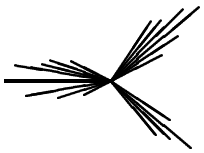

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO IFT–D.002/03

Estudo de Percolação de Clusters de Monte Carlo para o Modelo de Ising Bidimensional

Wanderson Gonçalves Wanzeller

Orientador

Prof. Dr. *Gastão Inácio Krein*

Co-orientadora

Profa. Dra. *Tereza Mendes*

Fevereiro de 2003

Agradecimentos

Gostaria de gradecer às seguintes pessoas

- Ao Gastão e à Tereza pela possibilidade de realização deste trabalho.
- Aos meus familiares pelo carinho e motivação durante estes dois anos de afastamento.
- Ao meu grupo de trabalho, em especial ao Sérgio pela ajuda no desenvolvimento inicial desta dissertação; à Raquel pelo auxílio na elaboração dos programas para ao cálculo de erros e pela leitura do rascunho desta dissertação; ao Victor e ao Leandro pelas conversas esclarecedoras e à Patricia (mesmo não estanto mais no grupo) pelo seu alto astral cativante e pelas rodas de chimarrão.
- Ao Gian, Paulo Gustavo, Vagner Castro, Wilian Hipólito, Márcio de Menezes, Marcelo Talarico, Carlos Eduardo e a tantos outros, por toda e qualquer tipo de ajuda ou apoio durante este período de convivência.
- Ao pessoal do Rio Grande; Ives, Giovane, Ana Paula, Vinicius. Por todas as mensagens enviadas sobre os mais diversos assuntos, a maioria besteiras, que ajudavam a diminuir as distâncias.
- Ao Fernando Kokubun e ao Dimiter Hadjimichef pela ajuda desde a gradução até hoje.
- Ao pessoal do polo, em especial ao Sr. Heitor e à Sra. Maria José, pela ajuda técnica. E a todos os funcionários do IFT que direta ou indiretamente ajudaram neste trabalho.
- À CAPES pelo apoio financeiro.

...e depois do começo
o que vier vai começar a ser o fim...

Renato Russo

Resumo

A teoria da percolação de clusters é empregada para estudar a transição de fase magnética no modelo de Ising bidimensional utilizando simulações de Monte Carlo. A teoria da percolação é de interesse para problemas de transições de fase em matéria condensada e em biologia e química. Mais recentemente, conceitos da teoria de percolação de clusters têm sido invocados em estudos da transição de desconfinamento dos quarks e glúons a altas temperaturas na Cromodinâmica Quântica. A dissertação apresenta uma revisão sucinta, mas autocontida, dos princípios básicos da teoria da percolação e sua relação aos fenômenos críticos, e dos principais métodos de Monte Carlo. Alguns resultados obtidos não são novos, no entanto, todos os códigos numéricos para as simulações e estimativas de erros são originais.

Palavras Chaves: Percolação; fenômenos críticos; modelo de Ising; método de Monte Carlo.

Áreas do conhecimento: Física estatistica; simulação numérica .

Abstract

Cluster percolation theory is employed to study the magnetic phase transition in the two dimensional Ising model using Monte Carlo simulations. Percolation theory is of interest in problems of phase transitions in condensed matter physics, and in biology and chemistry. More recently, concepts of percolation theory have been invoked in studies of quark-gluon deconfinement at high temperatures in Quantum Chromodynamics. The dissertation presents a brief, but selfcontained review of the basic principles of percolation theory, the relation of percolation to critical phenomena, and discusses the main Monte Carlo methods. Some of the results obtained are not new, but all numerical codes employed in the simulations and error estimate are original.

Keywords: Percolation; critical phemomena; Ising Model; Monte Carlo methods.

Índice

1 Introdução **x**

2 Teoria de Percolação **1**

2.1 Percolação de Sítios 3

2.2 Simulação Numérica com Condições de Contorno Livres 8

3 Fenômenos Críticos **12**

3.1 Fenômenos Críticos em Materiais Magnéticos 14

3.1.1 Expoentes Críticos 15

3.1.2 Universalidade 16

3.2 Expoentes Críticos para a Teoria da Percolação 17

3.3 Finite-Size Scaling 18

4 O Modelo de Ising **20**

4.1 Hamiltoniano, Função de Partição e Medidas de Observáveis 20

4.2 Algoritmo de Metropolis 21

4.3 Algoritmo de Banho Térmico 24

4.4 Algoritmo de Clusters 25

4.4.1 Algoritmo de Swendsen-Wang 25

4.4.2 Algoritmos de clusters *versus* teoria de percolação 27

4.5 Medidas de Erro 29

4.5.1 Correlação 29

4.5.2 Binning 31

5 Simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising bidimensional. **33**

6 Conclusões e Perspectivas **46**

A Algoritmo de Hoshen-Kopelman **48**

B Solução exata para o modelo de Ising **51**

Referências **57**

Relação das Figuras

2.1 Rede unidimensional, onde os círculos cheios (vazios) representam sítios ocupados (vazios). Só teremos um cluster percolante se todos os sítios estiverem ocupados. 2
2.2 Rede inicial de sítios ocupados ou não 4
2.3 Identificação dos clusters obtida a partir da Fig. 2.2. 4
2.4 Histograma da densidade de de sítios ocupados, gerados através de 1000 redes 30×30 distintas com $p = 0.6$. 5
2.5 Função degrau, a curva suave corresponde a $L < \infty$; temos o degrau quando $L = \infty$. Com $\langle P \rangle$ sendo a probabilidade de percolação. 6
2.6 Probabilidadede percolação $\langle P \rangle$ para vários volumes de rede. 8
2.7 Medida de $\langle P \rangle$ concentrada em p_c. 10
2.8 Histograma para 10000 configurações para vários tamanhos de redes. 11

3.1 Diagrama do espaço P, ρ, T, em (a) vemos as transições de primeira e de segunda ordem (diagrama $P - T$), em (b) temos as isotermas, o valor contante de P na isiterma para $T = T_c$ demonstra a coexistência das fases líquida e gasosa, a parábola é conhecida como *curva de coexistência*. 13
3.2 Diagramas do espaço H, m, T, em (a) temos o diagrama $H - T$ onde fica claro a transição de fase, em (b) representamos as isotérmas através de um diagrama $H - m$, em (c) mostramos o comportamento do parâmetro de ordem, a magnetização espontânea para $H = 0$. . . . 14
3.3 Curva de coexistêcia para oito fluidos, onde a curva sólida é o ajuste dos dados feito utlilizando uma curva cúbica. Esta figura foi retirada de [16, pag. 10] e também é encontrada em [5, pag. 23]. 17

4.1 Configuração de sítios para uma dada temperatura, em (a) temos apenas os sítios com seus respectivos spins; em (b) temos uma rede de clusters com os respectivos elos formados com probabilidade p_{ij} (Eq. (4.14)); em(c) a rede final após fliparmos os clusters com probabilidade 1/2. 28

4.2 esquema que representa como funciona o método de binning para uma amostra particular de oito medidas. 31

5.1 Comparativo entre as magnetizações medidas para o banho térmico e Metropolis com barras de erro com correlação. 36
5.2 Comparativo entre os erros na medida da magnetização com ASW. . 37
5.3 Comportamento de uma rede 100×100 na temperatura de Curie. A primeira linha foi obtida com o Metropolis, a segunda com banho térmico e a terceira com ASW. Nas colunas temos a evolução dos clusters em uma seqüência de três passos de Monte Carlo. 39
5.4 Comportamento do tempo de correlação medido com banho térmico e ASW, para uma rede 100×100 com 100 iterações. Fica demonstrado o comportamento crítico slowing down para o banho térmico e a atenuação deste no ASW. 40
5.5 Correlação dos valores de magnetização medidos para uma rede 100×100 com 1000 iterações. Na primeira linha temos os resultados para o banho térmico, na segunda para o ASW. Mostramos três regiões de temperatura. Na primeira coluna temos os valores para $T_c > T = 1.45$, na coluna central para $T_c \sim T = 2.24$ e na terceira coluna para $T_c < T = 3.03$. A linha tracejada corresponde ao ajuste de uma exponencial aos pontos. 42
5.6 Gráfico da probabilidade de percolação $\langle P \rangle$ para redes com $L = 100,\ 400,\ 600$ e 800. 45
5.7 Gráfico da pressão do clusters percolantes (Ω) para as diversas redes, demonstrando o comportamento crítico para esta quantidade. 45

B.1 Tipos de redes contínuas para o modelo de Ising . Em (a) temos uma rede uni-dimensional, que impondo continuidade, comporta-se como um anel, a figura (b) representa um rede bidimensional que, impondo-se continuidade, comporta-se como um toróide 55
B.2 Gráfico da Eq. (B.16) demonstrando o comportamento crítico do parâmetro de ordem tal qual ao previsto na Fig. 3.2 (c). 56

Relação das Tabelas

2.1 Tabela com a probabilidade de percolação 9

3.1 Definição de alguns expoentes críticos 16

5.1 Valores de magnetização e temperatura para uma rede 100×100 . . . 34
5.2 Medidas da magnetização para o modelo de Ising utilizando o ASW. . 35
5.3 Comportamento do tempo de correlação τ_c para o banho térmico e ASW 38
5.4 Pressão dos clusters percolante. 41
5.5 Valores da probabilidade de percolação 41
5.6 Erros na medida de $\langle P \rangle$ 43
5.7 Erros na medida de Ω 44

Capítulo 1

Introdução

O objetivo desta dissertação é empregar a teoria da percolação de clusters* ao modelo de Ising bidimensional utilizando simulações de Monte Carlo. Além do interesse intrínseco para problemas de transições de fase em física da matéria condensada e em biologia e química [1], estudos de percolação podem ser de relevância para o problema da transição de desconfinamento dos quarks e glúons a temperatura e densidades finitas na Cromodinâmica Quântica (QCD) [2]. A dissertação tem o objetivo de apresentar uma revisão sucinta, mas autocontida, dos princípios básicos da teoria da percolação e sua relação aos fenômenos críticos, e dos principais métodos de Monte Carlo. Os resultados obtidos aqui não são novos, no entanto, todos os códigos numéricos para as simulações e estimativas de erros foram desenvolvidos pelo autor.

O início dos estudos de percolação é atribuído a Flory e Stockmayer [3]. Estes autores estavam interessados em entender o processo de polimerização de macromoléculas, i.e. a formação de moléculas maiores a partir de moléculas menores à medida que o número de ligações químicas entre as moléculas aumentar. A teoria moderna da percolação e sua conexão com fenômenos críticos teve sua origem na década de 1970 [4].

O estudo de fenômenos críticos constitui uma área ampla dentro da física estatística, tanto sob seus aspectos teóricos quanto sob seus aspectos experimentais [5]. Fenômenos críticos estão associados a transições de fase de segunda ordem. As transições de fase de segunda ordem diferem das transições de fase de primeira ordem, cujo exemplo mais corriqueiro é a fusão ou a evaporação da água. As funções termodinâmicas apresentam derivadas segundas singulares na temperatura de transição, ou temperatura crítica T_c. Um outro aspecto importante relacionado a fenômenos críticos é sua conexão com quebra de simetrias. Conceitos de

*Nesta dissertação optamos pelo uso da denominação "clusters" em inglês, ao invés do termo "aglomerados" que é menos difundido.

fase ordenada, parâmetros de ordem e classe de universalidade, que surgiram neste contexto, foram transpostos para outros campos da física, como a teoria quântica de campos. Muito do entendimento atual da física das partículas elementares, e da QCD em particular, está baseado nestes conceitos [6].

O modelo protótipo para se explorar estas idéias é o modelo de Ising. Este modelo foi concebido na tese de doutorado de Ernst Ising, na Universidade de Hamburg, em 1924. Por sugestão de seu orientador, Wilhelm Lenz, Ising estava investigando as propriedades de materiais magnéticos como função da temperatura. Ising idealizou o material como sendo um sistema cristalino de spins com dois graus de liberdade que interagem apenas com seus primeios vizinhos. O modelo introduzido por Ising é muito atraente sob o ponto de vista teórico devido à simplicidade das configurações dos spins, que podem assumir apenas duas orientações ("up" ou "down"), e por ser analiticamente solúvel em uma e duas dimensões a campo nulo. Em sua versão bidimensional, o modelo de Ising apresenta uma transição de fase de segunda ordem; abaixo de uma temperatura crítica, os spins da rede se alinham espontaneamente em uma mesma direção; este alinhamento torna-se mais fraco com o aumento da temperatura. Acima desta temperatura crítica, os spins da rede orientam-se aleatoriamente. Desta maneira, o modelo reproduz qualitativamente o efeito da perda da magnetização espontânea do material quando a temperatura ultrapassa um valor crítico - o material transforma-se de ferromagnético em paramagnético. O nome do modelo de Ising foi cunhado por Rudolf Peierls em 1938, através do artigo entitulado "On Ising's Model of Ferromagnetism". A cada ano são publicados aproximadamente 800 artigos que empregam o modelo de Ising, nas mais diversas áreas. Ising morreu em 11 de maio de 1998 com 98 anos. Um artigo interessante sobre a vida de Ernst Ising pode ser encontrado no volume de março de 1999 da *Physics Today*.

Um aspecto fascinante da transição de fase no modelo de Ising é sua possível conexão com o fenômeno da percolação. Esta conexão surge naturalmente com a observação que o tamanho das regiões com spins paralelos (domínios) crescem à medida que a temperatura diminue em direção à temperatura crítica. Intuitivamente, o crescimento dos domínios leva a uma percolação de spins de um lado a outro da rede. As bases da teoria da percolação surgem com o trabalho pioneiro de Flory e Stockmayer [3] em crecimento de macromoléculas no período 1941-1943 e a conexão definitiva com o modelo de Ising veio com o trabalho de Coniglio e Klein [7].

Em teoria de percolação um conceito importante é o de *cluster percolante*. Este conceito pode ser ilustrado de uma maneira simples para clusters geométricos de redes de spins. Um cluster geométrico é formado por sítios adjacentes com spins idênticos. Isto é, partindo-se de uma configuração inicial de spins, ao se varrer a rede

e comparar spins de sítios adjacentes, diz-se que estes spins pertencem ao mesmo cluster se estes forem iguais. Este tipo de cluster é denominado cluster geométrico. Caso um dado cluster se estenda de uma lado a outro da rede, diz-se que este cluster percolou. Obviamente, a percolação de um cluster é determinada pela configuração de spins da rede. Por exemplo, suponhamos que geramos uma configuração de acordo com o seguinte critério: um dado sítio da rede terá spin up (down) se um número sorteado aleatoriamente for menor (maior) que um certo parâmetro externo fixo p, variando entre zero e um. Variando este parâmetro, certamente obteremos configurações diferentes e, portanto, a ocorrência de clusters percolantes dependerá do valor deste parâmetro. Ainda mais, é de se esperar que existam valores especiais de p para os quais clusters percolantes sempre existirão. Este tipo de percolação é denominado de *percolação de sítios*, e o valor especial para o parâmetro a partir do qual sempre existirá pelo menos um cluster percolante, p_c, determina um *ponto crítico* da percolação. Neste sentido, a percolação pode ser encarada como um fenômeno crítico.

As tentativas de tratar a transição de fase magnética no modelo de Ising com teoria de percolação falhavam em reproduzir a temperatura crítica magnética (chamada de temperatura de Curie). Em geral a temperatura crítica de percolação obtida era menor que a temperatura de Curie. Um passo decisivo no esclarecimento da situação foi o trabalho de Fortuin e Kasteleyn (FK) [9] em 1972. FK mostraram, a partir do hamiltoniano do modelo de Potts - do qual o modelo de Ising é um caso particular - que a função de partição deste modelo pode ser reescrita como uma soma sobre configurações de clusters de spins, ao invés de uma soma sobre configurações de spins. A conexão definitiva entre a transição magnética no modelo de Ising com o fenômeno da percolação veio com o trabalho de Coniglio e Klein (CK) [7]. Esta conexão é válida também para modelos de spins contínuos [8]. Usando a representação de clusters de FK para o modelo de Ising em duas dimenões, CK mostraram analiticamente, empregando técnicas de grupo de renormalização, que a temperatura crítica magnética do modelo de Ising determina o ponto crítico da percolação p_c, em que p_c depende de T_c através da fórmula $p_c = 1 - \exp(-2J/KT_c)$, onde J é a intensidade da interação spin-spin do modelo de Ising e K é a constante de Boltzmann.

Muitas vezes, modelos de interesse físico não permitem solução analítica. Este é o caso, por exemplo, do modelo de Ising em mais de duas dimensões. Muitos outros problemas de física estatística não podem ser resolvidos analiticamente, e uma alternativa que vem se destacando nas últimas décadas é o emprego de simulações numéricas genericamente denominadas de *métodos de Monte Carlo (MC)* [10]. Numa simulação de MC, a "evolução temporal" de um fenômeno, ou processo é feita de maneira estocástica, que depende da geração de números aleatórios na simulação.

A repetição da simulação, em que uma nova sequência de números aleatórios são gerados, levará a resultados diferentes dos obtidos numa simulação prévia, no entanto, as diferenças são tais que estas estão dentro do que se chama de "erro estatístico". A obtenção do valor de p_c para a percolação de sítios discutida acima é um exemplo da aplicação do MC. Para o modelo de Ising, formulado tanto na representação de configurações de spins, quanto na representação de clusters, há uma variedade de métodos MC. Os mais conhecidos, e que serão discutidos nesta dissertação, são os algoritmos de Metropolis e de banho térmico. Para a aplicação da teoria de percolação ao modelo de Ising, empregaremos o algoritmo de Swendsen-Wang [11].

Uma parte essencial em qualquer simulação é a estimativa de erros. Devido à natureza estocástica do MC, inevitavelmente haverá um erro inerente e sua avaliação pode não ser trivial. A forma mais simples de avaliar este erro é através do desvio padrão das medidas. Esta forma de análise não leva em consideração possíveis correlações dos dados, principalmente em algoritmos locais como o de Metropolis, que apresentam forte correlação na região da transição de fase, ou *região crítica*. Torna-se necessária uma análise do erro levando em conta estas correlações dos dados, e o conceito importante aqui é o *tempo de correlação*. Estes métodos, e outros como *binning*, serão discutidos no capítulo 4. Outra questão importante em qualquer simulação numérica, refere-se ao tamanho finito das redes empregadas, que não permite alcançar o limite termodinâmico. No entanto, é possível extrapolar resultados obtidos em redes finitas fazendo uso do princípio de *finite-size scaling*, o qual será discutido no capítulo 3.

Além desta Introdução, a dissertação contém mais 5 capítulos e dois apêndices. No próximo capítulo apresentamos uma revisão sobre a teoria da percolação e discutimos percolação de sítios. É feita uma aplicação numérica à percolação simples de sítios. Este estudo é importante para a descrição de uma transição de fase de segunda ordem e ao mesmo tempo são desenvolvidos boa parte dos códigos numéricos usados para o modelo de Ising, especialmente a rotina que rotula os clusters. O capítulo 3 apresenta uma breve revisão de fenômenos críticos. Neste mesmo capítulo será discutida a conexão entre percolação e fenômenos críticos. O capítulo 4 apresenta uma discussão sobre o modelo de Ising, discute os principais algoritmos de simulação e estimativas de erro. Os resultados numéricos das simulações estão apresentados no capítulo 5. Apresentamos as conclusões e perspectivas no capítulo 6. O apêndice A apresenta o algoritmo de Hoshen e Kopelman para a identificação de clusters, e o apêndice B apresenta a solução do modelo de Ising em uma e duas dimensões.

Capítulo 2

Teoria de Percolação

Neste capítulo faremos uma breve revisão sobre teoria de percolação. Para tanto, nos apoiamos na vasta literatura existente sobre este assunto [1]. Percolação está ligada a um *fluxo* de uma *substância* em um *meio* randômico. Os termos fluxo, substância e meio são abstratos e têm várias interpretações de acordo com o contexto adotado, como por exemplo: fogo em florestas, derramamento de óleo, formação de moléculas, etc [1, Cap. 1], [4]. Esta teoria surgiu com o estudo de *Flory e Stockmayer* (FS)[3] durante a segunda guerra mundial. Estes autores estudaram processos de polimerização de macromoléculas. FS estavam interessados em entender os processos de formação de macromoléculas a partir de moléculas menores com o aumento do número de ligações químicas entre as moléculas.

