

DISSERTAÇÃO DE
MESTRADO

**Simulações de Monte Carlo
da Teoria ϕ^6 $O(4)$ na Rede em 3d**

ANDRÉ NICOLAI OBREDOR MARCIANESI

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS–CBPF

RIO DE JANEIRO, JULHO DE 2008

Resumo

De acordo com Wilczek e Rajagopal, pode-se argumentar que a transição de fase quiral da QCD pertence à mesma classe de universalidade que a teoria ϕ^6 em três dimensões com simetria interna $O(4)$. Sendo este um modelo escalar bem mais simples, sua simulação numérica é mais econômica em termos computacionais e, portanto, possibilita uma análise mais precisa de suas transições de fase. Por haver transições de fase de primeira e segunda ordens no modelo escalar considerado, é possível fazer uma análise do ponto tricrítico, o qual acredita-se existir na cromodinâmica ao considerar nulas as massas dos quarks *up* e *down*, e algum valor finito para massa do quark *strange*. Nesta dissertação, realiza-se o estudo do comportamento crítico deste modelo escalar por simulações através do método de Monte Carlo, estabelecendo seu diagrama de fases, ponto tricrítico e expoentes críticos.

Abstract

According to Wilczek and Rajagopal, one can argue that the chiral phase transition in QCD belongs to the same universality class of the ϕ^6 theory in three dimensions with $O(4)$ internal symmetry. The latter being a far simpler model, it permits more economic numerical simulations, and so forth, more precise analysis of the phase transitions. Because there are first and second orders phase transitions in the scalar model in question, it is possible to make an analysis of the tricritical point, which is believed to exist in chromodynamics considering null *up* e *down* quark masses and some finite value for *strange* quark mass. On this dissertation, a study of the critical behavior in the mentioned scalar theory is presented, determining its phase diagram, tricritical point and critical exponents.

Agradecimentos

Embora não seja um costume meu (como sabem os conhecidos), faço questão de agradecer aqui a todos os que, de alguma forma, contribuíram para a realização e conclusão deste trabalho (não necessariamente em ordem de importância).

Agradeço primeiramente à minha mãe que, sempre com um conselho valioso, uma palavra carinhosa e um astral positivo me ajudou nos momentos mais difíceis e me orientou, como mãe e como amiga; sem ela, não teria conseguido terminar esta dissertação. Obrigado pelo seu “energizante” caseiro que me ajudou a passar a noite em claro escrevendo este trabalho quando cheguei no prazo limite de entrega.

Agradeço ao meu pai que, sempre respondendo às minhas indagações científicas desde a mais tenra idade, foi meu primeiro professor e incentivador do meu grande interesse pela ciência. Sem ele, não teria embarcado neste caminho em busca do conhecimento. Não tenho dúvida de que também será uma grande influência científica para Lucas.

Agradeço ao meu único e preferido irmão Lucas, com quem infelizmente não passo tanto tempo quanto gostaria, pelo seu enorme carinho, por sempre me obedecer quando peço para escovar os dentes (brincadeira), e por ser um companheiro verdadeiro apesar da grande diferença de idade (às vezes parece mais adulto do que eu).

Agradeço à Liana e ao Hugo, que fazem parte da minha família há tanto tempo. Obrigado Liana por suas risadas contagiantes e pelo seu astral positivo sempre jovial. Considero-te, mais do que uma madrastra, uma amiga. Obrigado Hugo pela sua dedicação diária em botar comida na mesa (literalmente); também te considero um amigo, além de um segundo pai.

À minha namorada Luciana, que me apoiou o tempo todo, agradeço especialmente. Obrigado por estar ao meu lado e ter paciência quando tive que ficar os finais de semana estudando, por ajudar a cuidar do meu cachorro quando ficou doente e não tive tempo de cuidar dele. Enfim, obrigado por ter aparecido em minha vida!

Agradeço ao meu co-orientador Cesar Linhares, idealizador do atual trabalho, pela sua paciên-

cia e orientação dedicadas desde minha iniciação científica, e que certamente se estenderá, juntamente com o Itzhak, para futuros trabalhos. Ao meu orientador Itzhak Roditi, pela sua não menor paciência, pelo seu bom humor (mesmo quando eu merecia uns puxões de orelha) e compreensão.

Agradeço também ao resto da minha família que, embora longe, sei que me apóia tanto quanto os meus seres queridos mais próximos; agradeço todos os bons momentos que passei ao seu lado. Obrigado Nonita e Nonito, tios Hugo e Walter, Tias Susana, Kitty e Marcela, primas Pamela, Valeria, Agustina e Agostina, primos Giulio, Renzo, Santiago, Pablo e Gabriel, e os demais.

Agradeço à minha outra grande família do Movimento Humanista, cuja participação, além de me ajudar a ser uma pessoa mais coerente, me rendeu bons amigos. Paz, força e alegria para todos vocês.

Por penúltimo, mas não menos importante, agradeço aos meus bons amigos, alguns novos e outros de mais velha data: Rafaéis Aranha, Sapeca e Ferrazolli, Diogo, Gussstavo, Marília, Zambrano (valeu pelas dicas de latex), Ana, Bia, Marco, Seiti, Carbono, Ju, Giselle, Fernanda, e todos os companheiros do CBPF. Àqueles que não mencionei, me desculpem; deixei para fazer este agradecimento na madrugada anterior à entrega do trabalho, na verdade quase não lembrava mais o meu nome (prometo incluí-los nos agradecimentos da tese de doutorado).

Finalizando, agradeço ao CBPF, por ter me dado a possibilidade de cursar o mestrado, e à Capes, CNPq e Faperj, pela ajuda financeira durante o período.

Sumário

Introdução	1
1 Da QCD a modelos escalares	4
1.1 Definição da QCD e simetrias	4
1.2 Transição quiral	6
1.2.1 $N_f = 2$	7
1.2.2 $N_f = 3$	9
1.3 Objetivos e perspectivas	10
2 Teorias de campo escalares e mecânica estatística	12
2.1 Teorias escalares	12
2.2 Gerador funcional e rotação de Wick	13
2.3 Correspondência com a mecânica estatística	14
2.4 Discretização do espaço na rede	15
3 Transições de fase	18
3.1 Transições de segunda ordem	18
3.1.1 Escalonamento de tamanho finito (Finite size scaling)	20
3.2 Transições de primeira ordem	24
3.3 Determinação do ponto crítico e do expoente ν	26
3.4 Efeitos de tamanho finito	27
3.5 Diagrama de fases	28
4 Simulações de Monte Carlo na rede	29
4.1 Equipamento utilizado	29
4.2 Método de Monte Carlo	29

4.2.1	Balanço detalhado	31
4.3	Algoritmo de Metropolis	32
4.3.1	Números aleatórios	34
4.3.2	Correlação	35
4.3.3	Sobre-relaxação	39
4.4	Algoritmo de Wolff	40
4.5	Implementando o método	46
4.6	Análise de erros	48
4.6.1	Método de bootstrap	49
4.6.2	Propagação de erros	50
5	Resultados numéricos	51
5.1	Verificação da eficácia do método de Monte Carlo	51
5.2	Comparação dos algoritmos	52
5.3	Ponto Tricrítico	62
5.3.1	Análise de relaxação	62
5.3.2	Análise de histerese	67
5.4	Análise de FSS	72
5.4.1	FSS para transição de primeira ordem	72
5.4.2	Estimativas dos expoentes ν , γ e β	75
5.5	Diagrama de fases	87
6	Conclusão e perspectivas	88
A	Atualização local do campo	90
B	Condições de contorno periódicas	92
C	Algoritmo local	94
	Referências Bibliográficas	95

Lista de Tabelas

5.1	<i>Estimativas de τ_{eq} para os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem sobre-relaxação. Verifica-se que o tempo de equilíbrio só depende do tamanho da rede para o algoritmo de Metropolis sem S.R..</i>	57
5.2	<i>Estimativas de t_{MC} para os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem sobre-relaxação. As simulações foram feitas em dois extremos aproximados ($\rho_l = -43$ e $\rho_l = -47$) da região crítica $\{ \rho_l \approx -45, \lambda = 25, \eta = 0 \}$.</i>	57
5.3	<i>Estimativas de expoentes críticos encontradas na literatura (todas as referências são encontradas em [10]) e obtidas neste trabalho (primeira linha) para a classe de universalidade $O(4)$ em $d = 3$. Os expoentes marcados com * foram calculados a partir de outros expoentes fornecidos nas referências, usando as relações de hiperescala (3.21) e (3.22). ^a Expoentes calculados próximo ao ponto tricrítico ($\lambda = -3, \eta = 1$). ^b Expoentes calculados longe do ponto tricrítico ($\lambda = 25, \eta = 0$).</i>	86
A.1	<i>Estimativas da taxa de aceitação média para diferentes valores de b em (4.10). A melhor escolha corresponde a $b = 0,6$.</i>	91

Lista de Figuras

3.1	<i>Vizinhanças de uma transição de segunda ordem.</i>	19
3.2	<i>Transição de segunda ordem para a energia livre (3.4). O valor $(r_o)_c = 0$ corresponde à transição de fase para um dado valor $\lambda > 0$ do termo quártico.</i>	20
3.3	<i>Energia interna de um sistema nas vizinhanças de uma transição de primeira ordem. Nota-se a descontinuidade na temperatura crítica T_c.</i>	25
3.4	<i>Transição de primeira ordem para a energia livre (3.24). O valor $(r_o)_c = 0$ corresponde à transição de fase para um dado valor $\lambda > 0$ do termo quártico.</i>	25
3.5	<i>Suavização do comportamento de transição para redes finitas, para primeira e segunda ordens.</i>	27
3.6	<i>Diagrama de fases da teoria de Landau com termo sêxtico (3.24). A linha cheia corresponde às transições de segunda ordem, enquanto a tracejada corresponde às de primeira ordem. O comportamento da energia livre é mostrado de forma esquemática nas diferentes regiões do espaço de fase.</i>	28
4.1	<i>Teste do algoritmo ranmar. Nota-se que a disposição dos pontos não apresenta qualquer regularidade à simples vista.</i>	35
4.2	<i>Autocorrelação normalizada $A_m(t)/A_m(0)$ como função de t no modelo $\phi^6 O(4)$ em uma rede 18^3, para diferentes valores de ρ_l. O valor de $t = \tau$ para o qual $A_m(\tau) = e^{-1}$ é a estimativa do tempo de correlação, considerando $A \approx e^{-t/\tau}$.</i>	37
4.3	<i>Autocorrelação normalizada $A_m(t)/A_m(0)$ como função de t da figura (4.2), para $\rho_l = -50$. O coeficiente linear do ajuste linear fornece a estimativa do tempo de correlação, considerando $\ln A_g \approx -\frac{t}{\tau} + B_0$.</i>	38
4.4	<i>“Cluster flipping” na configuração $\{\sigma_x^i\}$ para um determinado i, no modelo escalar $O(N)$, em uma rede 10×10. Em μ há 8 links quebrados, e em ν há 18 links quebrados.</i>	43

4.5	<i>Evolução do sistema $O(4)$ em uma rede 16^3 em um dado ponto do espaço de parâmetros, utilizando o algoritmo de Metropolis, para duas condições iniciais diferentes: uma com os campos aleatórios (vermelho) e outra com os campos uniformes (preto), com todas as componentes iguais a 0, 4.</i>	47
4.6	<i>Evolução do sistema $O(4)$ em uma rede 16^3 para diferentes valores de ρ_l.</i>	48
5.1	<i>Evoluções do sistema $O(4)$ em uma rede 10^4. O parâmetro r_0 [42] é equivalente ao parâmetro ρ em (2.7), e $\lambda_0 = 4\lambda$.</i>	52
5.2	<i>$\langle \Phi \rangle \times \rho_l$, $\chi \times \rho_l$, $U_L \times \rho_l$ para o modelo $\phi^4 O(4)$ com redes 5^4 e 10^4. Considerando as curvas para $\langle \Theta \rangle$ e χ, $(\rho_l)_c = -8, 4 \pm 0, 1$, ou $(r_0)_c = -24, 8 \pm 0, 2$; de acordo a interseção em U_L, $(\rho_l)_c = -8, 2 \pm 0, 1$, ou $(r_0)_c = -24, 4 \pm 0, 2$.</i>	53
5.3	<i>Evolução da magnetização $\vec{\Theta}$ do sistema $\phi^6 O(4)$ em redes 16^3, 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 4$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase ordenada), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..</i>	54
5.4	<i>Evolução da magnetização $\vec{\Theta}$ do sistema $\phi^6 O(4)$ em redes 16^3, 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 5, 5$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase desordenada), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..</i>	55
5.5	<i>Evolução da magnetização $\vec{\Theta}$ do sistema $\phi^6 O(4)$ em redes 16^3, 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 5$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase crítica), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..</i>	56
5.6	<i>Evolução da magnetização $\vec{\Theta}$ do sistema $\phi^6 O(4)$ em redes 8^3, 16^3 e 32^3 com parâmetros $\rho_l = -60$, $\lambda = 25$, $\eta = 0$. Vê-se que o tempo de equilíbrio depende quadraticamente do tamanho linear da rede.</i>	58
5.7	<i>Estimativa de τ_m (eq. 4.24) com $\lambda = 25$, $\eta = 0$ para diversos valores de ρ_l; As simulações foram feitas para redes de dimensão linear $L = 8, 12, 18, 30$, e nota-se picos mais pronunciados para redes maiores.</i>	59
5.8	<i>Comparação entre estimativas de $\tau_{max} \times L$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com e sem sobre-relaxação, para uma transição forte de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$).</i>	60
5.9	<i>Comparação entre estimativas de $\tau^d(L)$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com e sem sobre-relaxação, para uma transição forte de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$). O algoritmo de Wolff com SR é claramente o mais eficiente.</i>	60

- 5.10 *Comparação entre estimativas de $\tau^d(L)$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com sobre-relaxação, para uma transição de primeira ordem ($\lambda = -5, \eta = 1$). O algoritmo de Wolff se mostra o mais eficiente. 61*
- 5.11 *Evolução do parâmetro de ordem para redes de tamanho $30^3, 45^3, 60^3$ desde duas condições iniciais distintas. Em cada rede foram considerados três pontos do espaço de parâmetros com $\lambda = -4, 0$ próximos de uma transição de segunda ordem (os valores juntos às curvas correspondem ao parâmetro ρ_l considerado.). Observa-se que não há metaestados ou “saltos” no valor de equilíbrio de $|\vec{\Theta}|$, e no ponto crítico ($\rho_l = 7, 20$) há somente um valor de equilíbrio. 64*
- 5.12 *Evolução do parâmetro de ordem para redes de tamanho $30^3, 45^3, 60^3$ desde duas condições iniciais distintas. Em cada rede foram considerados três pontos do espaço de parâmetros com $\lambda = -4, 4$ próximos de uma transição de primeira ordem. Observa-se um “salto” no valor de equilíbrio de $|\vec{\Theta}|$, bem como metaestados na partida desordenada para $\rho_l = 8, 135$ 65*
- 5.13 *Evolução do parâmetro de ordem no ponto crítico para $\lambda = -4, 0$, e redes de tamanho $30^3, 45^3, 60^3$ desde duas condições iniciais distintas. Observam-se dois valores distintos de equilíbrio. 66*
- 5.14 *Histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 60$ com $\lambda = -3, 2$, simulado com o algoritmo de Metropolis sem SR. Como foi verificado na seção anterior (e como será verificado nesta mesma seção), a transição acima é de segunda ordem. 67*
- 5.15 *Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 30$ para três valores de λ . Constatase que o ponto tricrítico está mais próximo de $\{\lambda = -4, 0, \rho_l = 7, 2\}$ 69*
- 5.16 *Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 45$ para três valores de λ . O comportamento é semelhante ao da rede $L = 30$ e as conclusões são as mesmas. 70*
- 5.17 *Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 60$ para três valores de λ . O comportamento é semelhante ao das redes $L = 30, 45$ e as conclusões são as mesmas. 71*
- 5.18 *Comportamento do parâmetro de ordem para $L = 12, 14, 16, 18, 21$, em uma região de transição de fase de primeira ordem fraca ($\lambda = -4, 4, \eta = 1$) próxima ao ponto tricrítico. 73*

- 5.19 *Comportamento do cumulante de Binder (a) para $L = 12, 14, 16, 18, 21$, e suscetibilidade (b) em uma região de transição de fase de primeira ordem ($\lambda = -4,4, \eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico. 74*
- 5.20 *Comportamento da função de escala da suscetibilidade mostrada na Fig. 5.19(b), (região de transição de fase de primeira ordem) usando (3.23). 74*
- 5.21 *Comportamento do cumulante de Binder em uma região de transição de fase de segunda ordem ($\lambda = -3, \eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico. 77*
- 5.22 *Região de transição de fase de segunda ordem ($\lambda = -3, \eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico. A linha vertical tracejada corresponde à estimativa do ponto crítico pelo cumulante. 78*
- 5.23 *Escalonamento da magnetização (esquerda) e da suscetibilidade (direita) no ponto $(\rho_l)_c = 5,0568, \lambda = -3, \eta = 1$ para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 , em escala logarítmica. 79*
- 5.24 *Escalonamento de (5.10) (primeira linha), no ponto $\rho_l = 5,0568, \lambda = -3, \eta = 1$ para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 , em escala logarítmica. O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de β/ν 79*
- 5.25 *Funções de escala universais para o parâmetro de ordem (esquerda) e a suscetibilidade (direita) nas proximidades do ponto crítico $(\rho_l)_c = 5,0568$ com $\lambda = -3, \eta = 1$, para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 . Foram utilizadas as estimativas (5.20) para os expoentes críticos. 80*
- 5.26 *Região de transição de segunda ordem ($\lambda = 25, \eta = 0$), afastada do ponto tricrítico. 82*
- 5.27 *Escalonamento de (5.10) (primeira linha) no ponto $\rho_l = -44,91, \lambda = 25, \eta = 0$ para redes $L = 15, 18, 21, 24, 27, 33$. O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de $1/\nu$ 83*
- 5.28 *Escalonamento da magnetização (esquerda) e da suscetibilidade (direita) no ponto $(\rho_l)_c = -44,91, \lambda = 25, \eta = 0$ para redes $L = 15, 18, 21, 24, 27$ e 33 , em escala logarítmica. 84*
- 5.29 *Escalonamento de (5.12). O coeficiente linear fornece a estimativa de $(\rho_l)_c$. O resultado é consistente com o obtido em (5.24). 85*
- 5.30 *Funções de escala análogas às da Figura 5.25 para $\lambda = 25, \eta = 0$, próximas do valor crítico $(\rho_l)_c = -44,91$. Foram usadas as estimativas (5.26) para os expoentes críticos. 85*

- 5.31 *Diagrama de fases da teoria ϕ^6 $O(4)$ em três dimensões, para $\eta = 0$ (esquerda) e $\eta = 1$ (direita). 87*
- B.1 *Condições de contorno helicoidais em uma rede bidimensional. Os números distinguem os sítios da rede, representados pelos pontos. As interações representadas pelas setas vermelhas indicam condições de contorno helicoidais. 93*

Introdução

O século passado foi marcante no que diz respeito aos avanços da física na compreensão da natureza, do ponto de vista das interações fundamentais. Uma parte notável desses avanços na segunda metade do século certamente deveu-se à construção da cromodinâmica quântica (QCD). Esta teoria descreve as interações fortes que ocorrem entre partículas denominadas *quarks*, formando partículas presentes na matéria nuclear chamadas *hádrons*.

A QCD, por ser uma teoria de gauge não-abeliana, esconde por trás da sua elegante definição características muito peculiares. Em poucas palavras, no limite de altas energias, a chamada “carga de cor”, um de seus números quânticos, exibe um comportamento de blindagem (*screening*) oposto ao de teorias abelianas, de forma que para distâncias extremamente curtas a sua constante de acoplamento α_s tende a zero. Este comportamento é denominado *liberdade assintótica*. No entanto, para distâncias maiores (i.e., energias menores) há um aumento em α_s , e presume-se que a grandes distâncias a força de atração entre quarks seja constante, caracterizando o confinamento de quarks no ‘interior’ de hádrons.

Por outro lado, em colisões de íons pesados a altas energias, supostamente forma-se um plasma de quarks e glúons quente e denso [1], no qual se espera não haver confinamento. Fala-se então de uma transição de fase de desconfinamento, ocorrendo em alguma temperatura finita [2]. Acredita-se que o universo era composto por essa “sopa” de quarks e glúons nos instantes iniciais após o *big bang* (por volta de 10^{-6} s), após os quais as temperaturas baixaram da escala de 200 MeV ¹ [3] e os hádrons começaram a se formar.

Um outro fenômeno que ocorre na QCD é a quebra da simetria quiral. Esta simetria se constituiu pela separação entre dois tipos de quarks, esquerdo e direito. Veremos no primeiro capítulo que campos efetivos podem descrever condensados de quarks, os quais apresentam quebra espontânea de simetria quiral no vácuo. Esses condensados desaparecem sob condições extremas de tempe-

¹Ou, equivalentemente, $2,3 \times 10^{12} \text{ K}$; as duas grandezas (energia em unidades naturais e temperatura) estão relacionadas pela constante de Boltzmann $\kappa_B \approx 8,6 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$.

ratura e densidade de energia, e uma outra transição de fase é então esperada, conhecida como restauração da simetria quiral [4].

Um grande tema de discussão, portanto, em QCD é o que trata de suas transições de fase. No entanto, a discussão dessas transições, partindo de métodos perturbativos, apresenta grande dificuldade, uma vez que o aumento da intensidade das interações de suas partículas fundamentais a baixas energias tornam inviável a sua aplicação. Simplificações são então necessárias para viabilizar o estudo, de forma que as transições tornam-se definidas para alguns limites da teoria. Considerando as massas dos quarks infinitas (teoria de gauge pura), é estabelecida a existência da transição desconfinanante, enquanto no limite das massas serem nulas a transição quiral é verificada. No entanto, não se sabe se as transições se mantêm para os valores físicos das massas dos quarks ou ainda se ambas as transições ocorrem juntas. Simulações de Monte Carlo na rede tornam-se então especialmente importantes no regime de transições de fase da QCD, e resultados de simulações na rede indicam que possivelmente as duas transições ocorrem no mesmo ponto crítico [2, 1].

Dificuldades adicionais surgem em simulações diretas da teoria, pois esta envolve um certo número de sabores de quarks, além dos campos de Yang–Mills, descrevendo glúons, com simetria de calibre SU(3). Fazer estudos numéricos em QCD significa que todos estes campos devem ser considerados sobre redes em três dimensões espaciais e uma direção de temperatura, de acordo com as prescrições de discretização utilizadas no formalismo de teorias na rede [5]. Tais estudos são extremamente exigentes em termos computacionais, pois, além do número de campos a se levar em conta, mantendo a simetria SU(3) de cor, há a dificuldade de se implementar numericamente os campos fermiônicos, anticomutativos, cujos métodos existentes tornam a simulação ainda mais lenta. Desta maneira, para que se obtenham resultados estatisticamente significativos, são necessários em geral tempos extremamente longos para a execução de programas.

Para abordar este tema, Wilczek argumenta [4, 6] que a transição de fase quiral da QCD está na mesma classe de universalidade dos modelos escalares de Ginzburg–Landau (G–L) com simetria $O(4)$ e em três dimensões. Desde o início da década de 1990, vem-se defendendo o uso de teorias escalares no estudo da transição de fase quiral da QCD a altas temperaturas, ao invés de se considerar o modelo não-abeliano completo. Portanto, em vez de estudar esta transição diretamente na QCD, pretende-se atingir o mesmo objetivo estudando essas teorias escalares, de menor complexidade computacional. Evitando muitos problemas técnicos envolvidos na simulação direta, características da transição (expoentes críticos, funções de escala, etc.) podem ser obtidas com muito menor custo. Com base nessa conjectura, neste trabalho adotaremos esta abordagem, em

vez de simular a QCD diretamente.

Um outro modelo, citado por Wilczek como pertencente à mesma classe de universalidade da cromodinâmica quântica, é o de Heisenberg $O(4)$ em 3 dimensões. O mesmo já foi extensamente estudado, existindo numerosos trabalhos na literatura que analisam as características de sua transição de fase através de simulações de Monte Carlo [7, 8, 9, 10]. Porém, este modelo apresenta somente transições de fase de segunda ordem, e em determinadas condições (como será visto adiante) a transição quiral da QCD aparenta ser de primeira ordem.

Já o modelo de Ginzburg-Landau (G–L) estendido (com termo de sexta ordem) apresenta ambos os tipos de transição, cobrindo mais amplamente os possíveis regimes de transições existentes na QCD, e permitindo um estudo de singularidades perto de pontos tricríticos. Neste trabalho pretendemos então estudar a teoria escalar $\phi^4 + \phi^6$ via simulações numéricas de Monte Carlo com a hamiltoniana de G–L estendida (com termo sêxtico), obtendo o diagrama de fases, funções de escala e grandezas universais (expoentes críticos). Em projetos futuros pretende-se estender o estudo, de forma a permitir uma comparação direta dos resultados da teoria escalar com a QCD, como equações de estado em comum (fazendo uma identificação entre as grandezas trabalhadas de ambas), e obtenção de informações sobre as singularidades e correções de escala próximo ao ponto tricrítico [6].

No primeiro capítulo, uma breve incursão à QCD é realizada, descrevendo sua possível transição de fase de quebra de simetria quiral. Também é feita uma argumentação formal mostrando que a QCD e o modelo de G–L pertencem à mesma classe de universalidade. Discute-se também as transições das teorias escalares (representadas pela hamiltoniana de G–L). No segundo capítulo, introduz-se a teoria escalar ϕ^4 e ϕ^6 na rede, discretizando o espaço euclidiano, e mostrando sua equivalência formal com o modelo de G–L estendido. No terceiro capítulo, as características de transições de primeira e de segunda ordem são descritas, usando a aproximação de campo médio do modelo de G–L, e relações de escala são obtidas. O quarto capítulo explica o funcionamento do método de Monte Carlo com os algoritmos utilizados e a análise de erros correspondente. As estimativas obtidas para a estimativa do ponto tricrítico, funções de escala e expoentes críticos para o modelo escalar de G–L $O(4)$ em três dimensões são mostradas no quinto capítulo. Os expoentes críticos são então comparados com os valores encontrados na literatura. Finalmente, a conclusão sobre os resultados obtidos é feita no último capítulo. Perspectivas de trabalho futuro são também comentadas.

Capítulo 1

Da QCD a modelos escalares

Apesar de tradicionalmente ser uma poderosa ferramenta teórica em TQC, a validade da teoria perturbativa na QCD, como foi mencionado na Introdução, é restrita ao limite de altas energias em que a constante de acoplamento é pequena. Neste limite, cálculos perturbativos permitem descrever o fenômeno de liberdade assintótica com êxito, mas falham em prever o confinamento e a transição de fase quiral. Outras abordagens de estudo da QCD que podem ser mencionadas são o grupo de renormalização, a formulação de teorias de campo efetivas (como veremos a seguir) e simulações numéricas na rede discreta. Estes estudos, aplicados em QCD, vêm sendo desenvolvidos nas últimas décadas no esforço de compreender melhor as propriedades e fenômenos da teoria, em especial as propriedades de seu vácuo e os possíveis regimes de transição de fase. Porém, ainda pouco se conhece a respeito destas questões, e muito trabalho ainda é necessário a fim de compreender as particularidades contidas nessa elegante formulação.

