})$$

Referências Bibliográficas

- [1] NEWMAN, M. E. J. e BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Nova Iorque: Oxford University press, 1999.
- [2] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guinde to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [3] ISING, E. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. , v. 31, p. 253, 1925.
- [4] ISING, E. *Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus*, Tese de Doutorado, Universidade de Hamburg, 1924.
- [5] PEIERLS, R.E. *On Ising's Model of Ferromagnetism*, P. Camb. Philos. Soc., v. 32, p. 477, 1936.
- [6] HEISENBERG, W. *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. v. 49, p. 619, 1928.
- [7] ONSAGER, L. *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. v. 62, p. 117, 1944.
- [8] STROGATZ, S. H. *Exploring Complex Networks*. Nature, v.410, p. 268, 2000.
- [9] MILGRAM, S. *The small world problem*. Psychol. Today, v. 2, p. 60, 1967.
- [10] <http://smallworld.columbia.edu>.
- [11] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>.
- [12] TSALLIS, C. *Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics*. J. Stat. Phys., v. 52, p. 479, 1988.
- [13] COOPER, F.; FREEDMAN, B.; PRESTON, D. *Solving $\phi_{1,2}^4$ Field Theory with Monte Carlo*. Nucl. Phys. B, v. 210, p. 210, 1982.
- [14] TSYPIN, M. M. *Universal Effective Potential for Scalar Field Theory in Three Dimensions by Monte Carlo Computation* Phys. Rev. Lett. v. 73, p. 2015, 1994.
- [15] REICHL, L. E. *A Modern Course in Statistical Physics*. Wiley-Interscience, 1998.
- [16] PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 1996.
- [17] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. Wiley, 1987.
- [18] KUBO, R. *Statistical Mechanics*. North-Holland, 1965.
- [19] REIF, F. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. New York: McGraw-Hill Book, 1965.
- [20] LANDAU, L. D. e LIFSHITZ, E. M. *Statistical Physics*. Addison-Wesley, 1969.
- [21] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 1997.

- [22] THOMPSON, C. J. *Classical equilibrium statistical mechanics*. Oxford: Clarendon Press, 1988.
- [23] Eds: ABE, S.; OKAMOTO, Y. *Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications*. Springer, 2001.
- [24] DE QUEIROZ, S. L. A. *Fenômenos Críticos em sistemas Magnéticos: Teoria*. São Paulo: SBF, 2000.
- [25] BINNEY, J. J.; DOWRICK, N. J.; FISHER, A. J. e NEWMAN, M. J. *The Theory of Critical Phenomena*. Oxford: Oxford Press, 1992.
- [26] YEOMANS, J. M. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford: Oxford Press, 1993.
- [27] PLISCHKE, M.; BERGERSEN, B. *Equilibrium Statistical Mechanics*. Singapore: World Scientific, 1994.
- [28] STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Clarendon: Oxford. 1971.
- [29] SAMUELSEN, E. J. *Experimental Study of the Two-Dimensional Ising Antiferromagnet Rb₂CoF₄*. Phys. Rev. Lett., v. 31, p. 936-938, 1973.
- [30] KADANOFF, L. P.; GÖTZE W.; HAMBLIN D.; HECHT R.; LEWIS E. A. S.; PALCIAUSKAS V. V.; RAYL M.; SWIFT J.; ASPNES, D. e KANE, J. *Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment*. Rev. Mod. Phys., v. 39, p. 395-431, 1967.
- [31] PESKIN, M. E.; SCHROEDER, D. V. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Westview Press, 1995.
- [32] RYDER, L. *Quantum Field Theory*. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1996.
- [33] HATFIELD, B. *Quantum Field Theory of Point Particles and Strings*. Westview Press, 1992.
- [34] HUANG, K. *Quantum Field Theory: From Operators to Path Integrals*. New York: Wiley, 1998.
- [35] ITZYKSON, C.; ZUBER, J-B. *Quantum Field Theory*. Dover Publications, 2006.
- [36] BAILIN, D.; LOVE, A. *Introduction to gauge field theory*. Dauville: Inderstche Printers Publishers, 1994.
- [37] ZEE, A. *Quantum Field Theory in a Nutshell*. Princeton: Princeton University Press, 2003.
- [38] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. *Equation of state calculations by fast computing machines*. J. Chem. Phys., v. 21, p. 1087, 1953.
- [39] CREUTZ, M. *Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory*. Phys. Rev., v. D21, p. 2308-2315, 1980.
- [40] KASTELEYN, P. W.; FORTUIN, C. M. *Phase Transitions in Lattice Systems with Random Local Properties*. J. Phys. Soc. Japan, v. 26s, p. 11, 1969.
- [41] FORTUIN C. M.; KASTELEYN, P. W. *On the random cluster model I: introduction and relation to other models*. Physica, v. 57, p. 536, 1972.
- [42] SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*. Phys. Rev. Lett., v. 58, p. 86, 1987.
- [43] LEHMER, D. H. *Combinatorial problems with digital computers*. Proc. of the Fourth Canadian Math. Congress, p. 160, 1957.
- [44] HOSHEN, J.; KOLPELMAN, R. *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*. Phys. Rev. B, v. 14, p. 3438, 1976.
- [45] WOLFF, U. *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*. Phys. Rev. Lett., v. 62, p. 361, 1989.
- [46] FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. *New Monte Carlo technique for studying phase transitions*. Phys. Rev. Lett., v. 61, p. 2635, 1988.