Podemos entender como se dá um processo de percolação através do exemplo do escoamento da água em um material poroso [14, Cap. 13]. Imaginemos que um cubo de material poroso seja colocado dentro de um recipiente com água; o líquido penetrará no material através de seus poros. Podemos tratar este cubo como uma rede de poros interligados que conduzirão a água até o seu interior e possivelmente a outra face do cubo. Mas nem todos os poros estão conectados, muitos não se ligam a outros, impedindo a passagem do líquido. Desta forma, dizemos que o líquido percolou (ou não) no material quando o líquido transpõe (ou não) totalmente o material. Podemos idealizar esta situação de uma forma simples. Supomos que o material forma uma rede cúbica onde os poros são representados pelos sítios desta rede. Com este tipo de rede os sítios podem ter dois estados, *vazios* ou *ocupados*, onde vazio significa um sítio que não será atingido pelo líquido, e ocupado significa um sítio por onde o líquido poderá passar. Em uma simulação numérica deste processo, a escolha de vazio ou ocupada seria feita aleatoriamente. A ocupação ou não do sítio respeita uma dada probabilidade P da seguinte forma. Seja R uma variável randômica uniformemente distribuida entre [0,1] e P a mencionada probabilidade.

Então, podemos impor que

$$\begin{aligned} R < P \quad &\rightarrow \text{sítio ocupado} \\ R > P \quad &\rightarrow \text{sítio vazio}\,. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Podemos rotular um sítio ocupado pelo valor 1 e um vazio por 0. Se dois sítios vizinhos estão ocupados, eles fazem parte de um *cluster*. Cluster é definido como um grupo de sítios da rede conectados a um primeiro vizinho (um sítio isolado forma um cluster unitário). Conforme já definido na Introdução, estes tipos de clusters são chamados de *clusters geométricos* por serem formados simplesmente analisando a geometria do material, ou seja, não existe elemento físico algum envolvido no estabelecimento do cluster. Esta conecção pode ser vista como um tubo entre um poro e outro por onde o líquido pode fluir. Como os integrantes de um cluster são todos conectados, nesta região o líquido percorrerá todos os sítios. E em certas situações, ou seja, para determinados valores de P, este cluster se extenderá de um lado a outro da rede formando o que chamamos de *cluster percolante*. A rede mais simples que podemos imaginar é uma rede unidimensional. Este tipo de rede torna o problema um tanto trivial: só teremos um cluster percolante se $P = 1$, significando que todos os sítios estão ocupados. Um exemplo teste tipo de rede é mostrado na Fig. 2.1.

Figura 2.1: Rede unidimensional, onde os círculos cheios (vazios) representam sítios ocupados (vazios). Só teremos um cluster percolante se todos os sítios estiverem ocupados.

Em particular, esta teoria pode ser relevante para tratar modelos que envolvem componentes que tenham apenas dois graus de liberdade, como o *Modelo de Ising*. Os componentes do modelo de Ising são spins que possuem apenas dois valores possíveis, $+1$ ou -1; neste caso os sítios não serão ocupados ou vazios, e sim receberão valores $+1$ ou -1. No entanto, como será visto mais adiante, a simples extensão da análise de percolação de sítios geométricos ao modelo de Ising, não levará a resultados corretos para a temperatura crítica.

Na próxima seção, faremos uma descrição geral da teoria de percolação e discutiremos os resultados obtidos para a percolação crítica através de simulações numéricas. Usaremos redes de tamanhos diferentes com condições de contorno livres.

2.1 Percolação de Sítios

Antes de considerarmos o modelo de Ising, vamos analisar a percolação de sítios em uma rede bidimensional. Em cada sítio desta rede, associamos o valor 1 ou 0, para indicar que este sítio está ocupado, ou não. Para analisarmos as propriedades de percolação desta rede, procedemos da seguinte maneira:

1. Geramos uma rede bidimensional $(i) \times (j)$ onde seus sítios estão ocupados com uma probabilidade p e vazios com probabilidade $(1-p)$. Esta ocupação é feita randomicamente. Para uma rede 30×30 e $p = 0.6$, geramos a Fig. 2.2.

2. Varremos a rede de uma maneira datilográfica, comparando o sítio $r(i,j)$ com os seus primeiros vizinhos. Um determinado sítio $r(i,j)$ tem como vizinhos $r(i \pm 1, j)$ e $r(i, j \pm 1)$. Escolhemos compará-lo com $r(i-1,j)$ e $r(i,j-1)$ somente, o que não representa nenhuma limitação , pois, ao final da varredura, todos os vizinhos de um certo sítio serão comparados devido à forma datilográfica da varredura da rede. Quando o sítio em análise não estiver ocupado, passamos imediatamente para o próximo. Se um sítio ocupado tem os seus vizinhos desocupados, um novo rótulo é dado a ele (conforme mostra o exemplo abaixo). Esta rotulação é feita de forma crescente, de maneira a formar clusters com rótulos crescentes. Isto não implica que o cluster identificado com o rótulo 4, por exemplo, contenha mais ou menos sítios que o cluster identificado com o rótulo 7, como ficará claro a seguir. A análise da ocupação de sítios pode ser feita utilizando uma rede periódica, ou uma rede com condições de contorno livres. Aqui faremos uso de uma rede com condições de contorno livres. Notamos que não temos comparação entre sítios diagonais em uma rede quadrada.

3. Durante a varredura podemos nos confrontar com a ambigüidade na rede de clusters representada aqui por ?. Neste caso não sabemos qual rótulo (5 ou 7) atribuir a este sítio.

4	0	5	0	6
0	7	?	0	6

   Uma escolha possível é tomar o menor valor (poderia também ser escolhido o valor maior). Neste ponto, notamos que deverá ocorrer um reordenamento dos rótulos do sítios. Este passo não é trivial; no Ap. A apresentamos o algoritmo Hoshen-Kopelman [12] que implementa este reordenamento. A Fig. 2.3 é o resultado obtido a partir da Fig. 2.2.

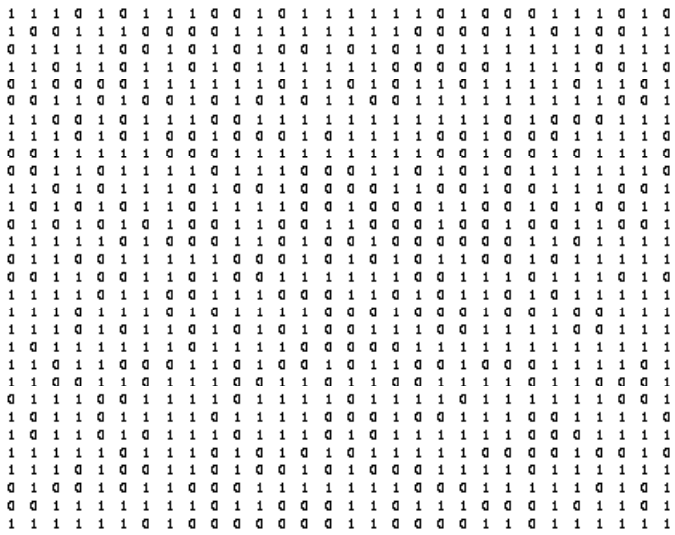

Figura 2.2: Rede inicial de sítios ocupados ou não .

Notamos que no processo de rotular os sítios de acordo com os números atribuídos aos clusters, geramos uma rede que denominamos de *rede de clusters*, tal como na Fig. 2.3.

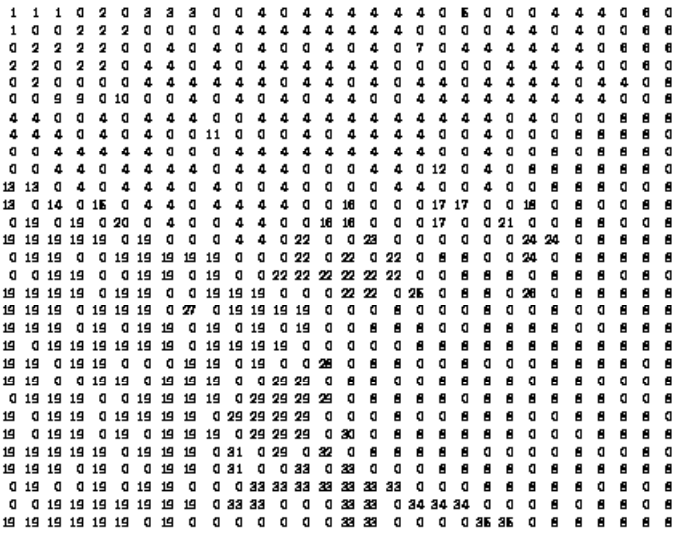

Figura 2.3: Identificação dos clusters obtida a partir da Fig. 2.2.

Podemos medir, por exemplo, a densidade de sítios ocupados, definida por

$$\rho_s = \frac{\sum_i s_i}{volume} \,. \tag{2.2}$$

onde

$$s_i = \begin{cases} 1\,, & \text{sítio ocupado} \\ 0\,, & \text{sítio vazio} \end{cases} \tag{2.3}$$

O comportamento desta quantidade pode ser visto no histograma da Fig. 2.4. Fica evidente, como esperado, que a densidade de sítios ocupados está intimamente ligada com o valor de probabilidade usada na simulação.

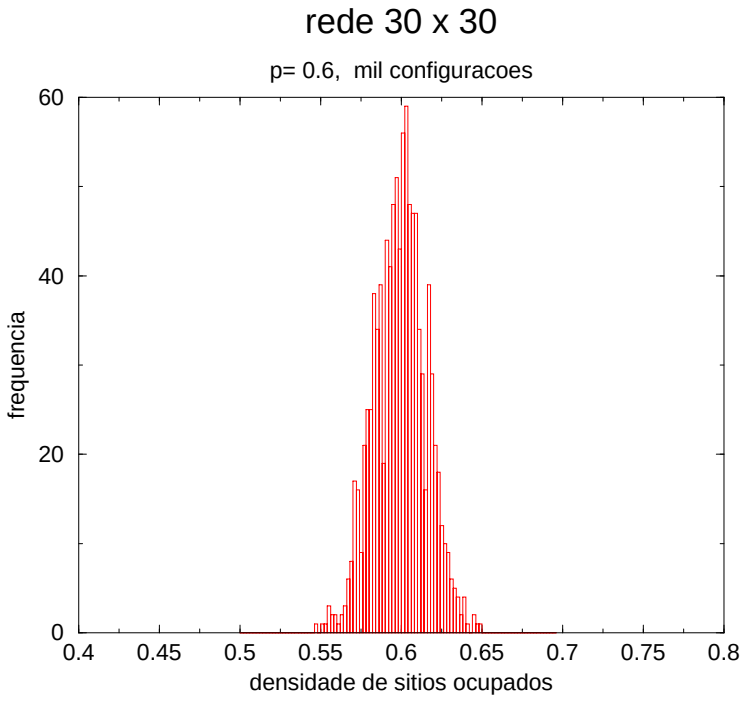

Figura 2.4: Histograma da densidade de de sítios ocupados, gerados através de 1000 redes 30×30 distintas com $p = 0.6$.

Podemos medir também o valor limite de p para o qual existe pelo menos um *cluster percolante*. Para uma rede unidimensional, obviamente este valor é igual a um. Estamos procurando um cluster que se estenda da primeira até a última coluna. Poderíamos, sem perda de generalidade, investigar os clusters que se estendem entre da primeira à última linha. Vamos analisar o primeiro caso.

Considerando a percolação como uma transição de fase de segunda ordem, podemos considerar o valor limite de p para o qual ocorre percolação, p_c, como o *ponto crítico* desta transição. Para uma rede bidimensional quadrada, o valor de p_c é conhecido numericamente e dado por [1, Cap. 2]

$$p_c \;=\; 0.592746\,. \tag{2.4}$$

Note que na Fig. 2.3 não ocorreu percolação , mesmo sendo $p > p_c$. Isto sugere que devemos gerar várias redes (ou configurações) identificando se ocorreu ou não percolação em cada uma destas. Ao final simplesmente calculamos a média de vezes que ocorreu percolação através do cálculo de uma média simples. Neste ponto temos o primeiro ponto crítico. A região nas proximidades de p_c é conhecida como região crítica. Discutiremos mais detalhes sobre fenômenos críticos no capítulo 3.

Em um gráfico de probabilidade de percolação, deveríamos observar o comportamento de uma função degrau no ponto crítico correspondendo a probabilidade zero abaixo de p_c e um acima de p_c. No entanto, devido ao tamanho finito de nossas redes, este comportamento não pode ser observado. Um exemplo deste comportamento pode ser visto pictoricamente na Fig. 2.5. Nesta figura, a curva suave é obtida com uma rede bidimensional finita de comprimento L . Para uma rede infinita ($L = \infty$), teremos exatamente o degrau, determinando assim o valor para o qual p seja igual a p_c. Devemos salientar que mesmo que estivéssemos trabalhando com condições de contorno periódicas em uma rede finita, não seria possível visualizarmos a função degrau. A vantagem de usar condições de contorno periódicas é que não são necessárias redes muito grandes. Com condições de contorno livres, o tamanho da rede deve ser relativamente grande, principalmente se desejamos medir p_c com boa precisão. Para uma análise da densidade de sítios ocupados, definida na Eq.(2.2), uma rede 30×30 já fornece um bom resultado, como é visto na Fig. 2.4.

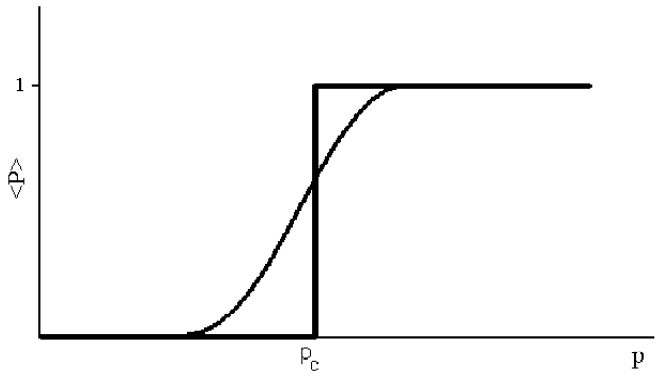

Figura 2.5: Função degrau, a curva suave corresponde a $L < \infty$; temos o degrau quando $L = \infty$. Com $\langle P \rangle$ sendo a probabilidade de percolação.

A probabilidade de que um determinado sítio da rede pertença a um cluster de tamanho s é n_s. Então, a probabilidade de que um sítio qualquer pertença a qualquer cluster é igual à probabilidade do sítio estar ocupado, ou seja, desde que o

sítio esteja ocupado, ele pertencerá a um cluster. Então,

$$\sum_s n_s s = p, \text{ com a condição que } p < p_c\,,$$

com a soma se extendendo sobre todos os clusters da rede. Se pensarmos no caso unidimensional, onde a condição passa a ser $p = p_c = 1$, rapidamente nos convenceremos da validade da equação acima. Para um determinado sítio da rede, a probabilidade de que ele pertença a um determinado cluster s da rede é

$$\omega_s = \frac{n_s s}{\sum_s n_s s}\,. \tag{2.5}$$

Com estas equações podemos definir o tamanho médio do cluster [1],

$$S = \sum \omega_s = \sum \frac{n_s s^2}{\sum n_s s}\,. \tag{2.6}$$

Se a soma na Eq. (2.6) incluir o cluster percolante, S será infinito. Ou seja, S diverge em p_c, demonstrando um comportamento crítico da forma (no limite termodinâmico)

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma}\,, \tag{2.7}$$

onde γ é o expoente crítico.

Outra quantidade útil é a *pressão do cluster percolante*, que é definida como:

$$\Omega \equiv \begin{cases} 0\,, & p < p_c \\ \Delta/V\,, & p \geq p_c\,, \end{cases} \tag{2.8}$$

onde $\Delta = n_s$ é o volume do cluster percolante e $V = L^2$ o volume da rede. Esta quantidade mede o peso que o cluster percolante exerce na rede, considerando a fração da rede que faz parte deste cluster.

Também podemos medir a probabilidade de que, para um dado p, ocorra percolação. Ou simplesmente, a probabilidade de percolação, a qual denotaremos por $\langle P \rangle$. Estas duas quantidades, Ω e $\langle P \rangle$, serão obtidas para o modelo de Ising no capítulo 5, $\langle P \rangle$ também será obtida para o caso de percolação simples.

O nosso objetivo nesta seção foi estudar a teoria de percolação. A seguir vamos implementar um algoritmo numérico para a medida (cálculo) de p_c em uma rede quadrada bidimensional. Existem disponíveis na literatura vários programas numéricos para implementar algoritmo de percolação, como por exemplo, [1, Ap. A]. Os resultados mostrados na próxima seção foram obtidos a partir de um programa elaborado por nós tendo como apoio a ampla literatura, principalmente a última citação. A linguagem de programação adotada foi *FORTRAN 77*.

2.2 Simulação Numérica com Condições de Contorno Livres

Escrevemos um código numérico para implementar o algoritmo de percolação de sítios, descrito na seção anterior. Realizamos simulações para vários tamanhos de rede com condições de contorno livres. Idealmente, gostaríamos de visualizar um gráfico como o mostrado na Fig. 2.5, no entando, como não podemos fazer uma rede infinita, encontraremos no máximo um curva suave. Trabalhamos com redes quadradas de volume igual a L^2 com L sendo $100, 250, 400, 600$ e 1000. A probabilidade de percolação é nula antes da região crítica e 1 após a região crítica. Para pouparmos tempo de processamento numérico vamos nos concentrar nos valores de p próximos a p_c, i.e., na região crítica.

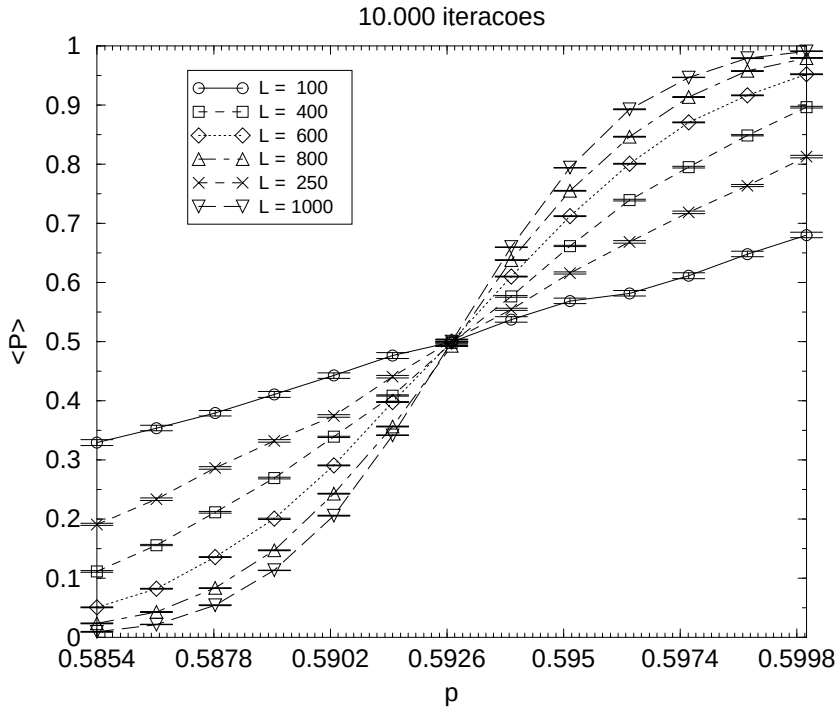

Figura 2.6: Probabilidadede percolação $\langle P \rangle$ para vários volumes de rede.