1.1 Definição da QCD e simetrias

A densidade de lagrangiana da cromodinâmica [11] tem a forma

$$\mathcal{L} = \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f (i\gamma_\mu \partial^\mu - m_f) \psi_f - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} + g A_\mu^a \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f \gamma^\mu t^a \psi_f, \quad (1.1)$$

onde γ^μ são as matrizes de Dirac, $t^a = \frac{\lambda_a}{2}$, λ_a são as matrizes de Gell-Mann, geradoras do grupo $SU(3)$, e

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (1.2)$$

é a intensidade de campo correspondente ao campo não-abeliano de Yang–Mills A_μ^a , com constantes de estrutura f^{abc} relativas à álgebra do grupo de gauge.

O primeiro termo da expressão descreve o campo de Dirac dos férmions com suas massas características, enquanto que o segundo descreve a dinâmica e a auto-interação dos bósons da teoria, os glúons. O último termo define a interação entre os campos fermiônicos e bosônicos.

O campo gluônico carrega, além do índice de espaço-tempo μ , um índice interno ‘ a ’ que corresponde ao índice dos geradores do grupo de cor ($a = 1-8$) e, portanto, possui “carga de cor”.

O campo fermiônico $\psi = \psi_{\alpha,i,f}$, que corresponde aos campos dos quarks, possui três tipos de índices: $\alpha = \{1, 2, 3, 4\}$, correspondente às componentes espinoriais, onde as matrizes γ^μ atuam; $i = \{1, 2, 3\}$, índice de *cor*, sobre o qual atuam as matrizes de Gell-Mann; e finalmente $f = u, d, s, c, b, t$, correspondente ao *sabor* do quark.

Ao considerar massas iguais para os quarks ($m_f = m$), pode-se representar todos os campos de quarks ψ_f em um multipleteo ψ [12], e o termo de Dirac na lagrangiana assume a forma

$$\bar{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - m)\psi, \quad (1.3)$$

onde m é a matriz de massa dos quarks. Logo, rotações no espaço de sabores de ψ podem ser representadas pelo grupo $SU(N_f)$, onde N_f é o número de sabores considerados.

Por outro lado, considerando massas nulas para os quarks, a simetria total da lagrangiana (1.1), além das simetrias de Poincaré e CPT, é

$$\mathcal{G} = SU(3)_c \times SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R \times U(1)_A \times U(1)_V. \quad (1.4)$$

A simetria de cor $SU(3)_c$ está relacionada com a simetria de gauge local da QCD, na qual a teoria é baseada. A corrente de Noether associada a ela é o vetor “colorido” $\bar{\psi}\gamma_\mu t^a\psi$, que se mantém rigorosamente conservado em qualquer interação ou fase que a teoria possa apresentar. Já as simetrias quirais $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$ surgem ao considerar as massas de todos os quarks nulas. Ao se considerar as massas não-nulas (mas iguais), a simetria se reduz a $SU(N_f)_{L+R}$. A simetria $U(1)_V$, chamada simetria bariônica, está relacionada à fase em comum existente para todos os campos de quarks, e está associada à conservação do vetor de carga bariônica $\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$. A simetria axial bariônica $U(1)_A$ está associada às fases opostas entre os campos de quarks com quiralidades *left* e *right*. Ao se quantizar a teoria, o fenômeno da anomalia reduz esta simetria ao seu subgrupo discreto $Z_A^{N_f}$, e a introdução de valores não-nulos para as massas nos quarks quebra completamente esta simetria.

1.2 Transição quiral

Observemos com mais detalhes a simetria quiral $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$. Como vimos, esta simetria deve ocorrer caso tenhamos massas nulas para os quarks. Porém, evidências advindas de simulações numéricas [13, 14] do chamado condensado quiral

$$\langle \bar{q}_i(1 + \gamma_5)q_j \rangle \propto \langle \bar{q}_i^L q_j^R \rangle \propto v\delta_j^i \quad (1.5)$$

mostram que este, no limite quiral, se comporta como um provável parâmetro de ordem, induzindo uma transição de fase de quebra da simetria quiral no vácuo da teoria [4].

A relação do condensado (1.5) com a simetria quiral pode ser entendida da seguinte forma: no limite quiral, os campos esquerdo (*left*) e direito (*right*) definidos como

$$\psi \equiv \frac{1 + \gamma^5}{2} \psi_R + \frac{1 - \gamma^5}{2} \psi_L \quad (1.6)$$

transformam-se diferentemente sob rotações axiais

$$\psi \mapsto e^{i\beta^a \lambda^a \gamma_5} \psi \quad (1.7)$$

no espaço de sabores. Isto significa que, aplicando-se rotações axiais de sabor arbitrárias no condensado quiral, os campos esquerdo e direito se transformam de forma independente, gerando um valor esperado nulo do mesmo. No entanto, analisando a dinâmica de quarks com massa m no campo de gauge, pode-se definir uma expressão [1] para o condensado da forma

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle \propto \sum_{\lambda>0} \frac{2im}{\lambda^2 + m^2}, \quad (1.8)$$

onde λ são os autovalores do operador de Dirac covariante

$$i\gamma^\mu D_\mu \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \quad (1.9)$$

com o estado diagonalizado ψ_λ . Ao tomar o limite $m \rightarrow 0$ com λ finito, observa-se que a expressão acima tende a zero proporcionalmente à massa, caracterizando a simetria quiral. No entanto, uma análise mais cuidadosa mostra um resultado bem diferente; no limite termodinâmico, o parâmetro λ torna-se contínuo, de forma a poder assumir valores arbitrariamente próximos a zero. Tomando então primeiramente o limite $\lambda \rightarrow 0$, haverá contribuições proporcionais a $1/m$ para o condensado.

Para discutir com mais detalhes a quebra da simetria quiral, é preciso analisar a influência dos diferentes números de sabores considerados na teoria. A simetria $SU(N_f)_{L+R}$ somente é

exata considerando as massas dos quarks todas iguais. No entanto, a influência dos quarks *charm*, *bottom* e *top* são normalmente desprezadas, devido à grande diferença de suas massas (acima de 1 GeV) em relação às massas dos quarks *up*, *down* e *strange* [15, 1]:

$$\begin{aligned} m_u, m_d &\approx 3 - 7 \text{ MeV} \\ m_s &\approx 120 \text{ MeV} . \end{aligned} \quad (1.10)$$

Logo, fala-se efetivamente em simetrias aproximadas $SU(N_f = 2)$ ou $SU(N_f = 3)$, dependendo de se tomar $m_s \approx \infty$ ou não. Isto equivale a dizer que as massas desses quarks são pequenas o suficiente para desprezar-se qualquer diferença entre elas (isto não é óbvio para o quark *s*, e é de fato discutível, como será tratado mais à frente no capítulo).

1.2.1 $N_f = 2$

Considerando somente sabores de quarks *u* e *d*, com simetria quiral ($m_u = m_d = 0$), Pisarski, Wilczek e Rajagopal conjecturaram [16, 17] que a QCD pode sofrer uma transição de fase com quebra espontânea desta simetria e esta transição seria de segunda ordem, dada a existência de pelo menos um ponto fixo infravermelho estável no limite ao contínuo via grupo de renormalização.

É observado [4] em simulações numéricas do condensado quiral (1.5) que este se comporta de forma análoga à variação da magnetização com a temperatura em um ferromagneto, quebrando a simetria quiral no vácuo e restaurando-a a altas temperaturas. Logo, seria natural supor um modelo efetivo baseado na expansão de um parâmetro de ordem matricial de componente M_{ij} com componentes

$$M_{ij} = \langle \bar{q}_i^L q_j^R \rangle , \quad (1.11)$$

possuindo uma transição de segunda ordem em que a simetria é quebrada. M seria então uma matriz $N_f \times N_f$ (no caso, 2×2), e o modelo teria simetria $U(1) \times SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$.

Numa transição de fase contínua, o comportamento não-analítico de certas grandezas termodinâmicas é determinado pelos modos que têm grandes comprimentos de correlação no ponto crítico. Assim sendo, as flutuações dominantes possuem grandes comprimentos de onda e podem-se então desprezar derivadas de ordem superiores na expressão da energia livre. Como na região crítica o parâmetro de ordem M assume valores pequenos para suas componentes (≈ 0), pode-se escrever uma expansão em série truncada em M . Assim, o ponto de partida mais plausível (e simples) para analisar o comportamento crítico de uma transição de fase de segunda ordem na QCD é

o modelo sigma linear para a densidade de energia livre,

$$\mathcal{F} = \text{tr} (\partial_i M^\dagger \partial_i M) + \mu^2 \text{tr} M^\dagger M + \lambda_1 \text{tr} (M^\dagger M)^2 + \lambda_2 (\text{tr} M^\dagger M)^2, \quad (1.12)$$

onde é omitida a soma nos índices i , e $\mu^2 = \mu^2(T)$ é a massa renormalizada (ao quadrado), função da temperatura T . A temperatura crítica T_c é aquela em que $\mu^2(T_c) = 0$: para $T > T_c$, $\mu^2(T) > 0$; para $T < T_c$, $\mu^2(T) < 0$. Os parâmetros λ_1 e λ_2 são também funções (porém suaves) da temperatura. Suponhamos que $\lambda_1, \lambda_2 > 0$. Nestas condições, ocorre quebra espontânea de simetria: $M \propto 1$ para $T < T_c$.

A simetria da expressão (1.12), $U(1) \times U(N_f)_L \times U(N_f)_R$, não corresponde exatamente à simetria da QCD em (1.4). No entanto, só estamos interessados em modelar a quebra de simetria

$$SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R \rightarrow SU(N_f)_{L+R}. \quad (1.13)$$

Assim, basta restringir a simetria de (1.12) para o grupo de transformações com determinante unitário. Isto pode ser feito, no caso de número de sabores $N_f = 2$, impondo unitariedade (com determinante real), à matriz M . Para isto, pode-se parametrizá-la como

$$M = \sigma + i\vec{\pi} \cdot \vec{\tau}, \quad (1.14)$$

onde $\vec{\tau}$ é o vetor cujas componentes são as matrizes de Pauli e $\phi^a = (\sigma, \vec{\pi})$ é um conjunto de quatro parâmetros reais. Com essa restrição, a expressão (1.12) corresponde ao modelo de *Gell–Mann–Lévy*. Substituindo (1.14) em (1.12), e notando-se que

$$\begin{aligned} \text{tr} M^\dagger M &= \text{tr} [(\sigma - i\vec{\pi} \cdot \vec{\tau})(\sigma + i\vec{\pi} \cdot \vec{\tau})] = \text{tr} [\sigma^2 + (\vec{\pi} \cdot \vec{\tau})^2] \\ &= \text{tr} [\sigma^2 + \vec{\pi}^2] = \text{tr} [\phi^a \phi_a] = 2 \cdot \phi^a \phi_a \\ \text{tr} (M^\dagger M)^2 &= \text{tr} [(\phi^a \phi_a)^2] = 2 (\phi^a \phi_a)^2 \\ (\text{tr} M^\dagger M)^2 &= (\text{tr} [\phi^a \phi_a])^2 = (2 \phi^a \phi_a)^2 = 4 (\phi^a \phi_a)^2, \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde a matriz identidade $I_{2 \times 2}$ foi omitida nos traços, a energia livre reduz-se a

$$F = \int d^3x \mathcal{F} = \int d^3x \left(\frac{1}{2} \partial^i \phi^a \partial_i \phi_a + \frac{1}{2} \mu^2 \phi^a \phi_a + \lambda (\phi^a \phi_a)^2 \right). \quad (1.16)$$

Assim, com as restrições acima, a simetria se reduz à do modelo escalar ou do modelo de Heisenberg, ambos com simetria $O(4)$. Análises em teoria perturbativa (com estimativas do comportamento assintótico) estabelecem a existência neste modelo de um ponto fixo infravermelho estável [4] para $d \leq 3$, sendo da mesma classe de universalidade da QCD com dois quarks sem

massa. Pode-se portanto estudar a transição de fase quiral de segunda ordem para $N_f = 2$ analisando o modelo de Ginzburg-Landau $O(4)$ acima, eq. (1.16) em três dimensões, o qual corresponde formalmente à teoria $\phi^4 O(4)$ euclidianizada (como será visto no capítulo 2).

1.2.2 $N_f = 3$

Considerando-se a massa do quark *strange* nula ($m_u = m_d = m_s = 0$), a parametrização usada para M no caso anterior ($N_f = 2$) a fim de ajustar a simetria de (1.12) não é mais válida, já que M neste caso é representada por uma matriz 3×3 . Porém, adicionando à energia livre em questão um termo de determinantes

$$\mathcal{F}' = \mathcal{F} + g (\det M + \det M^\dagger) , \quad (1.17)$$

obtém-se [16] uma simetria $Z^{N_f} \times SU(N_f) \times SU(N_f)$. Observa-se assim que, além de se obter uma quebra de simetria do tipo (1.13), os termos de determinante permitem descrever a anomalia axial da QCD.

Cálculos perturbativos de expansão- ϵ [18] mostram que a estrutura do grupo de renormalização para $N_f = 3$ é diferente do caso $N_f = 2$; obtém-se para o primeiro um ponto fixo infravermelho não-estável, sugerindo a existência de uma transição de primeira ordem [6]. Esta conjectura foi verificada [19] em simulações do modelo sigma com $N_f = 3$, com e sem a interação via determinantes, nas quais a transição eram sempre de primeira ordem, enquanto que foi verificado um comportamento de transição de segunda ordem para o modelo, considerando $N_f = 2$.

Resta saber se a expressão da energia livre do modelo sigma linear continua válida acrescentando o quark *s* à teoria com os quarks *u* e *d*. Segundo Pisarski e Wilczek [16], neste caso não há necessidade de se introduzir campos novos que se tornem sem massa na temperatura crítica, de forma que ficam mantidos os argumentos para uso da energia livre de G-L (1.16). O efeito do quark *s* não seria mais que a renormalização dos acoplamentos μ^2 e λ , levando a um deslocamento da T_c , a menos que se considere também valores negativos para λ . No caso de $\lambda < 0$, para haver estabilidade, a energia livre deve conter um termo sêxtuplo:

$$F = \int d^3x \left(\frac{1}{2} \partial^i \phi^a \partial_i \phi_a + \frac{1}{2} \mu^2 \phi^a \phi_a + \lambda (\phi^a \phi_a)^2 + \eta (\phi^a \phi_a)^3 \right) . \quad (1.18)$$

Nesta energia livre, se $\lambda > 0$, $\langle \phi^2 \rangle$ cresce continuamente a partir de zero quando μ^2 torna-se menor que zero. Porém, se $\lambda < 0$ e $\mu^2 > 0$, $\langle \phi^2 \rangle$ salta descontinuamente de zero a $|\lambda|/2\eta$ quando μ^2 cruza o ponto $\lambda^2/2\eta$. A transição de fase então passa a ser de primeira ordem. Isto significa

que o ponto no diagrama de fases para o qual $\mu = \lambda = 0$ representa um ponto tricrítico, onde a transição de fase passa a ser de segunda para primeira ordem.

1.3 Objetivos e perspectivas

Nas duas situações trabalhadas na seção anterior ($N_f = 2$ ou 3) para a transição quiral, $m_u = m_d = 0$, foi sugerido, com respaldo de evidências de simulações numéricas que, para $m_s \approx \infty$, a transição é de segunda ordem, enquanto que para $m_s = 0$, a transição é de primeira ordem. Portanto, deve haver algum valor de $m_s = m_s^*$ para o qual a transição de fase passa continuamente de segunda para primeira ordem. Este valor equivaleria ao ponto tricrítico da energia livre (1.18). Existe a questão de estabelecer se a massa física do quark s corresponderia a um valor maior ou menor do que m_s^* . Evidências numéricas [13] baseadas no diagrama de fases da QCD [14], sugerem que a massa física do quark *strange* é consideravelmente menor do que m_s^* .

Nos estudos que pretendem conferir se os sistemas pertencem à mesma classe de universalidade, procura-se obter grandezas universais, tais como expoentes críticos ou, de maneira mais geral, comparam-se equações de estado dos sistemas. Na literatura de simulações de Monte Carlo, funções de escala foram obtidas no modelo de Heisenberg $O(4)$ em 3d [8, 20], e suas comparações com simulações de QCD mostram resultados compatíveis entre ambas as teorias. Também foram estimados os expoentes críticos dos modelos de Heisenberg [9] e ϕ^4 [10] com simetria interna $O(4)$, os quais estão em acordo entre si.

Entretanto, estes desenvolvimentos estão circunscritos ao estudo de transições de fase quiral de segunda ordem, quando $N_f = 2$. A transição de primeira ordem, que deve surgir ao se considerar um terceiro quark (para algum valor de sua massa), pode ser estudada, portanto, por simulações do modelo de G–L $O(4)$ estendido (1.18), com o termo ϕ^6 .

As propriedades tricríticas de vários modelos, entre os quais o modelo ϕ^6 , foram descritas na ref. [21]. As singularidades de grandezas termodinâmicas em pontos tricríticos são universais, de forma que, seguindo Wilczek [6], o ponto tricrítico da QCD com dois sabores, em função da massa do quark s , deve estar na classe de universalidade do modelo $\phi^6 O(4)$.

Sabe-se, no entanto, que a obtenção de bons resultados de simulações de Monte Carlo para o estudo de efeitos de tamanho finito de transições de fase de primeira ordem é mais problemática do que nas transições de segunda ordem. Surgem dificuldades na localização da transição e mesmo na constatação da própria natureza de primeira ordem da transição. Estes problemas foram discutidos

na literatura de simulações de sistemas de matéria condensada (em geral, do modelo de Potts) e os métodos desenvolvidos (uso do cumulante de Challa–Landau–Binder, por exemplo) devem ser adaptados a campos escalares.

Capítulo 2

Teorias de campo escalares e mecânica estatística

Uma importante ferramenta para se trabalhar em teoria quântica de campos (TQC) consiste no formalismo de integração funcional. Este é especialmente importante neste trabalho, porque possibilita uma estreita analogia com a mecânica estatística. De fato, como será visto a seguir, fazendo uma rotação de Wick na variável temporal, o formalismo de ambos (TQC e mecânica estatística) torna-se totalmente análogo. Isso permite identificar o integrando do gerador funcional como um peso estatístico, o que é fundamental para realizar as simulações numéricas via método de Monte Carlo.

2.1 Teorias escalares

Os modelos de campos escalares são de extrema importância na física. Além de descreverem teorias de partículas sem spin, sua simplicidade é vantajosa por questões didáticas, e por permitir cálculos numéricos em simulações com menor custo computacional do que teorias de gauge, por exemplo.

Quando se trata de estudos em regiões de transições de fase, a importância de certos modelos escalares vai além de descrever das teorias sem spin. De fato, teorias escalares podem ser úteis para descrever o comportamento crítico de outras teorias muito complexas e diferentes, desde que pertençam à mesma classe de universalidade. É o caso da teoria $\phi^4 + \phi^6$ na versão euclidiana em $3D$ com simetria $O(4)$, cuja ação, como será visto a seguir, corresponde à expressão da densidade

hamiltoniana de Ginzburg-Landau dada em (1.18):

$$S_E \equiv F_{G-L} . \quad (2.1)$$

Pode-se mostrar, como será feito a seguir, que a função de partição de G-L

$$Z = \int \mathcal{D}\phi(x^a) \cdot e^{-S}, \quad (2.2)$$

pode ser aplicada, dando uma abordagem estatística à teoria ϕ^6 . A medida de integração $\mathcal{D}\phi$ significa integrar sobre todas as configurações de campo possíveis no espaço (neste caso tridimensional), e equivale a somar (ou integrar) sobre todos os microestados em mecânica estatística. Essa medida de integração será detalhada mais à frente, quando o espaço for discretizado.

2.2 Gerador funcional e rotação de Wick

É interessante mostrar como o formalismo euclidiano nas expressões (2.1) e (2.2) pode ser obtido do formalismo convencional da TQC no espaço minkowskiano $(1+n)$ dimensional.

Em TQC, define-se o funcional gerador $Z(j)$ como [25]

$$\begin{aligned} Z(j) &= A \lim_{\substack{T \rightarrow i\infty \\ T' \rightarrow -i\infty}} \int \mathcal{D}\phi \cdot e^{iS_j/\hbar} \\ &= A \lim_{\substack{T \rightarrow i\infty \\ T' \rightarrow -i\infty}} \int \mathcal{D}\phi \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_T^{T'} dx^0 \int \cdots \int_{R^n} d^n \vec{x} \mathcal{L} + j(x)\phi(x) \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde $x = (x^0, \vec{x})$, $j(x)$ é uma fonte externa (existente em um intervalo finito de tempo) independente do campo $\phi(x)$, e A é um fator constante (o qual é irrelevante, pois veremos que o mesmo cancela-se nas expressões calculadas a partir de $Z(j)$).

A expressão S_j é a ação da teoria considerada, acrescida do termo de acoplamento da fonte j com a variável temporal integrada sobre limites complexos. Os limites temporais imaginários são necessários para dar convergência à expressão.

A ação da teoria ϕ^6 $O(4)$ em $(1+n)$ dimensões no espaço de Minkowski escreve-se

$$S_j = \int d^{1+n}x \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi^i \partial^\mu \phi_i - \rho \phi^i \phi_i) - \lambda (\phi^i \phi_i)^2 - \eta (\phi^i \phi_i)^3 + j \phi \right]. \quad (2.4)$$

Deve-se primeiro euclidianizar o espaço-tempo para simular a teoria na rede, assim não haverá problemas com a métrica e a ligação do formalismo com a estatística ficará completa. Para isso,

realiza-se uma continuação analítica na variável temporal, em que esta é girada no plano complexo por um ângulo α arbitrário não-nulo a fim de não ser necessário estipular limites temporais complexos. Escolhe-se por conveniência o ângulo $\alpha = -\frac{\pi}{2}$ (rotação de Wick)

$$x^0 \rightarrow -ix_E^0,$$

de forma que a métrica, originalmente minkowskiana, fica euclidiana:

$$x^2 = (x^0)^2 - \vec{x}^2 = -(x_E^0)^2 - \vec{x}^2 = -|x_E|^2.$$

Tendo em conta que

$$d^{1+n}x = -i \cdot d^{1+n}x_E \quad e \quad \partial_\mu \phi \cdot \partial^\mu \phi \rightarrow -\partial_k \phi \cdot \partial_k \phi,$$

a ação fica [22]:

$$S_j = i \int d^{1+n}x_E \left[\frac{1}{2} (\partial_k \phi^i \partial_k \phi_i + \rho \phi^i \phi_i) + \lambda (\phi^i \phi_i)^2 + \eta (\phi^i \phi_i)^3 - j \phi \right]. \quad (2.5)$$

Definindo-se $S_E \equiv -i S_j$, pode-se escrever a expressão do funcional gerador $Z(j)$ após a rotação de Wick como:

$$Z_E(j) = A \lim_{\substack{T \rightarrow -\infty \\ T' \rightarrow +\infty}} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E}, \quad (2.6)$$

onde ¹

$$S_E = \int_T^{T'} dx_E^0 \int \cdots \int_{R^n} d^n \vec{x}_E \left[\frac{1}{2} (\partial_k \phi^i \partial_k \phi_i + \rho \phi^i \phi_i) + \lambda (\phi^i \phi_i)^2 + \eta (\phi^i \phi_i)^3 - j \phi \right]. \quad (2.7)$$

Desta forma, S_E é real e possui a forma da hamiltoniana de Ginzburg-Landau. O gerador $Z_E(j)$, por sua vez, adquire a forma da função de partição (2.2).

Fazendo $n = 2$ na expressão (2.5), obtemos a hamiltoniana de G-L que descreve a teoria $\phi^6 O(4) 3D$, cuja densidade de hamiltoniana é dada por (2.1):

$$S_E(n=2) = H_{G-L} = \int d^3x \mathcal{H}_{G-L}. \quad (2.8)$$

2.3 Correspondência com a mecânica estatística

O gerador $Z_E(j)$ possui no integrando uma exponencial decrescente, totalmente análoga ao fator de Boltzmann dos modelos estatísticos. Pode-se dizer então que a probabilidade de os campos

¹De aqui em diante, trabalhar-se-á sempre em unidades naturais, onde $\hbar = c = 1$.

assumirem uma dada configuração $\{\phi^i(x)\}$ é proporcional ao seu "peso de Boltzmann", i.e.:

$$P(\{\phi^i(x)\}) \propto e^{-S_j[\{\phi^i(x)\}]}.$$
 (2.9)

Portanto, o valor esperado de uma grandeza pode ser dado por [39]

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}(\{\phi^i\}) e^{-S_j}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_j}} = \frac{1}{Z_E(j)} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{O}(\{\phi^i\}) e^{-S_j}.$$
 (2.10)

Fazendo a correspondência da teoria escalar euclidiana $O(N)$ com um modelo de spins na mecânica estatística (modelo de Heisenberg $O(N)$), tem-se

$$\begin{aligned} S_j \left\{ \vec{\phi} \right\} &\equiv H_{G-L} \left\{ \vec{\phi} \right\} \rightarrow \frac{1}{\kappa T} H_{Heisenberg} \left\{ \vec{s} \right\}; \\ \frac{1}{V} \left\langle \sum_x \vec{\phi}(x) \right\rangle &\equiv \langle \vec{\Phi} \rangle \rightarrow \langle \vec{m} \rangle; \\ \frac{\partial \langle |\vec{\Phi}| \rangle}{\partial j} &\rightarrow \chi; \\ j(x) &\rightarrow B(x), \end{aligned}$$
 (2.11)

onde V é o volume da rede (medido em número de sítios), \vec{m} é a magnetização e χ a susceptibilidade magnética do modelo de spins.

Tendo sido feita a correlação estatística da teoria escalar euclidiana, o passo seguinte é discretizar o espaço.

2.4 Discretização do espaço na rede

O espaço discretizado é representado por uma rede finita de L^d sítios, com espaçamento uniforme a . Consideraremos primeiramente o espaço d -dimensional por questões didáticas, e depois faremos $d = 3$.