- [47] FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. *Optimized Monte Carlo data analysis*. Phys. Rev. Lett., v. 63, p. 1195, 1989.
- [48] ANDRICIOAEI, I.; STRAUB, J. E. *Generalized simulated annealing algorithms using Tsallis statistics: Application to conformational optimization of a tetrapeptide*. Phys. Rev. E, v. 53, p. R3055, 1996.
- [49] PENNA, T. J. P. *Traveling salesman problem and Tsallis statistics*. Phys. Rev. E, v. 51, p. R1, 1995.
- [50] TSALLIS, C.; MENDES, R. S.; PLASTINO, A. R. *The role of constraints within generalized nonextensive statistics*. Physica A, v. 261, p. 534, 1998.
- [51] DE OLIVEIRA, P. M. C.; PENNA, T. J. P.; HERRMANN, H. J.; *Broad histogram method*. Braz. J. Phys., v. 26, p. 677, 1996.
- [52] SALAZAR R.; TORAL R. *A Monte Carlo method for the numerical simulation of Tsallis statistics*. Physica A, v. 283, p. 59, 2000.
- [53] SALAZAR R.; TORAL R. *Thermostatistics of extensive and non-extensive systems using generalized entropies*. Physica A, v. 290, p. 159, 2001.
- [54] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley Sons, 1985.
- [55] JAMES, F. *A review of pseudorandom number generators*. Computer Physics Communications v.60, n. 3, p. 329-344, 1990.
- [56] LEHMER, H. D. *Proceedings of the Second Symposium on Large-Scale Digital Calculating Machinery*. Cambridge: Harvard University Press, 1951.
- [57] KNUTH, D. E. *The Art of Computer Programming, Volume 2 : Semi-numerical Algorithms*. Addison-Wesley, Reading.
- [58] PRESS, W. H.; FLANNERY, B. F.; Teukolsky, S. A. e Vetterling, W. T. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [59] MACLAREN M. D.; MARSAGLIA, G. *Uniform Random Number Generators*. J. ACM, v. 12(1), p. 83, 1965.
- [60] BAYS, C.; DURHAM, S. *Improving Poor Random Number Generator*. ACM Transaction on Mathematical Software 2 (1), p. 59; 1976.
- [61] L'ECUYER, P. *An Efficient and portable combined random number generators*. Comm. ACM, v. 31, p.742 e 774, 1988.
- [62] PARK, S. K.; MILLER, K. W. *Random Number Generators: Good Ones are Hard to Find*. Comm. ACM, v. 31, p. 1192, 1988.
- [63] TAUSWORTHE, R. C. *Random numbers generated by linear recurrence modulo two*. Math. Comp., v. 19, p. 201, 1965.
- [64] MARSAGLIA, G. *The mathematics of random number generators* Proc. Symposia Appl. Math., v. 46, p. 73, 1992.
- [65] MARSAGLIA, G.; ZAMAN, A.; TSANG, W.-W. *Toward a universal random number generator*. Stat. Prob. Lett., v. 9, p. 35, 1990.
- [66] MARSAGLIA, G.; ZAMAN, A. *A new class of random number generators*. Ann. Appl. Prob., v. 1, p. 462, 1991.