Encontramos os valores da probabilidade de percolação para 10000 iterações (*sweeps*), ou seja, para 10000 configurações diferentes. Calculamos também os seus respectivos "erros ingênuos", σ^{ing}, que estão listados na Tab. (2.1). Erro ingênuo é simplesmente o desvio padrão nas medidas de qualquer observável. Uma discussão mais elaborada sobre medidas de erros será apresentada no capítulo 4. O gráfico destes valores está apresentado na Fig. 2.6. Como esperado, quanto maior a rede, mais o comportamento da curva se aproxima de um degrau. Mesmo para uma rede

	$L = 100$		$L = 250$		$L = 400$	
p	$\langle P \rangle$	σ^{ing}	$\langle P \rangle$	σ^{ing}	$\langle P \rangle$	σ^{ing}
0.58540	0 329567	4.8926E-03	0.191081	1.9715E-03	0.111688	1.2241E-03
0.58662	0.353864	4.8107E-03	0.233876	1.9581E-03	0.156184	1.2286E-03
0.58783	0.379162	4.8072E-03	0.286573	1.9507E-03	0.211578	1.2240E-03
0.58905	0.410559	4.8545E-03	0.332166	1.9459E-03	0.269373	1.2325E-03
0.59027	0.442555	4.8883E-03	0.374463	1.9682E-03	0.339066	1.2225E-03
0.59148	0.476452	4.9070E-03	0.440756	1.9378E-03	0.408959	1.2436E-03
0.59270	0.499150	4.8202E-03	0.501749	1.9869E-03	0.497950	1.2262E-03
0.59392	0.537446	4.8194E-03	0.554544	1.9699E-03	0.576442	1.2190E-03
0.59513	0.568843	4.8455E-03	0.615838	1.9457E-03	0.661633	1.2206E-03
0.59635	0.568843	4.8331E-03	0.668533	1.9537E-03	0.739226	1.2324E-03
0.59757	0.611438	4.8473E-03	0.718428	1.9359E-03	0.794720	1.2139E-03
0.59878	0.648035	4.7691E-03	0.763723	1.9653E-03	0.848715	1.2192E-03
0.60000	0.680132	4.8223E-03	0.812818	1.9387E-03	0.896310	1.2131E-03

	$L = 600$		$L = 800$		$L = 1000$	
p	$\langle P \rangle$	σ^{ing}	$\langle P \rangle$	σ^{ing}	$\langle P \rangle$	σ^{ing}
0.58540	0.0050895	8.2449E-04	0.002379	6.1180E-04	0.000939	4.9174E-04
0.58662	0.0082191	8.1925E-04	0.004309	6.1375E-04	0.002189	4.9233E-04
0.58783	0.1356864	8.1450E-04	0.008349	6.1546E-04	0.005449	4.8909E-04
0.58905	0.2005799	8.2097E-04	0.147085	6.1828E-04	0.113488	4.9061E-04
0.59027	0.2908709	8.1822E-04	0.242975	6.0871E-04	0.205779	4.9125E-04
0.59148	0.3978602	8.1737E-04	0.356664	6.1342E-04	0.341765	4.9141E-04
0.59270	0.5002500	8.2005E-04	0.492550	6.1155E-04	0.500250	4.8975E-04
0.59392	0.6100390	8.1775E-04	0.637936	6.1535E-04	0.659634	4.9220E-04
0.59513	0.7119288	8.1552E-04	0.755124	6.1335E-04	0.793921	4.8971E-04
0.59635	0.8004200	8.1823E-04	0.846315	6.0695E-04	0.892711	4.8963E-04
0.59757	0.8705129	8.1568E-04	0.913608	6.1411E-04	0.946405	4.9114E-04
0.59878	0.9162084	8.1457E-04	0.957304	6.1191E-04	0.979102	4.8567E-04
0.60000	0.9518048	8.1634E-04	0.979402	6.1304E-04	0.990701	4.8802E-04

Tabela 2.1: Tabela com a probabilidade de percolação sítios ocupados para vários tamanhos de rede, um gráfico destes valores pode ser visto na Fig. 2.6.

com 10^6 sítios, ainda estamos longe da situação ideal (um degrau). São observados efeitos de volume finito para $L < 100$.

Aqui, não precisamos fazer uma análise de erros gerados por correlação, pois em cada iteração geramos uma configuração inicial diferente e não guardamos nenhuma informação da configuração anterior. Desta forma, a medida em um determinado passo de Monte Carlo é imediatamente desconectada com o passo anterior. O único erro é o inerente do método de Monte Carlo. Na Fig. 2.6, notamos uma inversão na concavidade da curva em $p = 0.59274 \pm 0.00001$ e $\langle P \rangle \sim 0.5$ (veja Fig. 2.7).

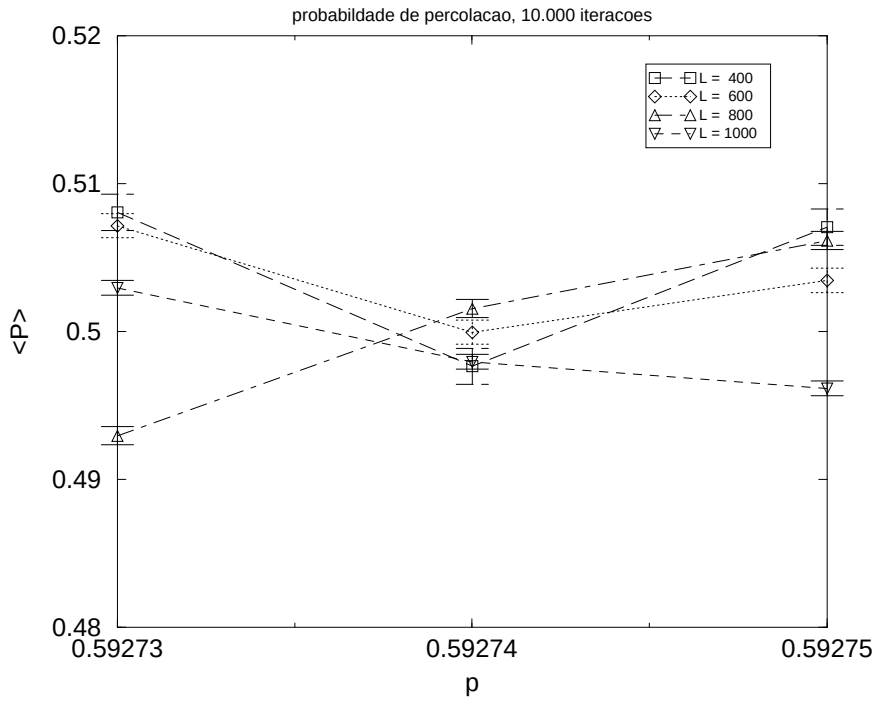

Figura 2.7: Medida de $\langle P \rangle$ concentrada em p_c.

Isto nos oferece uma medida de $p_c = 0.59274$, que é consistente dentro dos erros com o valor mencionado na Eq. (2.4), devido ao fato de todas as curvas cruzarem neste ponto. Isto demonstra o bom comportamento do algoritmo. Neste ponto temos a primeira utilização do escalonamento de tamanho finito, que será introduzido na seção 3.3. Este princípio nos garante que podemos medir propriedades termodinâmicas a partir de volumes de redes finitos, por esta razão todas as curvas cruzam no mesmo valor.

Como ilustração do carater estocastico dos observáveis medidos, vamos comprovar a ligação entre a probabilidade p e a densidade de sítios ocupados ρ_s, traçamos histogramas para as várias redes utilizadas aqui. Desta forma, temos o conjunto de histogramas mostrados na Fig. 2.8. Nos limitamos a mostrar os histogramas dos

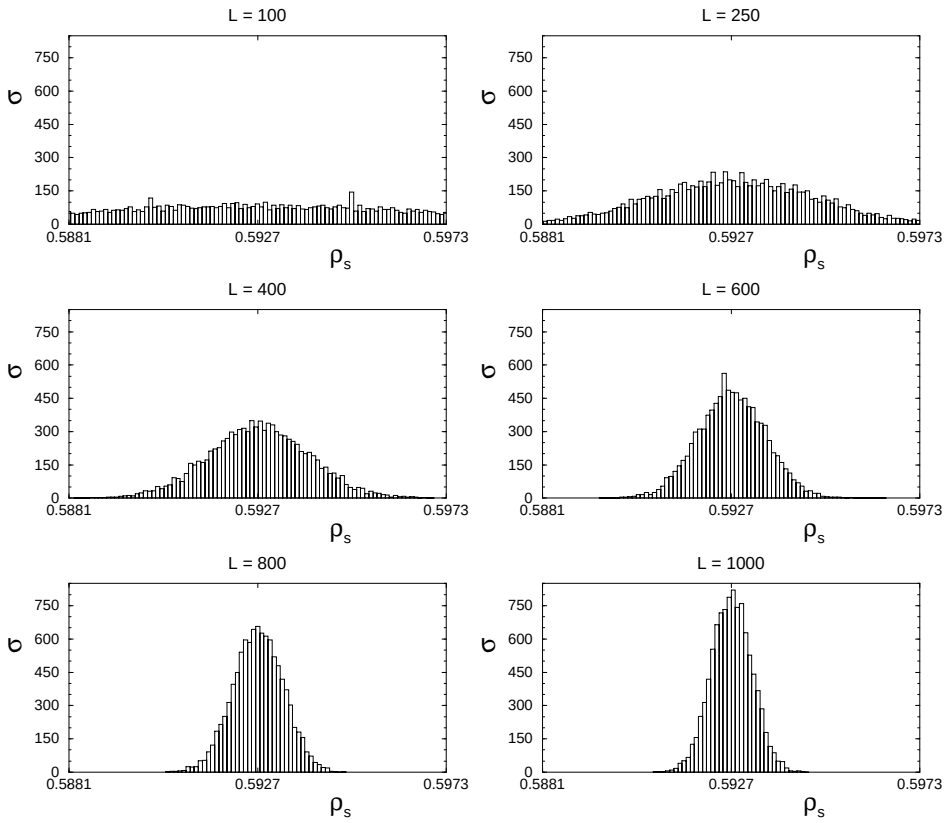

Figura 2.8: Histograma para 10000 configurações para vários tamanhos de redes.

dados para $p \sim p_c$. Note que temos uma distribuição gaussiana centrada próxima a p_c. Quanto maior a rede, mais concentrados são os dados no valor de p_c. Este comportamento verifica a lei dos grande números e o teorema do limite central [13].

A seguir, vamos analisar o modelo de Ising sob o ponto de vista da teoria da percolação. Antes, vamos revisar alguns conceitos sobre fenômenos críticos.

Capítulo 3

Fenômenos Críticos

Em nosso dia-a-dia, realizamos várias experiências que estão diretamente ligadas com fenômenos críticos. Quando colocamos água para aquecer, visualizamos uma transição de fase, neste caso, do estado líquido para o gasoso. Em um condensador(facilmente encontrado em refrigeradores de ar) temos o efeito oposto, a transição de fase é da gasosa para a líquida. Também existe a transição da fase sólida para a líquida, e vice-versa. Este tipo de transição é de primeira ordem, pois envolve *calor latente*. Quando o material realiza uma transição de fase de uma temperatura alta para uma infinitesimalmente mais baixa, uma quantidade de calor (calor latente) é emitida. Isto nos indica que o material sofreu uma signifitiva mudança em sua estrutura. Um exemplo deste tipo de transição pode ser visto na passagem da fase líquida da água, onde as moléculas estão totalmente desordenados, para a fase sólida, onde as moléculas tendem a formar uma rede cristalina.

A equação de estado de um fluido é representada por um funcional da pressão (P), da temperatura (T) e da densidade (ρ). Estes três parâmetros termodinâmicos formam uma superfíce no espaço P, ρ, T onde cada ponto deste espaço corresponde a um ponto de equílibrio termodinâmico do fluido. Na Fig. 3.1 (a) temos diagramas no plano $P-T$ desta superfíce formando um diagrama de fases do fluido. No gráfico o ponto (T_t, P_t) representa o ponto tríplice, i.e., neste ponto temos a coexistência das três fases do fluido e as transições de fase são de primeira ordem. Mas nesta mesma figura o ponto (T_c, P_c) que é conhecido como *ponto crítico*, representando o fim da coexistência das fases líquida e gasosa. Seguindo a linha de coexistência entre as fases líquida e gasosa, a diferença entre as densidades do líquido e do gás é cada vez menor, anulando-se no ponto crítico. Com isto, as duas fases tornam-se idênticas. Uma transição deste tipo é dita contínua, ou de *segunda ordem*, no sentido que a primeira derivada da energia livre em relação à temperatura é contínua. Seguindo a linha de coexistência entre as fases sólida e líquida, poderíamos pensar em um ponto crítico para esta região, no entanto, uma transição de fase de segunda ordem

entre estas duas fases não é observada experimentalmente. Isto nos leva a supor que esta linha de coexistência se estende infinitamente, não exibindo um comportamento crítico. Na Fig. 3.1 (b) temos uma diagrama $P - v$, onde $v = V/N$, com V sendo o volume e N o número de moles do fluido. A quantidade v é conhecida como volume específico. Nesta figura fica claro o que ocorre nas diferentes faixas de temperatura. O valor constante de P entre v_l e v_g para $T < T_c$ indica a coexistência da fase líquida, com volume específico v_l, e da fase gasosa, com volume específico v_g; a parábola representa a curva de coexistência vista na Fig. 3.1 (a).

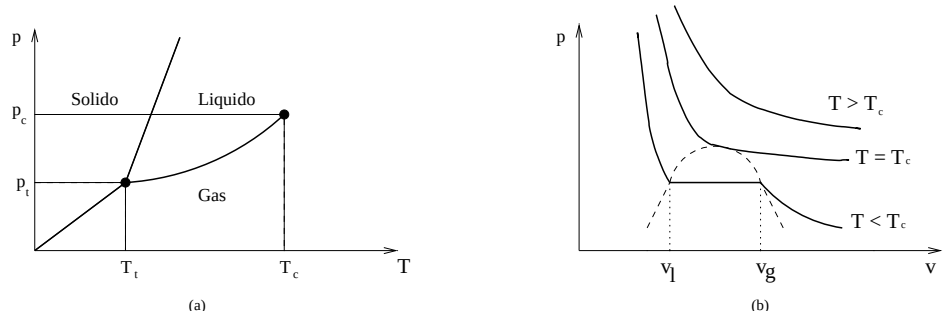

Figura 3.1: Diagrama do espaço P, ρ, T, em (a) vemos as transições de primeira e de segunda ordem (diagrama $P - T$), em (b) temos as isotermas, o valor contante de P na isiterma para $T = T_c$ demonstra a coexistência das fases líquida e gasosa, a parábola é conhecida como *curva de coexistência.*

Com o aumento da temperatura, a diferença entre os volumes específicos das fases líquida e gasosa, $\varphi = v_g - v_l$, torna-se cada vez menor ao ponto de anular-se quando $T = T_c$. Também podemos ver este comportamento descrevendo a densidade do líquido, $\rho_l = 1/v_l$, e a do gás, $\rho_g = 1/v_g$, em um diagrama $P-\rho$, análogo ao $P-v$. Note que a quantidade $\psi = \rho_l - \rho_g$, da mesma forma que φ, é nula acima de T_c, mas diferente de zero abaixo, demonstrando que esta quantidade está intimamente ligada a T_c. ψ é conhecida como *parâmetro de ordem* para o ponto crítico gás-líquido, e a continuidade deste parâmetro de ordem demonstra uma transição de segunda ordem.

No entanto, não estamos interessados diretamente em fenômemos críticos em um fluido. Desejamos descrever a transição de fase de segunda ordem em um material magnético. Mas, respeitando algumas analogias, podemos realizar um tratamento de um material magnético tal como foi feito para um fluido. A região ao redor do ponto crítico é chamada de *região crítica.* No restante deste capítulo faremos uma discussão sobre fenômenos críticos em materiais magnéticos, seus pontos críticos e parâmetro de ordem [15, Cap. 12].

3.1 Fenômenos Críticos em Materiais Magnéticos

Da mesma forma que determinamos a equação de estado para um fluido como função de P, ρ, T podemos estipular que a equação de estado para um material magnético é um funcional da magnetização (m), do campo magnético (H) e da temperatura. Em um fluido, se aplicarmos pressão sua densidade aumenta; se aplicarmos um campo magético em um material ferromagnético a magnetização aumentará, desta forma podemos tratar o campo magnético e a magnetização tal como a pressão e a densidade respectivamente. Também podemos traçar uma superfície no espaço H, m, T, e as diagramas deste espaço de fase nos planos $H - m$, $H - T$ e $m - T$, serão úteis para o estudo crítico deste sistema. O diagrama no plano $H - T$ da superfice H, m, T, que pode ser vista na Fig. 3.2 (a), demonstra um ponto crítico quando $H = 0$. Por razões históricas, este ponto é chamado de *temperatura de Curie* (T_c) que é a temperatura em que ocorre a transição de fase de segunda ordem, ou simplesmente, a temperatura crítica. Este diagrama demonstra que o sistema magnético é muito mais simétrico que um fluido, ao longo da curva de coexistência temos duas fases ferromagnéticas distintas, uma com a maioria dos spins do material apontando para baixo e outra com a maioria dos spins apontando para cima. Estas duas fases ferromagnéticas sofrem uma transição de primeira ordem. Se para um dado valor de temperatura aumentarmos o campo magnético externo, os spins terão a mesma direção do campo, logo não existe uma continuidade na transição.

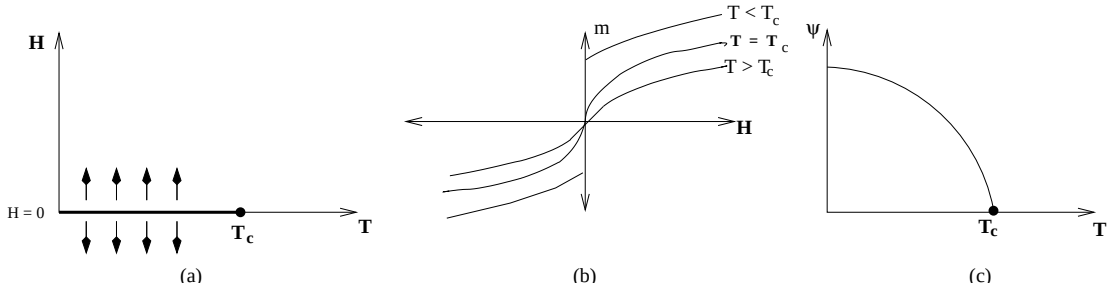

Figura 3.2: Diagramas do espaço H, m, T, em (a) temos o diagrama $H - T$ onde fica claro a transição de fase, em (b) representamos as isotérmas através de um diagrama $H - m$, em (c) mostramos o comportamento do parâmetro de ordem, a magnetização espontânea para $H = 0$.

Todos os materiais ferromagnéticos possuem uma magnetização espontânea a campo nulo. Isto está refletido nos spins que formam o material, o comportamento

desses spins determina a fase em que se encontra o material. Temos duas fases, uma ferromagnética, com a maior parte dos spins alinhados, e outra paramagnética com os spins totalmente desalinhados (a campo nulo).

Em um material magnético temos isotermas da mesma forma que em um fluido, conforme mostra a Fig. 3.1 (b). Para visualizá-las é necessário um diagrama do espaço H, m, T no plano $m - H$; este diagrama pode ser visto na Fig. 3.2 (b). Por analogia, o parâmetro de ordem ψ em um modelo magnético será a magnetização espontânea. As magnetizações espontâneas para ambas as fases ferromagnéticas (campo nulo) são iguais em módulo. A Fig. 3.2 (c) representa a magnetização espontânea (em módulo). Para temperaturas maiores que a temperatura crítica, i.e., quando estamos em uma fase paramagnética, esta magnetização torna-se nula, pois os spins estão totalmente desalinhados. Esta discussão indica que a magnetização é o parâmetro de ordem do sistema [16, Cap. 1].

Um aspecto importante no estudo de transições de fase é sua conexão com quebras de simetrias. No caso da magnetização espontânea, observamos que abaixo de T_c o parâmetro de ordem indica uma fase ordenada, revelando um estado do sistema com menos simetria do que o estado da fase desordenada, a temperaturas acima de T_c. No próximo capítulo vamos retornar a esta questão.