Em uma rede d -dimensional, cada ponto é representado por uma coordenada discreta do espaço

$$x_i = a n_i,$$
 (2.12)

onde

$$\vec{n} = (i, j, \dots, k) \in \mathfrak{R}^d.$$
 (2.13)

A derivada parcial espacial da componente k do campo na direção \hat{e}_i escreve-se²

$$\partial_i \phi_k(x) = \frac{1}{a} [\phi_k(\vec{n} + \hat{e}_i) - \phi_k(\vec{n})],$$
 (2.14)

²Por simplicidade de notação, escreve-se $\phi(\vec{n} + \hat{e}_i)$ no lugar de $\phi(a\vec{n} + a\hat{e}_i)$.

enquanto que a integral espacial é substituída por um somatório sobre os sítios da rede:

$$\int d^d x \rightarrow a^d \sum_{\vec{n}}. \quad (2.15)$$

Pode-se fazer essas substituições na expressão da ação (2.7), integrada num espaço d -dimensional:

$$\begin{aligned} S_E &= a^d \sum_{\vec{n}} \sum_{k=1}^4 \sum_{i=1}^d \left(\frac{1}{2a^2} [\phi_k^2(\vec{n} + \hat{e}_i) + \phi_k^2(\vec{n}) - 2\phi_k(\vec{n} + \hat{e}_i)\phi_k(\vec{n})] \right) \\ &\quad + \frac{1}{2}\rho \phi_k^2(\vec{n}) + \lambda\phi_k^4(\vec{n}) + \eta\phi_k^6(\vec{n}) \\ &= a^{d-2} \sum_{\vec{n}} -\phi_k(\vec{n}) \sum_{i=1}^d \phi_k(\vec{n} + \hat{e}_i) + \rho_l \phi_k^2(\vec{n}) + a^2\lambda\phi_k^4(\vec{n}) + a^2\eta\phi_k^6(\vec{n}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde se definiu

$$\rho_l \equiv d + \frac{1}{2}a^2\rho. \quad (2.17)$$

Foi considerado [23] em (2.16) que

$$\sum_{\vec{n}} \sum_{i=1}^d \phi^2(\vec{n} + \hat{e}_i) = \sum_{i=1}^d \sum_{\vec{n}} \phi^2(\vec{n} + \hat{e}_i) = \sum_{i=1}^d \sum_{\vec{n}} \phi^2(\vec{n}) = d \sum_{\vec{n}} \phi^2(\vec{n}), \quad (2.18)$$

relação que se torna rigorosamente válida ao considerar condições de contorno periódicas na rede (apêndice B).

É conveniente redefinirmos o campo de forma que ele fique adimensional. Para tanto, é útil fazer uma breve análise dimensional. A ação é adimensional; logo, considerando o termo cinético (e lembrando que em unidades naturais a integral espacial concede ao integrando dimensão de volume l^d), obtém-se

$$\begin{aligned} [S_E] = 1 &= [l]^d [\text{termo cinético}] = [l]^d [\phi]^2 [l]^{-2} \\ &\rightarrow [\phi] = [l]^{\frac{2-d}{2}}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Assim, definindo o novo campo [24] adimensional

$$\theta_k(\vec{n}) \equiv a^{\frac{d-2}{2}} \phi_k(\vec{n}) \quad (2.20)$$

e substituindo na expressão (2.16), temos

$$S_E = \sum_{\vec{n}} -\theta_k(\vec{n}) \sum_{i=1}^d \theta_k(\vec{n} + \hat{e}_i) + \rho_l \theta_k^2(\vec{n}) + a^{4-d} \lambda \theta_k^4(\vec{n}) + a^{6-2d} \eta \theta_k^6(\vec{n}). \quad (2.21)$$

Porém, o interesse aqui é $d = 3$. Substituindo este valor em (2.21) obtém-se

$$S_E = \sum_{\vec{n}} -\theta_k(\vec{n}) \sum_{i=1}^3 \theta_k(\vec{n} + \hat{e}_i) + \rho_l \theta_k^2(\vec{n}) + a \lambda \theta_k^4(\vec{n}) + \eta \theta_k^6(\vec{n}), \quad (2.22)$$

que é equivalente à hamiltoniana de G-L $O(4)$ em $3D$ com termo sêxtico. É importante ressaltar que a ação definida assim deve continuar adimensional, logo todos os novos parâmetros devem ser adimensionais. De fato, repetindo a análise (2.19) para m^2 , λ e η , podemos conferir a dimensão dos novos parâmetros:

$$\begin{aligned}[\rho] &= [l]^{-2} \rightarrow [\rho_l] = 1 ; \\[\lambda] &= [l]^{-1} \rightarrow [a\lambda] = 1 ; \\[\eta] &= 1 .\end{aligned}\tag{2.23}$$

Capítulo 3

Transições de fase

A característica fundamental da maioria das transições de fase é a existência de uma grandeza que assume um valor não-nulo de um “lado” da transição (em uma das fases separadas pela transição) e nulo do outro lado (outra fase), denominada *parâmetro de ordem*. A definição deste varia entre distintos sistemas, podendo ser uma grandeza unidimensional ou multidimensional.

Existem basicamente dois tipos de transições de fase: transições de *primeira ordem* e transições de *segunda ordem*. Veremos que a aproximação de campo médio para o modelo de G–L estendido apresenta ambos os tipos de transição separadas por um ponto tricrítico, logo, o modelo ϕ^6 deve apresentar um comportamento semelhante.

As diferenças básicas entre as duas classes de transições são explicadas a seguir.

3.1 Transições de segunda ordem

Em transições de segunda ordem de forma geral, as grandezas definidas em função de primeiras derivadas da função de partição (p. ex. energia interna, magnetização, campo médio, etc.) são contínuas, e as grandezas definidas com derivadas segundas (p. ex. calor específico, susceptibilidades de campos em geral) apresentam singularidades na região crítica, como mostra a figura (3.1).

Antes de prosseguir a análise, considera-se a função de correlação de dois pontos, definida para um dado parâmetro de ordem s como

$$G(x) = \langle s(x)s(0) \rangle - \langle s(x) \rangle \langle s(0) \rangle . \quad (3.1)$$

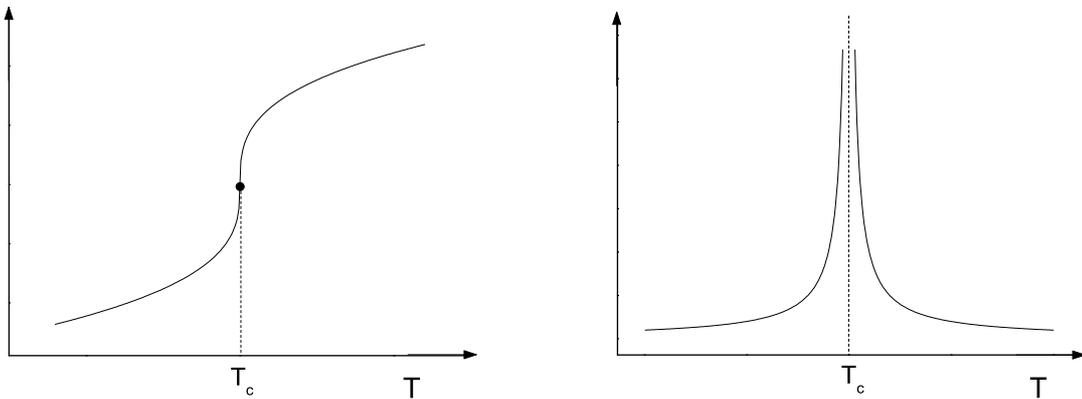
Longe da região crítica, esta decresce exponencialmente [25]

$$G(r_{ij}) \approx e^{-|r_{ij}|/\xi} \quad |r_{ij}| \rightarrow \infty , \quad (3.2)$$

onde ξ tem dimensão de distância e é chamado *comprimento de correlação*. Este é conceitualmente importante em se tratando de transições de fase, relacionado ao comprimento de escala característico do sistema. Contudo, suficientemente próximo à região crítica de uma transição de segunda ordem, o comprimento de correlação diverge e a correlação varia como uma lei de potência:

$$G(r) \propto \frac{1}{|r|^{d+\eta-2}} \quad (d + \eta - 2) > 0. \quad (3.3)$$

Logo, pode-se definir uma ‘região crítica’, onde $\xi \rightarrow \infty$ e a correlação não mais decai exponencialmente. Diz-se então que a transição ocorre de maneira progressiva, “antecipada” pelo comprimento de correlação. Portanto, o parâmetro de ordem - em geral uma derivada primeira da energia livre - decai continuamente a zero.



(a) Comportamento de uma grandeza derivada primeira da função de partição

(b) Comportamento de uma grandeza derivada segunda da função de partição

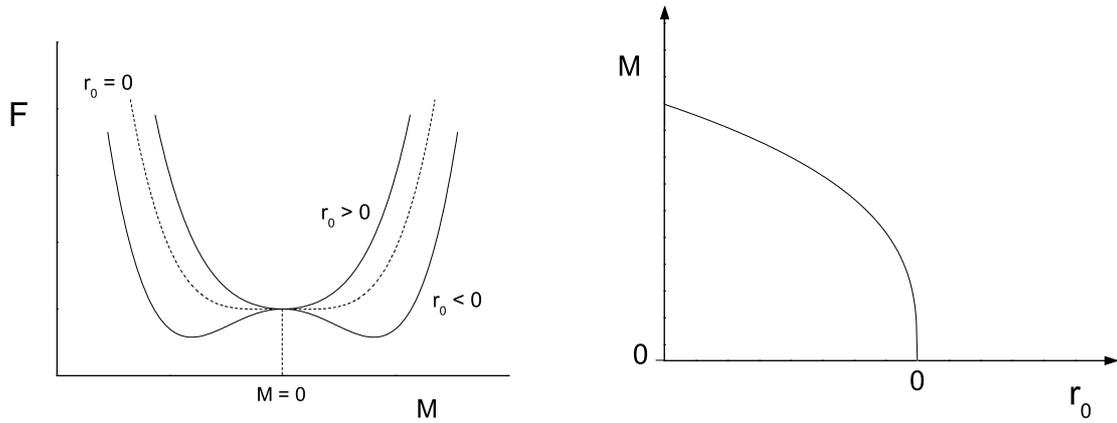
Figura 3.1: *Vizinhanças de uma transição de segunda ordem.*

Consideremos a teoria de Landau de campo médio em um sistema de volume $V \rightarrow \infty$, descrita pela energia livre

$$F = V \left(\frac{1}{2} r_0 M^2 + u M^4 \right). \quad (3.4)$$

Analisando a figura (3.2) vê-se que, variando r_0 de valores negativos até zero (para um dado $u > 0$), o valor esperado da magnetização ¹ M diminui de forma contínua até $M = 0$ para $(r_0)_c = 0$. Continuando a aumentar r_0 , o valor esperado de M permanece nulo para qualquer valor positivo de r_0 . Logo, M constitui um parâmetro de ordem para uma transição de segunda ordem.

¹No limite termodinâmico, o valor esperado é o valor que corresponde ao mínimo da energia livre.



(a) Energia livre em função de M , para valores de r_0 menor, igual e maior que zero.

(b) Dependência do valor esperado da magnetização em função de r_0 .

Figura 3.2: *Transição de segunda ordem para a energia livre (3.4). O valor $(r_0)_c = 0$ corresponde à transição de fase para um dado valor $\lambda > 0$ do termo quártico.*

3.1.1 Escalonamento de tamanho finito (Finite size scaling)

Em transições desta natureza, as propriedades de alguns sistemas completamente díspares podem ser relacionadas considerando a “distância” reduzida da transição

$$\epsilon = \frac{\kappa}{\kappa_c} - 1, \quad (3.5)$$

onde κ corresponde ao parâmetro que induz a transição e κ_c é o valor do parâmetro no ponto crítico. De fato, numerosos experimentos e simulações, assim como alguns modelos analiticamente solúveis, mostram que grandezas termodinâmicas podem ser descritas como simples leis de potência nas vizinhanças da região crítica ($\epsilon \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \xi &= \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ m &= m_0 \epsilon^{\beta} \\ \chi &= \chi_0 \epsilon^{-\gamma}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde ξ corresponde ao comprimento de correlação, m ao parâmetro de ordem e χ à suscetibilidade do parâmetro de ordem, e ν , β , γ são os correspondentes expoentes críticos. Outras grandezas podem ser definidas como sendo leis de potência, porém não serão estudadas neste trabalho.

Na teoria de Landau, assim como no modelo ϕ^6 , há mais de um parâmetro independente na ação que pode induzir a transição: $\{r_0, u, B\}$ e $\{\rho, \lambda, \eta, j\}$, respectivamente². A convenção adotada daqui em diante será usar o parâmetro quadrático como indutor ($\kappa = 1/r_0$ ou $\kappa = 1/\rho_l$):

$$\begin{aligned}\epsilon_L &= \frac{r_0^{-1}}{(r_0)_c^{-1}} - 1 = \frac{(r_0)_c}{r_0} - 1 \\ \epsilon_{\phi^6} &= \frac{(\rho_l)^{-1}}{(\rho_l)_c^{-1}} - 1 = \frac{(\rho_l)_c}{\rho_l} - 1,\end{aligned}\quad (3.7)$$

embora os outros possam ser utilizados igualmente.

Os expoentes de teorias solúveis podem ser calculados de forma direta (como na teoria de Landau de campo médio), ou utilizando grupo de renormalização. Porém, outra abordagem é necessária para teorias não-solúveis, como o **escalonamento de tamanho finito** (*finite size scaling*).

O escalonamento de tamanho finito (ou simplesmente FSS) consiste numa forma de se estimar expoentes críticos observando como certas grandezas variam conforme o tamanho da rede utilizada para simular o modelo. Uma forma simples de se fazer isto é mostrada a seguir para a magnetização.

Substituindo a primeira linha de (3.6) na segunda linha, elimina-se ϵ desta última:

$$m \propto \xi^{-\beta/\nu}. \quad (3.8)$$

Este comportamento refere-se a um sistema no limite termodinâmico, em que o comprimento de correlação diverge para $\epsilon \rightarrow 0$. Porém, em uma rede finita (com dimensão linear L), conforme será comentado um pouco adiante, ξ não diverge. Em vez disso, o mesmo apresenta um “corte” (*cutoff*) proporcional a L , de forma que

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad \text{para } \xi \gg L \text{ ou } \epsilon \rightarrow 0. \quad (3.9)$$

Desta forma, no ponto crítico ($\epsilon = 0$) tem-se a relação de escala

$$m_L(\kappa_c) \propto L^{-\beta/\nu}. \quad (3.10)$$

A relação de escala da susceptibilidade pode ser derivada de forma totalmente análoga:

$$\chi_L(\kappa_c) \propto L^{\gamma/\nu}. \quad (3.11)$$

A partir disso podem-se determinar as razões β/ν e γ/ν , mas não o valor isolado dos expoentes. Para determinar o valor de ν (e, por conseguinte, os expoentes restantes) é necessária

²O parâmetro B na teoria de campo médio pode ser utilizado considerando um termo $-B \cdot M$ na ação (3.4).

uma técnica de escalonamento um pouco mais refinada, realizada a seguir tomando como exemplo a suscetibilidade.

Pode-se expressar a relação de escala de χ para redes finitas como

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (3.12)$$

onde ξ continua sendo o comprimento de correlação no limite termodinâmico e χ_0 é uma função adimensional com as propriedades

$$\begin{aligned} \chi_0(x) &\propto x^{\gamma/\nu} && \text{para } x \rightarrow 0 \\ \chi_0(x) &= \text{constante} && \text{para } x \gg 1. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Assim, garante-se que os limites $\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}$ para $\xi \ll L$ (longe da região crítica), e $\chi \propto L^{\gamma/\nu}$ para $\xi \gg L$ ($\epsilon \rightarrow 0$) sejam obedecidos.

A expressão (3.12) não é prática pois depende de ξ , uma grandeza definida no limite termodinâmico, cujo comportamento não se conhece, sendo portanto difícil de estimar. Por esse motivo, é conveniente redefinir χ_0 como

$$\chi_0(L/\xi) \equiv (L/\xi)^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}([L/\xi]^{1/\nu}) = L^{\gamma/\nu} \xi^{-\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \xi^{-1/\nu}), \quad (3.14)$$

com limites dados por

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}(x) &\propto x^{-\gamma} && \text{para } x \gg 1 \\ \tilde{\chi}(x) &= \text{constante} (\neq 0) && \text{para } x \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Assim, a equação (3.12) fica:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \xi^{-1/\nu}). \quad (3.16)$$

A seguir, expressa-se o comprimento de correlação em termos de ϵ segundo (3.6) para obter

$$\chi_L(\epsilon) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \epsilon). \quad (3.17)$$

Vale ressaltar que a função $\tilde{\chi}$ não diverge na região crítica, como mostra o limite (3.15) para $\epsilon \rightarrow 0$. Ela não é simétrica, visto que em geral a suscetibilidade tampouco o é para os dois lados da transição. Tal como a susceptibilidade, ela apresenta um máximo que, como será visto logo mais, não se situa no ponto crítico $\epsilon = 0$.

Toda a dependência em L da suscetibilidade é explicitada na equação (3.17). Logo, a função $\tilde{\chi}(x)$ não depende da dimensão linear da rede, e é chamada então *função de escala*. Espera-se que seu comportamento seja universal, independente do tamanho do sistema.

Escrevendo a relação (3.17) para o valor de $\epsilon = \epsilon_0$ correspondente ao máximo da suscetibilidade, obtém-se:

$$\begin{aligned}\chi_L(\epsilon_0) &= L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \epsilon_0) \\ \chi_L^{max} &= L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}^{max} \\ \chi_L^{max} &\propto L^{\gamma/\nu} .\end{aligned}\tag{3.18}$$

Diferentemente da relação (3.11), a suscetibilidade na expressão acima é calculada no seu valor máximo em ϵ_0 (chamado valor pseudo-crítico) para cada L , e não no ponto crítico ($\epsilon = 0$).

O desvio do valor pseudo-crítico é estimado notando-se que o argumento de $\tilde{\chi}$ na primeira linha de (3.18) é constante (chamaremos-lo x_0) para qualquer tamanho de rede. Então

$$\begin{aligned}L^{1/\nu} \epsilon_0 &= x_0 \\ \frac{\kappa_0}{\kappa_c} - 1 &= x_0 L^{-1/\nu} \\ \kappa_0 - \kappa_c &= b L^{-1/\nu} ,\end{aligned}\tag{3.19}$$

onde $b = x_0 \kappa_c$.

Logo, a análise do desvio do pico da susceptibilidade em relação ao ponto crítico κ_c provê uma estimativa do expoente crítico ν . Na verdade, o ponto crítico também é desconhecido, portanto seria necessário extrair ν e κ_c de (3.19) através de um ajuste simultâneo destes dois parâmetros. Fazer esse ajuste é relativamente complicado, assim como fazer a estimativa dos erros. Na seção 3.3 será vista uma maneira de se estimar o ponto crítico de forma precisa e independente de outros parâmetros, de forma que a relação acima possa ser usada para testar a consistência entre as estimativas do ponto crítico e de ν .

Outros expoentes como η e δ , definidos³ por

$$\begin{aligned}\tilde{G}(q) &= q^{\eta-2} f(q\xi) \quad (q \ll a^{-1}) \\ m &= m_0 H^{1/\delta} ,\end{aligned}\tag{3.20}$$

onde a é o espaçamento da rede e H o campo externo (representado por j na teoria ϕ^6 ou B na teoria de Landau), podem ser obtidos através de *relações de hiperescalamento* [25, 22, 26] como:

$$\begin{aligned}\gamma/\nu &= 2 - \eta \\ \delta &= \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} .\end{aligned}\tag{3.21}$$

³Não confundir o expoente crítico η com o parâmetro de acoplamento sêxtico da ação da teoria ϕ^6 .

Após obter as estimativas dos expoentes, pode-se conferir sua consistência usando outra relação de hiperescalonamento:

$$\frac{\beta}{\nu} + \frac{1}{2} \frac{\gamma}{\nu} - \frac{d}{2} = 0. \quad (3.22)$$

Outro teste de consistência é obter funções de escala como a de (3.17) usando as estimativas dos expoentes críticos e do ponto crítico para vários tamanhos de rede, e verificar a coincidência das curvas (se os expoentes críticos estiverem corretos, funções de escala não devem variar com o tamanho da rede).

3.2 Transições de primeira ordem

Transições de primeira ordem caracterizam-se por apresentarem na transição de fase uma descontinuidade (*gap*) em grandezas como o parâmetro de ordem ou a energia (ou outra grandeza definida em função de derivadas primeiras da função de partição), evidenciando a existência de ‘calor latente’ (proporcional ao *gap* de energia) (Figura 3.3). Durante a transição, as duas fases coexistem e não há divergência no comprimento de correlação. A transição ocorre de maneira abrupta, e grandezas definidas com derivadas de segunda ordem da função de partição se comportam como funções delta de Dirac.

Como ξ permanece finito na transição, a análise de FSS não é válida para este regime de transição de fase, já que não há uma região crítica em que $\xi \gg L$; logo, os expoentes críticos da seção anterior não podem ser definidos aqui. No entanto, sabe-se [27, 28] que, em transições de primeira ordem, surgem leis de escala proporcionais ao volume L^d . Desta forma, grandezas como a suscetibilidade devem apresentar um comportamento do tipo

$$\chi_L(\epsilon) = L^d \tilde{\chi}(L^d \epsilon). \quad (3.23)$$

Na teoria de Landau de campo médio, podem-se introduzir transições de primeira ordem adicionando um termo sêxtico:

$$F = V \left(\frac{1}{2} r_0 M^2 + u M^4 + v M^6 \right). \quad (3.24)$$

Para $\eta > 0$ e $u < 0$, o valor esperado de $|M|$ diminui continuamente quando r_0 aumenta, até o ponto crítico $r_0 = u^2/2v$. Neste ponto, as fases magnetizadas e desmagnetizadas coexistem. A partir daí ($r_0 > \lambda^2/2\eta$), o módulo da magnetização salta de $\pm u/2v$ para zero, como ilustrado na Figura (3.4). É interessante observar que, nas proximidades da transição, ocorre a existência

de *metaestados* (representados na Figura (3.3) para a energia interna), pseudo-estados nos quais a magnetização localiza-se em mínimos locais - e não globais - da energia livre. Esse fenômeno mostra-se útil na distinção de transições de primeira e segunda ordem, como será visto no último capítulo.

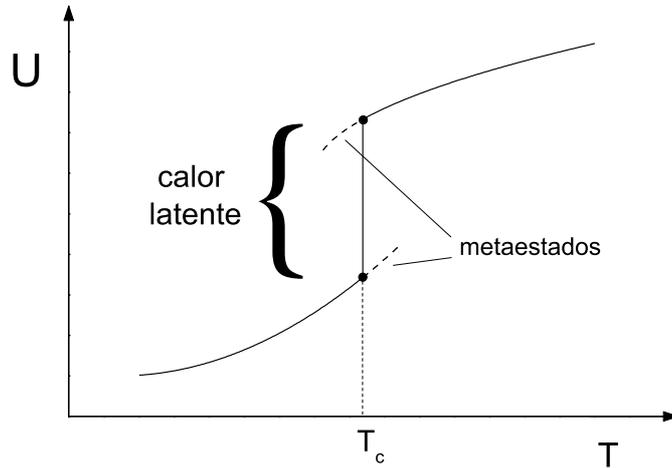
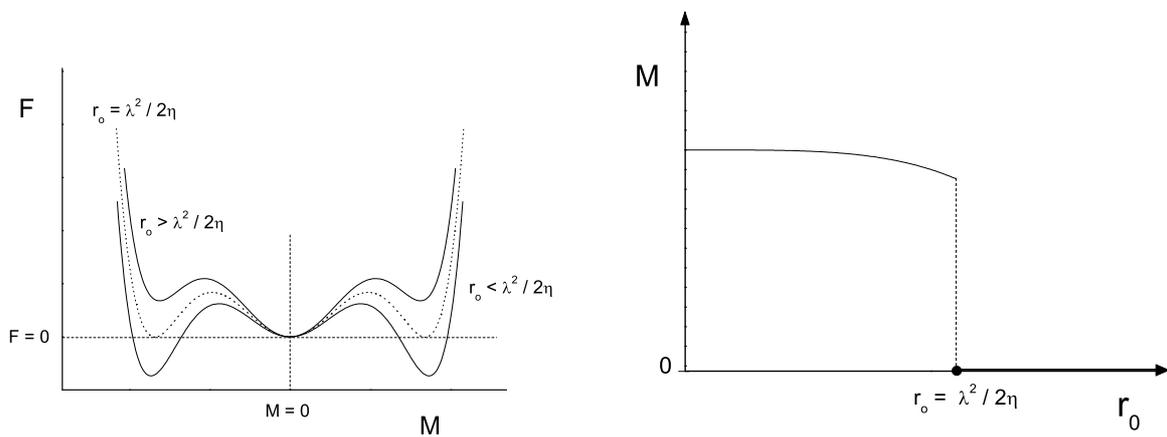


Figura 3.3: Energia interna de um sistema nas vizinhanças de uma transição de primeira ordem. Nota-se a descontinuidade na temperatura crítica T_c .



(a) Energia livre em função de M , para valores de r_0 menor, igual e maior que $\lambda^2 / 2\eta$. (b) Dependência do valor esperado da magnetização em função de r_0 .

Figura 3.4: Transição de primeira ordem para a energia livre (3.24). O valor $(r_0)_c = 0$ corresponde à transição de fase para um dado valor $\lambda > 0$ do termo quártico.

3.3 Determinação do ponto crítico e do expoente ν

Como visto na seção 3.1, o pico da susceptibilidade apresenta um desvio (*offset*) em redes finitas em relação ao valor crítico de κ , evidenciado na equação (3.19). Logo, para determinar o ponto crítico no limite termodinâmico, seria necessário fazer um ajuste simultâneo dos parâmetros κ_c e ν . Em razão disso, é conveniente analisar primeiramente o comportamento do cumulante de Binder

$$U_L \equiv 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (3.25)$$

É fácil mostrar [29] que esta grandeza assume um comportamento de função de escala:

$$U_L = \tilde{U}(L/\xi) = \tilde{U}'(L^{1/\nu}\epsilon). \quad (3.26)$$

Logo, no ponto crítico, as curvas para diferentes tamanhos de rede devem se cruzar em $\tilde{U}(0)$. Esta forma de determinar κ_c é muito mais simples e precisa do que a análise anterior do pico da susceptibilidade e, com base na estimativa obtida de κ_c , podem-se então usar as relações (3.19), (3.10) e (3.11) para estimar os expoentes críticos γ , β e ν . Pode-se mostrar também [30] que, para modelos com simetria $O(N)$, o cumulante possui limites (afastando-se da região crítica)

$$\begin{aligned} U_L &\rightarrow \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{N}\right) && \text{fase simétrica} \\ U_L &\rightarrow \frac{2}{3} && \text{fase quebrada.} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Existe ainda outra maneira de se estimar o expoente ν , através do cumulante de Binder. Derivando-o em relação a κ :

$$\frac{dU_L}{d\kappa} = \frac{d(L^{1/\nu}\epsilon)}{d\kappa} \frac{dU_L}{d(L^{1/\nu}\epsilon)} = \alpha(\kappa) L^{1/\nu} \frac{d\tilde{U}'(L^{1/\nu}\epsilon)}{d(L^{1/\nu}\epsilon)}, \quad (3.28)$$

pode-se ver facilmente que, no ponto crítico, a derivada na expressão final acima é uma constante universal, $d\tilde{U}'(x)/dx|_{x=0}$. Logo,

$$\left. \frac{dU_L}{d\kappa} \right|_{\kappa_c} \propto L^{1/\nu}. \quad (3.29)$$

O scaling acima pode ser utilizado então para comparação com o resultado da estimativa de ν por (3.19).