- [67] LUSCHER, M. *A portable high-quality random number generator for lattice field theory simulations.* Comput. Phys. Commun., v. 79, p. 100-110, 1994.
- [68] ALBERT, R.; A.-L. BARABÁSI, A.-L. *Statistical mechanics of complex networks.* Rev. Mod. Phys., v. 74, n. 1, 2002.
- [69] WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. *Collective dynamics of 'small-world' networks.* Nature, v.393, p. 440, 1998.
- [70] NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. *Renormalization group analysis of the small-world network model.* Phys. Lett. A, v. 263, p. 341, 1999.
- [71] NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. *Scaling and percolation in the small-world network model.* Phys. Rev. E, v. 60, p. 7332, 1999.
- [72] BINDER, K. *Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions.* Z. Phys. B, v. 43, p. 119, 1981.
- [73] CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P. *Critical behavior of the six-state clock model in two dimensions.* Phys. Rev. B, v. 33, p. 437, 1986.
- [74] CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P.; BINDER, K. *Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions.* Phys. Rev. B, v. 34, p. 1841, 1986.
- [75] MA, S. K. *Statistical Physics.* Cingapura: World Scientific, 1985.
- [76] BARRAT, A.; WEIGT, M. *On the properties of small-world network models.* Euro. Phys. J. B, v. 13, p. 547, 2000.
- [77] GITTERMAN, M. *Small-world phenomena in physics: the Ising model.* J. Phys. A: Math. Gen., v. 33, p. 8373, 2000.
- [78] PEKALSKI, A. *Ising model on a small world network.* Phys. Rev. E, v. 64, p. 057104, 2001.
- [79] HONG, H.; KIM, B. J.; CHOI, M. Y. *Comment on "Ising model on a small world network".* Phys. Rev. E, v. 66, p. 018101, 2002.
- [80] HERRERO, C. P. *Ising model in small-world network.* Phys. Rev. E, v. 65, p. 066110, 2002.
- [81] HASEGAWA, H. *Nonextensive aspects of small-world networks.* Physica A, v. 365, p. 383, 2006.
- [82] LIMA, A.R.; PENNA, T.J.P. *Tsallis statistics with normalized q-expectation values is thermodynamically stable: illustrations.* Phys. Lett. A v. 256, p. 221, 1999.
- [83] BAKER, G.A.; BENOFY, L. P.; COOPER, F.; PRESTON, D. *Analysis of the Lattice, Strobog Coupling Series for $g_0\varphi^4$ Field Theory with in d Dimensions.* Nucl. Phys. B, v. 210, p. 273, 1982.
- [84] FREEDMAN, B.; P. SOMOLENSKY, P.; WEINGARTEN, D. *Monte Carlo evaluation of the continuum limit of (b4) 4 and (b4) 3.* Phys. Lett. B, v. 113, p. 481, 1982.
- [85] COOPER, F.; FREEDMAN, B. *Renormalizing the effective potential for spontaneously broken $g\phi^4$ field theory.* Nucl. Phys. B, v. 239, p. 459, 1984.
- [86] CAMPOSTRINI, M.; PELISSETTO, A.; ROSSI, P.; VICARI, E. *25th-order high-temperature expansion results for three-dimensional Ising-like systems on the simple cubic lattice.* Phys. Rev. E, v. 65, p. 066127, 2002.
- [87] BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. *Eleventh-order calculation of Ising-limit Green's functions for scalar quantum field theory in arbitrary space-time dimension D.* Phys. Rev. D, v. 51, p. 1875, 1995.

- [88] SOKOLOV, A. I.; ORLOV, E. V. *Renormalized sextic coupling constant for the two-dimensional Ising model from field theory.* Phys. Rev. B, v. 58, p. 2395, 1998.
- [89] WHEATER, J. F. *Numerical Results on $\eta\varphi^6$ Theory in three dimensions.* Phys. Lett. B, v. 136, p. 402, 1984.
- [90] ARDEKANI, A.; WILLIAMS, A. G. *Optimization of Monte Carlo calculations of the effective potential.* Phys. Rev. E, p. 57, v. 6140, 1998.
- [91] ANANOS, G. N. J.; PINHEIRO, M. P. S. *The behavior of the sextic coupling for the the three-dimensional ϕ^4 theory.* , hep-lat/0512037.
- [92] DRUMMOND, I.T.; DUANE, S.; HORGAN, R.R. *The stochastic method for numerical simulations: higher order corrections.* Nucl. Phys. B, v. 220, p. 119, 1983.
- [93] DRUMMOND, I.T.; DUANE, S.; HORGAN, R.R. *Stochastic quantization simulation of φ^4 theory.* Nucl. Phys. B, v. 280, p. 25, 1987.
- [94] WESTON, R. A. *φ^4 in Three Dimensions. A Stochastic Slave Equation Simulation.* Phys. Lett. B, v. 219, p. 315, 1989.