3.1.1 Expoentes Críticos

Examinando a Fig. 3.2 (c) notamos que o parâmetro de ordem (magnetização) tende a zero quando $T \to T_c$, então podemos representá-lo por

$$m \sim |t|^{\beta}, \tag{3.1}$$

com $t \equiv (T - T_c)/T_c$, onde t é chamada de temperatura reduzida. Em uma transição de fase de segunda ordem, o comportamento de certas grandezas termodinâmicas na região crítica torna-se divergente. No fluido, a compressibilidade isotérmica é definida por

$$\kappa_T \equiv |T - T_c|^{-\gamma}. \tag{3.2}$$

Notamos que esta quantidade diverge em $T = T_c$. Para um material magnético temos uma grandeza análoga à compressibilidade isotérmica, a suscetibilidade magnética, definida por

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_T \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \tag{3.3}$$

Na região $T < T_c$ a magnetização é dada por

$$m \sim m_0(T) + \chi_T H. \tag{3.4}$$

com

$$m_0(T) \sim (T_c - T)^{\beta} . \tag{3.5}$$

Na temperatura de Curie,

$$m \sim H^{1/\delta} . \tag{3.6}$$

Os expoentes γ, β, δ e outros são conhecidos como expoentes críticos, e suas definições aparecem listadas na Tab. (3.1) abaixo. As quantidades $c_B, m, \chi_T, G^{(2)}$ e ξ representam o calor específico, parâmetro de ordem (magnetização), susceptibilidade, função de correlação de dois pontos e o comprimento de correlação, respectivamente.

Expoentes	Definição		
α	$c_B \sim \alpha^{-1}(\lvert t\rvert^{-\alpha} - 1)$,	$T \to T_c$,	$H = 0$
β	$m \sim \lvert t\rvert^{\beta}$,	$T \to T_c$,	$H = 0$
γ	$\chi_T \sim \lvert t\rvert^{-\gamma}$,	$T \to T_c$,	$H = 0$
δ	$m \sim H^{1/\delta}$,	$T = T_c$,	$H \to 0$
η	$G^{(2)}(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$,	$T = T_c$,	$H = 0$
ν	$\xi \sim \lvert t\rvert^{-\nu}$,	$T \to T_c$,	$H = 0$

Tabela 3.1: Definição de alguns expoentes críticos [5, Cap. 1, Tab. (1.1)].

3.1.2 Universalidade

Os valores numéricos medidos para os expoentes críticos de diversos sistemas diferentes revelam uma semelhança incrível considerando as margens de erro. Isto mostra um comportamento universal da natureza na região crítica. Este fato é conhecido como *universalidade*. Um expoente crítico qualquer ϱ medido, por exemplo para O_2, é o mesmo que para o N_2. Isto demonstra um comportamento universal dos sistemas contidos dentro de uma *classe de universalidade*, ou seja, alguns fluidos terão o mesmo comportamento na região crítica. No entanto, fatores de escala podem influenciar na medida de algum observável. Para identificarmos vários sistemas dentro de uma mesma classe de universalidade, em muitos casos, precisamos fazer um re-escalamento de suas dimensões.

Este comportamento também é evidenciado para materiais magnéticos, tais como o Ferro, Níquel, etc (veja [5, Cap. 1, Tab. (1.2)]). Desta forma, concluímos que o

comportamento termodinâmico próximo ao ponto crítico é universal para diferentes sistemas. Um gráfico da curva de coexistência para oito fluidos pode ser visto na Fig. 3.3. Nesta figura, a curva sólida (que representa a curva de coexistência) é um ajuste dos dados utilizando uma equação cúbica [16, Cap. 1]. Podemos dizer que estes oito fluidos fazem parte de uma mesma classe de universalidade.

A universalidade depende basicamente de três fatorres: (*i*) das dimensões do sistema; (*ii*) do alcance das interações entre as componentes que formam o sistema; (*iii*) e das simetrias existentes (número de componentes do parâmetro de ordem). No que segue, não trataremos mais deste assunto.

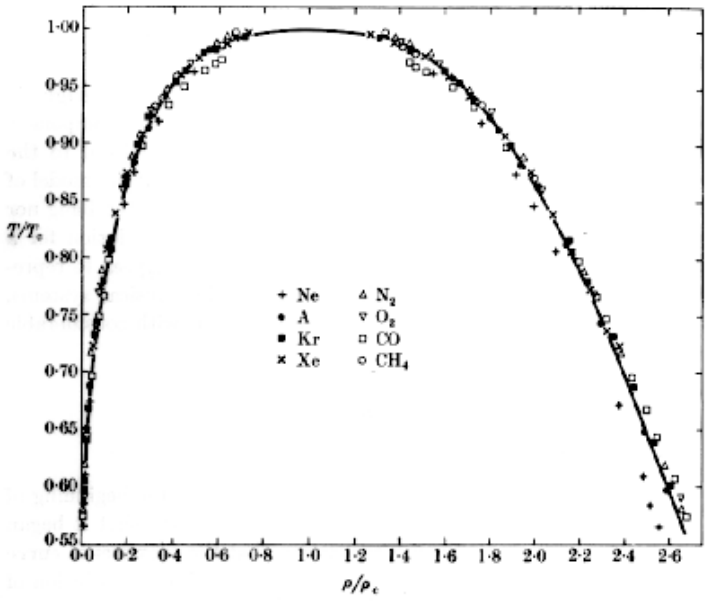

Figura 3.3: Curva de coexistêcia para oito fluidos, onde a curva sólida é o ajuste dos dados feito utlilizando uma curva cúbica. Esta figura foi retirada de [16, pag. 10] e também é encontrada em [5, pag. 23].

3.2 Expoentes Críticos para a Teoria da Percolação

A temperatura crítica para modelos magnéticos representa um ponto crítico para o sistema. Por analogia, como já visto no capítulo anterior, podemos considerar p_c como um ponto crítico para a percolação. Neste caso, se $p < p_c$, temos diversos clusters não percolantes. Quando $p > p_c$, existe um cluster percolante. Podemos tratar a região próxima à crítica como uma transição de fase de segunda ordem.

Conforme visto acima, o parâmetro de ordem (magnetização) e a susceptibilidade no modelo magnético são dados respectivamente por:

$$m \sim |T - T_c|^{\beta}, \qquad T < T_c, \tag{3.7}$$

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \tag{3.8}$$

Por analogia [1], no modelo de percolação o parâmetro de ordem (pressão do cluster percolante) e o tamanho médio dos clusters são dados por:

$$\Omega \sim (p - p_c)^{\beta}, \qquad p > p_c, \tag{3.9}$$

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma}. \tag{3.10}$$

3.3 Finite-Size Scaling

A teoria descrita até o momento aplica-se somente no limite termodinâmico. No entanto, simulações numéricas somente podem ser efetuadas em redes finitas. Mas, podemos obter informações sobre o limite termodinâmico através de simulações para diferentes tamanhos de rede, tal como foi feito na Fig. 2.6. Nesta figura, notamos que todas as curvas se interceptam no mesmo ponto, $p = 0.5927$, fornecendo assim o valor crítico p_c. Neste sentido, mesmo realizando simulações em redes finitas, podemos medir uma quantidade característica de uma rede infinita, i.e., podemos retirar informações de volume infinito a partir de valores medidos em um volume finito. Este procedimento é chamado de *escalonamento de tamanho finito* (finite-size scaling), e será amplamente empregado nesta dissertação.

Sempre que desejamos medir um ponto ou um expoente crítico, podemos utilizar este procedimento. Se uma variável $\mathcal{O}$ tem o comportamento crítico $|p - p_c|^{-\mu}$ em uma rede finita de dimensão linear L, a teoria do grupo de renormalização nos garante que esta mesma variável se comporta como [23]:

$$\mathcal{O}(p - p_c, L) = L^{\mu/\nu} \mathcal{Q}_{\mathcal{O}} \left(\frac{p - p_c}{p_c} L^{1/\nu} \right), \tag{3.11}$$

quando estamos na região crítica, i.e., para p próximo a p_c. A função $\mathcal{Q}_{\mathcal{O}}$ é similar à variável $\mathcal{O}$ só que depende da dimensão linear L da rede apenas através de $((p - p_c)/p_c)L^{1/\nu}$, onde ν é o expoente crítico para o comprimento de correlação ξ (veja a Tab. 3.1). Note que, se $p = p_c$, a Eq. (3.11) torna-se

$$\mathcal{O}(0, L) = L^{\mu/\nu} \mathcal{Q}_{\mathcal{O}}(0). \tag{3.12}$$

Nesta última equação , $\mathcal{Q}_{\mathcal{O}}$ (uma constante) não depende de L, o que nos possibilita determinar o expoente crítico μ/ν realizando várias simulacões de $\mathcal{O}$ para diferentes

L e fazendo um ajuste de dados. Alternativamente, se $\mu = 0$ curvas para vários $L's$ devem interceptar-se em p_c. Isto é basicamente o que foi feito na fig. (2.6) para determinarmos p_c usando o observável $\langle P \rangle$, com $\mu = 0$ [19] .

Obviamente, este procedimento pode ser adotado para a determinação dos expoentes e pontos críticos de qualquer transição de fase de segunda ordem, não somente para fenômenos de percolação. No capítulo 5, utilizaremos escalonamento de tamanho finito para encontrar o ponto crítico no modelo de Ising.

Capítulo 4

O Modelo de Ising

Como já sabemos, materiais magnéticos sofrem uma drástica modificação em suas propriedades intrínsecas, tal como o desaparecimento da magnetização espontânea nas proximidades do ponto crítico. Um modelo que apresenta esta característica é o modelo de Ising. Este modelo possui solução analítica em uma e duas dimensões (ver Ap. B) sendo, portanto, adequado para testar algoritmos de simulações numéricas que poderão ser estendidas para dimensões mais altas.

O objetivo das simulações numéricas que serão realizadas a seguir é medir o ponto e o expoente críticos da transição de fase de segunda ordem, avaliar erros e comparar eficiências de diferentes algoritmos. Para tanto, utilizamos algoritmos locais e algoritmos de clusters. As fundamentações teóricas que levam a estes dois tipos de algoritmos serão apresentadas logo abaixo. Para avaliarmos as quantidades no limite termodinâmico, usamos a técnica de escalamento de tamanho finito, como descrito no capítulo anterior. Os procedimentos para a análise dos erros envolvidos nas simulações serão discutidos mais adiante neste capítulo.

4.1 Hamiltoniano, Função de Partição e Medidas de Observáveis

Em um material magnético os spins interagem entre si e possivelmente com um campo magnético externo. No modelo de Ising estas interações são representadas pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}(T, \vec{H}) = -J \sum_{<ij>} S_i S_j - H \sum_i S_i \,, \tag{4.1}$$

onde J tem dimensão de energia e representa a intensidade da interação entre os spins primeiros vizinhos, o que é denotado por $< ij >$, e H é o campo magnético externo. Dependendo do valor de J, temos dois tipos de materiais distintos; para

$J > 0$ temos um material ferromagnético, para $J < 0$ temos um material anti-ferromagnético. Um material ferromagnético é aquele que possui no estado fundamental todos os seus spins alinhados, este material apresenta naturalmente uma magnetização espontânea quando $\vec{H} = 0$. Já um material anti-ferromagnético apresenta no estado fundamental os seus spins anti-alinhados, com isto, não possui magnetização espontânea. Por estas razões, aqui utilizaremos $J = 1$.

Na ausência de campo externo, o hamiltoniano do modelo apresenta uma simetria Z_2, i.e., ele é invariante sob a inversão dos spins. O estado com $T < T_c$ apresenta seus spins alinhados, o parâmetro de ordem (magnetização) é diferente de zero, e, portanto, apresenta quebra espontânea da simetria. A interconexão entre transições de fase e quebra espontânea de simetria levou a desdobramentos importantes em outros campos da física. No que segue, não vamos mais tratar deste assunto.

A função de partição do modelo de Ising é dada por

$$\mathcal{Z}(T, \vec{H}) \;=\; \sum_{\{S\}} e^{-\beta\, \mathcal{H}(T,\vec{H})}\,, \tag{4.2}$$

onde $\{S\}$ indica todas as possíveis configurações de spin, $\beta \equiv 1/KT$, com K sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. A magnetização média é dada por

$$< \mathcal{M} >= \left\langle \sum_i^N S_i \right\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{S\}} \sum_i^N S_i\, e^{-\beta\, \mathcal{H}(T,\vec{H})}\,. \tag{4.3}$$

Da solução exata do modelo de Ising bidimensional, sabemos que ocorre uma transição de fase de segunda ordem que pode ser vista na medida do parâmetro de ordem do sistema quando $\vec{H} = 0$, conforme mostrado na Fig. 3.2 (c). Desejamos investigar o comportamento desta quantidade com a variação da temperatura e, em particular medir T_c através de simulações de Monte Carlo. Nas próximas seções, apresentamos os algoritmos principais.

4.2 Algoritmo de Metropolis

Para calcularmos a grandeza prevista na Eq. (4.3) somamos todos os spins da rede em uma dada configuração. A diferença entre uma configuração e outra está simplesmente na flipagem de apenas um spin de toda a rede, então, uma rede 3×3 possue $2^9 = 512$ posssíveis configurações. Um computador calcula, por exemplo, a energia de todas estas configurações em frações de segundos. Mas como queremos alcançar o limite termodinâmico, precisamos de redes grandes. No entanto, isto gera um problema, para uma rede (ainda pequena pora os nossos objetivos) 10×10, temos aproximadamente 10^{30} configurações. Um computador varre todas

estas configurações em aproximadamente 10^{21} segundos (milhares de vezes a idade do Universo). Felizmente, nem todas as configurações incluídas pela soma feita pelo computador são relevantes, pois contribuem muito pouco. Neste sentido, a solução para o problema está em escolhermos as configurações mais importantes para a medida do observável termodinâmico.

Os métodos de Monte Carlo são baseados na escolha randômica dos estados a serem incluídos na soma. De todos os processos randômicos, de particular interesse são os chamados processos de Markov. Seja $\mathcal{P}(i \to j)$ a probabilidade de que o sistema estanto na configuração i seja levado à configuração j, ou seja,

$$\exists\, \mathcal{P}(i \to j) \quad \forall \quad i \text{ e } j\,. \tag{4.4}$$

Um processo que leva de uma configuração i para uma qualquer configuração j, e que depende somente da configuração i, é chamado de um *processo de Markov*. Isto é, em um processo de Markov basta saber o estado atual para irmos ao próximo estado, sem interessar como se chegou ao atual. A probabilidade deve satisfazer

$$\sum_j \mathcal{P}(i \to j) = 1\,, \tag{4.5}$$

onde i é qualquer um entre todos os estados existentes. Uma cadeia de Markov é uma seqüência de estados gerados por um processo de Markov. Ergodicidade significa que podemos, estanto em uma dada configuração ir para qualquer outra em um número finito de passos, desde que esta também faça parte das configurações possíveis. Geralmente $\mathcal{P}$ é escolhido de forma a satisfazer a condição de *balanço detalhado*

$$p_i \mathcal{P}(i \to j) = p_j \mathcal{P}(j \to i)\,.$$

onde p_k, para o nosso caso, é a probabilidade de Gibbs. Embora esta condição seja suficiente ela não é necessária para que p_i seja a distribuição estacionária da cadeia [17].

Precisamos de uma amostragem que encontre as configurações que mais contribuem para a quantidade que desejamos medir. Este tipo de amostragem é conhecida por *amostragem por importância*. Implementamos esta idéia introduzindo uma distribuição de probabilidade

$$\rho_\alpha \geq 0 \,\forall\, \alpha\,, \qquad \sum_{\alpha=1}^{A} \rho_\alpha = 1\,. \tag{4.6}$$

Definimos

$$\eta_\alpha \equiv \frac{p_\alpha}{\rho_\alpha} X_\alpha\,, \tag{4.7}$$

com

$$< X >_p = \sum_{\alpha=1}^{A} X_\alpha p_\alpha \,, \tag{4.8}$$

sendo a média da quantidade X com respeito a distribuição p, onde α rotula a configuração do sistema. Escolhendo p_α como sendo distribuição de probabilidade de Gibbs para a configuração α,

$$p_\alpha = \frac{e^{-\beta E_\alpha}}{Z} \tag{4.9}$$

obtemos que valor esperado de η com probabilidade ρ é dado por

$$< \eta >_\rho = \sum_{\alpha=1}^{A} \eta_\alpha \rho_\alpha \; = \sum_{\alpha=1}^{A} X_\alpha p_\alpha \; =< X >_p \; . \tag{4.10}$$

Portanto, estimar $< \eta >_\rho$ é equivalente a estimar $< X >_p$. A eficiência deste método consiste em escolher ρ o melhor possível, tal que ρ aproxime-se da distribuição do próprio estado que queremos medir. No entanto, não é possível realizar este procedimento. O que se faz é seguir a evolução da cadeia de Markov apropriada, para que ao final, encontremos a distribuição de Gibbs, como descrito acima [18]. O algoritmo mais simples que realiza uma amostragem por importância levando em consideração as cadeias de Markov, é o algoritmo de Metropolis.

Digamos que queremos calcular a variação na energia do sistema devido a mudança na configuração de i para j. Se a variação da energia entre as configurações i e j for negativa a nova configuração é aceita. Por outro lado, se a variação for positiva, a nova configuração será aceita com probabilidade $e^{-\beta(E_j - E_i)}$. Isto é,

$$\mathcal{P}(i \to j) = \begin{cases} N^{-1} \;\; , \text{ se } E_j < E_i, \\ N^{-1} e^{-\beta(E_j - E_i)}, \text{se } E_j > E_i, \end{cases} \tag{4.11}$$

onde N é uma constante de normalização que é escolhida tal que a Eq. (4.5) seja satisfeita.

Para exemplificar o algoritmo, vamos simular como se dá o processo no modelo de Ising. Uma configuração α é gerada com energia E_α, flipando apenas um spin desta rede geramos uma nova configuração α'. Esta nova configuração tem energia $E_{\alpha'}$. Com isto calculamos a diferença de energia $\Delta E = E_{\alpha'} - E_\alpha$. Se $\Delta E < 0$, ou seja $E_{\alpha'} < E_\alpha$, a nova configuração será aceita. No entanto, se $\Delta E > 0$ o que implica em $E_{\alpha'} > E_\alpha$, a nova configuração será aceita com probabilidade $\exp(-\beta \Delta E) \geq R$, onde R é uma variável randômica uniformemente distrubuída entre $[0, 1]$*. Este procedimento (a inversão ou não de um spin da rede) é aplicado para cada spin

*Estas variáveis foram geradas adotando o gerador *rand( )* interno do *FORTRAN 77*.

da rede. Aqui fica claro que as configurações geradas e aceitas serão altamente correlacionadas, e como será visto mais adiante, implicando em um *critical slowing down,* i.e., a divergência no tempo de correlação.

Como a diferença entre duas configurações é a inversão de um determinado spin da rede, a razão de aceitação para o algoritmo de Metropolis pode ser pequena. Desta forma precisamos aumentar o número de iterações. Mas isto ocasiona um aumento considerável no tempo de processamento. Na próxima seção apresentaremos um algoritmo que aumenta a aceitação das configurações sem precisar aumentar o tempo de simulação.

4.3 Algoritmo de Banho Térmico

O algoritmo de Metropolis perde eficiência quando a razão de aceitação se torna muito pequena. No algoritmo de Metropolis, permitimos que uma nova configuração seja aceita de acordo com a mudança de energia provocada pela mudança do estado de um único spin da rede. Uma maneira de sanar o problema de baixa aceitação é fornecido pelo *algoritmo de banho térmico.*

A implementação deste algoritmo transcorre a seguinte maneira: como no modelo de Ising os spins possuem duas possíveis orientações, determinamos que o spin é igual a 1 (up) com probabilidade p_i ou igual a -1 (down) com probabilidade $1 - p_i$, sendo

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp(-2\beta \sum_{<ij>} S_j)} \,. \tag{4.12}$$

Considera-se portanto a distribuição local para os spins, condicionada aos spins vizinhos. Após um certo número de iterações teremos todos os spins da rede respeitando uma distribuição de Boltzmann. Formando assim o que chamamos de banho térmico [10, Cap. 5].

Neste processo, uma determinada configuração nunca será rejeitada, a sua escolha depende apenas das direções impostas aos spins pela distribuição de Boltzmann. Tanto o algoritmo de banho térmico como o de Metropolis são algoritmos locais, atualizando cada spin com valores fixos para os seus primeiros vizinhos. Desta forma o tempo de correlação (τ_c) o qual será discutido mais adiante, diverge na região crítica. Note que esta divergência ocorre em sistemas infinitos. Em nossas simulações teremos um pico. Este fenômeno é conhecido como *critical slowing down* (CSD) e é inerente ao método de Monte Carlo quando empregado em algoritmos numéricos.