3.4 Efeitos de tamanho finito

No limite termodinâmico, a distinção entre os dois tipos de transição é bastante óbvia. Porém, ao se considerar flutuações nos valores do campo, não é possível uma descrição analítica simples como a feita acima para a aproximação de Landau. Para estudar o modelo (2.7), com termos de interação envolvendo derivadas (correspondentes às interações entre vizinhos na rede discreta), simulações numéricas em redes de tamanho finito tornam-se fundamentais. Desta forma, no entanto, efeitos de tamanho finito freqüentemente ocorrem, como a “suavização” de curvas que têm caráter divergente e/ou não-deriváveis. Assim, para transições tanto de primeira como de segunda ordem, parâmetros de ordem apresentam um decaimento suavizado (Figura 3.5(a)), enquanto susceptibilidades apresentam um pico finito (Figura 3.5(b)). A rigor, não se pode então falar de transição de fase em redes finitas, e um FSS torna-se necessário para distinguir o limite termodinâmico.

Nas proximidades do ponto tricrítico, o comportamento das duas classes de transição é ainda mais semelhante; torna-se então difícil distinguir uma transição de primeira ordem fraca de uma de segunda ordem fraca (com correlação relativamente pequena), dificultando a precisão em se determinar o ponto tricrítico em si. É importante uma análise cuidadosa para determinar o tipo de transição de fase nessa região.

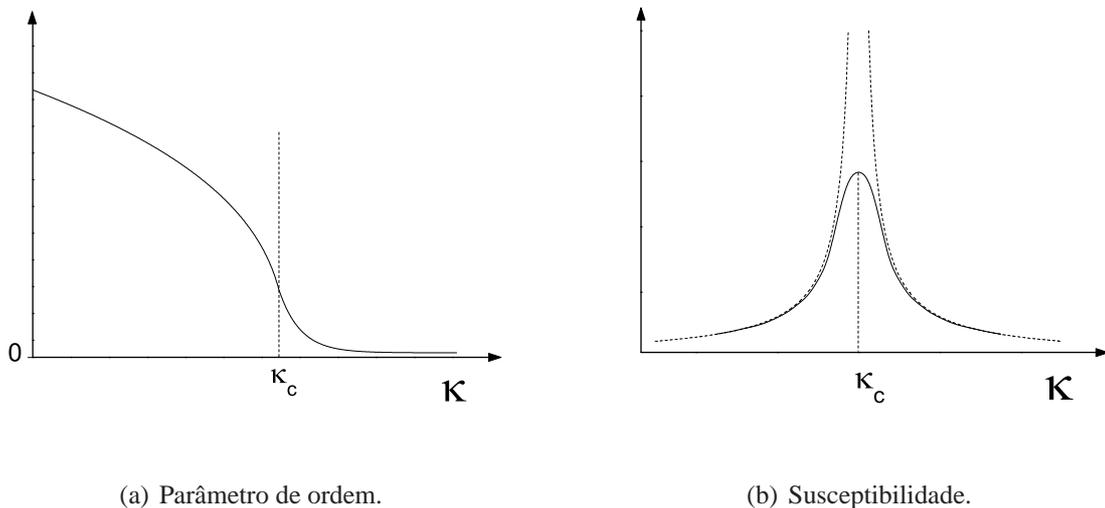


Figura 3.5: Suavização do comportamento de transição para redes finitas, para primeira e segunda ordens.

3.5 Diagrama de fases

O diagrama de fases de um determinado modelo consiste na localização (e classificação) de todos os pontos em que ocorre transição de fase no *espaço de fase*. Este último é definido como o espaço formado pelo conjunto de parâmetros do modelo. No caso do ϕ^6 (desconsiderando o termo de campo externo), o espaço de fases é tridimensional, formado por $\{m^2, \lambda, \eta\}$.

Considerando novamente a teoria de Landau com termo sêxtico (3.24), o seu diagrama de fases é mostrado na Figura 3.6 com $v > 0$ fixo, de acordo com [31]. Nele pode-se ver que a linha delimitadora de transições de segunda ordem coincide com a parte positiva do eixo vertical ($r_0 = 0, u > 0$), enquanto que a linha delimitadora de transições de primeira ordem situa-se no quadrante ($r_0 > 0, u < 0$). O ponto tricrítico localiza-se na origem, onde só há acoplamento sêxtico na energia livre.

Um dos objetivos neste trabalho é determinar o diagrama de fases para a teoria ϕ^6 , o qual conjectura-se ter um comportamento semelhante ao mostrado na Figura 3.6.

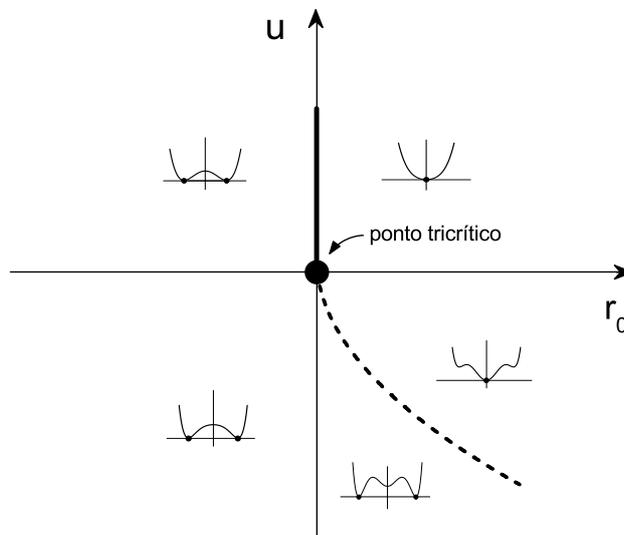


Figura 3.6: Diagrama de fases da teoria de Landau com termo sêxtico (3.24). A linha cheia corresponde às transições de segunda ordem, enquanto a tracejada corresponde às de primeira ordem. O comportamento da energia livre é mostrado de forma esquemática nas diferentes regiões do espaço de fase.

Capítulo 4

Simulações de Monte Carlo na rede

Neste capítulo será vista com mais detalhes a aplicação do método de Monte Carlo no modelo com rede euclidianizada da seção 2.4.

4.1 Equipamento utilizado

As simulações foram feitas no cluster SSOLAR do CBPF. Este é composto de um nó principal e 19 nós clientes, utilizando o sistema BEOWULF. Os nós clientes têm, cada um, 2 processadores AMD Athlon MP 1800+ com 384 KB de cache, 2 ou 4GB de memória DDR SDRAM e HD de 40GB Ultra ATA 7.200RPM IDE HDD. Foi usada a linguagem C de programação (compilador Icc).

4.2 Método de Monte Carlo

O formalismo de mecânica estatística permite conhecer todas as propriedades de equilíbrio de um sistema em TQC euclidianizado (i. e., valores esperados) através de expressões do tipo (2.10). Porém, em praticamente todos os sistemas com interação, essas expressões, assim como a função de partição (no caso, a ação (2.22)) não são analiticamente integráveis. Logo, métodos numéricos se fazem extremamente importantes para obter valores aproximados de certas grandezas estatísticas. Em última análise, o método de Monte Carlo é o mais utilizado para estimar estas grandezas em uma rede discreta.

Poderia se pensar no seguinte procedimento para calcular os valores médios na teoria de G–L: discretizar o espaço para uma rede de n sites, substituindo a integração funcional por um número

finito de integrais, assim como discretizar os valores possíveis dos campos¹ (em intervalos $\Delta\phi$), substituindo desta forma as integrais por somas, obtendo então um número finito de microestados.

Restaria então computar a soma total:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{\left(\prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_i \right) \mathcal{O}(\{\phi_i\}) e^{-S}}{\left(\prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_i \right) e^{-S}} \rightarrow \frac{\left(\prod_{i=1}^n \sum_{k_i=-\frac{a}{\Delta\phi}}^{\frac{a}{\Delta\phi}} \Delta\phi \right) \mathcal{O}(\{k_i\Delta\phi\}) e^{-S}}{\left(\prod_{i=1}^n \sum_{k_i=-\frac{a}{\Delta\phi}}^{\frac{a}{\Delta\phi}} \Delta\phi \right) e^{-S}} \\
 &= \frac{(\Delta\phi)^n \left(\prod_{i=1}^n \sum_{k_i=-\frac{a}{\Delta\phi}}^{\frac{a}{\Delta\phi}} \right) \mathcal{O}(\{k_i\Delta\phi\}) e^{-S}}{(\Delta\phi)^n \left(\prod_{i=1}^n \sum_{k_i=-\frac{a}{\Delta\phi}}^{\frac{a}{\Delta\phi}} \right) e^{-S}} = \frac{\sum_{k_1, \dots, k_n} \mathcal{O}(\{k_i\Delta\phi\}) e^{-S}}{\sum_{k_1, \dots, k_n} e^{-S}}, \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

onde foram omitidos os limites dos somatórios em $\{k_1, \dots, k_n\}$ na última expressão. A generalização para campos com quatro componentes e simetria $O(4)$ é imediata, com a ação S dada por (2.22).

Pode ser facilmente visto que o número de microestados (W) obtidos desta forma é enorme, de forma a tornar proibitiva a realização da soma acima. Mesmo considerando somente dois valores possíveis para cada componente do campo, $\phi = -a$ e $\phi = a$, o número de microestados para uma rede 5^3 com simetria $O(4)$ é de $W_5 = 2^{4 \times 125} \approx 10^{150}$. Este número também aumenta muito rapidamente com o tamanho da rede, de forma que, para uma rede 6^3 , $W_6 = 2^{864} \approx 10^{259}$, de forma que $W_6/W_5 \approx 10^{109}$.

O único método numérico conhecido para contornar este problema é o de Monte Carlo. Este consiste basicamente em estimar valores médios de grandezas, ou mesmo estimar a função de partição de um sistema, simulando as flutuações deste passando de estado em estado, levando em conta somente uma pequena fração dos microestados possíveis. Dessa forma o cálculo de (2.10) pode ser visto como uma média temporal sobre a seqüência de microestados pelo qual o sistema passa.

Para tanto, deve-se escolher uma dinâmica para a simulação de forma que os microestados μ sejam escolhidos com uma distribuição de probabilidade $p(\{\phi_i\}_\mu)$ adequada:

¹Observar que, para obter um número finito de valores de campo – e portanto um número finito de microestados –, deve-se restringir os limites de cada campo para valores finitos, mostrados na expressão a seguir como $-a$ e a .

$$\langle \mathcal{O} \rangle \rightarrow \bar{\mathcal{O}} = \frac{\sum_{\mu=1}^M \mathcal{O}_{\mu} p_{\mu}^{-1} e^{-S_{\mu}}}{\sum_{\mu=1}^M p_{\mu}^{-1} e^{-S_{\mu}}}, \quad (4.2)$$

onde a soma é feita sobre os M microestados escolhidos, e abreviaram-se as notações $p(\{\phi_i\}_{\mu})$, $\mathcal{O}(\{\phi_i\}_{\mu})$ e $S(\{\phi_i\}_{\mu})$. É importante observar que a distribuição de probabilidade p_{μ} não precisa ser normalizada, pois o fator global do numerador cancela-se com o do denominador.

Em primeiro lugar, deve-se observar que a soma (4.2) é dominada por uma pequena fração de termos para os quais a ação tem valores próximos do mínimo. Os termos restantes, apesar de serem muitos, contribuem muito pouco para o valor total, devido ao decaimento exponencial do fator de Boltzmann com a ação. Logo, a melhor escolha para p_{μ} é a própria distribuição de Boltzmann

$$p_{\mu} \propto e^{-S_{\mu}}. \quad (4.3)$$

Com isso, a expressão simplifica-se para uma mera média aritmética:

$$\langle \mathcal{O} \rangle \rightarrow \bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M \mathcal{O}_{\mu}. \quad (4.4)$$

A vantagem deste método, como já foi dito, é que basta passar por uma pequena fração de microestados do sistema para se obter estimativas acuradas de grandezas físicas. A principal desvantagem é que, ao não considerar todos os microestados, erros aleatórios são introduzidos, e será necessário abordar mais à frente as estimativas de erros (seção 4.6).

4.2.1 Balanço detalhado

Apresentado o método, devem-se estabelecer as condições para sua dinâmica, a fim de estabelecer uma distribuição tipo Boltzmann (4.3) dos estados do sistema.

A seqüência de microestados pelos quais o sistema passa numa simulação de MC constitui uma *cadeia de Markov*, definida como uma seqüência de estados onde cada novo estado ν é gerado a partir do estado anterior μ de uma maneira aleatória, conforme a probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$. Esta deve satisfazer a condição

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1, \quad (4.5)$$

onde vale notar que $P(\mu \rightarrow \mu)$ não é nulo. O processo deve também ser ergódico, o que significa que a cadeia de Markov seja capaz de atingir qualquer estado do sistema partindo de outro qualquer, desde que se deixe evoluir por tempo suficiente. No modelo de campo escalar, os valores dos

campos são contínuos, e portanto existem infinitos microestados. Logo, deve-se definir densidade de probabilidade em vez de probabilidade de transição, e substituir a soma por uma integral ²:

$$\int_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) d\nu = 1 . \quad (4.6)$$

Além disso, espera-se que, após algum tempo, a sucessão de estados gerados simule a distribuição de probabilidade (4.3). Quando isto acontece, diz-se que o sistema está em *equilíbrio*. É justamente esta situação que se deseja para começar a calcular as grandezas médias do sistema. A condição de equilíbrio simulando a distribuição de Boltzmann é dada por

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-(S_{\nu} - S_{\mu})} , \quad (4.7)$$

chamada condição de *balanço detalhado*.

4.3 Algoritmo de Metropolis

Um dos primeiros algoritmos a ser criado, e também o mais utilizado até hoje, que implementam o método de Monte Carlo é o algoritmo de *Metropolis* [32, 31, 33]. Ele é um algoritmo local, o que significa que realiza mudanças em apenas um sítio da rede por passo de MC.

É conveniente definir a probabilidade de transição como

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (4.8)$$

com

$$\int_{\nu} g(\mu \rightarrow \nu) d\nu = 1$$

$$0 < A(\mu \rightarrow \nu) \leq 1 , \quad (4.9)$$

onde $g(\mu \rightarrow \nu)$ representa a *probabilidade de seleção*, sendo a probabilidade de um estado ν ser gerado ao acaso a partir do estado μ pelo programa, e $A(\mu \rightarrow \nu)$ representa a *taxa de aceitação*. Esta, por sua vez, significa que se o sistema estiver no estado μ e o algoritmo gerar o estado ν , este será aceito uma fração $A(\mu \rightarrow \nu)$ das vezes que isso ocorrer. No algoritmo de Metropolis, a probabilidade de seleção é igual para todos os estados possíveis, enquanto a taxa de aceitação é a responsável por simular a distribuição de Boltzmann.

²De agora em diante, sempre que se referir a probabilidades de transição do tipo $P(\mu \rightarrow \nu)$, deve ser entendido densidades de probabilidade.

Em cada passo de MC, um determinado sítio da rede é selecionado; as componentes do campo nesse ponto são adicionadas de valores escolhidos aleatoriamente entre os limites $-b$ e $+b$:

$$\theta_i(\vec{n}) \mapsto \theta'_i(\vec{n}) = \theta_i(\vec{n}) + b \cdot r_{(i)}, \quad (4.10)$$

onde $r_{(i)}$ é um número aleatório entre $(-1, 1)$ para a componente i . O valor de b é ajustado de forma a ser grande o suficiente para não restringir muito os valores dos campos (afetando a ergodicidade), não deixando porém a taxa de aceitação muito baixa (apêndice A). Após as substituições, o novo estado é aceito ou não de acordo com a taxa de aceitação. Caso seja aceita, a nova configuração do campo é aplicada, caso contrário, o campo nesse ponto retém a configuração original. Terminado o passo, repete-se o ciclo com o próximo sítio da rede, repetindo o processo até varrer a rede por completo. O número de varreduras completas é definido como o número de passos de MC por sítio da rede, ou por volume.

Mas como definir a taxa de aceitação?

Primeiramente, observemos a transição em um dado sítio \vec{n} em um passo de MC; a região de microestados possíveis para a transição nada mais é do que a região delimitada pelos valores possíveis das componentes do campo a ser alterado. Como esta região é igual para qualquer passo (um hipercubo de lado $2b$), e a probabilidade de seleção é igual para qualquer microestado ν possível. A expressão (4.9)

$$1 = \int_{\nu} g(\mu \rightarrow \nu) d\nu = g(\mu) \int_{\nu} d\nu = g(\mu) \cdot (2b)^4, \quad (4.11)$$

mostra que a probabilidade de seleção é uma constante:

$$g(\mu) = g = \frac{1}{(2b)^4}, \quad (4.12)$$

ou seja, tampouco depende do microestado inicial μ .

Com isso, o balanço detalhado pode ser escrito:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-(S_{\nu} - S_{\mu})}. \quad (4.13)$$

Para o algoritmo ser o mais eficiente possível, devem-se escolher os maiores valores possíveis para as taxas de aceitação que satisfaçam a condição acima. Do contrário, muitos passos acabariam sendo rejeitados e a dinâmica seria muito lenta. O algoritmo de Metropolis consiste numa escolha otimizada das taxas da seguinte forma: Na relação (4.13), a maior das taxas tem seu valor fixado no máximo possível ($A = 1$ ou 100% de aceitação), enquanto que a outra tem seu valor fixado

de forma a satisfazer a relação. Logo, se $S_\mu < S_\nu$ (a exponencial é menor do que a unidade), $A(\nu \rightarrow \mu) = 1$ e portanto $A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-(S_\nu - S_\mu)}$. Caso contrário, $A(\mu \rightarrow \nu) = 1$ e $A(\nu \rightarrow \mu) = e^{-(S_\mu - S_\nu)}$. Pode-se resumir o algoritmo como

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-(S_\nu - S_\mu)} & S_\mu < S_\nu \\ 1 & \text{outros casos} . \end{cases} \quad (4.14)$$

Em outras palavras, se o novo estado selecionado tiver um valor da ação menor do que o da original, a transição será sempre aceita. Se tiver um valor da ação maior, o novo estado será aceito com a probabilidade do tipo Boltzmann dada acima.

4.3.1 Números aleatórios

O método de MC baseia-se na utilização de números aleatórios, de forma rápida e freqüente; portanto, é relevante fazer uma breve análise sobre a geração de números aleatórios nas simulações.

Primeiramente deve-se observar que, nos computadores atuais, a forma mais rápida de produção de números aleatórios é através do próprio software do computador³. Porém, devido à exatidão dos cálculos dos *chips* de processamento, não é possível obter uma verdadeira aleatoriedade. De fato, o que se obtém dos diversos algoritmos existentes para esse propósito é uma seqüência finita, após a qual os números começam a se repetir. Além disso, esses algoritmos necessitam de uma ou mais sementes, parâmetro inicial a partir do qual é obtida a seqüência pseudo-aleatória. Esta é determinada, o que significa que será sempre igual se calculada com a(s) mesma(s) semente(s).

Um bom algoritmo gerador deve possuir uma periodicidade muito grande, de forma a suprir a demanda na utilização, sem repetir os números. Também deve gerar uma seqüência r_n , $n = 1, 2, \dots$ com probabilidade uniforme dentro de seu domínio, geralmente

$$0 \leq r_n \leq 1 . \quad (4.15)$$

Sabe-se que a geração de seqüências aleatórias pobres levam a erros sistemáticos nas simulações de MC [34], logo quanto menos correlacionados os valores gerados, menor se torna essa fonte de erro.

³Processos físicos aplicados diretamente na produção de números aleatórios (p.ex., ruído elétrico em circuitos) são possíveis, porém a taxa de produção destes pelos mesmos é muito baixa, considerando a velocidade dos computadores atuais.

O algoritmo utilizado neste trabalho gera uma seqüência com a subrotina *ranmar*; as duas sementes utilizadas por ele são dadas por sua vez pela subrotina *rmarin*, que utiliza os segundos e minutos do horário em que a mesma é chamada na geração das sementes. Na Figura (4.1), um simples teste visual (“estacionamento”) é feito [31] para se ter uma idéia da qualidade do algoritmo. Nele, os números aleatórios são agrupados em pares, cada um destes correspondendo às coordenadas de um ponto no plano; os pontos são então plotados e verifica-se se há qualquer padrão ou regularidade na disposição dos mesmos. A figura foi feita com 20.000 pontos. Embora mais testes sejam necessários para garantir a qualidade do algoritmo, essa análise não é de interesse aqui, e consideramos este algoritmo adequado para o trabalho em questão.

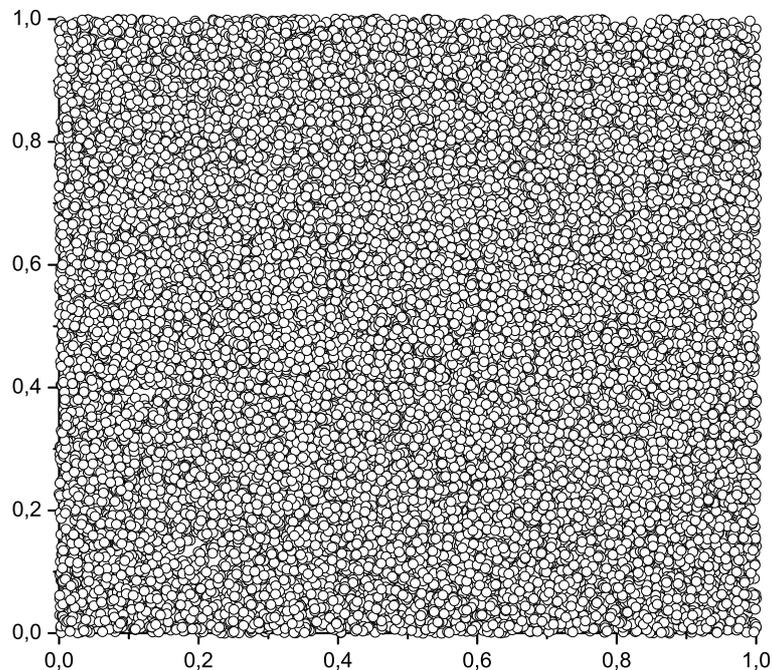


Figura 4.1: *Teste do algoritmo ranmar. Nota-se que a disposição dos pontos não apresenta qualquer regularidade à simples vista.*

4.3.2 Correlação

Aparentemente, tem-se agora todas as ferramentas para começar a calcular as médias das grandezas. Porém, para obter uma estimativa confiável pelo método de MC, é fundamental que os estados usados para estimar expressões do tipo (4.4) sejam suficientemente diferentes entre si ou, equivalentemente, sejam independentes. Isto quer dizer que dois desses estados devem ter

configurações significativamente diferentes a ponto de não ser “presumível” qualquer relação entre eles. Em geral, uma varredura da rede (um passo de MC para cada sítio) não é suficiente para gerar um estado descorrelacionado. É necessário então fazer varreduras adicionais a fim de o estado final obtido ser razoavelmente independente do original.

Uma estimativa razoável da correlação entre uma certa grandeza g de um sistema, medida em tempos diferentes separados por um intervalo t é dada pela *função de autocorrelação* [32, 39]

$$\begin{aligned} A_g(t) &= \int dt' [g(t') - \langle g \rangle] [g(t' + t) - \langle g \rangle] \\ &= \int dt' [g(t')g(t' + t) - \langle g \rangle^2] , \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde a integração é feita sobre o tempo, $g(t)$ é o valor instantâneo da grandeza g no tempo t , e

$$\int dt' g(t') = \int dt' g(t + t') = \langle g \rangle . \quad (4.17)$$

Pode-se ver da primeira linha de (4.16) que, se $g(t')$ e $g(t' + t)$ flutuarem na mesma direção (acima ou abaixo de $\langle g \rangle$), o integrando terá um valor positivo; caso contrário, o integrando terá um valor negativo. Caso a separação temporal t seja pequena o suficiente, as medições da grandeza g em t' e $t' + t$ flutuarão boa parte do tempo na mesma direção (por estarem correlacionadas) e portanto a função de autocorrelação assumirá um valor não-nulo positivo. Caso t seja grande o suficiente, o integrando flutuará entre valores positivos e negativos anulando-se em média na integral, resultando em uma função de autocorrelação próxima a zero (não necessariamente positiva). Portanto, quanto maior o valor de $A_g(t)$, maior é a correlação média entre estados separados por um intervalo temporal t .

Aplicando ao método de Monte Carlo, pode-se estimar a função de autocorrelação da magnetização $m \equiv |\vec{\Phi}|$ definida em (4.48) como

$$A_m(t) = \sum_{t'=0}^{T-t} m(t')m(t' + t) - \frac{1}{T-t} \sum_{t'=0}^{T-t} m(t') \cdot \sum_{t'=0}^{T-t} m(t' + t) , \quad (4.18)$$

onde o tempo corresponde aos passos de MC e T é o total de passos de MC realizados para medir m (o ideal seria $T \rightarrow \infty$, porém, em uma simulação real, T precisa ser finito).

A autocorrelação é esperada decair exponencialmente com t :

$$A \approx A_0 e^{-t/\tau} , \quad (4.19)$$

onde τ corresponde ao parâmetro de escala temporal para o qual a autocorrelação decai, e é chamado *tempo de correlação*. De fato, observando a Figura (4.2), onde foram feitas simulações do modelo ϕ^4 $O(4)$ em uma rede 18^3 calculando (4.18), pode-se verificar um aproximado

decaimento exponencial característico para diferentes parâmetros ρ_l ; para cada valor deste, a autocorrelação apresenta distintos tempos de correlação:

$$\begin{aligned}\tau_m(\rho_l = -20) &= 12 \pm 1 \\ \tau_m(\rho_l = -60) &= 75 \pm 1 \\ \tau_m(\rho_l = -50) &= 165 \pm 1 .\end{aligned}\tag{4.20}$$

Observe-se que, para os valores de λ e η considerados, $\rho_l = -50$ é o valor do parâmetro quadrático que mais se aproxima da região crítica (como será confirmado no próximo capítulo), pois apresenta menor decaimento de A_m (ou, equivalentemente, maior τ_m). Isso evidencia o efeito de *critical slowing down*, característica de transições de segunda ordem.

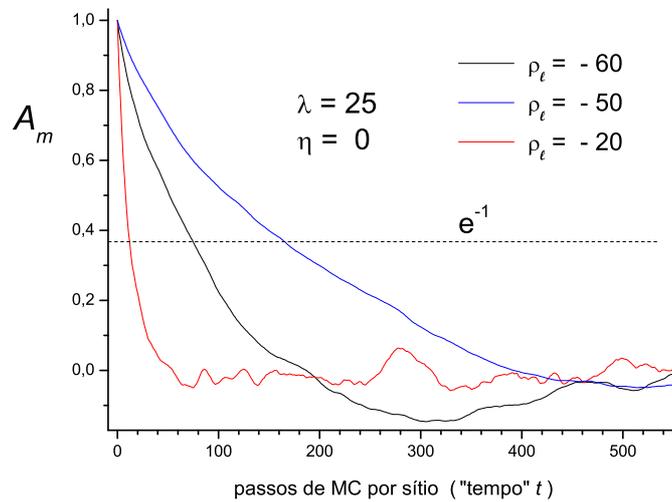


Figura 4.2: Autocorrelação normalizada $A_m(t)/A_m(0)$ como função de t no modelo $\phi^6 O(4)$ em uma rede 18^3 , para diferentes valores de ρ_l . O valor de $t = \tau$ para o qual $A_m(\tau) = e^{-1}$ é a estimativa do tempo de correlação, considerando $A \approx e^{-t/\tau}$.