4.4 Algoritmo de Clusters

Em um algoritmo que implementa a teoria de percolação, sempre que um determinado sítio ocupado tiver alguns dos seus primeiros vizinhos (pelo menos um) também ocupados, um *elo* é estabelecido entre eles. No capítulo 2 discutimos teoria de percolação, onde estes elos eram sempre postos entre sítios vizinhos ocupados formando o que chamamos de clusters geométricos. Nos chamados algoritmos de cluster, estes elos serão estabelecidos de acordo com uma dada probabilidade que está intimamente ligada com a temperatura através da função de partição do modelo empregado. Então, se temos uma grandeza física envolvida no estabelecimento dos clusters, estes clusters não irão refletir apenas a geometria do material. Por esta razão eles são chamados de *clusters físicos*. Todos os clusters encontrados com algoritmos de clusters serão deste tipo. Existe uma relação entre clusters geométricos e físicos [20], que será explorada no próximo capítulo.

Como estamos interessados no modelo de Ising, na próxima seção analisaremos os resultados obtidos com simulações realizadas com algoritmos locais (Metropolis e Banho térmico) e algoritmos de clusters, em particular o algoritmo de Swendsen-Wang que será detalhado logo abaixo.

4.4.1 Algoritmo de Swendsen-Wang

Nos algoritmos de clusters, em particular o algoritmo de Swendsen-Wang (ASW) [11], este elo será estabelecido mediante uma dada probabilidade. Para definirmos a forma desta probabilidade e sua relação com a função de partição, vamos explorar as propriedades do modelo de Ising. O hamiltoniano para o modelo de Ising é dado pela Eq. (4.1):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<ij>} S_i S_j - H \sum_i S_i \,,$$

onde a função de partição é

$$\mathcal{Z}(T, \vec{H}) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(T, \vec{H})} \,.$$

Este hamiltoniano pode ser escrito de uma maneira um pouco diferente, sem modificar o seu conteúdo físico, para isto evocamos os modelos de spins discretos de Potts [21], onde o hamiltoniano sem campo magnético é descrito como

$$\mathcal{H} = \sum_{<ij>} J_{ij}(1 - \delta_{S_i S_j}) \,, \tag{4.13}$$

onde S_k representa os spins que assumem valores discretos de 1 a q e a soma é feita sobre os primeiros vizinhos $< ij >$. A equivalência do modelo de Potts com o modelo de Ising se dá quando $q = 2$ e $J_{ij} = 2J$. A partir da manipulação da função de partição (Eq. (4.13)), podemos escrever [22, Cap. 1]

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta \sum_{<ij>} J_{ij}(1-\delta_{S_i S_j})} \\
&= \sum_{\{S\}} \prod_{<ij>} e^{-\beta J_{ij}} e^{\beta J_{ij} \delta_{S_i S_j}} \\
&= \sum_{\{S\}} \prod_{<ij>} e^{-\beta J_{ij}} (\delta_{S_i S_j} e^{\beta j_{ij}} + 1 - \delta_{S_i S_j}) \\
&= \sum_{\{S\}} \prod_{<ij>} \left(\delta_{S_i S_j} (1 - e^{-\beta J_{ij}}) + e^{-\beta J_{ij}} \right) ,
\end{aligned}$$

definindo

$$p_{ij} \equiv 1 - e^{-\beta J_{ij}} = 1 - e^{-2J\beta} , \tag{4.14}$$

e através da identidade

$$a + b = \sum_{n=0,1} (a\delta_{n,1} + b\delta_{n,0}) ,$$

sendo $a \equiv p_{ij}\delta_{S_i S_j}$ e $b \equiv (1 - p_{ij})$, encontrando,

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} \prod_{<ij>} \left[p_{ij} \delta_{S_i S_j} + (1 - p_{ij}) \right] \\
&= \sum_{\{S\}} \sum_{\{n\}} \prod_{<i,j>} \left[(p_{ij} \delta_{S_i S_j} \delta_{n_{ij}1} + (1 - p_{ij}) \delta_{n_{ij}0} \right] ,
\end{aligned} \tag{4.15}$$

ou ainda,

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S\}} \sum_{\{n\}} \left\{ \prod_{<i,j>}^{n_{ij}=1} p_{ij} \delta_{S_i S_j} \right\} \left\{ \prod_{<i,j>}^{n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right\} . \tag{4.16}$$

A nova variável $n_{ij} = 1(0)$ especifica quando dois sítios estão ligados (ou não), i.e., *representa os elos*. Sendo que p_{ij} é a probabilidade de se formar um elo entre dois sítios vizinhos ij. Como indicamos anteriormente, o elo depende da temperatura.

Em simulações numéricas, em especial no ASW, um conjunto de sítios interligados com elos forma um cluster. Note que, mesmo se os vizinhos de um determinado sítio forem ocupados com objetos do mesmo tipo, isto não implica que estes sítios farão parte do mesmo cluster. Também, não teremos elos formados entre sítios de spins diferentes. No modelo de percolação simples, um cluster é formado por um conjunto de sítios homogeneamente ocupados. No ASW poderemos ter vários clusters menores, como mostra a Fig. 4.1.

No ASW construímos elos entre sítios de mesma espécie de acordo como a Eq. (4.14). Quanto menor a temperatura, maiores serão os clusters. Em uma situação limite, quando $T = 0$, o ASW comporta-se tal como um algoritmo de percolação de sítios, a difrença é que sítios isolados também são considerados como clusters. Ao nos aproximarmos de T_c o cluster quebra-se em vários clusters menores. Quando $T > T_c$, a tendência é formarmos vários clusters cada vez menores ao ponto de quando $T >> T_c$ visualizar apenas spins(clusters) isolados.

Para implementarmos o ASW em uma rede bidimensional quadrada, procedemos da seguinte forma:

1. Para um determinado valor de temperatura, geramos uma rede de spins de Ising. Trabalhamos aqui com as mesmas condições de contorno livres.

2. Para encontrar os clusters de ASW, é necessário o uso do algoritmo de Hoshen e Kopelman, para reparar as eventuais ambiguidades (neste passo definimos os elos), formando assim uma rede de elos. Este algoritmo, usado também no capítulo 2 é descrito no Ap. A.

3. Na rede de elos, flipamos cada cluster (conjunto de sítios conectados) com probabilidade 1/2. Retornamos a rede de spins levando a informação da flipagem para implementála na rede de sítios. Após a flipagem da rede de spins, calculamos o observável simplesmente contando os sítios da rede.

4. Apagamos a informação dos elos e retornamos ao passo 2, fazemos isto tantas vezes quanto for o nosso número de iterações para cada valor de temperatura.

Este algoritmo é ergódico, pois existe a probabilidade de ir de uma configuração para qualquer outra em uma varredura na rede, e satisfaz a condição de balanço detalhado [23, Cap. 4]. Na Fig. 4.1 temos a seqüência a ser obedecida; em (a) a rede de spins (iten 1) formada alatoriamente; em (b) a rede de elos (iten 2) estipulados com probabilidade dada pela Eq. (4.14); e em (c) a flipagem da rede de elos que é passada para a rede de spins (iten 2). Então montamos a seguinte seqüência de passos para o algoritmo: $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow \ldots$.

4.4.2 Algoritmos de clusters *versus* teoria de percolação

Mas porque precisamos desenvolver todo este ferramental se já temos um algoritmo que estuda clusters? Para responder a esta pergunta, recorremos a história do surgimento deste tipo de algoritmo e as tentativas de usá-lo em estudos de fenômenos críticos. Como mencionamos no capítulo 2, a idéia de teoria de percolação surgiu com o estudo de formação de macro-moléculas aumentando as ligações químicas

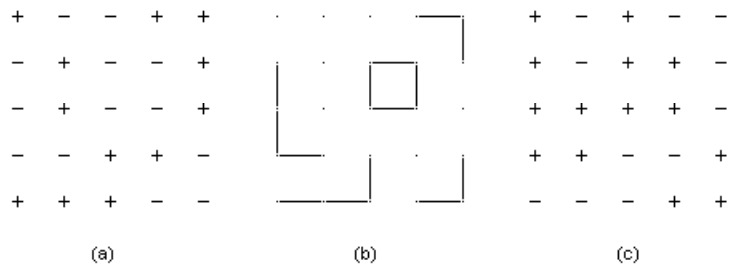

Figura 4.1: Configuração de sítios para uma dada temperatura, em (a) temos apenas os sítios com seus respectivos spins; em (b) temos uma rede de clusters com os respectivos elos formados com probabilidade p_{ij} (Eq. (4.14)); em(c) a rede final após fliparmos os clusters com probabilidade 1/2.

entre moléculas menores, pensou-se então em utilizar estes mesmos princípios para o estudo de fenômenos críticos no modelo de Ising em três dimensões. Notou-se que os clusters geométricos construídos com a teoria de percolação, percolavam antes da temperatura de Curie, com menos de 1/4 de seus spins para baixo[†], ou seja, a temperatura crítica de percolação era menor que T_c que corresponde a 1/2 para cima e a metade para baixo, já que a magnetização é zero. Desta forma, evidenciando a diferença existente entre uma criticalidade calculada com um algoritmo de percolação e os resultados analíticos conhecidos [24]. Além disto, resultados numéricos mostram que, p_c tende a 0 se o número de primeiros vizinhos tende ao infinito [1, Tab. 1]. Se o número de primeiros vizinhos é suficientemente grande, a temperatura de percolação é menor que T_c [1, Cap. 7]. Com todos estes problemas se faz necessário elaborar um procedimento que diminuia o tamanho dos clusters.

Coniglio e Klein [7] baseados na fundamentação teórica proveniente do trabalho de Fortuin e Kasteleyn [9] para o modelo de Potts, resolveram este problema. Eles determinaram que dois spins só fariam parte do mesmo cluster, o qual eles chamaram de gota, se eles fossem conectados por um elo. Sendo estes elos distribuidos na rede aleatoriamente, entre spins paralelos, com uma probabilidade $p = 1-\exp(-2J/KT)$. Desta forma eles conseguiram provar a equivalência dos expoentes críticos para as gotas, tal qual a densidade do cluster percolante Ω e os expoentes críticos correspondentes às quantidades térmicas, no caso a magnetização média $\langle M \rangle$.

Com o desenvolvimento dos fundamentos teóricos providos por Fortuin e Kasteleyn, Swendsen e Wang desenvolveram o seu algoritmo [11] o qual foi descrito na

[†]Estipulava-se que um cluster percolante era formado por spins apontando para abaixo.

seção anterior. Este algoritmo basicamente quebra o cluster gerado pelo algoritmo de percolação de sítios em vários pedaços, que aqui nesta dissertação são chamados de clusters físicos. D'Onorio et. al. [20] mediram a equivalência prevista por Coniglio e Klein utilizando o ASW. Neste ponto fica claro o por quê de não podermos fazer um tratamento de teoria de percolação de sítios, para o modelo de Ising, justificando a elaboração dos algoritmos de cluster físicos. Note que, existe uma versão mais eficiente do ASW, o *algoritmo de Wolff*, que considera apenas um cluster por iteração, mas nao é apropriado para o nosso estudo de percolação.

4.5 Medidas de Erro

Em um cálculo de Monte Carlo a principal fonte de erro estatístico no valor medido de uma quantidade qualquer é usualmente a flutuação desta de um passo a outro (ou, de uma configuração a outra) [25, Cap. 3]. A suposição básica em um cálculo de Monte Carlo é que o erro surge devido a flutuações randômicas no valor medido da quantidade. Portanto, o valor verdadeiro pode ser estimado tomando a média de várias medidas diferentes, e o erro nesta estimativa é simplesmente o erro na média. Esta forma de calcular o erro é um tanto ingênua pois não considera as correlações entre as medidas. Abaixo descrevemos duas maneiras de corrigir esta medida de erro.

4.5.1 Correlação

Em um algoritmo, quando realizamos n medidas (n passos) de uma certa quantidade $\mathcal{F}$, a estimativa da média desta quantidade é

$$< \mathcal{F} >= \frac{1}{n} \sum_{a=1}^{n} \mathcal{F}_a \,, \tag{4.17}$$

e o desvio padrão é dado pela média da quantidade $\mathcal{F}$,

$$\sigma = \sqrt{\frac{< \mathcal{F}^2 > - < \mathcal{F} >^2}{n-1}} \,. \tag{4.18}$$

A expressão acima pressupõe que as amostras (ou configurações) $\mathcal{F}_a$ são estatisticamente independentes. No entanto, ao iniciarmos a simulação com uma dada rede, o passo seguinte terá uma *memória* desta rede inicial. Esta memória terá uma persistência, por um certo número de iterações. Torna-se essencial, portanto, uma medida do *tempo* necessário para que esta memória se dissipe, ou seja, necessitamos uma medida do *tempo de correlação*. O tempo de correlação é uma medida de quantas iterações são necessárias para que o sistema mude de um estado para

outro significativamente diferente do inicial [25, Cap. 3]. Na expressão dada pela Eq. (4.17) a média foi feita somando todos os valores de configurações. Esta média não leva em conta o tempo de correlação, logo, o seu valor contém correlações.

Desta discussão temos que a idéia do estudo de correlações consiste em analisar o quanto as amostras são independentes entre si. Por exemplo, esperamos que medidas da magnetização no modelo de Ising para valores de a's próximos estejam bastante correlacionadas. Porém, em a's mais distantes, a correlação deve ser menor devido às cadeias de Markov que estão por trás do algoritmo local utilizado para gerar as amostras. Uma maneira de estimarmos a correlação de determinadas configurações é utilizando a função de correlação,

$$C(\kappa) =< \mathcal{F}_a \mathcal{F}_{a+\kappa} > - < \mathcal{F}_a >^2 , \tag{4.19}$$

onde

$$< \mathcal{F}_a \mathcal{F}_{a+\kappa} >= \sum_{a=1}^{n-\kappa} \frac{\mathcal{F}_a \mathcal{F}_{a+\kappa}}{n-\kappa} , \quad < \mathcal{F}_a >= \frac{1}{n} \sum_{a=1}^{n} \mathcal{F}_a . \tag{4.20}$$

Em geral, a função de correlação decai aproximadamente de uma forma exponencial

$$C(\kappa) \sim e^{-\frac{\kappa}{\tau_c}} , \tag{4.21}$$

onde τ_c é o tempo de correlação [25]. Podemos determinar τ_c de uma forma direta,

$$\tau_c \sim -\frac{\kappa}{\ln C(\kappa)} . \tag{4.22}$$

Os princípios que levaram à Eq. (4.18) são válidos para uma amostragem desconsiderando correlação. O erro calculado com esta equação é conhecido como *erro ingênuo*. Com o estudo da correlação podemos refinar o cálculo do erro para as grandezas medidas usando o τ_c da correlação [25, Cap. 3]

$$\sigma^{corr} = \sqrt{2\tau_c}\sigma^{ing} . \tag{4.23}$$

Como já mencionamos, o tempo de correlação na região crítica apresenta um comportamento divergente devido à forte correlação das configurações geradas pelo algoritmo local. Este comportamneto divergente de τ_c é conhecido como *critical slowing down*. Este tipo de análise nos mostra que a correlação possui um comportamento crítico.

Para que as medidas de σ^{corr} não sejam equivocadas, é necessário descartarmos as primeiras medidas do observável. Fazer isto, corresponde a ignorar a região transiente e considerar apenas as medidas feitas após a relaxação do algoritmo. A este procedimento damos o nome de *termalização* .

4.5.2 Binning

Como a discussão anterior mostrou, ignorar as correlações dos dados pode levar a várias estimativas equivocadas do erro estatístico. Mas, invocar todo o maquinário da análise de correlações é freqüentemente muito complicado. Uma outra forma de melhorarmos a estimativa do erro, é através de um análise de *binning* [26].

O método de binning basea-se no seguinte: supondo que o conjunto de medidas consiste de a medidas correlacionadas de $\mathcal{F}$, forma-se a_b blocos de tamanho L', pelo agrupamento dos dados originais. Desta forma tem-se um sub-conjunto (menor que o inicial) de medidas. Neste novo conjunto de medidas a correlação é aproximadamente nula se L' for da mesma ordem do tempo de correlação τ_c. De posse destes novos valores, calculamos o desvio padrão normalmente. Isto deverá ser feito sucessivamente até que o valor do desvio padrão para cada bloco de medida não sofra mais modificações significativas. Este é o ponto que fixará o valor que será utilizado para nossas medidas do desvio padrão (erro).

Da mesma forma que obtivemos um τ_c utilizando o método da correlação, também podemos relacionar ao desvio padrão um τ do binning, denotado por τ_b, que pode ser obtido através da equação

$$\sigma^{binn} = \sqrt{2\tau_b}\sigma^{ing} \,. \tag{4.24}$$

Para ficar claro digamos que temos oito medidas correlacionadas de um certo observável ($a = 8$), com estas 8 medidas calculamos o desvio padrão da forma usual através da Eq. (4.18). Logo após realizamos o primeiro binning agrupando os termos de dois em dois($L' = 2$), como está esquematizado na Fig. 4.2 calculamos

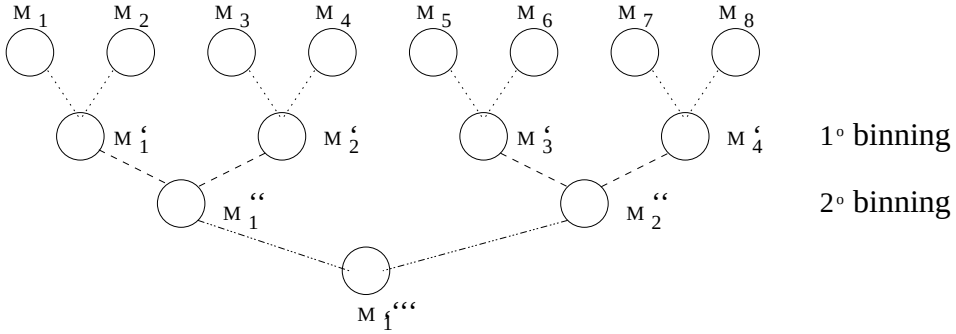

Figura 4.2: esquema que representa como funciona o método de binning para uma amostra particular de oito medidas.

novamente o desvio padrão e passamos para o próximo binning e assim procedemos

sucessivamente até chegarmos ao último binning onde não é mais possível realizarmos nenhum agrupamento. O ideal é que L' seja da ordem de τ_c para que no primeiro binning percamos quase totalmente a informação sobre a correlação. Outro fato importante diz respeito ao número de iterações. É conveniente que o número de medidas seja igual a L' elevado a nb

$$M = {L'}^{nb},$$

onde nb trata-se do números de binnings desejados mais 1, na Fig. 4.2 temos $nb = 2bininngs + 1 = 3$, ou seja, $8 = 2^3$. Neste momento, o número de medidas descartadas na termalização deve ser considerado.

Partimos agora para simulações numéricas feitas com estes dois tipos de algoritmos utilizando o modelo de Ising sem a presença de campo externo. Todos os resultados listados a seguir foram obtidos com redes 100×100 em 1000 iterações (ou passos de Monte Carlo) para o estudo de percolação, com o ASW, usaremos redes mariores e 5000 iterações. Faremos também medidas de erros e no decorrer do próximo capítulo discutiremos os resultados adquiridos confrontando estes dois tipos de algoritmos.

Capítulo 5

Simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising bidimensional.

Neste capítulo faremos uma discussão dos resultados obtidos em simulações numéricas utilizando dois algoritmos locais e um algoritmo de clusters. Os resultados listados abaixo referem-se a condição de campo externo nulo, desta forma, o hamiltoniano para o modelo de Ising é descrito como

$$\mathcal{H}(T,\vec{H}) = -J \sum_{<ij>} S_i S_j \,, \tag{5.1}$$

O parâmetro de ordem para o modelo de Ising é a magnetização média

$$\langle M \rangle = \frac{1}{V} \sum_i S_i \,, \tag{5.2}$$

onde V representa o volume da rede. Esperamos observar um comportamento como o mostrado na Fig. 3.2 (c), tomando $J = 1,\ \beta = 1/KT$.

Em um algoritmo local, encontramos para uma rede 100×100 ($L = 100$) os resultados para a magnetização média dispostos na Tab. (5.1). Comparando as duas curvas da Fig. 5.1 e levando em conta a solução exata, notamos que o comportamento do banho térmico na região crítica é sensivelmente melhor que o Metropolis. Este fato é devido à altíssima correlação dos valores medidos o que ocasiona uma divergência no tempo de correlação τ_c como foi discutido no capítulo 4 desta dissertação. No entanto, nas regiões anterior e posterior a T_c, o comportamento é excelente.

Estamos comparando dois algoritmos locais. Ambos não apresentam um bom comportamento na regiao crítica, mesmo sendo o algoritmo de banho térmico melhor que o algoritmo de Metropolis. Devemos encontrar algum algoritmo que forneça um bom resultado da medida de um observável nas proximidades de uma região crítica. Os algoritmos de cluster são bons canditados para consertar este problema, pois

	Metropolis			banho térmico		
Temp.	$\langle M \rangle$	σ^{cor}	σ^{ing}	$\langle M \rangle$	σ^{cor}	σ^{ing}
0.02	0.99994	0.177E-01	0.105E-02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00
0.18	0.99994	0.180E-01	0.105E-02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00
0.34	0.99993	0.191E-01	0.105E-02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00
0.50	0.99995	0.168E-01	0.105E-02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00
0.65	0.99994	0.178E-01	0.105E-02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00
0.81	0.99988	0.176E-01	0.105E-02	0.99994	0.350E-04	0.596E-05
0.97	0.99942	0.191E-01	0.105E-02	0.99948	0.106E-03	0.180E-04
1.13	0.99804	0.177E-01	0.105E-02	0.99812	0.198E-03	0.319E-04
1.29	0.99512	0.194E-01	0.105E-02	0.99505	0.349E-03	0.583E-04
1.45	0.98940	0.175E-01	0.105E-02	0.98941	0.565E-03	0.903E-04
1.61	0.84521	0.168E+00	0.101E-02	0.97945	0.846E-03	0.155E-03
1.76	0.24287	0.365E+00	0.473E-03	0.96234	0.128E-02	0.243E-03
1.92	0.27336	0.271E+00	0.481E-03	0.93304	0.227E-02	0.667E-03
2.08	0.23513	0.361E+00	0.452E-03	0.87829	0.445E-02	0.205E-02
2.24	0.10649	0.233E+00	0.656E-04	0.75166	0.105E-01	0.750E-02
2.40	0.04021	0.946E-01	0.254E-03	0.31500	0.425E-01	0.573E-01
2.56	0.00817	0.164E-01	0.312E-03	0.04725	0.426E-01	0.407E-01
2.71	0.00844	0.159E-01	0.313E-03	0.00925	0.300E-01	0.196E-01
2.87	0.00505	0.264E-01	0.387E-03	0.00061	0.222E-01	0.103E-01
3.03	0.00123	0.203E-01	0.264E-03	0.00893	0.191E-01	0.751E-02
3.19	0.00084	0.232E-01	0.345E-03	0.00566	0.167E-01	0.580E-02
3.35	0.00156	0.224E-01	0.336E-03	0.00087	0.158E-01	0.536E-02
3.51	0.00087	0.204E-01	0.310E-03	0.00676	0.140E-01	0.422E-02
3.67	0.00014	0.283E-01	0.377E-03	0.00323	0.130E-01	0.349E-02
3.82	0.00030	0.231E-01	0.291E-03	0.00294	0.118E-01	0.310E-02
3.98	0.00039	0.396E-01	0.255E-03	0.00109	0.111E-01	0.277E-02
4.14	0.00001	0.228E-01	0.339E-03	0.00045	0.107E-01	0.260E-02
4.30	0.00009	0.324E-01	0.366E-03	0.00136	0.995E-02	0.215E-02

Tabela 5.1: Valores de magnetização e temperatura para uma rede 100×100 com os respectivos erros ingênuos e de correlação. O comportamento destes valores pode ser visto na Fig. 5.1.

Temperatura	$\langle M \rangle$	$\sigma^{corr.}$	$\sigma^{ing.}$	$\sigma^{binn.}$
0.02	1.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
0.18	1.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
0.34	1.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
0.50	1.00000	0.675E-05	0.399E-06	0.000E+00
0.65	0.99999	0.248E-04	0.146E-05	0.000E+00
0.81	0.99989	0.896E-04	0.492E-05	0.139E-05
0.97	0.99939	0.196E-03	0.114E-04	0.379E-05
1.13	0.99778	0.452E-03	0.231E-04	0.106E-04
1.29	0.99435	0.647E-03	0.359E-04	0.382E-04
1.45	0.98761	0.107E-02	0.585E-04	0.864E-04
1.61	0.97573	0.173E-02	0.895E-04	0.145E-03
1.76	0.95537	0.297E-02	0.152E-03	0.268E-03
1.92	0.91974	0.530E-02	0.277E-03	0.486E-03
2.08	0.84541	0.118E-01	0.581E-03	0.990E-03
2.24	0.50669	0.112E+00	0.491E-02	0.189E-02
2.40	0.12219	0.338E-01	0.201E-02	0.571E-02
2.56	0.07071	0.199E-01	0.115E-02	0.651E-02
2.71	0.05082	0.152E-01	0.869E-03	0.657E-02
2.87	0.04234	0.125E-01	0.727E-03	0.677E-02
3.03	0.03621	0.102E-01	0.626E-03	0.676E-02
3.19	0.03202	0.913E-02	0.543E-03	0.675E-02
3.35	0.02926	0.855E-02	0.500E-03	0.672E-02
3.51	0.02737	0.725E-02	0.452E-03	0.681E-02
3.67	0.02605	0.685E-02	0.432E-03	0.677E-02
3.82	0.02449	0.771E-02	0.424E-03	0.687E-02
3.98	0.02335	0.647E-02	0.389E-03	0.683E-02
4.14	0.02313	0.640E-02	0.384E-03	0.686E-02
4.30	0.02138	0.654E-02	0.357E-03	0.689E-02

Tabela 5.2: Medidas da magnetização para o modelo de Ising em uma rede 100×100 utilizando ASW. Medimos também os erros ingênuo, correlação e de binning.

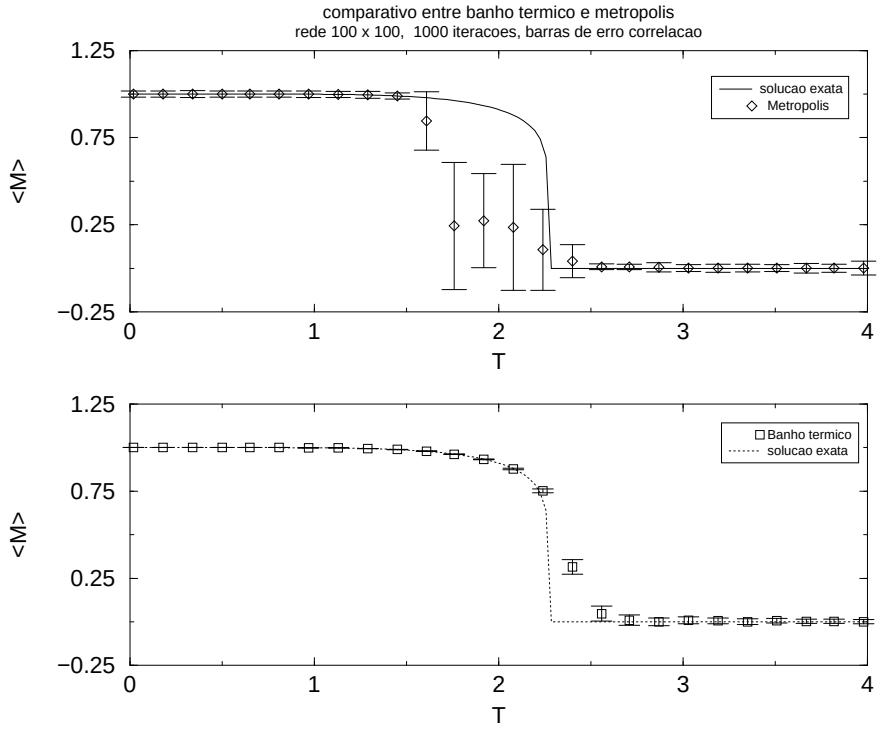

Figura 5.1: Comparativo entre as magnetizações medidas para o banho térmico e Metropolis com barras de erro com correlação.

como ja foi dito no capítulo 5 as suas medidas são pouco correlacionadas, o que implica em uma não divergência de τ_c na região crítica, eliminado assim o CSD.

Os resultados obtidos com o ASW estão listados na Tab. (5.2). O comportamento destes valores são plotados na Fig. 5.2. Como podemos ver, este algoritmo elimina quase que totalmete o critical slowing down.

Podemos observar o comportamento dos algoritmos simplesmente olhando para a rede. A Fig. 5.3 representa uma rede 100×100 de spins, em uma seqüência de três iterações, onde um sítio com spin 1 é representado por um ponto preto e um spin -1 por um ponto branco. Tendo como condição inicial uma rede fria, ou seja, todos os spins iguais a 1. Na primeira linha temos a rede para o algoritmo de Metropolis, na segunda os spins para o banho térmico e na última os clusters de ASW. Nos algoritmos locais notamos que um conjunto de spins evolui de uma iteração à outra, podendo aumentar ou dimimuir o seu volume. Nas redes de clusters observamos que um cluster pode desaparecer entre uma iteração e outra. Isto é devido a inversão final de todo um cluster com probabilidade 1/2, como foi descrito na seção 4.4

Como ja foi mencionado, em um algoritmo local o tempo de correlação diverge na

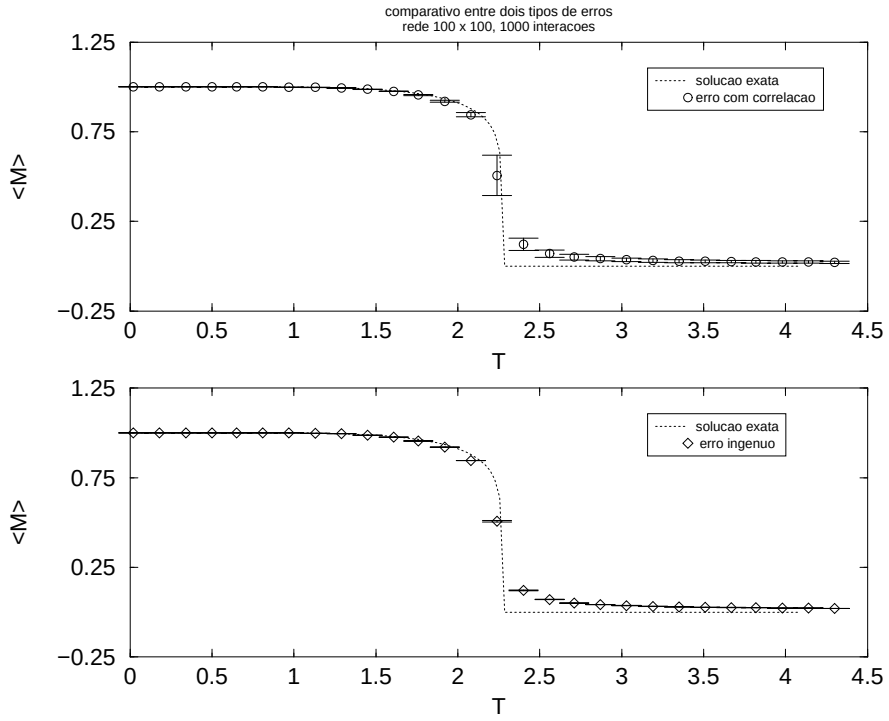

Figura 5.2: Comparativo entre os erros na medida da magnetização com ASW.

região crítica. Podemos, através da Eq. (4.22) determinar τ_c, a fim de observarmos a divergência desta quantidade. Na Tab. (5.3) apresentamos os valores de τ_c medidos para uma rede 100×100 com 1000 iterações, utilizando $\kappa = 10$ na Eq. (4.22). Como o Metropolis apresenta um comportamento análogo para τ_c, a partir deste ponto mostraremos os valores obtidos com banho térmico e ASW. Na Fig. 5.4 traçamos o gráfico destas medidas, onde fica claro o comportamento divergente desta quantidade em um algoritmo local. Como esperávamos, os valores de τ_c para o ASW atenua esta divergência, o comportamento crítico slowing down. Fixar $\kappa = 10$ significa que analisarmos a correlação entre a primeira e a décima iteração, e após, entre a segunda e a décima primeira iteração. E assim por diante de acordo com a Eq. (4.19).

Para verificar a Eq. (4.21), que determina o comportamento exponencial da correlação, traçamos $c(\kappa) \times \kappa$ para os dois tipos de algoritmos utilizados aqui nesta dissertação. Com isto, obtemos a Fig. 5.5 onde apresentamos alguns valores da correlação para determinados valores de temperaturas. Mostramos os valores para $T = 1.45$, 2.24 e 3.03 nas respectivas colunas desta figura. Assim na primeira coluna temos a correlação na região antes de temperatura crítica a segunda coluna, a correlação próxima a temperatura crítica e na última coluna $c(\kappa)$, após T_c, sendo

	τ_c	
Temperatura	banho térmico	ASW
0.02	0.000000	0.000000
0.18	0.000000	0.000000
0.34	0.000000	0.000000
0.50	0.000000	1.427597
0.65	0.000000	1.437856
0.81	1.447599	1.658038
0.97	1.433073	1.469208
1.13	1.298916	1.916210
1.29	1.393938	1.628357
1.45	1.276649	1.672469
1.61	1.679676	1.873400
1.76	1.791678	1.908410
1.92	4.313748	1.830877
2.08	10.64370	2.055646
2.24	25.73714	2.618786
2.40	91.10485	1.416511
2.56	45.58917	1.492975
2.71	21.30181	1.537485
2.87	10.75671	1.482124
3.03	7.743259	1.337003
3.19	6.027279	1.414682
3.35	5.769239	1.464421
3.51	4.561365	1.282113
3.67	3.616349	1.257946
3.82	3.433256	1.652997
3.98	3.133120	1.382915
4.14	2.958222	1.386445
4.30	2.325025	1.678401

Tabela 5.3: Comportamento do tempo de correlação τ_c para o banho térmico e ASW, em uma rede 100×100 com 1000 iterações. Um gráfico destes valores é visto na Fig. 5.4.

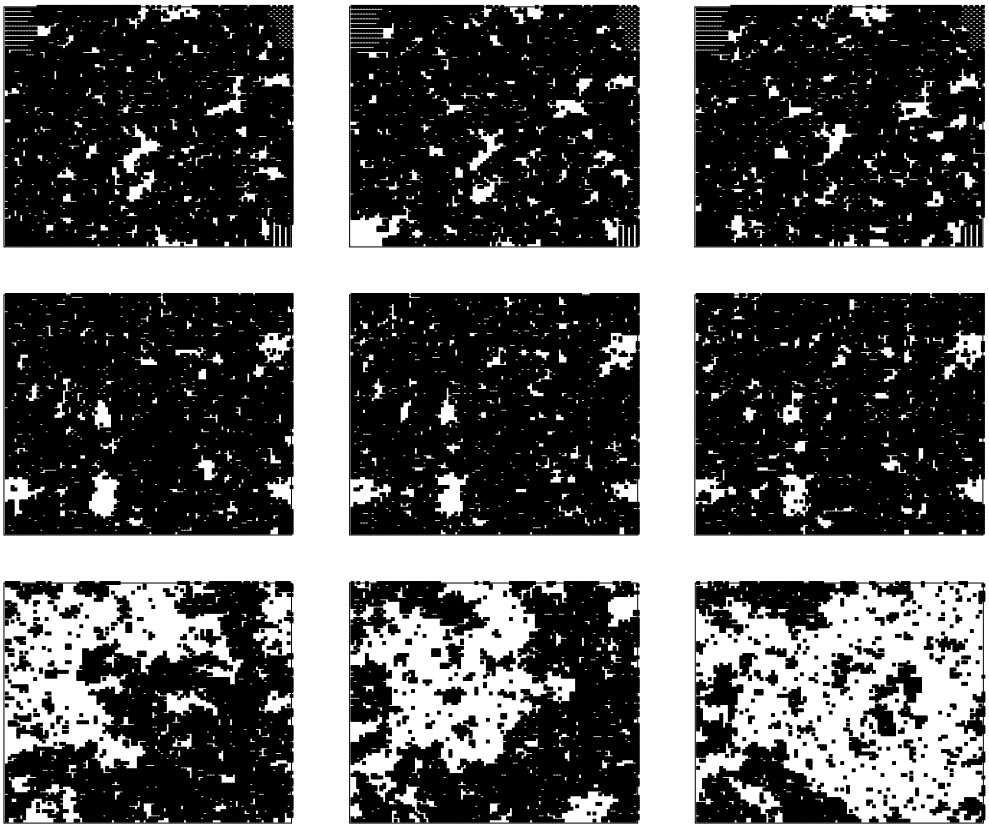

Figura 5.3: Comportamento de uma rede 100×100 na temperatura de Curie. A primeira linha foi obtida com o Metropolis, a segunda com banho térmico e a terceira com ASW. Nas colunas temos a evolução dos clusters em uma seqüência de três passos de Monte Carlo.

que a primeira linha é obtida com banho térmico e a segunda linha com o ASW.

Como foi mencionado no capítulo 3, existe uma equivalência entre quantidades medidas com teoria de percolação, tal como a pressão do cluster percolante Ω, e quantidades magnéticas, em particular o parâmetro de ordem. Para explorar este fato realizamos simulações com vários volumes de redes e valores de temperaturas na região crítica. Utilizamos redes de tamanho linear $L = 100$, 400, 600, e 800. Medimos a pressão do cluster percolante (Ω), conforme definida na Eq. (2.8) e a probabilidade de percolação definida como $\langle P \rangle$. Esperamos que a quantidade Ω se comporte como o parâmetro de ordem. Na Tab. (5.4) apresentamos os valores de temperatura com as suas respectivas Ω. Também apresentamos os valores de probabilidade de formar o elo (p) calculados através da Eq. (4.14). O comportamento de Ω, que pode ser verificado na Fig. 5.7, é análogo ao do parâmetro de ordem magnético $\langle M \rangle$. Isto pode ser visto pela forma da curva para valores grandes de L.

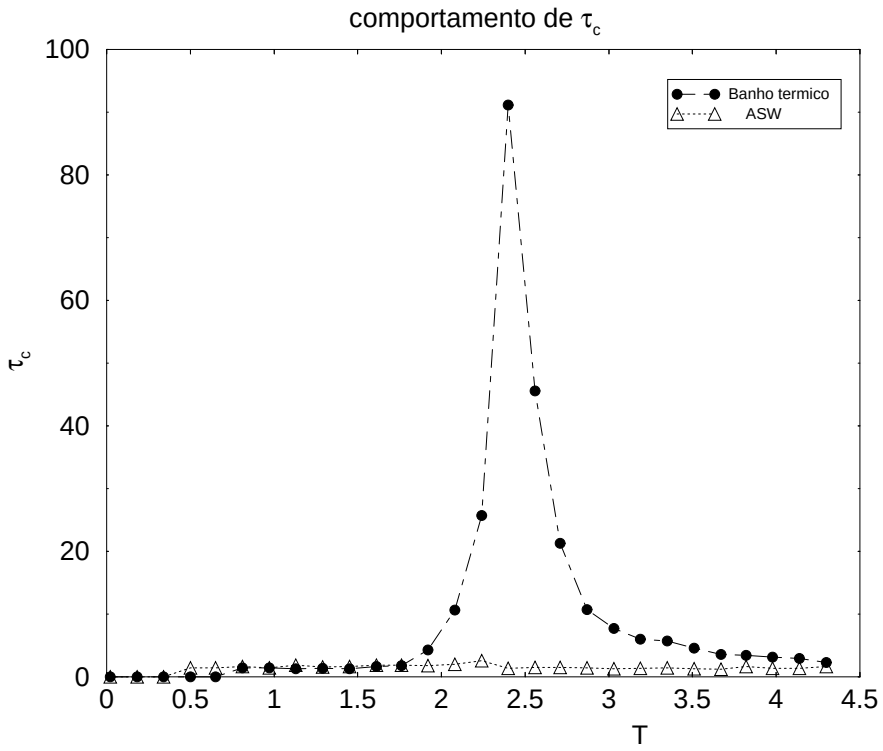

Figura 5.4: Comportamento do tempo de correlação medido com banho térmico e ASW, para uma rede 100×100 com 100 iterações. Fica demonstrado o comportamento crítico slowing down para o banho térmico e a atenuação deste no ASW.