Levando-se em conta que

$$\ln A_g \approx -\frac{t}{\tau} + B_0 ,\tag{4.21}$$

pode-se estimar o tempo de correlação fazendo um ajuste linear em $\ln A_m(t) \times t$, de forma que o inverso do coeficiente linear com sinal trocado corresponda à estimativa de τ . A Figura 4.3 mostra a curva obtida na Figura 4.2 para $\rho_l = -50$ em escala logarítmica. O ajuste linear é feito considerando o regime em que a autocorrelação se comporta como uma exponencial, obtendo-se assim para este valor de ρ_l :

$$\tau_m(\rho_l = -50) \approx 170 .\tag{4.22}$$

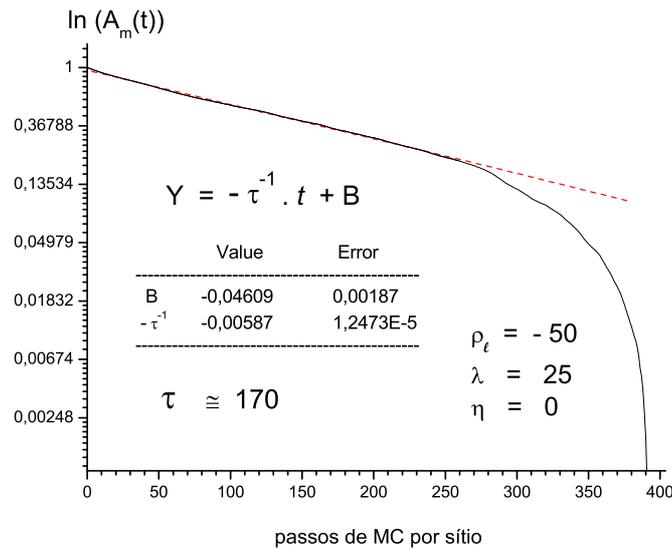


Figura 4.3: Autocorrelação normalizada $A_m(t)/A_m(0)$ como função de t da figura (4.2), para $\rho_l = -50$. O coeficiente linear do ajuste linear fornece a estimativa do tempo de correlação, considerando $\ln A_g \approx -\frac{t}{\tau} + B_0$.

Este valor⁴ está de acordo com a estimativa anterior em (4.20).

Uma maneira alternativa de se estimar o tempo de decorrelação é calcular o *tempo de correlação integrado*

$$\int_0^\infty \frac{A_g(t)}{A_g(0)} dt \approx \int_0^\infty e^{-t/\tau} dt = \tau. \quad (4.23)$$

Esta possui duas principais vantagens:

1. Mais fácil de aplicar, já que uma única simulação pode estimar o tempo de correlação para vários pontos do espaço de parâmetros, não sendo necessário fazer estimativas “a olho” (Fig. 4.2) ou ajustes lineares (fig. 4.3) para cada conjunto de parâmetros.
2. É menos sensível às flutuações, tanto em relação às estimativas “a olho” (flutuações no decaimento influenciam precisão do ponto em que $A_m \approx e^{-1}$) quanto em relação às estimativas de ajuste (os parâmetros do ajuste são sensíveis ao intervalo da curva usado para fazer o ajuste).

Logo, este será o método utilizado para estimar os tempos de correlação para cada ponto do espaço

⁴A estimativa do erro propagado do ajuste linear (erro do coeficiente angular) é inferior à unidade.

de fase simulado, na forma

$$\tau_m \approx \sum_{t=0}^T \frac{A_m(t)}{A_m(0)}. \quad (4.24)$$

Para isso, deve-se tomar cuidado para que o intervalo $\{0, T\}$ seja suficiente, de forma que a função de autocorrelação decaia a valores em torno de zero (onde as flutuações predominam). Para uma boa estimativa de τ_m , é desejável que T seja muito menor que o número total de passos de MC.

Em geral, espera-se que em transições de segunda ordem o tempo de correlação aumente consideravelmente na região crítica; portanto, espera-se que quanto mais forte o caráter de segunda ordem da transição (o que corresponde a afastar-se do ponto tricrítico em direção à região de transições contínuas) maiores sejam as correlações, e mais acentuado seja o *critical slowing down*.

4.3.3 Sobre-relaxação

Um recurso para tentar diminuir a correlação entre os estados gerados na simulação (e portanto diminuir τ_m) foi introduzido por Adler [35] através da generalização da técnica de *sobre-relaxação* (SR) –usada originalmente por algoritmos para resolução de equações diferenciais– para simulações de Monte Carlo de sistemas multiquadráticos⁵, e mais tarde para sistemas mais gerais [36].

A técnica se baseia em fazer atualizações locais nas variáveis de campo (ou spins no caso do modelo de Heisenberg), com taxa de aceitação de 100%. Para isso, o campo deve sofrer uma transformação que respeite a simetria da ação, i. e., deixe a ação invariante. A ação (2.22) pode ser escrita como

$$S_E = \alpha \sum_x \left\{ \vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x + \mathcal{U}(|\vec{\theta}|^2) \right\} = \alpha \sum_x \mathcal{S}_x^E, \quad (4.25)$$

onde \mathcal{U} se refere aos termos multiquadráticos da ação (que dependem do módulo quadrado do campo), e

$$\vec{N}_x = \frac{\sum_{\langle xy \rangle} \vec{\theta}_y}{\left| \sum_{\langle xy \rangle} \vec{\theta}_y \right|^2} \quad (4.26)$$

é a soma dos campos vizinhos ao site x normalizada à unidade. Definindo a transformação [36]

$$\vec{\theta}_x \rightarrow \vec{\theta}'_x = -\vec{\theta}_x + 2(\vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x)\vec{N}_x, \quad (4.27)$$

⁵Sistemas multiquadráticos são sistemas cuja ação (ou hamiltoniana) somente possui termos de ordem par em suas variáveis

de forma que

$$|\vec{\theta}'_x|^2 = |\vec{\theta}_x|^2 - 2 \cdot 2(\vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x)\vec{N}_x \cdot \vec{\theta}_x + 4(\vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x)^2 \overbrace{\vec{N}_x \cdot \vec{N}_x}^1 = |\vec{\theta}|^2, \quad (4.28)$$

pode-se facilmente verificar a ação se mantém invariante:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_x^E \rightarrow \mathcal{S}'_x^E &= -\vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x + 2(\vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x)\vec{N}_x \cdot \vec{N}_x + \mathcal{U}\left(|\vec{\theta}|^2\right) \\ &= \vec{\theta}_x \cdot \vec{N}_x + \mathcal{U}\left(|\vec{\theta}|^2\right) = \mathcal{S}_x^E. \end{aligned} \quad (4.29)$$

O balanço detalhado (4.13) é verificado da seguinte forma: considera-se uma atualização (4.27) migrando o sistema do estado μ para o estado ν ; como a transformação não envolve parâmetros aleatórios, a probabilidade de seleção é $g(\mu \rightarrow \nu) = 1$. Aplicando a transformação no campo já transformado (estado ν), ela leva novamente ao campo original (estado μ), ou seja, a mesma é inversível. Logo, a probabilidade de seleção inversa é também $g(\nu \rightarrow \mu) = 1$. Como a taxa de aceitação é definida sendo sempre 100% ($A(\mu \rightarrow \nu) = A(\nu \rightarrow \mu) = 1$), o lado esquerdo de (4.13) vale 1. A SR deixa a ação invariante, logo $S_\nu - S_\mu = 0$ e, portanto, o lado direito é também igual a 1, obedecendo assim ao balanço detalhado.

A sobre-relaxação pode ser aplicada juntamente com qualquer algoritmo de MC. Em alguns casos ela mostra-se eficiente em reduzir o expoente dinâmico do modelo trabalhado, p. ex. o modelo xy em [37]. Uma comparação entre estimativas de τ_m para o modelo escalar ϕ^4 $O(4)$ com e sem a SR é mostrada no próximo capítulo (aplicadas aos algoritmos de Metropolis e de Wolff) a fim de averiguar se a mesma torna a simulação mais eficiente.

4.4 Algoritmo de Wolff

Um algoritmo alternativo ao de Metropolis é o *algoritmo de Wolff*. Ao contrário do primeiro, este não é local, e sim um tipo de algoritmo de **cluster**; em vez de alterar campo por campo, define em cada passo um *cluster* (conjunto) de sítios que podem ser alterados de uma única vez. A idéia original de utilização de clusters foi introduzida em [38], com o chamado *algoritmo de Swendsen–Wang* (S–W), como uma alternativa mais eficiente para simular modelos com transições de segunda ordem perto da criticalidade em sistemas extensos (no caso, redes grandes). Diversas variantes de algoritmos de cluster foram desenvolvidas na literatura, como em [10, 36], sendo as mais utilizadas a de Wolff e de S–W. A diferença básica entre estes dois é que o primeiro é do tipo *single cluster*,

definindo apenas um cluster na rede por passo, enquanto o S–W define clusters na rede inteira em cada passo (podendo alterar os campos de diversos clusters de uma vez).

A grande vantagem destes métodos não-locais é que o expoente dinâmico z , definido [32, 31] na expressão

$$\tau \propto L^z, \quad (4.30)$$

é pequeno em relação ao expoente do Metropolis, gerando tempos de decorrelação muito menores para redes relativamente extensas. Desta forma, o *critical slowing down* é eliminado, ou drasticamente reduzido. De fato, a estimativa do expoente dinâmico do modelo de Ising para o algoritmo de cluster de S–W [38]

$$z_{S-W} \approx \begin{cases} 0,35 & \text{para } D = 2 \\ 0,75 & \text{para } D = 3, \end{cases} \quad (4.31)$$

para o algoritmo de Wolff⁶ [32]

$$z_W \approx 0,25, \quad (4.32)$$

assim como do modelo de Heisenberg $O(4)$ 3D [9] para o algoritmo de Wolff

$$z_W \approx 0, \quad (4.33)$$

contrasta bastante com a estimativa do algoritmo de Metropolis (ou qualquer algoritmo local)

$$z_{Metr} \approx 2, \quad (4.34)$$

válida a princípio para qualquer modelo de spin ou escalar. Referências sobre estimativas de decorrelação em modelos de campo escalar não foram encontradas. Neste trabalho utilizar-se-á, dentre as variantes de algoritmos de clusters, o single-cluster de Wolff, por ser mais simples e apresentar menor expoente dinâmico nos modelos de spin.

A aplicação destes algoritmos no modelo escalar é feita separando o módulo das componentes dos campos e seus respectivos sinais. Isso pode ser visto reescrevendo [10] a ação (2.22) como

$$\begin{aligned} S_E &= - \sum_{\langle xy \rangle} \vec{\theta}_x \cdot \vec{\theta}_y + \sum_x \left[\rho_l \vec{\theta}_x^2 + \lambda \vec{\theta}_x^4 + \eta \vec{\theta}_x^6 \right] \\ &= - \sum_{\langle xy \rangle} \sum_{i=1}^4 |\theta_x^i| |\theta_y^i| \sigma_x^i \sigma_y^i + \mathcal{U} \left(|\vec{\theta}|^2 \right) \\ &= - \sum_{i=1}^4 \sum_{\langle xy \rangle} \beta_{xy}^i \sigma_x^i \sigma_y^i + \mathcal{U} \left(|\vec{\theta}|^2 \right) = \sum_{i=1}^4 \mathcal{S}^i + \mathcal{U} \left(|\vec{\theta}|^2 \right), \end{aligned} \quad (4.35)$$

⁶De acordo com estimativas grosseiras feitas por mim (não mostradas neste trabalho), $z \equiv 0,3$ para este algoritmo

onde a soma $\sum_{\langle xy \rangle}$ é feita sobre todas as interações entre primeiros vizinhos, e

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(|\vec{\theta}|^2) &\equiv \sum_x \left[\rho_l \vec{\theta}_x^2 + \lambda \vec{\theta}_x^4 + \eta \vec{\theta}_x^6 \right] \\ \mathcal{S}^i &\equiv \sum_{\langle xy \rangle} \beta_{xy}^i \sigma_x^i \sigma_y^i \\ \beta_{xy}^i &\equiv |\theta_x^i| |\theta_y^i|. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Na expressão (4.35) foi introduzida a variável

$$\sigma_x^i = \{-1, +1\} \quad (4.37)$$

que contém o sinal da componente θ_x^i . Nota-se que apenas termo de interação vai depender dessas novas variáveis; portanto, ao se realizar uma dinâmica com base nelas não é preciso considerar o restante da ação, representado por \mathcal{U} . Com isso, pode-se olhar para o campo $\{\sigma_x^i\}$ como $N (= 4)$ modelos de Ising “embutidos” (*embedded Ising model*) na teoria escalar $O(4)$ (um para cada componente do campo).

O algoritmo de Wolff (ou outro qualquer de cluster) é dividido em duas partes: a dinâmica das componentes, as quais são alteradas localmente de forma análoga ao algoritmo de Metropolis, e a dinâmica dos sinais, atualizados de forma não-local utilizando clusters, de forma semelhante ao que seria no modelo de *Ising* (Heisenberg $O(1)$). A forma de gerar os clusters é o que define qual o tipo de algoritmo (S–W, Wolff, Invaded cluster, Wall-cluster, etc.). No caso do algoritmo de Wolff, um sítio chamado *semente* é escolhido aleatoriamente na rede, e a partir dele adicionam-se ao cluster os campos σ^i vizinhos (por simplicidade, chamaremos esses campos de *spins*) que possuem o mesmo sinal que o da semente, criando ligações (*links*) entre eles; porém, essas ligações são feitas com uma probabilidade P_{xy} , que a princípio depende dos sítios primeiros vizinhos x e y . Rigorosamente falando, o algoritmo descrito não é o de Wolff propriamente (criado para modelos de spin), pois envolve atualizações locais do campo, além da dinâmica de clusters. No entanto, por comodidade falar-se-á simplesmente em algoritmo de Wolff.

O balanço detalhado da dinâmica local é satisfeito da mesma forma que no algoritmo de Metropolis (com a taxa de aceitação (4.14)), enquanto que o balanço da dinâmica dos clusters merece uma atenção especial: Considerem-se dois estados μ e ν de um sistema escalar $O(4)$; olhando a configuração dos campos $\{\sigma_x^i\}$ para uma determinada componente i , eles só diferem entre si por um “*cluster flipping*” (inversão do sinal dos campos de um cluster), sendo o resto da configuração dos estados equivalente para todas as componentes (campos $\{|\theta^k|\}$, $k = 1, 2, 3, 4$ e $\{\sigma_x^k\}$, $k \neq i$). A situação está ilustrada na Figura (4.4). Considere-se agora o passo que leva de μ

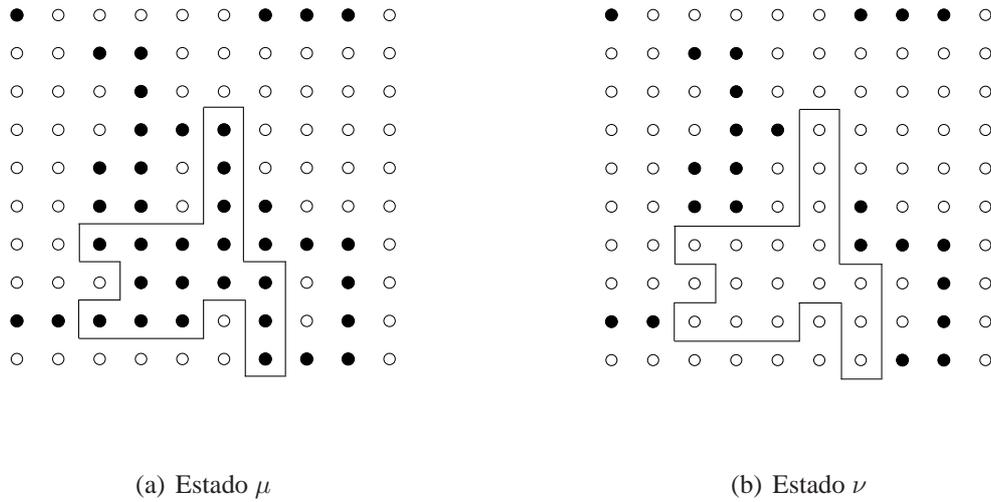


Figura 4.4: “Cluster flipping” na configuração $\{\sigma_x^i\}$ para um determinado i , no modelo escalar $O(N)$, em uma rede 10×10 . Em μ há 8 links quebrados, e em ν há 18 links quebrados.

e ν . Existem muitas maneiras de se fazer isso; poder-se-ia escolher qualquer spin do cluster como semente e, a partir deste, adicionar o restante em diversas ordens. No entanto, vamos considerar uma ordem específica, começando de uma semente específica; consideramos também o mesmo processo em reverso, levando o estado μ ao estado ν . A probabilidade de escolher a semente é a mesma nas duas ‘direções’, assim como a probabilidade de adicionar cada spin ao cluster. O que muda entre as duas é a probabilidade de *não* ligar os spins das bordas externas do cluster que têm o mesmo sinal dos spins dentro do mesmo (*links quebrados*), pois estes são diferentes nos dois casos. A probabilidade de um link quebrado xy ocorrer no estado μ é de $(1 - P_{xy}^\mu)$; então, a probabilidade de não ligar todos ao passar de um estado para outro é proporcional à probabilidade de seleção:

$$\begin{aligned}
 g(\mu \rightarrow \nu) &\propto \prod_{\langle xy \rangle_m} (1 - P_{xy}^\mu) \\
 g(\nu \rightarrow \mu) &\propto \prod_{\langle xy \rangle_n} (1 - P_{xy}^\nu),
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

onde os índices m e n correspondem ao conjunto de ligações quebradas nos estados μ e ν , respectivamente. A condição de balanço detalhado fica então:

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \prod_{\langle xy \rangle_m} \prod_{\langle xy \rangle_n} \frac{(1 - P_{xy}^\mu)}{(1 - P_{xy}^\nu)} \cdot \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-(S_\nu - S_\mu)}, \tag{4.39}$$

observando-se que $P_{xy} = 0$ se $\sigma_x \neq \sigma_y$.

A variação da ação $S_\nu - S_\mu$ depende das ligações quebradas nos dois estados. Como a única diferença entre os estados reside na configuração da componente i dos spins (σ_x^i), somente o termo \mathcal{S}^i de (4.35) é diferente na expressão da ação de ambos. Logo,

$$S_\nu - S_\mu = \mathcal{S}_\nu^i - \mathcal{S}_\mu^i = \sum_{\langle xy \rangle} \beta_{xy}^i [(\sigma_x^i \sigma_y^i)_\nu - (\sigma_x^i \sigma_y^i)_\mu] . \quad (4.40)$$

Nesta última soma, os únicos termos que não se anulam são os que correspondem aos primeiros vizinhos das bordas do cluster, ou seja, o conjunto $\langle xy \rangle_m \cup \langle xy \rangle_n$, ou $\langle xy \rangle_{\partial c}$. Para cada link $xy \in m$, o termo contribuirá com $+2\beta_{xy}^i$ para a soma, e para cada $xy \in n$, com $-2\beta_{xy}^i$. Portanto,

$$S_\nu - S_\mu = \sum_{\langle xy \rangle_{\partial c}} 2\beta_{xy} \delta_m^{xy} - 2\beta_{xy} \delta_n^{xy} . \quad (4.41)$$

Com isso, a expressão do balanço detalhado (4.39) pode ser escrita como

$$\prod_{\langle xy \rangle_{\partial c}} \frac{(1 - P_{xy}^\mu)}{(1 - P_{xy}^\nu)} \cdot \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \prod_{\langle xy \rangle_{\partial c}} e^{2\beta_{xy} \delta_n^{xy} - 2\beta_{xy} \delta_m^{xy}} . \quad (4.42)$$

Rearrmando a expressão, tem-se:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \prod_{\langle xy \rangle_{\partial c}} \frac{(1 - P_{xy}^\nu) e^{2\beta_{xy} \delta_n^{xy}}}{(1 - P_{xy}^\mu) e^{2\beta_{xy} \delta_m^{xy}}} . \quad (4.43)$$

A vantagem deste algoritmo está em definir a probabilidade de aceitação como

$$P_{xy}^\mu \equiv 1 - e^{-2\beta_{xy} \delta_m^{xy}} . \quad (4.44)$$

Assim, a relação (4.43) torna-se:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \prod_{\langle xy \rangle_{\partial c}} \frac{1}{1} = 1 . \quad (4.45)$$

A relação acima é válida independentemente dos estados μ e ν , do valor de β_{xy} , ou qualquer outro parâmetro. Dessa forma, pode-se fazer a taxa de aceitação igual à unidade

$$A(\mu \rightarrow \nu) = 1 , \quad (4.46)$$

obtendo-se assim o melhor valor possível para ela. Nenhum *cluster flip* é rejeitado dessa forma, e o balanço detalhado é satisfeito. Generalizando a probabilidade de aceitação para quaisquer primeiros vizinhos (não somente os pertencentes a ∂c), pode-se simplificar a expressão (4.44):

$$P_{xy} \equiv 1 - e^{-2\beta_{xy}} , \quad (4.47)$$

para quaisquer $\sigma_x^i = \sigma_y^i$ (caso contrário $P_{xy} = 0$).

A versão de algoritmo de clusters de Wolff no modelo escalar é aplicada da seguinte forma: realiza-se uma varredura da rede atualizando localmente as componentes dos campos como no algoritmo de Metropolis (eq. (4.10)), onde cada atualização é então aceita com a taxa de aceitação (4.14).

A seguir, aplica-se o algoritmo de Wolff nas variáveis tipo Ising embutidas $\sigma_i(\vec{n})$ (“spins”), seguindo os passos abaixo:

1. Escolher um spin aleatoriamente na rede como semente do cluster;
2. adicionar ao cluster os primeiros vizinhos da semente que têm spins iguais ao desta, com probabilidade $P_{xy} = 1 - e^{-2\beta_{xy}} = 1 - e^{-2|\theta_x^i|\theta_y^i|}$, onde x e y são primeiros vizinhos;
3. para cada spin adicionado no passo anterior, examinar seus vizinhos e adicionar spins ao cluster da mesma forma que no passo anterior. Repetir então este passo quantas vezes for necessário, até que todos os vizinhos de todos os spins do cluster tenham sido considerados ao menos uma vez para entrar no cluster. Conforme o cluster cresce, é possível que algum vizinho de um spin do cluster já tenha sido testado. Se o mesmo tinha sido adicionado, não é necessário adicioná-lo de novo. Senão, terá mais uma chance de participar do cluster;
4. “flipar” o cluster, ou seja, inverter os spins do cluster.

Os passos de 1 a 4 são realizados para cada uma das componentes do campo $\sigma_i(\vec{n})$, independentes entre si. O ciclo inteiro pode ser resumido da seguinte forma:

- varredura da rede atualizando localmente os campos com Metropolis;
- separação dos campos $\phi_i = |\phi_i|s_i$;
- algoritmo de Wolff para cada componente s_i ($\times N$);
- $|\phi_i|\sigma_i = \phi_i$.

Note-se que P_{xy} cresce com $|\theta_x^i|\theta_y^i|$; logo, em estados nos quais as componentes dos campos adquirem em média valores não nulos (analogamente uma fase magnetizada no modelo sigma não-linear) as probabilidades de aceitação serão em média também maiores do que em estados cujos campos têm componentes oscilando em torno de zero (fase desmagnetizada). Identificando β como

o inverso da temperatura de um sistema estatístico (como o Heisenberg $O(N)$), relaciona-se fases “ordenadas” como “frias” e fases ‘desordenadas” como “quentes”. Assim, estados magnetizados tendem a gerar clusters grandes (até a ordem do tamanho da rede), enquanto estados desmagnetizados tendem a gerar clusters pequenos (até da ordem de um sítio). Neste caso, um ou poucos spins são alterados de uma vez em um passo de MC, enquanto que, no primeiro caso, muitos spins são alterados de uma vez, chegando à quase a totalidade da rede ter seu sinal invertido.

Espera-se que, com este algoritmo, o expoente dinâmico e os tempos de decorrelação sejam significativamente diminuídos em relação ao Metropolis, podendo ser mais eficiente do que este nas simulações perto da região crítica, especialmente para redes grandes.

O algoritmo de cluster utilizado neste trabalho para atualização dos spins é definido em [32].

4.5 Implementando o método

Tendo esclarecido o método e os algoritmos, o passo seguinte seria realizar as simulações da teoria $\phi^6 O(4)$, dada pela ação (2.22). Para tanto, devem-se escolher os valores dos parâmetros m_l , λ , η , o tamanho da rede, as condições iniciais e também o valor de b em (4.10). Convencionase por simplicidade o espaçamento da rede sendo unitário ($a = 1$)⁷.

A título de verificar a equilibração (e estimar o tempo de equilibração) do sistema de volume⁸ V , a grandeza

$$|\vec{\Theta}| = \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{n}} \vec{\theta}(\vec{n}) \right|, \quad (4.48)$$

ou seja, a média espacial do vetor campo $O(4)$, é adequada para se calcular ao longo dos passos de MC. No capítulo seguinte ver-se-á que esta grandeza corresponde ao parâmetro de ordem, logo, por simplicidade, referir-se-á a esta como magnetização, como seu análogo estatístico em modelos de spin. Espera-se que, para um determinado conjunto de valores dos parâmetros (um ponto no espaço de parâmetros), as grandezas termodinâmicas tenham valores determinados. Logo, na simulação, estas (inclusive a magnetização) flutuariam em torno de um valor fixo quando o sistema alcançasse o equilíbrio.

São considerados dois tipos de configurações iniciais: uma com os campos $\theta(\vec{n})$ ordenados (“vetor” campo uniforme no espaço), e outra com os mesmo desordenados (ou aleatórios), com

⁷No limite para o contínuo deve-se tomar $a \rightarrow 0$

⁸Volume aqui refere-se ao número de sítios da rede, $V \in \mathfrak{R}$.

as componentes escolhidas aleatoriamente entre limites $-b$ e $+b$ ⁹. Tal escolha das condições iniciais não deve influenciar o sistema após o mesmo atingir o equilíbrio, de forma que essa escolha não seja crucial para a simulação. Tal asserção é demonstrada na figura (4.5), que mostra a evolução temporal¹⁰ do módulo da magnetização $|\vec{\Theta}|$ em um sistema com uma rede cúbica para duas condições iniciais distintas usando o algoritmo de Metropolis. Em uma, todos os campos foram definidos com as componentes iguais a $0,4$ (configuração ordenada), enquanto que na outra as componentes foram definidas aleatoriamente com probabilidade uniforme entre -1 e 1 .