Em particular, através de um escalonamento de tamanho finito, para $T = T_c$ como na Eq. (3.12), obtemos o expoente crítico $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$, consistente com o valor exato $\beta/\nu = 0.125$ para a magnetização.

Medimos também a probabilidade de percolação $\langle P \rangle$ para as diversas redes utilizando 5000 iterações, encontramos os valores listados na Tab. (5.5). Esta quantidade comporta-se tal qual ao cumulante de Binder [10]. O estudo de erros destas medidas está na Tab. (5.6). Se traçarmos um gráfico com estes valores notamos a semelhança desta quantidade com a probabilidade de percolação que está disposta na Fig. 2.6, isto pode ser visto na Fig. 5.6. O comportamento de $\langle P \rangle$ reflete o escalonamento de tamanho finito fornecendo o valor de T_c. A segurança de que os resultados físicos medidos com estes volumes de rede estão de acordo com os esperados é garantida pela escalonamento de tamanho finito. No capítulo 6 detalharemos estes fatos. Devemos mencionar que, como na formação dos clusters geométricos não existe uma escolha no estabelecimento dos elos entre os sítios que formarão o clusters, concluimos que os clusters geométricos sempre serão maiores que os clusters

Temp.	p	$L = 100$	$L = 400$	$L = 600$	$L = 800$
2.25700	0.5877528	0.4250000	0.8006000	0.9414000	0.9810000
2.26025	0.5872272	0.3610000	0.6530000	0.8420000	0.9264000
2.26350	0.5867024	0.3130000	0.4916000	0.6626000	0.7716000
2.26675	0.5861785	0.2854000	0.3308000	0.3910000	0.4834000
2.27000	0.5856554	0.2350000	0.2314000	0.2088000	0.1864000
2.27325	0.5851331	0.2292000	0.1096000	0.0718000	0.0486000
2.27650	0.5846117	0.1918000	0.0672000	0.0298000	0.0144000
2.27975	0.5840912	0.1558000	0.0296000	0.0116000	0.0022000
2.28300	0.5835714	0.1550000	0.0160000	0.0030000	0.0010000

Tabela 5.4: Pressão do clusters percolantes (Ω) para os clusters físicos. O gráfico destas quantidades é visto na Fig. 5.7.

Temperatura	$L = 100$	$L = 400$	$L = 600$	$L = 800$
2.25700	0.1948724	0.3903833	0.5000894	0.5450890
2.26025	0.1592187	0.2928873	0.4085595	0.4696669
2.26350	0.1350376	0.2024024	0.2828314	0.3450337
2.26675	0.1196032	0.1233345	0.1430394	0.1796146
2.27000	0.0959689	0.0782329	0.0657825	0.0578935
2.27325	0.0913149	0.0328880	0.0187155	0.0119456
2.27650	0.0742577	0.0184482	0.0071437	0.0030473
2.27975	0.0582339	0.0073245	0.0023776	0.0003864
2.28300	0.0580837	0.0039580	0.0005195	0.0001550

Tabela 5.5: Valores de $\langle P \rangle$. O comportamento destes valores é visto na Fig. 5.6.

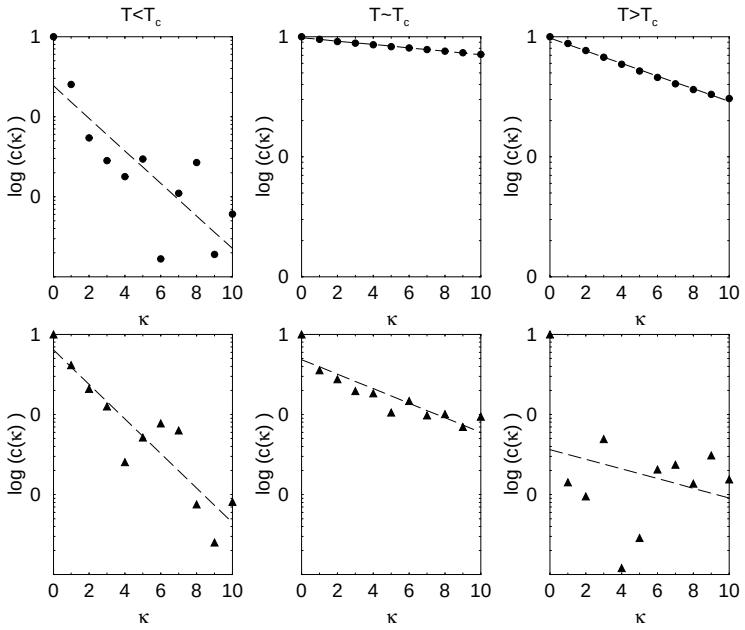

Figura 5.5: Correlação dos valores de magnetização medidos para uma rede 100×100 com 1000 iterações. Na primeira linha temos os resultados para o banho térmico, na segunda para o ASW. Mostramos três regiões de temperatura. Na primeira coluna temos os valores para $T_c > T = 1.45$, na coluna central para $T_c \sim T = 2.24$ e na terceira coluna para $T_c < T = 3.03$. A linha tracejada corresponde ao ajuste de uma exponencial aos pontos.

físicos [23, Cap. 4].

	$L = 100$			$L = 400$		
Temp.	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}
2.25700	0.179E-03	0.109E-03	0.72420E-02	0.330E-03	0.186E-03	0.56844E-02
2.26025	0.177E-03	0.106E-03	0.68803E-02	0.401E-03	0.181E-03	0.58073E-02
2.26350	0.174E-03	0.103E-03	0.68655E-02	0.510E-03	0.169E-03	0.57911E-02
2.26675	0.173E-03	0.988E-04	0.68729E-02	0.602E-03	0.152E-03	0.58747E-02
2.27000	0.161E-03	0.925E-04	0.68872E-02	0.350E-03	0.127E-03	0.58325E-02
2.27325	0.144E-03	0.859E-04	0.68827E-02	0.253E-03	0.102E-03	0.58747E-02
2.27650	0.132E-03	0.794E-04	0.68872E-02	0.161E-03	0.787E-04	0.58747E-02
2.27975	0.123E-03	0.745E-04	0.68872E-02	0.103E-03	0.577E-04	0.58747E-02
2.28300	0.106E-03	0.690E-04	0.68801E-02	0.568E-04	0.395E-04	0.58747E-02
	$L = 600$			$L = 800$		
Temp.	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}
2.25700	0.365E-03	0.209E-03	0.42055E-02	0.420E-03	0.216E-03	0.43192E-02
2.26025	0.541E-03	0.205E-03	0.42066E-02	0.640E-03	0.213E-03	0.42799E-02
2.26350	0.114E-02	0.195E-03	0.42269E-02	0.700E-03	0.205E-03	0.42956E-02
2.26675	0.556E-03	0.175E-03	0.45507E-02	0.450E-03	0.187E-03	0.41965E-02
2.27000	0.664E-03	0.148E-03	0.51477E-02	0.410E-03	0.159E-03	0.41965E-02
2.27325	0.103E-02	0.114E-03	0.43711E-02	0.559E-03	0.123E-03	0.41965E-02
2.27650	0.186E-03	0.786E-04	0.43711E-02	0.298E-03	0.835E-04	0.41965E-02
2.27975	0.952E-04	0.517E-04	0.43711E-02	0.990E-04	0.487E-04	0.41965E-02
2.28300	0.357E-04	0.275E-04	0.43711E-02	0.234E-04	0.197E-04	0.41965E-02

Tabela 5.6: Erros para a probabilidade de percolação $\langle P \rangle$, para as diversas redes utilizadas aqui.

	$L = 100$			$L = 400$		
Temp.	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}
2.25700	0.217E-07	0.707E-07	0.12273E-01	0.291E-07	0.975E-07	0.15894E-01
2.26025	0.403E-07	0.123E-06	0.12270E-01	0.530E-07	0.164E-06	0.16007E-01
2.26350	0.400E-07	0.122E-06	0.12296E-01	0.521E-07	0.160E-06	0.15894E-01
2.26675	0.393E-07	0.119E-06	0.12273E-01	0.508E-07	0.154E-06	0.16123E-01
2.27000	0.385E-07	0.116E-06	0.12275E-01	0.489E-07	0.146E-06	0.16007E-01
2.27325	0.180E-07	0.565E-07	0.12275E-01	0.184E-07	0.556E-07	0.16123E-01
2.27650	0.123E-07	0.397E-07	0.12275E-01	0.716E-08	0.226E-07	0.16123E-01
2.27975	0.935E-08	0.301E-07	0.13485E-01	0.392E-08	0.123E-07	0.16123E-01
2.28300	0.663E-08	0.216E-07	0.12275E-01	0.244E-08	0.763E-08	0.16123E-01
	$L = 600$			$L = 800$		
Temp.	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}	σ^{corr}	σ^{ing}	σ^{binn}
2.25700	0.310E-07	0.106E-06	0.54625E-02	0.255E-07	0.886E-07	0.42143E-02
2.26025	0.602E-07	0.188E-06	0.54625E-02	0.478E-07	0.150E-06	0.41874E-02
2.26350	0.593E-07	0.183E-06	0.54853E-02	0.473E-07	0.147E-06	0.42143E-02
2.26675	0.581E-07	0.176E-06	0.57256E-02	0.465E-07	0.142E-06	0.42507E-02
2.27000	0.570E-07	0.168E-06	0.57256E-02	0.463E-07	0.136E-06	0.44631E-02
2.27325	0.211E-07	0.622E-07	0.58031E-02	0.468E-07	0.130E-06	0.45374E-02
2.27650	0.590E-08	0.183E-07	0.58031E-02	0.996E-08	0.294E-07	0.45374E-02
2.27975	0.253E-08	0.782E-08	0.58031E-02	0.302E-08	0.867E-08	0.45374E-02
2.28300	0.113E-08	0.341E-08	0.58031E-02	0.107E-08	0.310E-08	0.43598E-02

Tabela 5.7: Erros para a pressão do cluster percolante Ω, para as diversas redes utilizadas aqui.

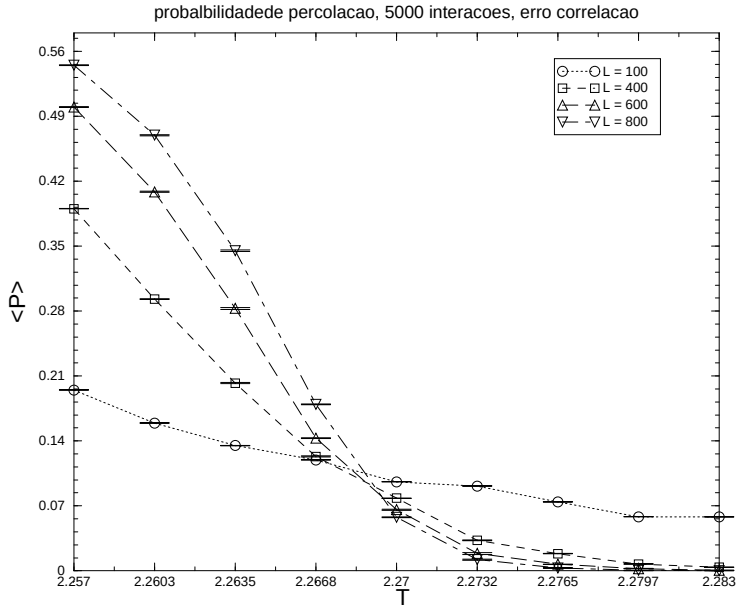

Figura 5.6: Gráfico da probabilidade de percolação $\langle P \rangle$ para redes com $L = 100,\ 400,\ 600$ e 800.

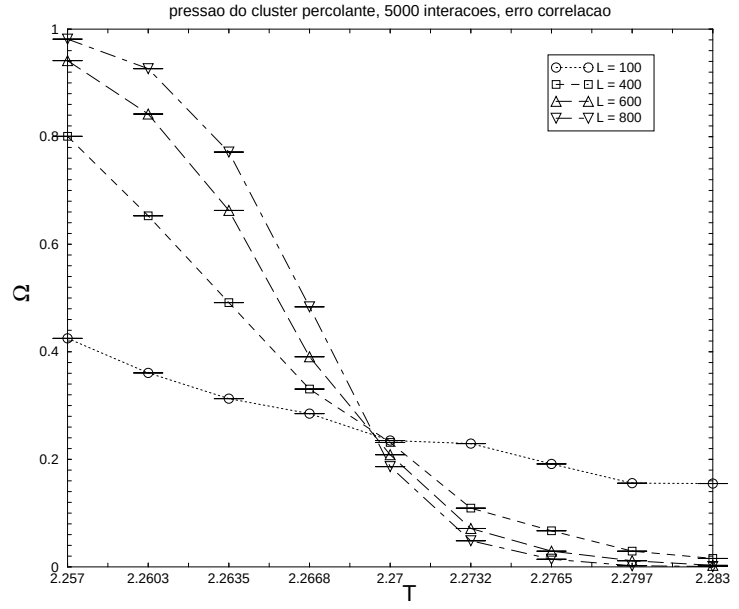

Figura 5.7: Gráfico da pressão do clusters percolantes (Ω) para as diversas redes, demonstrando o comportamento crítico para esta quantidade.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Neste capítulo discutiremos as conclusões do nosso trabalho e as perspectivas futuras. Nesta dissertação empregamos simulações numéricas de Monte Carlo para estudar a percolação de sítios e a transição de fase magnética no modelo de Ising bidimensional. Inicialmente, no capítulo 2, introduzimos vários conceitos da teoria da percolação usando como exemplo a percolação de sítios. No capítulo 3, fizemos uma breve revisão sobre fenômenos críticos. Também foram identificados a pressão do cluster percolante e o tamanho médio dos clusters como sendo os análogos, respectivamente, ao parâmetro de ordem e à susceptibilidade magnéticos. Os principais algoritmos de Monte Carlo e análises de erros foram apresentados no capítulo 4. Os resultados numéricos das simulações estão apresentados no capítulo 5.

Resultados numéricos de simulações estão apresentados nas seções 2.1 e 2.2, e no capítulo 5. A simulações da seção 2.2 tinham o objetivo de medir o p_c para a percolação de sítios em redes bidimensionais. No capítulo 5, estão apresentados os resultados de simulações para o modelo de Ising bidimensional, em que foram empregados dois algoritmos locais, o de Metropolis e banho térmico, e um algoritmo de cluster, o de Swendsen-Wang. Em toda esta dissertação fizemos uso de variáveis randômicas uniformemente distríbuidas entre $[0, 1]$. Tanto na determinação de p_c no capítulo 2, quanto nas simulações o capítulo 5, foram feitas análises de erros e foi aplicado o conceito de escalonamento de tamanho finito.

Na seção 2.2 apresentamos os resultados de simulações numéricas para redes de volumes $100^2, 250^2, 400^2, 600^2, 800^2$ e 1000^2, com 10000 iterações para cada volume. Na fig. 2.6, onde observamos o comportamento da probabilidade de percolação *versus* a probabilidade de ocupação, notamos que todas as curvas interceptam no mesmo ponto, $p = 0.5927 \pm 0.00001$. Se utilizarmos o conceito de escalonamento de tamanho finito, mais exatamente a Eq. (3.11), determinamos que este ponto é o ponto crítico onde ocorre a transição de fase. A fig. 2.8 apresenta vários histogramas da densidade de sítios ocupados para diferentes volumes de rede. Verifica-se claramente

que, à medida que o volume da rede aumenta, a densidade de sítios se concentra mais e mais em torno de p. Neste tipo de simulação, o único erro é o erro estatístico decorrente das variáveis randômicas. Isto porque a cada iteração geramos uma rede independente da anterior, logo, não teremos erro devido a correlações entre uma iteração e outra. A Tab. 2.1 apresenta estes erros, como também os valores das probabilidades de percolação.

No capítulo 5 nos concentramos nas simulações para o modelo de Ising bidimensional. Como foi explicado nas seções 4.2 e 4.3, os algoritmos de Metropolis e banho térmico varrem a rede de sítio em sítio, impondo uma atualização local do spin. Para este tipo de algoritmo, realizamos simulações em uma rede de volume 100^2 com 1000 iterações. Na Fig. 5.1 comparamos o valor da magnetização obtidos com o algoritmo de Metropolis e banho térmico. Como era esperado, as medidas do parâmetro de ordem na região crítica se desviam consideravelmente da solução exata. Isto ocorre devido às correlações entre uma configuração e outra, o que implica na divergência do tempo de correlação na região crítica e conseqüentemente na grande imprecisão dso resultados nesta região.

Nas simulacões com o algoritmo de Swendsen-Wang, para medirmos o parâmetro de ordem (magnetização) utilizamos uma rede de volume 100^2 com 1000 iterações. Na Fig. 5.2 apresentamos os valores medidos. Notamos que na região crítica, o algoritmo apresenta um desempenho muito melhor que os anteriores. A atenuação do critical slowing down pode ser claramente vista na Fig. 5.4.

As medidas da pressão do cluster percolante Ω e da probabilidade de percolação $\langle P \rangle$, apresentados nas Figs. 5.7 e 5.6 respectivamente, manifestam um comportamento crítico para estas quantidades. Nesta medidas nos concentramos em uma faixa de temperatura ao redor da região crítica. Simulamos vários volumes de rede, empregando 5000 iterações. A Fig. 5.6, para probabilidade de percolação, mostra que todas as curvas se cruzam em $T = 2.2691 \pm 0.0001$, que é consistente com a temperatura de Curie(dentro dos erros), $T_c = 2.269185$. Utilizando o escalonamento de tamanho finito encontramos o valor do exponete crítico, $\beta/\nu = 0.13 \pm 0.01$. Isto é uma demonstração clara de que a pressão do cluster percolante Ω se comporta tal qual o parâmetro de ordem para o modelo de Ising, conforme previsto por Coniglio e Klein.

Como perspectiva futura imediata deste trabalho, temos a intenção de empregar algoritmos de cluster para o modelo de Ising com a presença de um campo magnético externo. Também, em um futuro mais além, pretendemos investigar a relevância da percolação para o desconfinamento na QCD [2].

Apêndice A

Algoritmo de Hoshen-Kopelman

Como mencionamos no capítulo 2, quando estamos idendificando os clusters em uma rede, podemos nos deparar com situações nas quais temos que escolher qual o valor deve ser colocado em um determinado sítio. Se olharmos para a Fig. 2.2, identificamos visualmente um grande número de clusters, que são mostrados na Fig. 2.3. O algoritmo de Hoshen-Kopelmam é a melhor forma de chegarmos a última figura. Aqui descrevemos como ele funciona através de um exemplo.

Suponhamos que temos a seguinte rede de sítios:

$$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} .$$

De acordo com a rotina descrita no capítulo 2, varremos a rede da esquerda para a direita comparando os vizinhos superior e anterior. Vamos guardar a rede de cluster em outra matriz. Precisamos também de um vetor auxiliar, o seu uso ficará claro a seguir. O primeiro sítio da rede inicial (denotada por $ri(i+1, j+1)$)

$$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} ,$$

tem o valor 1 e os seus vizinhos são zeros. Lembre que estamos trabalhando com condições de contorno livres onde a linha (coluna) extra são preenchidas com zeros. Ele é o nosso primeiro candidato a cluster (a rede de cluster será denotada por $cl(i, j)$) assim, $cl(1, 1) = 1$. Vamos fazer $n(1) = 1$, onde $n(i * j)$ é um vetor auxiliar. O próximo sítio a ser analisado é o $ri(2, 3)$, o seu vizinho esquerdo é ocupado, então, ele deve receber o mesmo rótulo, ou seja, $cl(1, 2) = 1$. Não implementamos

mudança alguma no vetor, ele só será útil se encontrarmos um novo cluster ou uma ambigüidade. Agora, estamos em $ri(2,5)$, novamente ele esta isolado, então $cl(1,4) = 2$ e $n(2) = 2$. Seguindo na terceira linha temos $ri(3,3)$ ocupado com o vizinho superior também ocupado, então $cl(2,2) = 1$. Na quarta linha, $ri(4,2)$ esta isolado, logo $cl(3,1) = 3$ e $n(3) = 3$, no próximo sítio temos a primeira ambigüidade, devemos fazer $cl(3,2)$ igual ao menor valor entre os valores dos seus vizinhos, assim $cl(3,2) = 1$. Neste momento atualizamos o valor do vetor auxiliar $n(3)$, que é igual a 3 passa a ser $n(3) = 1$. Note que o valor do vetor foi atualizado permanecendo com o menor valor comparando $n(1)$ e $n(3)$. Seguindo na linha, fazemos $cl(3,4) = 4$ com $n(4) = 4$, pois $ri(4,5)$ está isolado. Na última linha, $cl(4,2) = 1$ e $cl(4,3) = 1$. Em $ri(5,5)$ temos mais uma ambigüidade, fazemos então $cl(4,4) = 1$ e $n(4) = 1$. Com isto terminamos a varredura da rede e podemos escrever a rede de cluster e o vetor auxilar:

$$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \quad ,$$

$$n(1) = 1, \qquad n(2) = 2, \qquad n(3) = 1, \qquad n(4) = 1 \quad .$$

Em pecolação de sítios não podemos ter sítios vizinhos com rótulos diferentes. Para corrigir a rede de clusters usamos o vetor auxiliar que é conhecido como o vetor que contém o *rótulos dos rótulos*. Agora varremos a rede atribuindo o valor do vetor ao respectivo cluster, ou seja, o cluster identificado pelo número 2 receberá o valor de n(2) e assim por diante, ao final reescrevemos a rede de clusters

$$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \quad ,$$

aqui, temos um cluster percolante que se estende da primeira a última linha identificado com o rótulo 1 e um cluster isolado com o rótulo 2.

Em rede maiores a utilidade do vetor auxiliar é mais significativa. Podemos, ao final da formação de uma determinada rede de clusters, ter as seguintes compomentes para vetor auxiliar:

$$n(1) = 1, \quad n(2) = 2, \quad n(3) = 2, \quad n(4) = 3, \quad n(5) = 4, \quad n(6) = 6 \quad .$$

Aqui, devemos agir de uma maneira recursiva,

$$
\begin{aligned}
& n(3) = 2 \quad \text{e} \quad n(2) = 2 \quad \therefore \quad n(3) = 2 \quad , \\
& n(4) = 3 \quad \text{e} \quad n(3) = 2 \quad \text{e} \quad n(2) = 2 \quad \therefore \quad n(4) = 2 \quad , \\
& n(5) = 4 \quad \text{e} \quad n(4) = 3 \quad \text{e} \quad n(3) = 2 \quad \text{e} \quad n(2) = 2 \quad \therefore \quad n(5) = 2 \quad , \\
& n(6) = 6 \qquad \therefore \quad n(6) = 3 \quad .
\end{aligned}
$$

Por definição, os rótulos dos clusters devem ser estabelecido de uma maneira crescente, por isto, $n(6) = 3$. No exemplo acima não precisamos fazer uma atualização deste tipo. Geralmente isto só ocorre em grandes redes. Para chegarmos a um resultado como o da Fig. 2.3 utilizamos este raciocínio.

Apêndice B

Solução exata para o modelo de Ising

Uma da grandes vantagens de utilizarmos o modelo de Ising é devido a o fato de que para os casos uni e bidimensionais, ele possuir solução analítica. Neste apêndice, descreveremos os procedimentos envolvidos na dedução desta solução, trataremos primeiramente o modelo de Ising unidimensional, onde fica claro a não existência de uma transição de fase de segunda ordem, ao contrário do que é visto no caso bidimensional, onde fica evidente a transição de fase de segunda ordem. Estas soluções são bem conhecidas no mundo da física estatística. Vamos descreve-las da mesma forma como é geralmente apresentadas em livros desta área. No entanto, a falta de detalhes nos procedimentos matemáticos envolvidos na dedução destas soluções, nos motivou para a elaboração deste apêndice. Tentaremos ser o mais claro possível, apresentando todos os passos envolvidos para o caso unidimensional. O caso bidimensional é um tanto complicado e aqui apresentaremos o resultado que L. Onsager[28] encontrou em 1944.

A solução.

Para a dedução da solução do modelo de Ising unidimensional, iniciamos determinando que a energia para uma dada configuração i, é descrita por

$$E_{\{S_i\}} = -J\sum_{k=1}^{N} S_k S_{k+1} - H\sum_{k=1}^{N} S_k \,, \tag{B.1}$$

esta equação pode ser adquirida a partir o hamiltoniano para o modelo de Ising apresentado na Eq. (4.1). Vamos utilizar condições de contorno periódicas que para uma rede unidimensional com N sítios implica que o sítio vizinho a S_N é o primeiro sítio, ou seja,

$$S_{N+1} = S_1 \,,$$

o que transforma a nossa rede linear em um anel, como está demonstrado na Fig. B.1 (a). Como praticamente todos os observáveis termodinâmicos são extraidos

da função de partição é inevitável a sua transcrição, utilizando a Eq. (4.2) temos

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1}\sum_{S_2=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1}\exp\left\{\beta\sum_{k=1}^{N}(JS_kS_{k+1}+\vec{H}S_k)\right\},$$

ou utilizando a condição de contorno que garante que

$$\sum_{k=1}^{N}S_k=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}(S_k+S_{k+1}),$$

chegamos a

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1}\sum_{S_2=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1}\exp\left\{\beta\sum_{k=1}^{N}(JS_kS_{k+1}+\frac{1}{2}\vec{H}(S_k+S_{k+1}))\right\}. \quad \text{(B.2)}$$

Vamos introduzir agora uma matriz P de ordem 2×2 a qual tem como elementos

$$< S|P|S' >= \exp[\beta(JSS'+\frac{1}{2}\vec{H}(S-S'))], \quad \text{(B.3)}$$

onde S e S' são autoestados de spins de Ising com valores ± 1

$$|S>=|+1>\otimes|-1>,$$

então os elementos de matriz podem ter os possíveis valores

$$\begin{aligned}
<+1|P|+1> &= \exp\beta(J+\vec{H}),\\
<-1|P|-1> &= \exp\beta(J-\vec{H}),\\
<+1|P|-1> &= \exp-\beta J, \quad \text{(B.4)}\\
<-1|P|+1> &= \exp-\beta J.
\end{aligned}$$

Analisando as Eqs. (B.4) notamos que P tem a seguinte forma

$$P=\begin{bmatrix} e^{\beta(J+\vec{H})} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\vec{H})} \end{bmatrix}, \quad \text{(B.5)}$$

esta matriz é chamada de *matriz de transferência.* Se expandirmos a soma em N na Eq. (B.2),

$$\begin{aligned}
Z = \sum_{S_1=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1}\exp\{\beta[(JS_1S_2+\frac{1}{2}\vec{H}(S_1+S_2))+ \quad \text{(B.6)}\\
(JS_2S_3+\frac{1}{2}\vec{H}(S_2+S_3))+\cdots+(JS_NS_1+\frac{1}{2}\vec{H}(S_N+S_1))]\},
\end{aligned}$$

onde notamos que Z é formado de vários termos que possuem a mesma forma das Eqs. (B.4), então podemos escrever a equação acima como

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1}<S_1|P|S_2><S_2|P|S_3>\cdots<S_N|P|S_1>, \quad \text{(B.7)}$$

quando temos uma equação deste tipo, temos uma seqüência de produtos de matrizes. Nesta seqüência os termos $\sum_{S_K=\pm 1} |S_k><S_k|$ podem ser identificados como uma identidade. Com isto, a equação acima se simplifica:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} < S_1|P^N|S_1 > \tag{B.8}$$

este tipo de equação pode ser representada como um traço

$$Z \;\; = \;\; TrP^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N \tag{B.9}$$

onde λ_+ e λ_- são os autovalores da matriz P. Então, se descobrirmos estes autovalores, teremos uma expressão para a função de partição.

Temos agora que resolver uma equação de autovalores

$$\begin{bmatrix} e^{\beta(J+\vec{H})} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\vec{H})} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} S^+ \\ S^- \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} S^+ \\ S^- \end{pmatrix}, \tag{B.10}$$

para tanto, montamos o sistema de equações lineares

$$\begin{cases} S^+(e^{\beta(J+\vec{H})} - \lambda) + S^- e^{-\beta J} & = 0 \\ S^-(e^{\beta(J-\vec{H})} - \lambda) + S^+ e^{-\beta J} & = 0 \end{cases}.$$

Da primeira equação , tiramos o valor de S^-

$$S^- = \frac{S^+(\lambda - e^{\beta(J+\vec{H})})}{e^{-\beta J}},$$

substituindo esta expressão na última equação do sistema encontramos

$$S^+ e^{-\beta J} + S^+(e^{\beta(J-\vec{H})} - \lambda)\frac{(\lambda - e^{\beta(J+\vec{H})})}{e^{-\beta J}} = 0\,,$$

ou

$$S^+\{e^{-\beta J} + e^{\beta J}(e^{\beta(J-\vec{H})} - \lambda)(\lambda - e^{\beta(J+\vec{H})})\} = 0\,,$$

como S^+ é diferente de zero, só nos resta a opção que o termo entre { } seja nulo, ou seja,

$$e^{-\beta J} + e^{\beta J}(e^{\beta(J-\vec{H})} - \lambda)(\lambda - e^{\beta(J+\vec{H})}) = 0\,,$$

daí tiramos uma equação polinomial de segundo grau em λ

$$\lambda^2 - \lambda(e^{\beta(J+\vec{H})} + e^{\beta(J-\vec{H})}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} = 0 \tag{B.11}$$

as raízes deste polinômio são os autovalores e são dados por

$$\lambda_\pm = \frac{e^{\beta(J+\vec{H})} + e^{\beta(J-\vec{H})}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{[e^{\beta(J+\vec{H})} + e^{\beta(J-\vec{H})}]^2 - 4[e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}]}\,, \tag{B.12}$$

ou, após uma pequena manipulação

$$\lambda_{\pm} = \frac{e^{\beta J}}{2}\left(e^{\beta\vec{H}} + e^{-\beta\vec{H}} \pm \sqrt{[e^{\beta\vec{H}} + e^{-\beta\vec{H}}]^2 - 4e^{-2\beta J}[e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}]}\right)$$

usando as definições de seno e cosseno hiperbólicos

$$\cosh(A) = \frac{e^{A} + e^{-A}}{2}, \qquad \sinh(A) = \frac{e^{A} - e^{-A}}{2}$$

podemos escrever os autovalores como

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J}\left[\cosh(\beta\vec{H}) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta\vec{H}) - 2e^{-2\beta J}\sinh(2\beta J)}\right]. \tag{B.13}$$

De acordo com a Eq. (B.9), notamos que, $\lambda_+ > \lambda_-$. Desta forma, para uma rede muito grande ($N \to \infty$), apenas os valores de λ_+ contribuirão para as medidas das quantidades termodinâmicas.

A partir da energia livre de Gibbs

$$G(T,\vec{H}) = -kT\ln(Z(T,\vec{H}))\,,$$

podemos calcular a energia livre de Gibbs por sítio

$$g(T,\vec{H}) = \lim_{N\to\infty}\frac{G(T,\vec{H})}{N} = -kT\lim_{N\to\infty}\frac{ln(Z(T,\vec{H}))}{N} = -kT\ln\lambda_+$$

usando a Eq. (B.13) para λ_+, e a propriedade dos logaritmos $\ln(RS) = \ln(R)+\ln(S)$ além de lembrarmos que $\beta \equiv 1/kT$, encontramos

$$g(T,\vec{H}) = -J - kT\ln\left[\cosh(\beta\vec{H}) + \sqrt{\cosh^2(\beta\vec{H}) - 2e^{-2\beta J}\sinh(2\beta J)}\right]. \tag{B.14}$$

Como sabemos a magnetização média é a derivada da energia livre de Gibbs em relação ao campo mantendo a temperatura constante, logo*,

$$\begin{aligned}
< m > &= -\left(\frac{\partial g}{\partial\vec{H}}\right)_T \\
&= kT\frac{\partial}{\partial\vec{H}}\left(\ln[\cosh(\beta\vec{H}) + \sqrt{}]\right) \\
&= \frac{kT}{\cosh(\beta\vec{H}) + \sqrt{}}\left(\beta\sinh(\beta\vec{H}) + \frac{2\cosh(\beta\vec{H})\sinh(\beta\vec{H})}{2\sqrt{}}\right) \\
&= \frac{\sinh(\beta\vec{H})}{\cosh(\beta\vec{H}) + \sqrt{}}\left(\frac{\sqrt{} + \cosh(\beta\vec{H})}{\sqrt{}}\right) \\
&= \frac{\sinh(\beta\vec{H})}{\sqrt{\cosh^2(\beta\vec{H}) - 2e^{-2\beta J}\sinh(2\beta J)}}
\end{aligned} \tag{B.15}$$

*Para facilitar, vamos definir a notação $\sqrt{} \equiv \sqrt{\cosh^2(\beta\vec{H}) - 2e^{-2\beta J}\sinh(2\beta J)}$

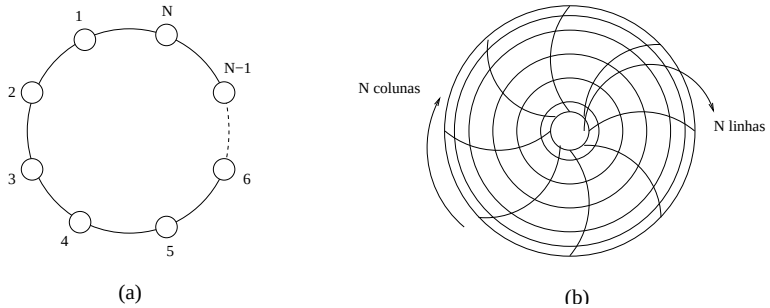

Figura B.1: Tipos de redes contínuas para o modelo de Ising . Em (a) temos uma rede uni-dimensional, que impondo continuidade, comporta-se como um anel, a figura (b) representa um rede bidimensional que, impondo-se continuidade, comporta-se como um toróide

onde usamos a igualdade $\beta = 1/kT$ no segundo passo. Na Eq. (B.15) fizemos $\vec{H} = 0$, não temos magnetização espontânea O que demonstra que para o modelo de Ising unidimensional não ocorre transição de ordem de segunda ordem [29, Cap. 16]. Portanto o modelo de Ising unidimensional nunca exibe um comportamento ferromagnético. Com isto, concluímos que este modelo com esta dimensão não é adequado para o estudo de uma transição de fase de segunda ordem, que é o nosso objetivo.

A solução do modelo de Ising bidimensional é bem descrita em [29, Cap. 17] com uma certa grandeza de detalhes. Também existem textos para *pedestres* [30] onde esta solução é apresentada. O resultado, no entanto é simples. A magnetização espontanea por spin é dada por:

$$m(0,T) = \begin{cases} 0 & ,T > T_c \\ \frac{(1+e^{-2\beta J})^{\frac{1}{4}}(1-6e^{-4\beta J}+e^{-8\beta J})^{\frac{1}{8}}}{\sqrt{1-e^{-4\beta J}}} & ,T < T_c \end{cases} . \tag{B.16}$$

Onde fica claro o comportamento da magnetização antes e depois da temperatura de Curie. Demonstrando o comportamento crítico desta quantidade que vem a ser o parâmetro de ordem do modelo de Ising. Se traçarmos o gráfico desta equação esperamos visualizar uma figura como a mostrada na Fig. 3.2 (c). Este gráfico está na Fig. B.2.

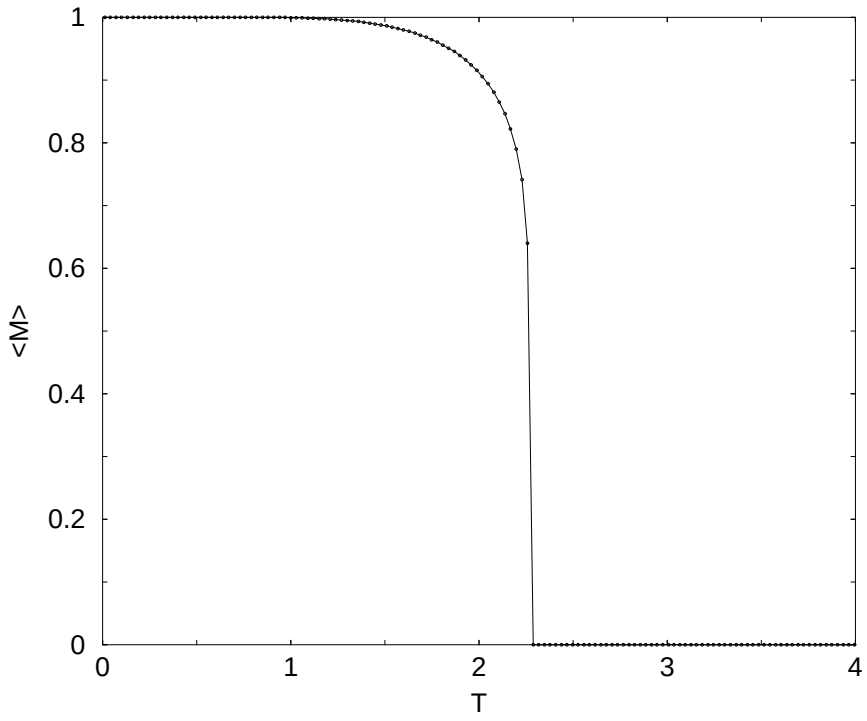

Figura B.2: Gráfico da Eq. (B.16) demonstrando o comportamento crítico do parâmetro de ordem tal qual ao previsto na Fig. 3.2 (c).

Referências

[1] D. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, 1992).

[2] H. Satz, *Comput. Phys. Commun.* **147**,46 (2002); *Fortsch. Phys.* **50**, 541 (2002); *Nucl. Phys. A* **681**, 3 (2001).

[3] P. Flory, *J. Am. Chem. Soc.* **63**, 3083 (1941); W. H. Stockmayer *J. Chem. Phys.* **11**, 45 (1943).

[4] D. Stauffer, *Phys. Rep.* **54**, 1 (1979).

[5] J. J. Binney, N.J. Dowrick, A. J. Fisher, e M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena* (Oxford, 1992).

[6] C. Itzykson e J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, 1980); V. A. Miransky, *Dynamical Symmetry Breaking in Quantum Field Theories* (World Scientific, 1993).

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

[8] P. Blanchard, T. Mendes, H. Satz et.al, *J.Phys. A* **33**. 8603 (2000).

[9] C. M. Fortuin e P. W. Kastelyen, *Physica* **57**, 536 (1972).

[10] D. P. Landau e K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge, 2000).

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

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

[13] T.Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Edusp, 2001)

[14] J. M. Hammerley e D. C. Handscomb, *Monte Carlo Methods* (Barnes & Noble, 1967).

[15] S. Salinas, *Introdução a Física Estatística.* (Edusp, 1997).

[16] E. Stanley, *Introducition to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford, 1971).

[17] G. Bhanot, *Rep. Prog. Phys,* **51**, 429 (1988).

[18] A. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Fundations and new algothms.* (Escola de verão "Functional Intergration: Basics and applications" em Cargêse, http://citeseer.nj.nec.com/sokal96monte.html)

[19] S. Fortunato, *Percolation and Deconfinament in SU(2) Gauge Theory.* PhD Thesis, Physics Faculty, University of Bielefeld

[20] M. D'Onorio De Meo et al. *J. Stat. Phys,* **60**, 585 (1990).

[21] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys,* **54**, 235 (1982).

[22] A. Cucchieri e T. Mendes, *Notas de Aula do curso de Teoria Quântica de Campos à Temperatura Finita* (São Carlos, 2002).

[23] K. Binder e D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer, 1997).

[24] D. Stauffer e D. W. Heermann, *Z. Physik.* **44**, 339 (1981).

[25] M. Newman e G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford, 1999).

[26] W. Janke, *Statistical Analisys of simulations: Data Correlations and Error Estimation*, (John von Newmann Institute for Computating, http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume10)

[27] J-S. Wang. *Physica A* **161**, 249 (1989).

[28] L. Onsager. *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

[29] E. Huang. *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, 1988).

[30] B. Kastening. *cond-mat/0104398.*