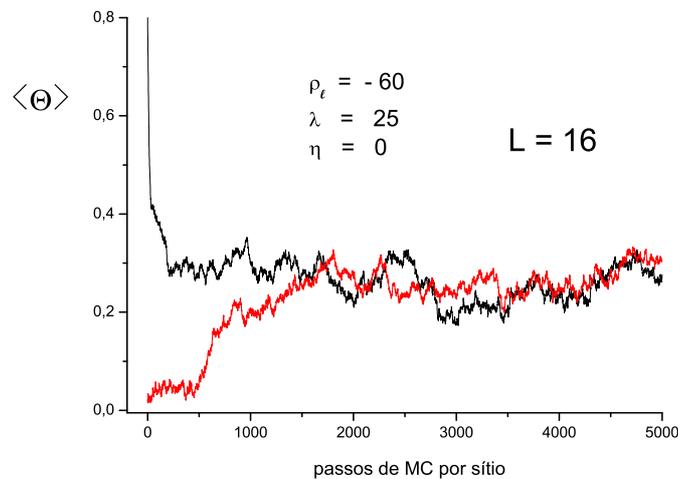


Figura 4.5: *Evolução do sistema $O(4)$ em uma rede 16^3 em um dado ponto do espaço de parâmetros, utilizando o algoritmo de Metropolis, para duas condições iniciais diferentes: uma com os campos aleatórios (vermelho) e outra com os campos uniformes (preto), com todas as componentes iguais a $0,4$.*

A Figura (4.6) mostra a mesma evolução temporal, mas para diferentes valores de ρ_t . Considerou-se os campos inicialmente desordenados como descrito acima. Verifica-se que o tempo de equilíbrio τ_{eq} varia, sendo que o caso em que este demorou mais foi com $\rho_t = -60$, onde o estado de equilíbrio mostrou-se mais afastado das condições iniciais. Como a “termalização” mostrou não exigir muito tempo computacional (menos de 30 segundos para este tamanho de rede), pode-se supor então o maior dos tempos de equilíbrio observados como o considerado para este tamanho de rede (com uma pequena folga), aproximadamente $\tau_{eq}(L = 16) \approx 2.000$ passos de MC por sítio da rede.

⁹Nas simulações escolheu-se $b = 1,5$.

¹⁰Nas simulações, o tempo refere-se aos passos de MC.

No capítulo seguinte, a equilibração será analisada com mais detalhes, para ambos os algoritmos.

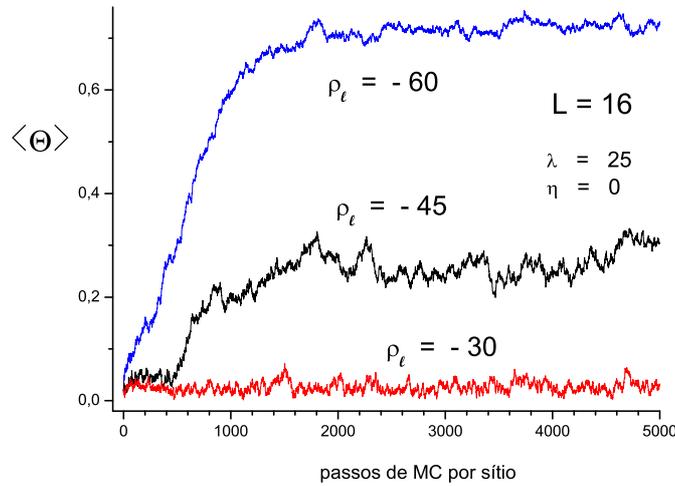


Figura 4.6: Evolução do sistema $O(4)$ em uma rede 16^3 para diferentes valores de ρ_ℓ .

4.6 Análise de erros

Assim como os erros experimentais, os erros relacionados ao método de MC dividem-se em duas classes: erros aleatórios e erros sistemáticos. O primeiro tipo deve-se à natureza aleatória do método, principalmente a flutuações das grandezas, e pode ser estimado fazendo-se várias medições da(s) grandeza(s) em questão e calculando a variância desses valores. A segunda classe (erros sistemáticos) deve-se a erros no procedimento de medida, como por exemplo usar dados correlacionados, ou não deixar o sistema se equilibrar suficientemente antes de realizar medidas de equilíbrio e, portanto, são indesejáveis em uma medição ideal.

Em grandezas de medição direta no sistema tais como (4.48), o erro estatístico pode ser estimado de forma direta e simples. Supondo que são feitas n medições m_i da grandeza m , a estimativa final desta é simplesmente a média sobre as medições \bar{m} , como em (4.4). A estimativa do erro corresponde ao desvio padrão

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1}(\overline{m^2} - \bar{m}^2)} \approx \sqrt{\frac{1}{n}(\overline{m^2} - \bar{m}^2)} \quad (n \gg 1). \quad (4.49)$$

Porém, a expressão acima só é válida se as medições m_i forem independentes, ou seja, completamente descorrelacionadas. Na prática, é muito difícil obter medições descorrelacionadas –

principalmente na região crítica– pois para isso o intervalo entre medições deve ser $\Delta t \gg \tau_m$, de forma que $A_m(\Delta t) \approx 0$. No entanto, uma solução simples e eficaz para o problema é dada [40] pela expressão

$$\sigma \approx \sqrt{\frac{1 + 2\tau/\Delta t}{n}(\overline{m^2} - \overline{m}^2)}, \quad (4.50)$$

que permanece válida para qualquer intervalo Δt considerado. Levando em consideração que

$$n = \frac{t_{max}}{\Delta t}, \quad (4.51)$$

onde t_{max} é o número total de passos de MC da simulação, e substituindo em (4.50), tem-se:

$$\sigma \approx \sqrt{\frac{1 + 2\tau n/t_{max}}{n}(\overline{m^2} - \overline{m}^2)} = \sqrt{\frac{2\tau + \Delta t}{t_{max}}(\overline{m^2} - \overline{m}^2)}. \quad (4.52)$$

Observa-se que, se $\Delta t \ll 2\tau$:

$$\sigma \approx \sqrt{\frac{1}{n_\tau}(\overline{m^2} - \overline{m}^2)}, \quad (4.53)$$

onde

$$n_\tau = \frac{t_{max}}{2\tau}. \quad (4.54)$$

Dessa forma, para Δt pequeno, o resultado tende à expressão (4.49) considerando n_τ estimativas independentes [39].

A estimativa final então é dada por (4.52). Apesar de a estimativa do erro estatístico diminuir com Δt , o erro sistemático (para o qual não há estimativa) aumenta por se considerar valores mais correlacionados de m_i . Portanto, ajustar o intervalo sobre medidas envolve um equilíbrio entre as duas classes de erro.

4.6.1 Método de bootstrap

Apesar da estimativa anterior ser efetiva em diversos casos, ela não pode ser implementada para estimar erros de grandezas que não são medidas diretamente durante a simulação, em cada passo de MC. Um exemplo disso é a susceptibilidade magnética χ , definida inerentemente em termos de médias do módulo da magnetização m sobre a simulação.

O método de *bootstrap* é um método de *reamostragem*, que permite obter uma estimativa razoavelmente simples do erro nesses casos. A seguir será mostrada a aplicação do método para a susceptibilidade magnética como exemplo:

Da lista de n medidas da magnetização, escolhem-se n ao acaso; é possível escolher a mesma medida mais de uma vez, portanto, dessa nova lista de valores, uma fração é repetida.

Em seguida, calcula-se a suscetibilidade normalmente a partir desse novo arranjo. Repete-se o processo de reamostragem e nova estimativa de χ várias vezes, criando um conjunto $\{\chi_i\}$ de diversas estimativas da suscetibilidades. Pode-se mostrar [41] que, tendo em mãos um conjunto suficientemente grande de R estimativas, o desvio padrão destas é uma medida do erro da estimativa original:

$$\sigma_\chi = \sqrt{\overline{\chi^2} - \bar{\chi}^2}, \quad (4.55)$$

onde

$$\bar{\chi}^k = \frac{1}{R} \sum_i^R (\chi_i)^k. \quad (4.56)$$

Em (4.55) não há o fator $1/(n-1)$ de (4.49), visto que na verdade não se tem $n-1$ medidas independentes como antes; todas as medidas estão de fato relacionadas, pois são extraídas de um mesmo conjunto de valores de m . A inclusão do fator implicaria em que a estimativa do erro poderia ser reduzida apenas reamostrando os dados mais vezes.

Este método de estimativa de erro será aplicado com a susceptibilidade e com o cumulante de Binder. Para uma boa estimativa do erro, o número de reamostragens deve estar no intervalo $100 \leq R \leq 1000$ [32].

4.6.2 Propagação de erros

De forma geral, em se tratando dos expoentes críticos, não se faz necessário determinar todos de forma direta; de fato, geralmente são estimados apenas dois ou três, sendo o resto calculado usando relações de hiperescalamento como (3.21). Desta forma, torna-se necessário utilizar algum método de propagação de erros. Para exemplificar a propagação de erros adotada neste trabalho, suponhamos que se deseja estimar o erro de um expoente crítico $z = f(x, y)$, a partir de dois outros expoentes x e y cujas estimativas e cujos erros $(\Delta x, \Delta y)$ são conhecidos. Então

$$\begin{aligned} \Delta z &= f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y) \\ &\approx \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x,y} \Delta x + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x,y} \Delta y + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta x \Delta y), \end{aligned} \quad (4.57)$$

onde foram desprezados termos de ordem dos erros superiores a 1. Esta relação também é facilmente generalizável para qualquer número de argumentos de f .

Capítulo 5

Resultados numéricos

5.1 Verificação da eficácia do método de Monte Carlo

Para se ter uma idéia se o método de MC foi bem aplicado ao modelo escalar, uma simulação prévia da evolução temporal do campo médio foi feita para o campo ϕ^4 ($\eta = 0$) com uma componente ($O(1)$), em quatro dimensões ($d = 4$), a fim de comparar os resultados com o trabalho de Huang *et al.* [42]. Nesse caso, o módulo da magnetização (4.48) reduz-se a

$$\Theta = \frac{1}{V} \sum_{\vec{n}} \theta(\vec{n}) . \quad (5.1)$$

O comportamento observado em ambas as figuras a seguir está de acordo com o obtido por ¹ [42] para o modelo ϕ^4 , com parâmetros equivalentes:

$$\begin{aligned} r_0 &\equiv \rho = \frac{2}{a^2}(\rho_l - d) = 2\rho_l - 8 \\ \lambda_0 &= 4\lambda . \end{aligned} \quad (5.2)$$

A Figura 5.1 mostra evoluções da magnetização $\langle \Theta \rangle$ em uma rede 10^4 para três valores diferentes do coeficiente quadrático ρ_l , com $\lambda = 250$ e $\eta = 0$. Pode-se ver que, para $\rho_l = -71$ (ou $r_0 = -150$), o sistema encontra-se na fase simétrica (campo desordenado), enquanto para $\rho_l = -83,5$ ($r_0 = -175$) o sistema adquire uma “magnetização” em torno de $\Theta \approx 2,3$. Para $\rho_l = -78,5$ ($r_0 = -165$), o sistema apresenta grande flutuação, oscilando o sentido da magnetização. Este comportamento é típico de uma região crítica, governado por flutuações de grandes comprimentos de onda.

¹Nesta referência, utiliza-se o algoritmo de Metropolis para atualizar o valor do módulo do campo, e o algoritmo de “banho térmico” [32, 31] para atualizar o sinal do campo.

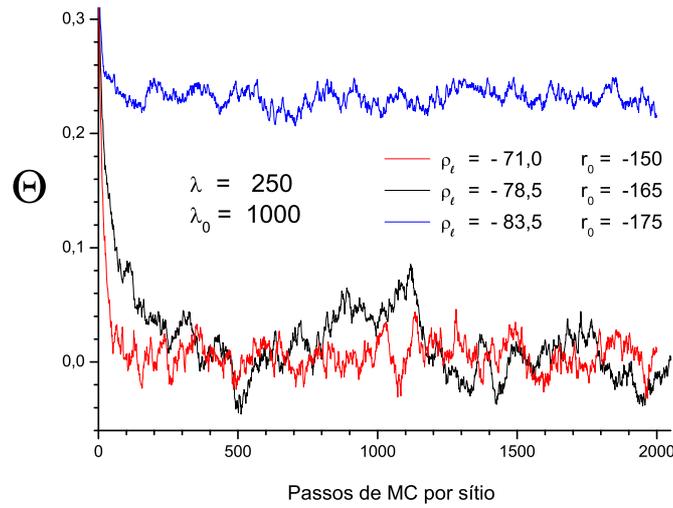


Figura 5.1: Evoluções do sistema $O(4)$ em uma rede 10^4 . O parâmetro r_0 [42] é equivalente ao parâmetro ρ em (2.7), e $\lambda_0 = 4\lambda$.

A Figura 5.2 mostra o valor esperado da magnetização, a suscetibilidade magnética e o cumulante de Binder no equilíbrio contra o parâmetro quadrático ($\langle \Theta \rangle \times \rho_l$, $\chi \times \rho_l$, $U_L \times \rho_l$) para dois tamanhos de rede (5^4 e 10^4), com $\lambda = 25$. As estimativas do ponto crítico onde ocorre a transição de fase são mais precisas do que análises como a da Figura 5.1. Analisando o pico da susceptibilidade, assim como estimando o ponto de inflexão das curvas de magnetização, tem-se $(\rho_l)_c = 8,4 \pm 0,1$. Analisando o ponto de interseção entre as curvas do cumulante para os dois tamanhos de rede, tem-se $\rho_c = 8,2 \pm 0,1$. Esta última aproxima-se mais da estimativa da referência [42] $(r_0)_c = 24,4$ para $\lambda_0 = 4\lambda = 100$, pois como visto na seção 3.3, não necessita de uma análise de escala de tamanho finito², ao contrário da análise pelo pico de $\chi_{max}(L)$.

5.2 Comparação dos algoritmos

Tendo verificado que o método de MC fora aplicado corretamente ao modelo escalar, o próximo passo é a comparação da eficiência dos algoritmos. Para isso, há basicamente dois parâmetros de comparação: os tempos de correlação τ_m e os tempos de equilibração τ_{eq} . Em geral $\tau_{eq} > \tau_m$, visto que dois estados perto do equilíbrio são mais “similares” do que um estado fora do equilíbrio (como os campos estarem ordenados ou totalmente desordenados) e outro perto do equilíbrio. No

²Na verdade, como será visto mais à frente, a estimativa do ponto de cruzamento de U_L depende do tamanho das redes envolvidas devido a correções de ordens superiores ignoradas na análise da seção 3.3.

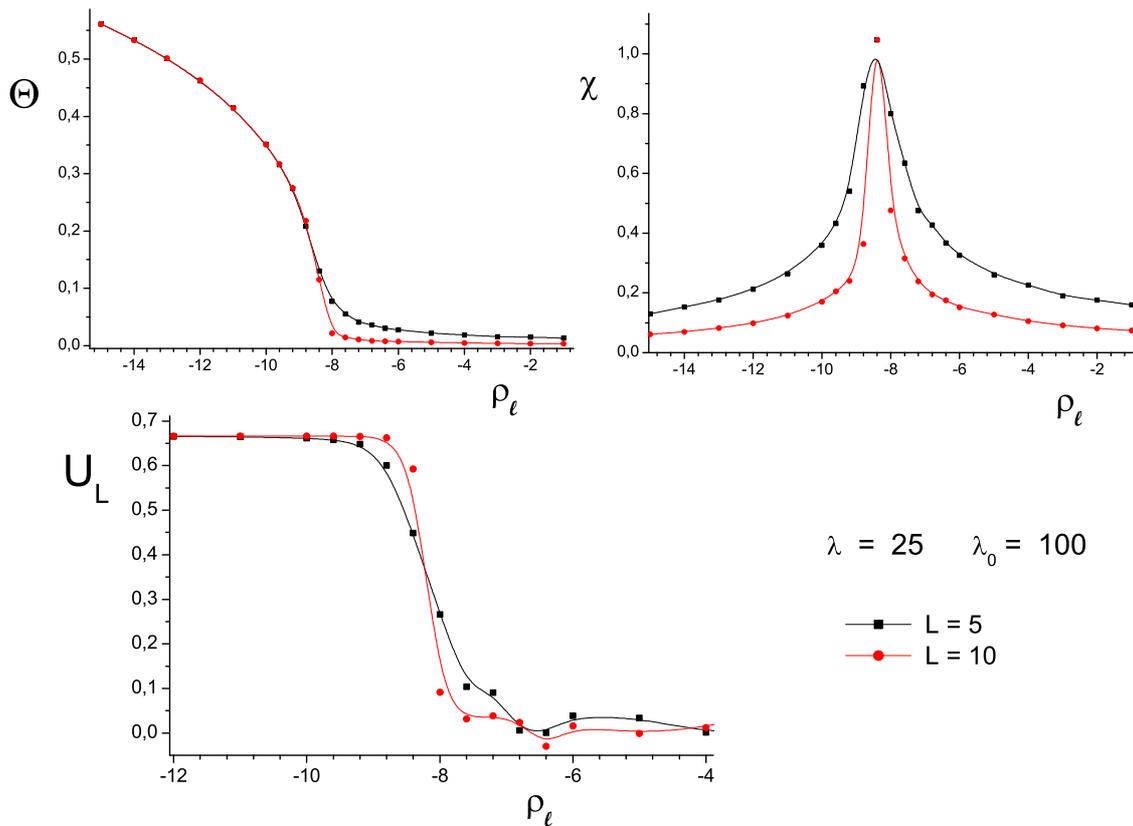


Figura 5.2: $\langle \Phi \rangle \times \rho_l$, $\chi \times \rho_l$, $U_L \times \rho_l$ para o modelo $\phi^4 O(4)$ com redes 5^4 e 10^4 . Considerando as curvas para $\langle \Theta \rangle$ e χ , $(\rho_l)_c = -8,4 \pm 0,1$, ou $(r_0)_c = -24,8 \pm 0,2$; de acordo a interseção em U_L , $(\rho_l)_c = -8,2 \pm 0,1$, ou $(r_0)_c = -24,4 \pm 0,2$.

entanto, estas duas estimativas estão relacionadas, de forma que pode-se dizer de forma grosseira que $\tau_{eq} \propto \tau_m$.

Começamos comparando os tempos de equilibração para os algoritmos de Wolff e Metropolis, com e sem sobre-relaxação. A título de comparação, três pontos no espaço de parâmetros foram escolhidos para tal: um correspondendo ao estado magnetizado, outro ao desmagnetizado e finalmente um bem próximo a uma região crítica. A condição inicial escolhida no primeiro caso foi a desordenada, enquanto que, no segundo caso, foi a ordenada. Na região crítica foram consideradas ambas as condições iniciais. As figuras 5.3, 5.4, 5.5 mostram a evolução da magnetização dos três casos acima, para três diferentes tamanhos de rede.

Com base no resultado expresso nas figuras, foi feita a Tabela 5.1 com as estimativas de τ_{eq} para cada caso. A sobre-relaxação, apesar de não diminuir de forma considerável os valores já

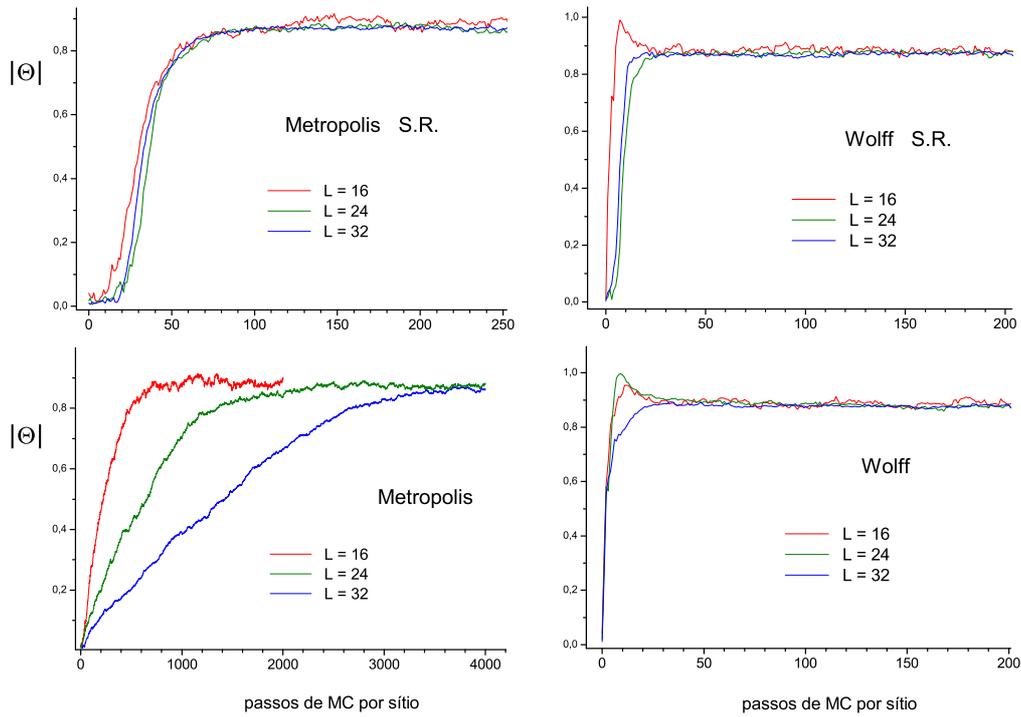


Figura 5.3: Evolução da magnetização $|\vec{\Theta}|$ do sistema ϕ^6 $O(4)$ em redes 16^3 , 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 4$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase ordenada), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..

pequenos das estimativas do algoritmo de Wolff, mostra-se bastante eficiente no algoritmo de Metropolis. Pode-se ver também que, com este recurso, as flutuações locais aumentam em ambos os algoritmos. Como será verificado adiante nas estimativas de τ_m , isto é um indício de que os estados gerados desta forma (com SR) são mais decorrelacionados. Outra peculiaridade é a dependência de $\tau_{eq}(L)$ quando o sistema evolui de um estado desordenado para um equilíbrio ordenado no algoritmo de Metropolis simples. Este comportamento é geral, não importando a região no espaço de parâmetros. Como exemplo, a Figura 5.6 mostra a mesma evolução das figuras anteriores para o algoritmo de Metropolis (sem SR) em outra região do espaço de parâmetros, para diferentes tamanhos de rede. Nela nota-se que

$$\begin{aligned}
 \tau_{eq}(8) &\approx 500 \\
 \tau_{eq}(16) &\approx 2000 \\
 \tau_{eq}(32) &\approx 8000 .
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

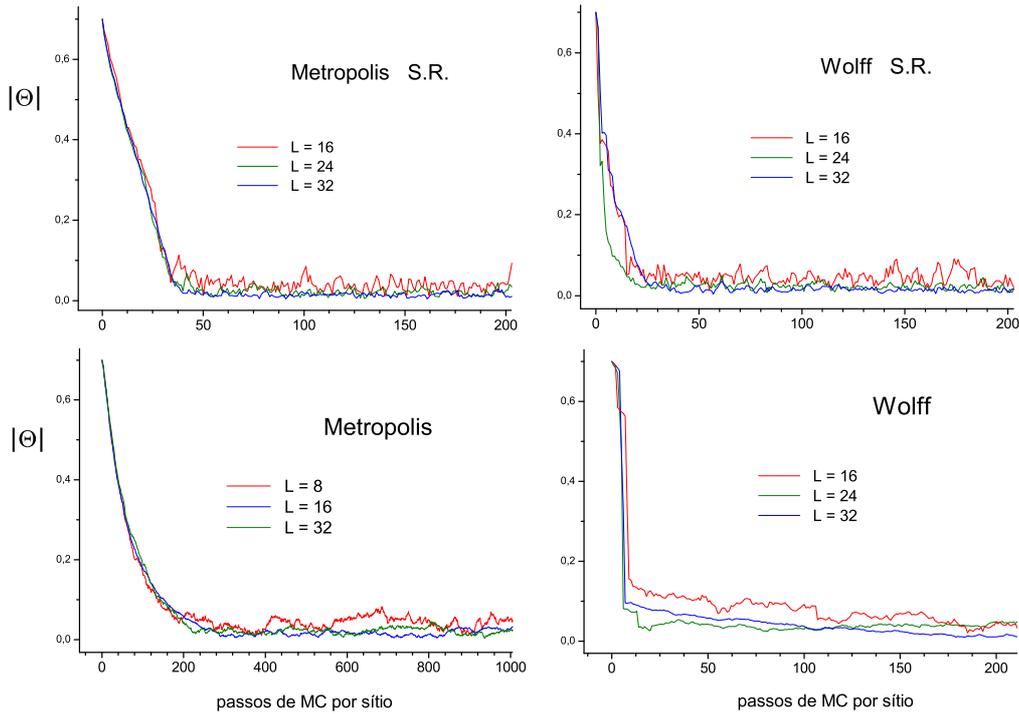


Figura 5.4: Evolução da magnetização $|\vec{\Theta}|$ do sistema ϕ^6 $O(4)$ em redes 16^3 , 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 5, 5$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase desordenada), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..

Considerando

$$\tau_{eq}(L) \propto L^\omega \quad \rightarrow \quad \ln(\tau_{eq}) \propto \omega \cdot \ln(L), \quad (5.4)$$

pode-se fazer um ajuste linear de $\ln(\tau_{eq}) \times \ln(L)$ com as estimativas de Metropolis da Tabela 5.1 e de (5.3). O coeficiente angular seria então a estimativa do expoente ω . Fazendo-se isto, tem-se aproximadamente que

$$\omega \approx 2 \quad \rightarrow \quad \tau_{eq}(L) \propto L^2. \quad (5.5)$$

Vale ressaltar que a estimativa de ω corresponde à estimativa (4.34) do expoente dinâmico do algoritmo de Metropolis .

A análise seguinte envolve a comparação entre os tempos de correlação dos algoritmos. Antes de mais nada, é necessário analisar o comportamento de τ_m conforme aproxima-se da região crítica. Em regiões de transição de fase de segunda ordem, o tempo de correlação aumenta gradualmente até um valor máximo no ponto de transição. Quanto mais forte a transição, maior será esse valor máximo. A Figura 5.7 mostra o comportamento típico de $\tau_m(\rho_l)$ para uma região de

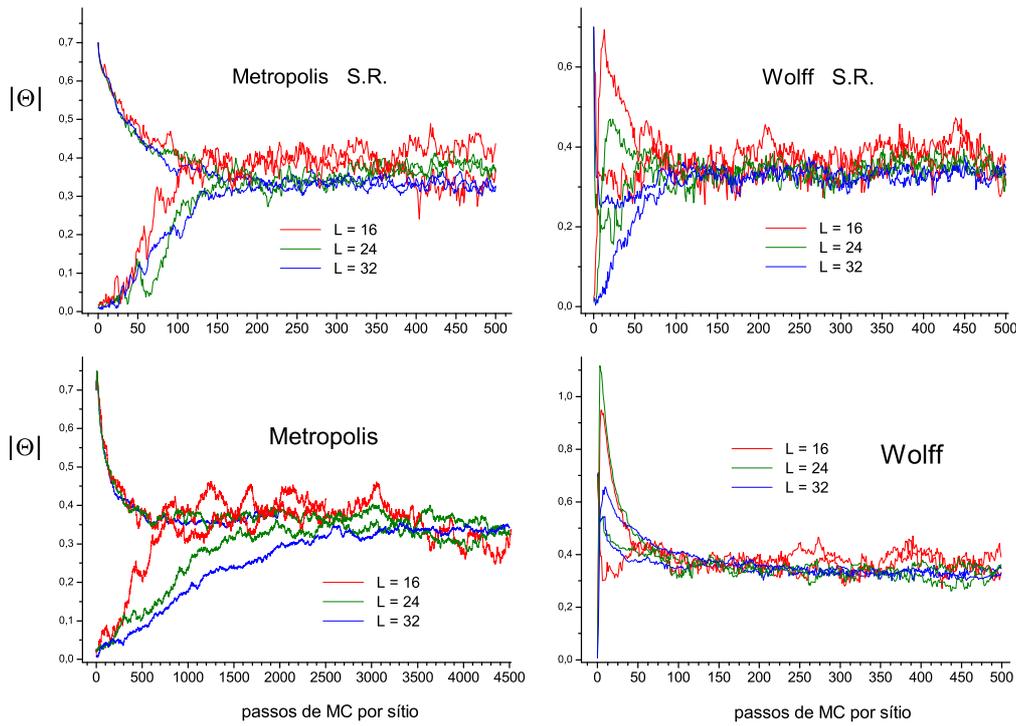


Figura 5.5: Evolução da magnetização $|\vec{\Theta}|$ do sistema $\phi^6 O(4)$ em redes 16^3 , 24^3 e 32^3 com os parâmetros $\rho_l = 5$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ (fase crítica), usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem S.R..

transição “forte” de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$), para diferentes tamanhos de rede. Vale observar que o comportamento não é simétrico em relação aos dois lados da transição. Verifica-se um valor máximo na região crítica, que em geral aumenta com o tamanho da rede³. Como a região de interesse é justamente a próxima da criticalidade, o valor máximo de τ_m torna-se o principal fator limitante para as simulações (*critical slowing down*). Logo, é feita a seguir uma comparação dos valores de $\tau_{max}(L) \equiv \tau_m((\rho_l)_c, L)$ entre os diferentes algoritmos. A Figura 5.8 mostra a estimativa de $\tau_{max} \times L$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis, com e sem SR, para $\lambda = 25$, $\eta = 0$. Pode-se observar uma redução sensível nas estimativas ao utilizar a sobre-relaxação nos dois algoritmos.

Vale ressaltar, no entanto, a diferença quanto ao tempo médio t_{MC} por passo de MC que a simulação gasta para cada algoritmo, exposta na Tabela 5.2, para se ter uma comparação razoável

³Embora as estimativas tenham sido realizadas para o algoritmo de Metropolis, um comportamento semelhante é verificado para o algoritmo de Wolff.

	ordenada	desordenada	crítica	
Metrop	$\tau_{16} \approx 1000$ $\tau_{24} \approx 2300$ $\tau_{32} \approx 3800$	$\tau \approx 300$	$\tau_{16} \approx 800$ $\tau_{24} \approx 2000$ $\tau_{32} \approx 3400$	$\tau \approx 700$
Metrop + S.R.	$\tau \approx 100$	$\tau \approx 50$	$\tau \approx 200$	
Wolff	$\tau \approx 40$	$\tau \approx 20$	$\tau \approx 150$	
Wolff + S.R.	$\tau \approx 30$	$\tau \approx 30$	$\tau \approx 120$	

Tabela 5.1: Estimativas de τ_{eq} para os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem sobre-relaxação. Verifica-se que o tempo de equilíbrio só depende do tamanho da rede para o algoritmo de Metropolis sem S.R..

algoritmo	$\langle \vec{\Theta} \rangle \neq 0$	$\langle \vec{\Theta} \rangle = 0$
Metrop	1	
Metrop + SR	1,09	
Wolff	1,75	2,10
Wolff + SR	1,84	2,18

Tabela 5.2: Estimativas de t_{MC} para os algoritmos de Metropolis e de Wolff, com e sem sobre-relaxação. As simulações foram feitas em dois extremos aproximados ($\rho_l = -43$ e $\rho_l = -47$) da região crítica $\{ \rho_l \approx -45, \lambda = 25, \eta = 0 \}$.

destes quanto à eficiência. Enquanto t_{MC} é basicamente constante no algoritmo de Metropolis para ambas as fases (ordenada e desordenada), por executar exatamente as mesmas instruções (uma varredura de atualizações locais na rede em cada passo) independentemente da fase em que se encontra o sistema, o mesmo não vale para o algoritmo de Wolff. O tamanho médio dos clusters a serem configurados e atualizados em cada passo depende de quão “organizadas” estejam as componentes dos campos (somente componentes com o mesmo sinal podem participar de um cluster), assim como do módulo das componentes (eq. (4.47)). O tempo gasto em definir e inverter um cluster pode então variar com a fase do sistema, de forma que, em geral, gasta-se mais tempo em regiões ordenadas (onde o tamanho médio do cluster é maior) do que em regiões desordenadas do espaço de parâmetros. Em modelos de spins, onde só há a dinâmica de clusters (sem atualizações de campo locais), o tempo que se leva para completar um passo de MC completo é proporcional

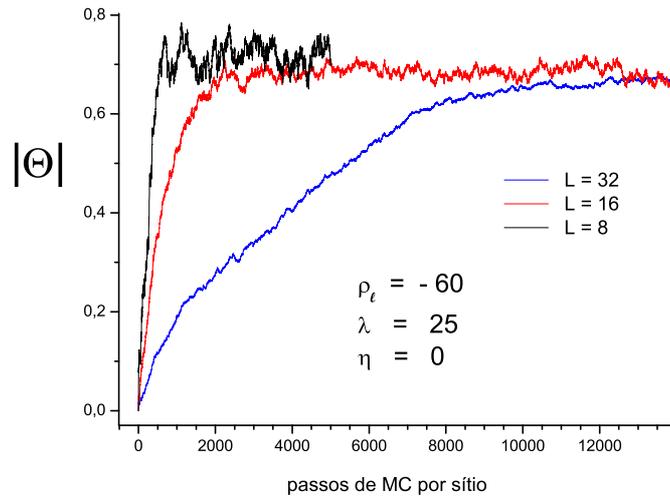


Figura 5.6: Evolução da magnetização $|\vec{\Theta}|$ do sistema ϕ^6 $O(4)$ em redes 8^3 , 16^3 e 32^3 com parâmetros $\rho_l = -60$, $\lambda = 25$, $\eta = 0$. Vê-se que o tempo de equilíbrio depende quadraticamente do tamanho linear da rede.

ao número de spins no(s) cluster(s) [32]; logo, define-se

$$\tau_{\text{wolff}} \equiv \tau_{\text{passo}} \cdot \alpha \frac{\langle n \rangle}{V}, \quad (5.6)$$

onde τ_{passo} é a estimativa para o algoritmo de Wolff em passos de MC, $\langle n \rangle$ é o número médio de sítios do(s) cluster(s), V é o número de sítios da rede e α uma constante de proporcionalidade. Esta estimativa pode então ser comparada diretamente com o tempo de correlação de Metropolis para qualquer fase em que o sistema se encontre ⁴.

No entanto, a mesma análise não pode ser feita no modelo em questão. O ciclo completo de um passo de MC para o campo escalar envolve, além da dinâmica global de clusters, uma dinâmica local, ao atualizar os módulos das componentes. Encontrar uma correspondência do tipo (5.6) que leve isso em conta seria mais complicado; portanto, a melhor solução é estimar, para cada algoritmo, o tempo médio gasto para gerar um estado decorrelacionado

$$\tau^d \equiv t_{MC} \cdot \tau_m, \quad (5.7)$$

sendo o algoritmo mais eficiente aquele que apresentar a menor estimativa de τ^d . A Figura 5.9

⁴Para fazer uma comparação “justa”, seria necessário ajustar α de forma que $t_{MC}^{\text{metrop}} = t_{MC}^{\text{wolff}} \cdot \alpha \langle n \rangle / V$. Porém, a diferença com o valor convencional $\alpha = 1$ é pequena comparada com a diferença nas estimativas de τ (e portanto na performance) entre os dois algoritmos para modelos de spin.

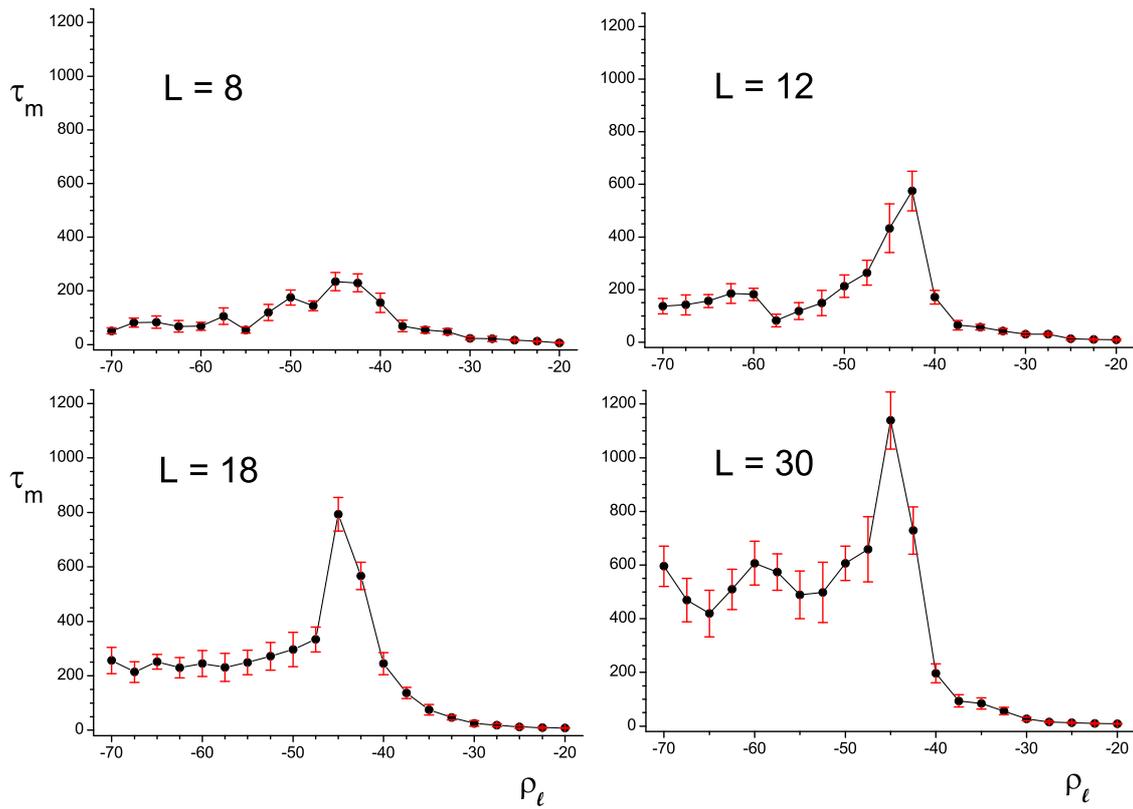
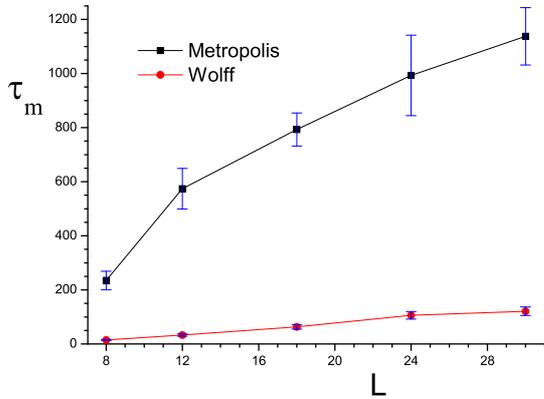


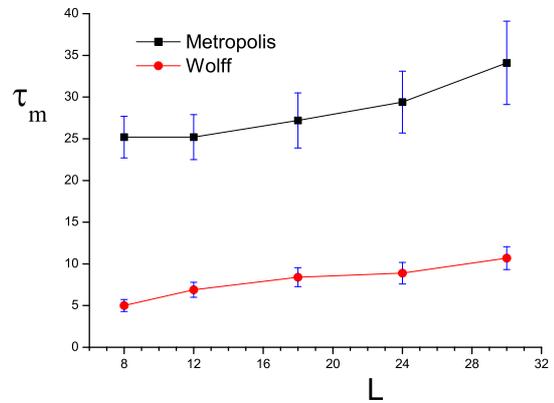
Figura 5.7: Estimativa de τ_m (eq. 4.24) com $\lambda = 25$, $\eta = 0$ para diversos valores de ρ_l ; As simulações foram feitas para redes de dimensão linear $L = 8, 12, 18, 30$, e nota-se picos mais pronunciados para redes maiores.

mostra as estimativas de $\tau^d(L)$ com base nos dados da Figura 5.8 e da Tabela 5.2. Fica claro que o algoritmo mais eficiente para transições de segunda ordem é o de Wolff com SR.

Em regiões de transição de primeira ordem, a sobre-relaxação também mostra-se mais eficiente, embora a diferença verificada ao utilizá-la seja menor do que em regiões de transição de fase de segunda ordem. A Figura 5.10 mostra o comportamento típico de $\tau_m(\rho_l)$ na vizinhança de uma transição descontínua, usando os algoritmos de Metropolis e de Wolff (ambos com SR) com dois diferentes tamanhos de rede. Pode-se perceber um pico na região crítica do primeiro, enquanto o último não apresenta *critical slowing down*. Logo, aqui também, o algoritmo mais eficiente é o de Wolff com SR.

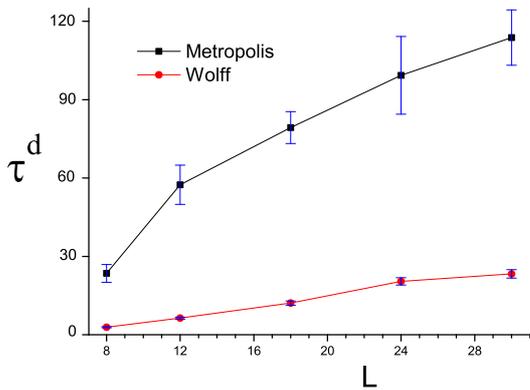


(a) Sem sobre-relaxação

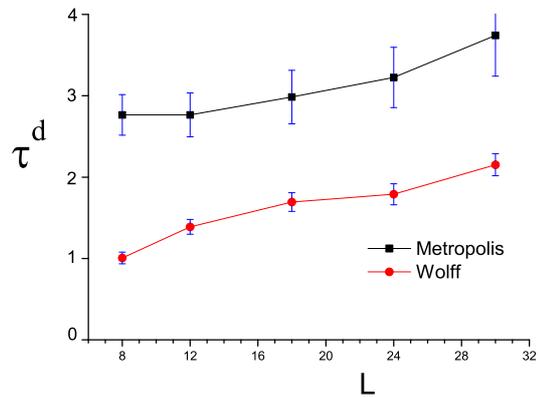


(b) Com sobre-relaxação

Figura 5.8: Comparação entre estimativas de $\tau_{max} \times L$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com e sem sobre-relaxação, para uma transição forte de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$).



(a) Sem sobre-relaxação



(b) Com sobre-relaxação

Figura 5.9: Comparação entre estimativas de $\tau^d(L)$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com e sem sobre-relaxação, para uma transição forte de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$). O algoritmo de Wolff com SR é claramente o mais eficiente.

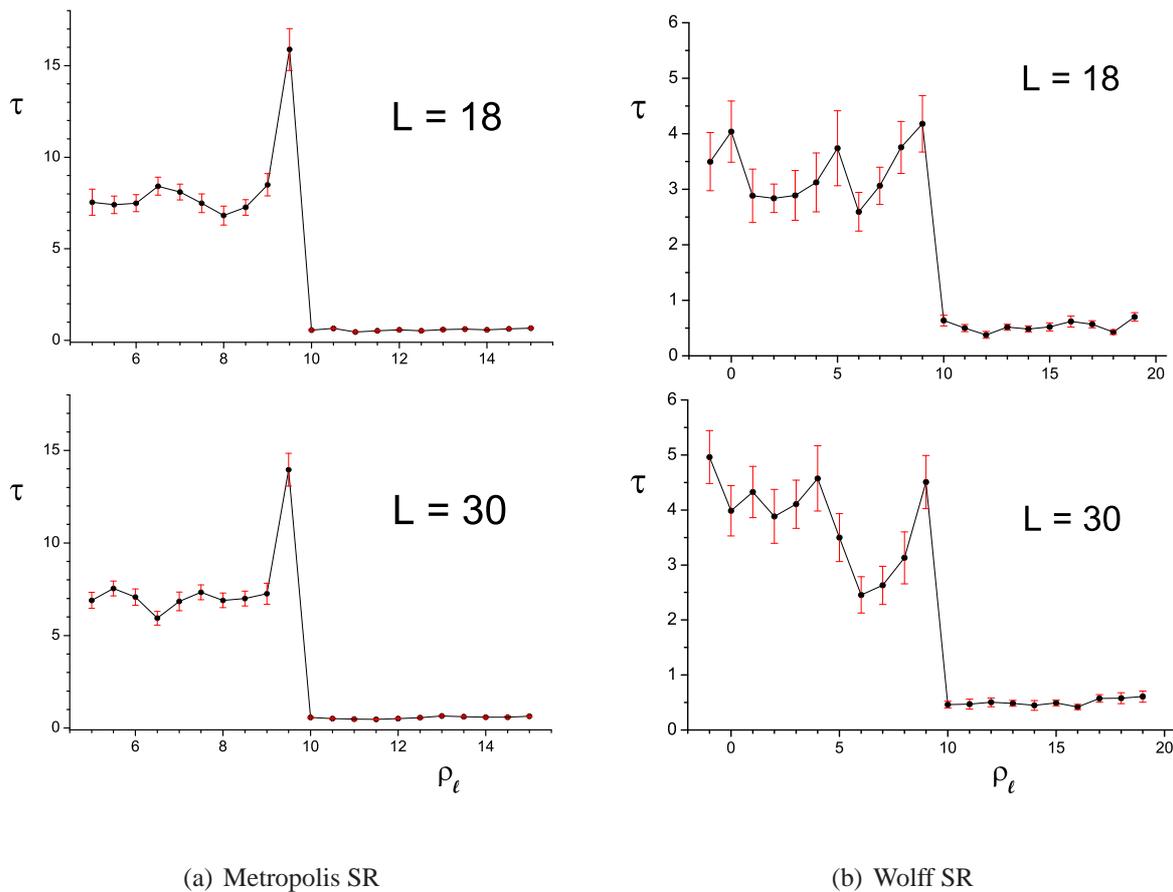


Figura 5.10: Comparação entre estimativas de $\tau^d(L)$ para os algoritmos de Wolff e Metropolis com sobre-relaxação, para uma transição de primeira ordem ($\lambda = -5$, $\eta = 1$). O algoritmo de Wolff se mostra o mais eficiente.

5.3 Ponto Tricrítico

Uma questão central no estudo do modelo e na construção de seu diagrama de fases é a determinação do ponto tricrítico no espaço de parâmetros, definido no capítulo 3. Como foi comentado lá, encontrar a sua localização não é fácil, e a simples análise das curvas de magnetização, suscetibilidade ou cumulante contra ρ_l no equilíbrio não são suficientes para tal. Alguns métodos foram desenvolvidos na literatura [43, 44] para determinar a ordem de uma transição de fase, dos quais dois são discutidos nas subseções seguintes e usados para obter estimativas independentes do ponto tricrítico.

5.3.1 Análise de relaxação

Duas características marcantes de transições de primeira ordem são a descontinuidade no parâmetro de ordem, e a existência de metaestados próximo à região crítica — quando $\epsilon \rightarrow 0$ — (seção 3.2), onde o sistema pode ficar “aprisionado” durante um período de tempo até tender ao equilíbrio “real”.

Uma das maneiras então de se verificar se a transição é de primeira ordem é analisar a evolução do parâmetro de ordem do sistema na região crítica desde as duas condições iniciais descritas na seção 4.5. Mudando ligeiramente o valor do parâmetro indutor (no caso, ρ_l), o valor de equilíbrio de $|\vec{\Theta}|$ deve apresentar um salto ao passar pelo ponto crítico. Além disso, estima-se observar patamares de pseudo-equilíbrio — metaestados —, quando a configuração inicial estiver mais próxima destes do que do equilíbrio “real”. No ponto crítico, espera-se haver dois valores de equilíbrio (fases coexistentes), onde o sistema escolherá o equilíbrio mais próximo da respectiva configuração inicial. Por sua vez, uma transição contínua (segunda ordem) deve mostrar uma variação suave do valor de equilíbrio de $|\vec{\Theta}|$ com ρ_l , e sem ocorrência de metaestados.

A Figura 5.11 exibe uma transição típica de segunda ordem para $\lambda = -4,0$ e $\eta = 1$. Para cada valor de ρ_l , não se verificam patamares de pseudo-equilíbrio, e no ponto crítico ($\rho_l = 7,20$) as duas evoluções correspondentes às duas diferentes configurações iniciais (ordenada e desordenada) tendem a um mesmo valor de equilíbrio intermediário. Nota-se que o mesmo comportamento é observado para os três tamanhos de rede.

Já a Figura 5.12 mostra uma transição típica de primeira ordem para $\lambda = -4,4$ e $\eta = 1$. Pode-se observar um salto no valor de equilíbrio entre $\rho_l = 8,140$ e $\rho_l = 8,135$, e o aprisionamento do sistema em um metaestado para este último valor de ρ_l (em vermelho), quando a

configuração inicial é desordenada. Também percebe-se neste último caso que o sistema demora mais em passar do pseudo-equilíbrio para o equilíbrio quanto maior é o tamanho da rede. No ponto crítico, verifica-se dois valores distintos de equilíbrio para cada escolha de condição inicial, como mostra a Figura 5.13.

Logo conclui-se que, para $\eta = 1$, a estimativa do ponto tricritico pela análise da relaxação é

$$T(\eta = 1) = \{\rho_l = 7,67 \pm 0,47, \lambda = -4,2 \pm 0,2\}, \quad (5.8)$$

de forma que, para regiões críticas com $\lambda > -4,2$, as transições são de segunda ordem.

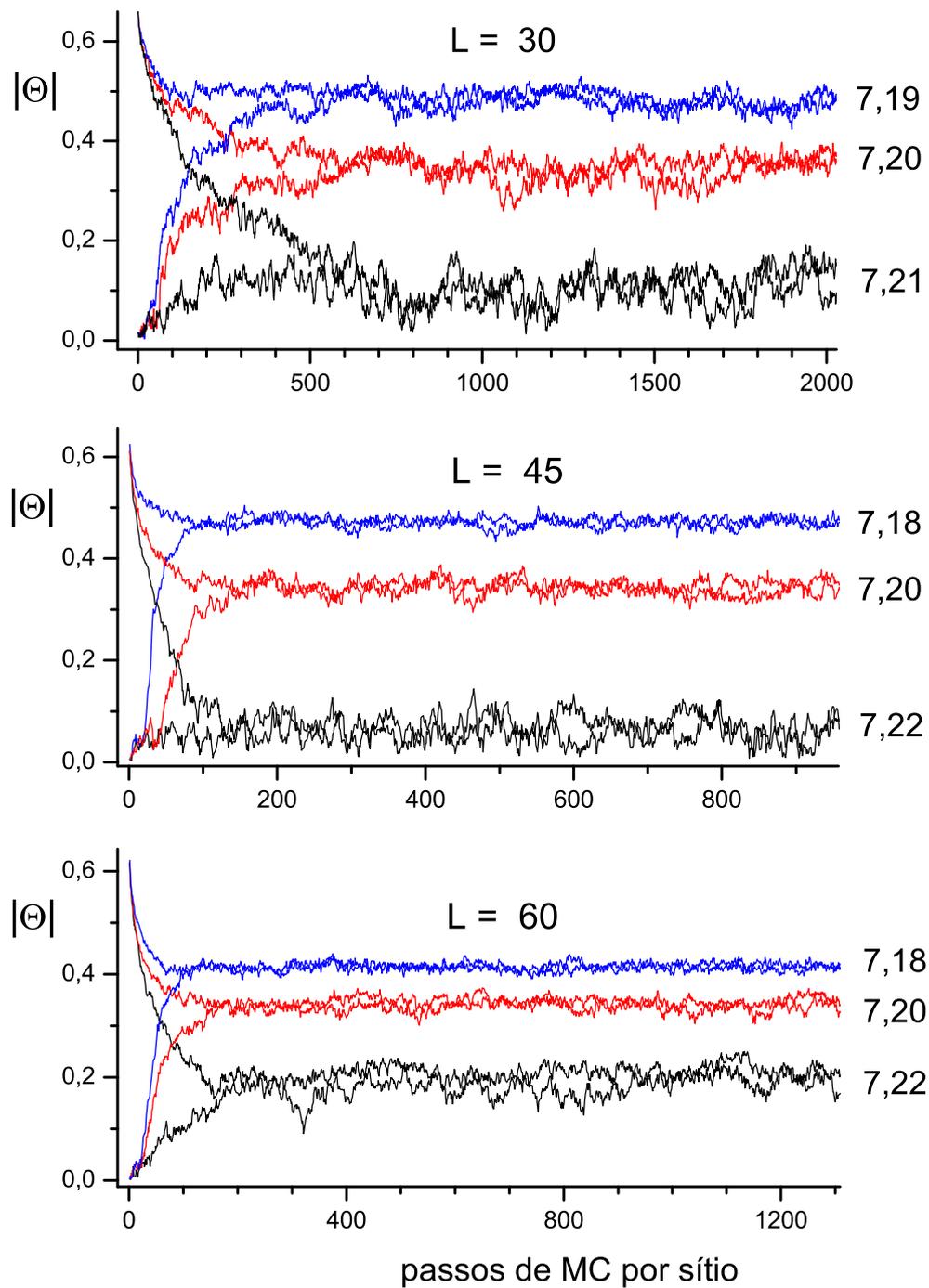


Figura 5.11: Evolução do parâmetro de ordem para redes de tamanho 30^3 , 45^3 , 60^3 desde duas condições iniciais distintas. Em cada rede foram considerados três pontos do espaço de parâmetros com $\lambda = -4,0$ próximos de uma transição de segunda ordem (os valores junto às curvas correspondem ao parâmetro ρ_l considerado.). Observa-se que não há metaestados ou “saltos” no valor de equilíbrio de $|\bar{\Theta}|$, e no ponto crítico ($\rho_l = 7,20$) há somente um valor de equilíbrio.

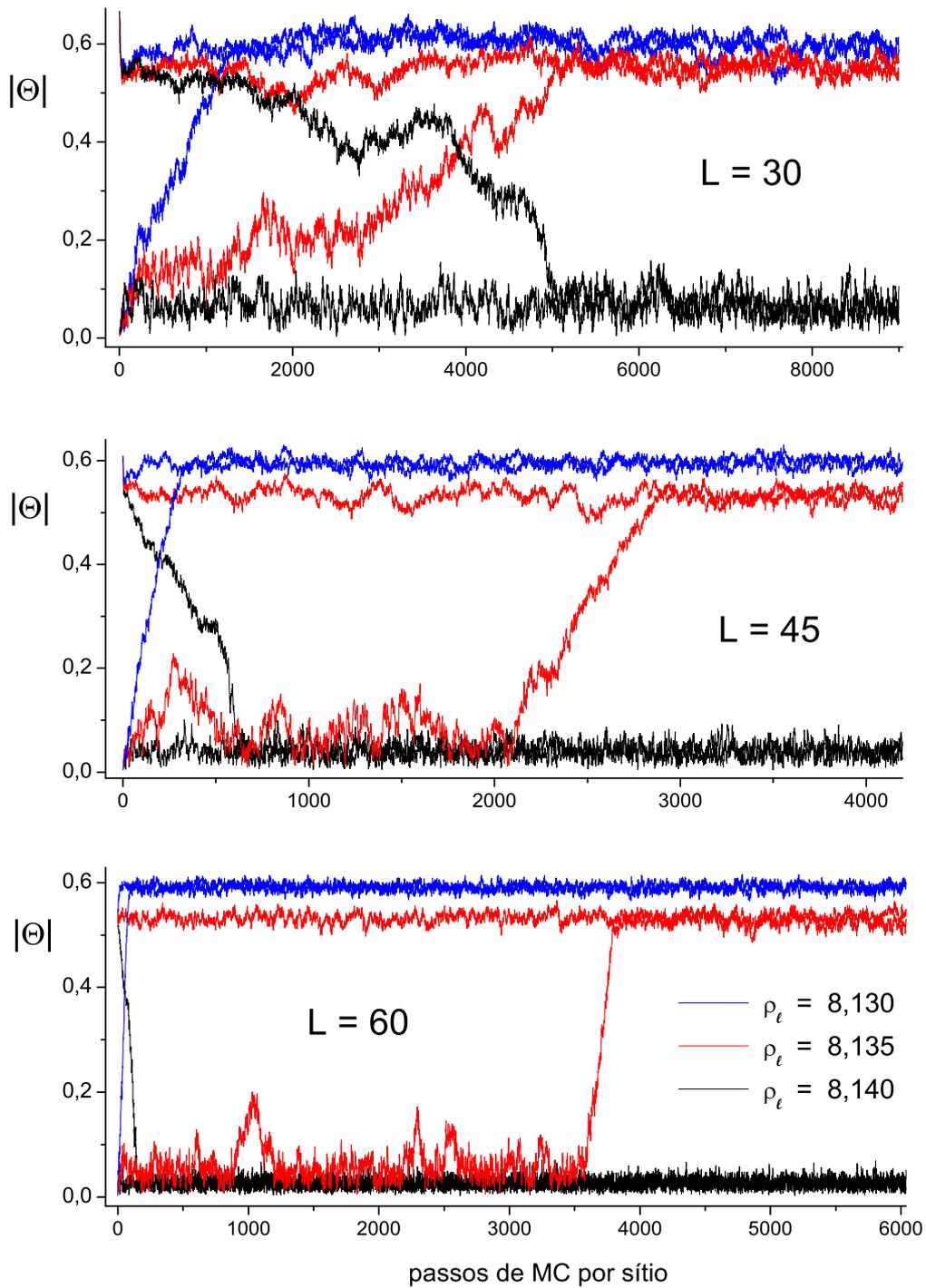


Figura 5.12: Evolução do parâmetro de ordem para redes de tamanho 30^3 , 45^3 , 60^3 desde duas condições iniciais distintas. Em cada rede foram considerados três pontos do espaço de parâmetros com $\lambda = -4,4$ próximos de uma transição de primeira ordem. Observa-se um “salto” no valor de equilíbrio de $|\vec{\Theta}|$, bem como metaestados na partida desordenada para $\rho_l = 8,135$.

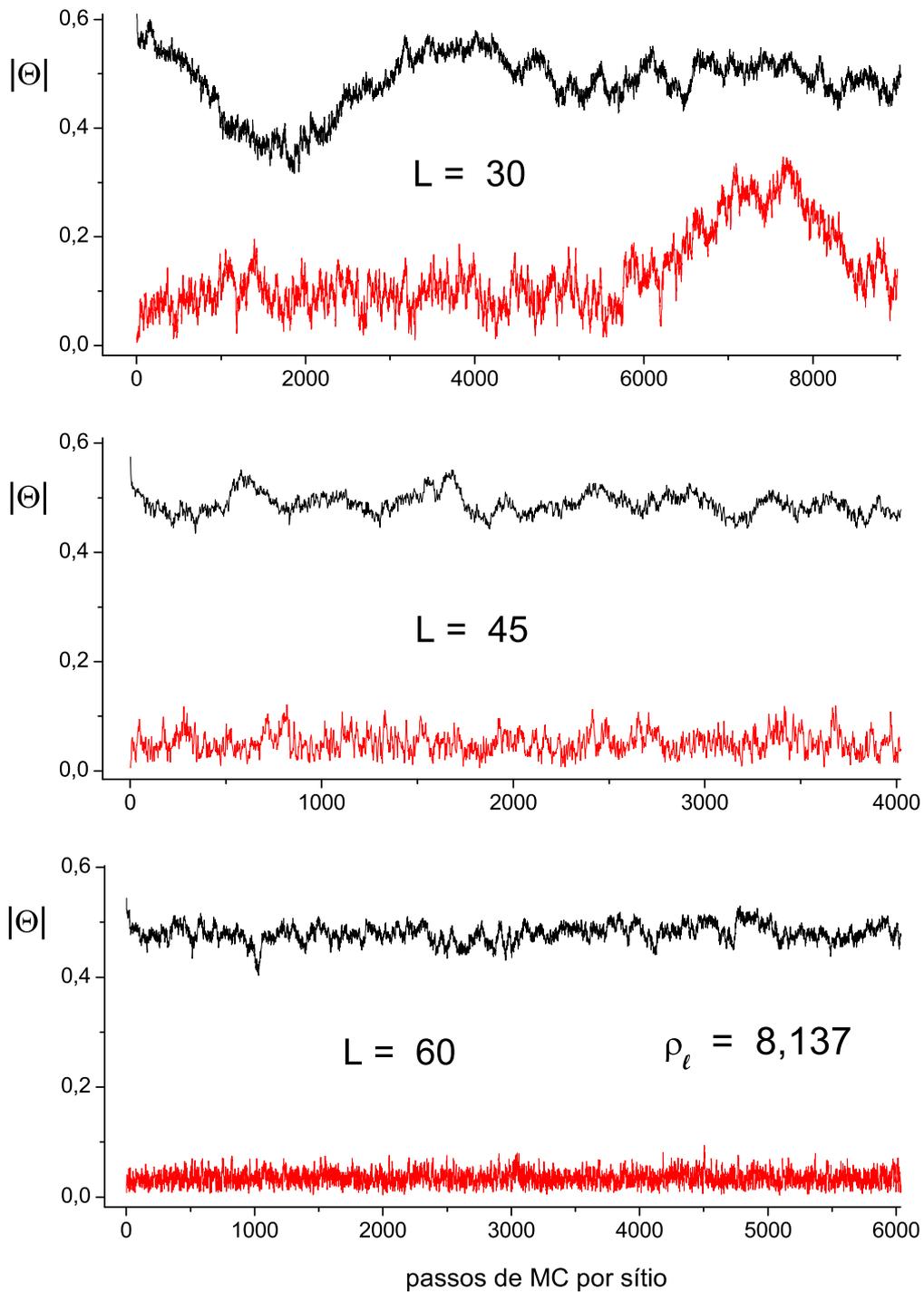


Figura 5.13: Evolução do parâmetro de ordem no ponto crítico para $\lambda = -4,0$, e redes de tamanho 30^3 , 45^3 , 60^3 desde duas condições iniciais distintas. Observam-se dois valores distintos de equilíbrio.

5.3.2 Análise de histerese

A ocorrência de metaestados em transições de primeira ordem induz outro fenômeno na região crítica: a observação de uma histerese na curva do parâmetro de ordem contra parâmetro indutor ($|\vec{\Theta}| \times \rho_l$), causada pela “resistência” do sistema em passar de uma fase para outra (mesmo após o ponto de transição, o sistema fica por algum tempo “preso” em um dado metaestado antes de passar para a região de equilíbrio). Pode-se prever este comportamento observando uma curva típica de potencial efetivo para transições de primeira ordem como a Figura 3.2, onde o sistema precisa sobrepujar uma “barreira” de potencial para passar de uma zona de equilíbrio para a outra. Realizando então simulações com poucos passos de MC e variando ρ_l a passos pequenos, o sistema sofre a transição de fase um pouco após o verdadeiro ponto crítico. Fazendo o caminho inverso, a defasagem da transição se dá no sentido inverso, o que faz aparecer uma histerese ou “loop” em torno da região crítica. Para simulações suficientemente longas (muitos passos de MC por sítio), o sistema acaba varrendo todo o espaço de fases, e nenhuma histerese é observada.

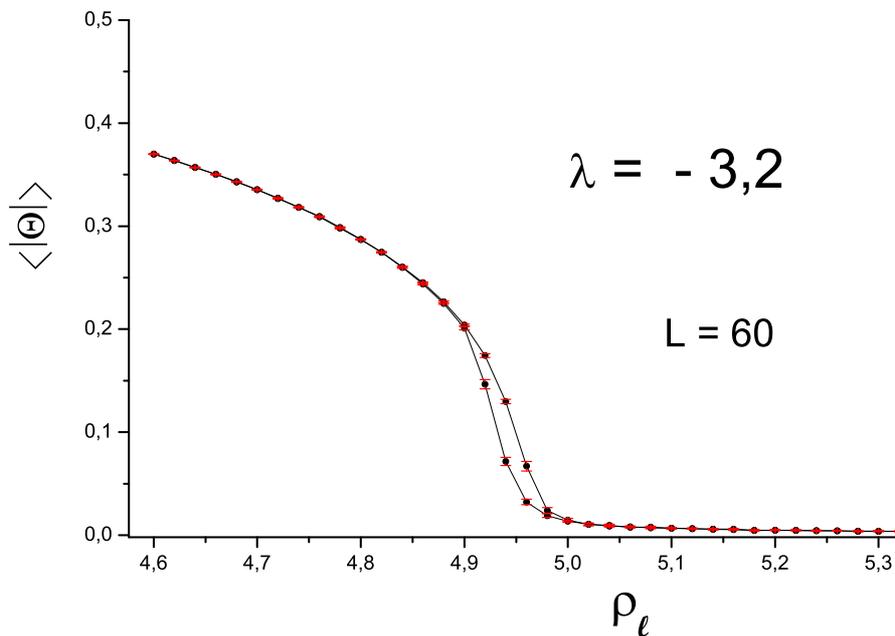


Figura 5.14: Histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 60$ com $\lambda = -3,2$, simulado com o algoritmo de Metropolis sem SR. Como foi verificado na seção anterior (e como será verificado nesta mesma seção), a transição acima é de segunda ordem.

Contudo, transições de segunda ordem também podem apresentar histerese, caso o tempo de

equilíbrio seja comparável ou maior do que o número de passos realizados para cada valor de ρ_l , como pode ser visto na Figura 5.14 para o algoritmo de Metropolis. Logo, a detecção sem ambigüidades da mesma em regiões de transição descontínua depende de se utilizar um algoritmo com um pequeno tempo de equilíbrio. Algoritmos não-locais, no entanto, não são muito adequados para este propósito, pois a probabilidade em cada passo de suplantar a barreira de potencial entre as regiões de equilíbrio é grande, para transições fracas de primeira ordem. Logo, o algoritmo escolhido é o de Metropolis com sobre-relaxação.

As Figuras 5.15, 5.16 e 5.17 mostram gráficos de $|\vec{\Theta}| \times \rho_l$ para $L = 30, 45$ e 60 , respectivamente. As simulações começaram e terminaram no extremo da fase ordenada, e os *loops* sempre se dão no sentido horário. Os pontos foram simulados a intervalos de $\Delta\rho_l = 0,02$, tomando-se em cada um 50 medições para as médias (separadas por um pequeno intervalo de decorrelação). Nota-se que, para $\lambda = -3,6$, embora seja claramente uma região de transição de segunda ordem, as curvas de ida e volta não coincidem perfeitamente, principalmente nas redes maiores. Isso se deve à insuficiência do intervalo entre medições para decorrelacionar os estados. Porém, um tempo de decorrelação muito grande poderia eliminar a histerese para o regime de transições descontínuas, obrigando a manter um ajuste fino entre os dois fatores.

Pode-se notar a falta de clareza nas figuras em se definir o ponto crítico, embora o comportamento seja semelhante para os três tamanhos de rede. Para $\lambda = -3,6$, observa-se uma pequena histerese, embora fique ligeiramente mais estreita para as redes maiores. Talvez, no limite $L \rightarrow \infty$, a curva se feche e não haja histerese, embora fosse necessário simular redes maiores para tirar conclusões dessa natureza. O tempo necessário para tal seria proibitivo em relação ao disponível; logo, a melhor estimativa segura do ponto tricrítico pela análise da histerese para $\eta = 1$ é

$$T(\eta = 1) = \{\rho_l = 7,2 \pm 0,9, \lambda = 4,0 \pm 0,4\} . \quad (5.9)$$

Esta estimativa é consistente com a obtida via análise da relaxação; porém, é menos precisa. Por conseguinte, a estimativa final de localização do ponto tricrítico é dada por (5.8).

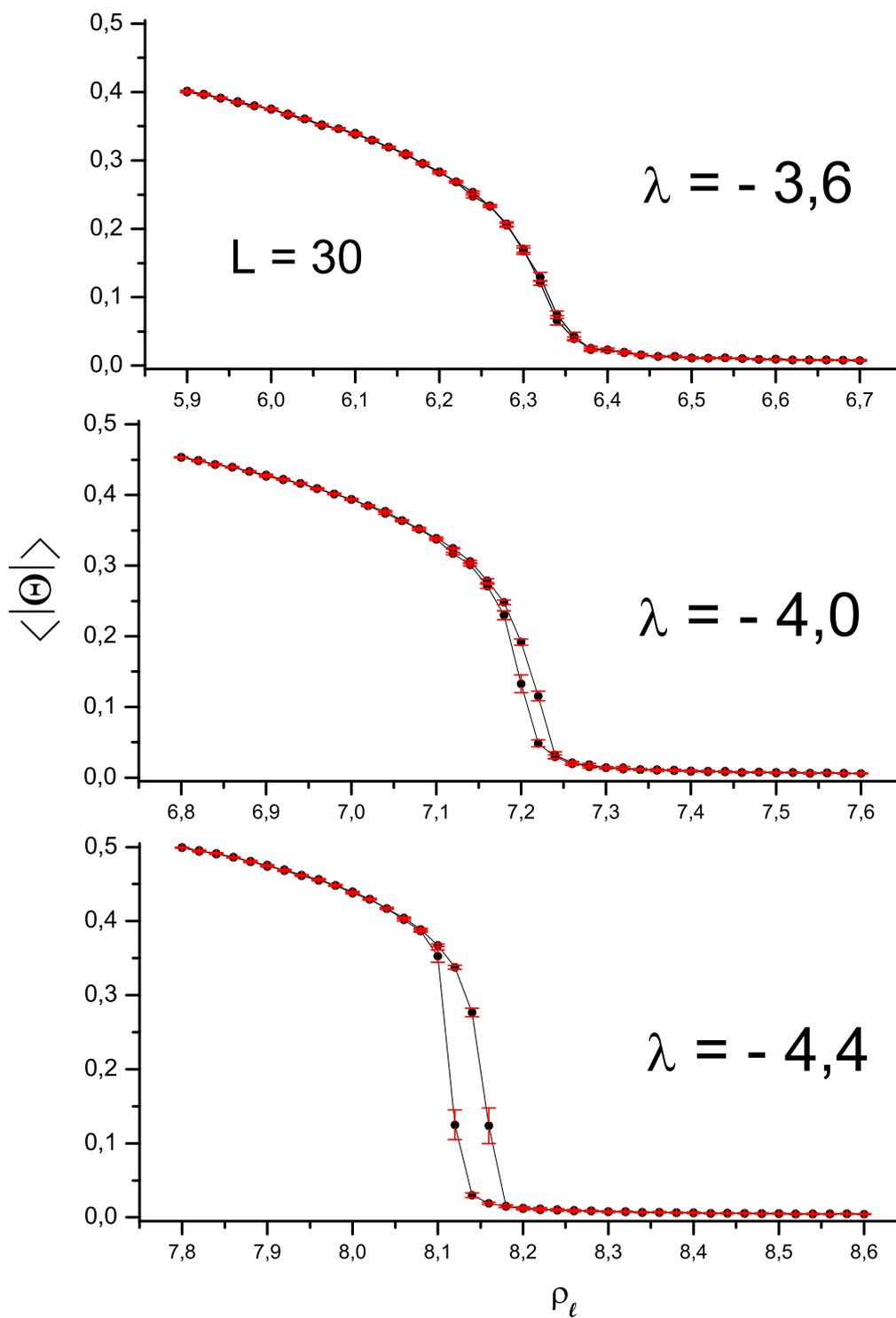


Figura 5.15: Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_t$ para $L = 30$ para três valores de λ . Constatase que o ponto tricrítico está mais próximo de $\{\lambda = -4, 0, \rho_t = 7, 2\}$.

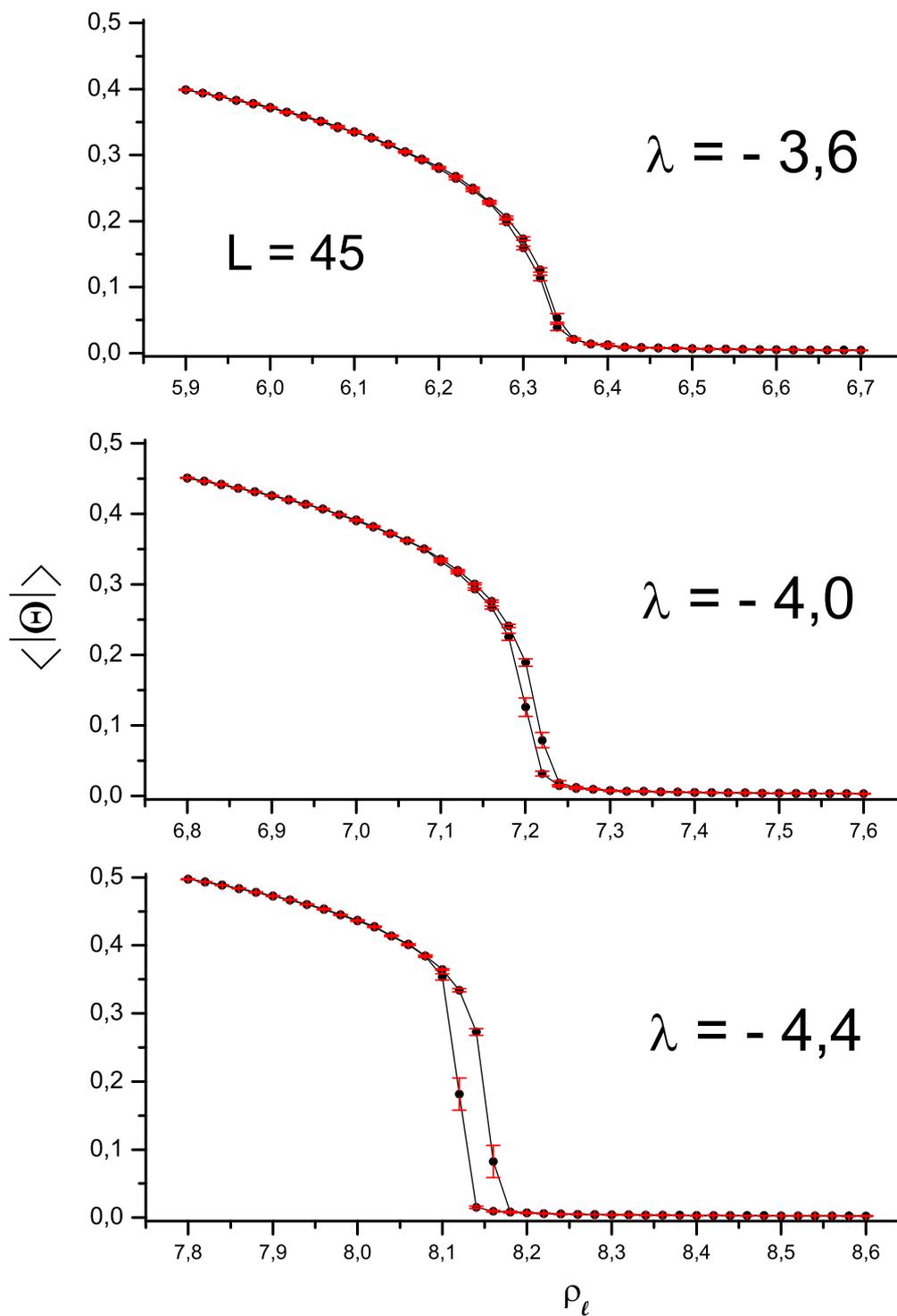


Figura 5.16: Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 45$ para três valores de λ . O comportamento é semelhante ao da rede $L = 30$ e as conclusões são as mesmas.

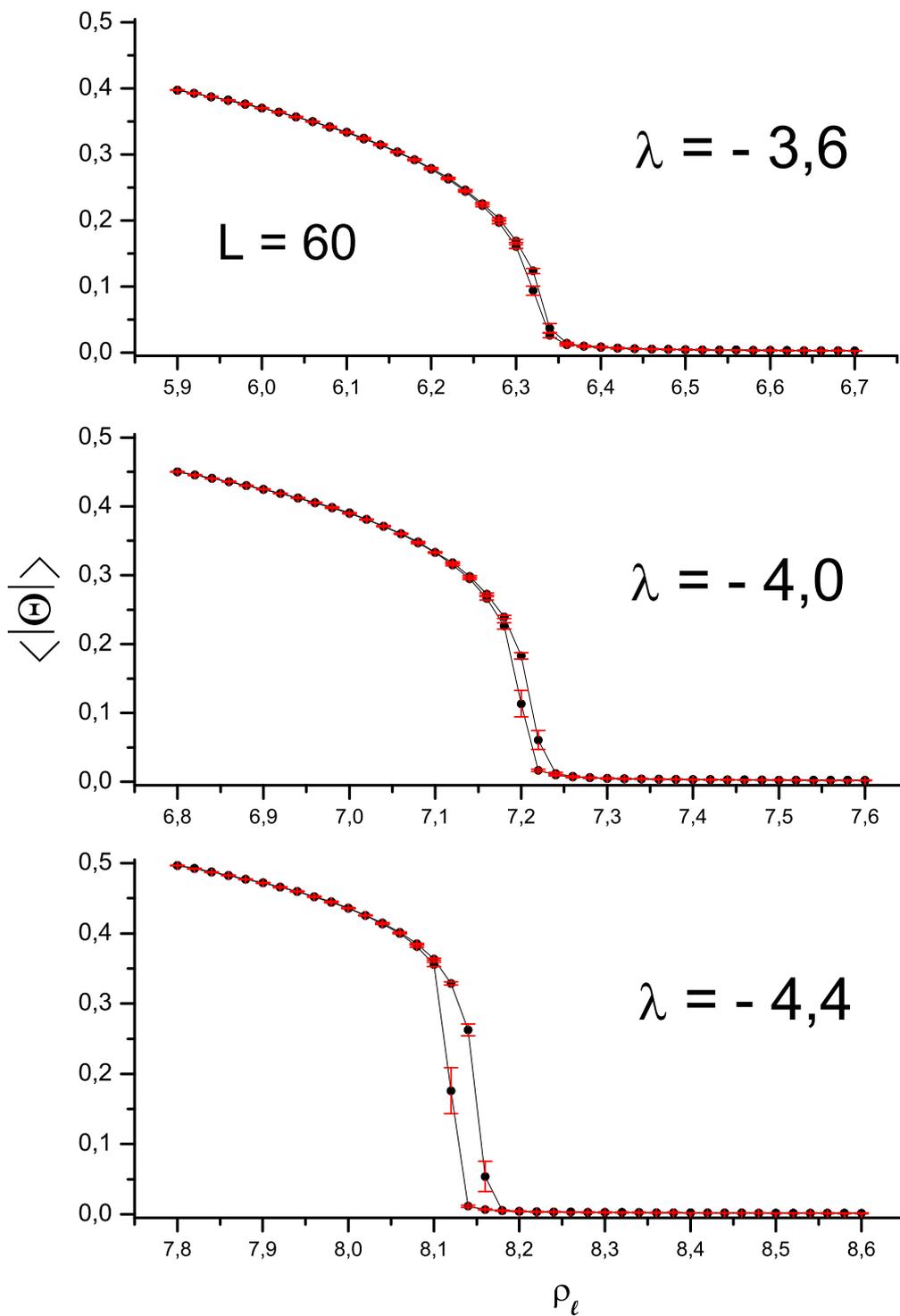


Figura 5.17: Análise de histerese em $\langle |\vec{\Theta}| \rangle \times \rho_l$ para $L = 60$ para três valores de λ . O comportamento é semelhante ao das redes $L = 30, 45$ e as conclusões são as mesmas.

5.4 Análise de FSS

Tendo sido localizado o ponto tricrítico para $\eta = 1$, parte-se agora para a análise de escalonamento finito nos dois regimes de transição de fase. Na região de primeira ordem, um FSS é feito perto do ponto tricrítico, e seu comportamento é comparado com o esperado para este regime de transição. Serão analisadas também duas regiões de transição contínua distintas, uma perto e outra longe do ponto tricrítico, a fim de comparar seus expoentes críticos, e com os expoentes que constam na literatura.

5.4.1 FSS para transição de primeira ordem

Começamos as análises de escalonamento finito com uma região de transição descontínua fraca (próxima ao ponto tricrítico), onde $\lambda = -4, 4$, $\eta = 1$. Segundo os resultados das análises de histerese e de relaxação, esta região claramente possui uma transição de primeira ordem. Nas Figuras 5.18 e 5.19, o comportamento do parâmetro de ordem, do cumulante de Binder e da suscetibilidade mostram um efeito de tamanho finito bastante sensível ao tamanho da rede, como esperado para este tipo de transição. Observa-se que, já para $L = 21$, as grandezas acima apresentam um comportamento bastante pronunciado⁵.

Em seguida, constrói-se a função de escala da suscetibilidade para transições de primeira ordem (3.23) para os vários tamanhos de rede, e o resultado final é mostrado na Figura 5.20. A previsão do comportamento para a transição é confirmada, podendo-se afirmar que a transição é de fato de primeira ordem.

No entanto percebe-se, observando a Figura 5.20, que as estimativas para os tamanhos de rede maiores ($L = 18, 21$) sofrem desvios em relação às funções de escala para as redes menores. Isto se deve ao fato de que, próximo à região crítica, o tempo de relaxação característico para o sistema realizar um “salto” da fase simétrica para a quebrada (ou vice-versa) utilizando algoritmos locais aumenta exponencialmente com o tamanho da rede [31] – efeito eventualmente referido como *supercritical slowing down* –, dado que a contribuição na ação da região entre os estados de equilíbrio é da ordem de L^z , com $z > 0$. Este fenômeno também implica que o sistema passa muito pouco tempo nesta região entre as configurações de equilíbrio, afetando a qualidade estatística da simulação. Tudo isso afeta de forma sensível a ergodicidade do sistema e a qualidade

⁵Neste trabalho, as barras de erro das figuras, quando forem menores ou da ordem de tamanho dos pontos nos gráficos, são omitidas.

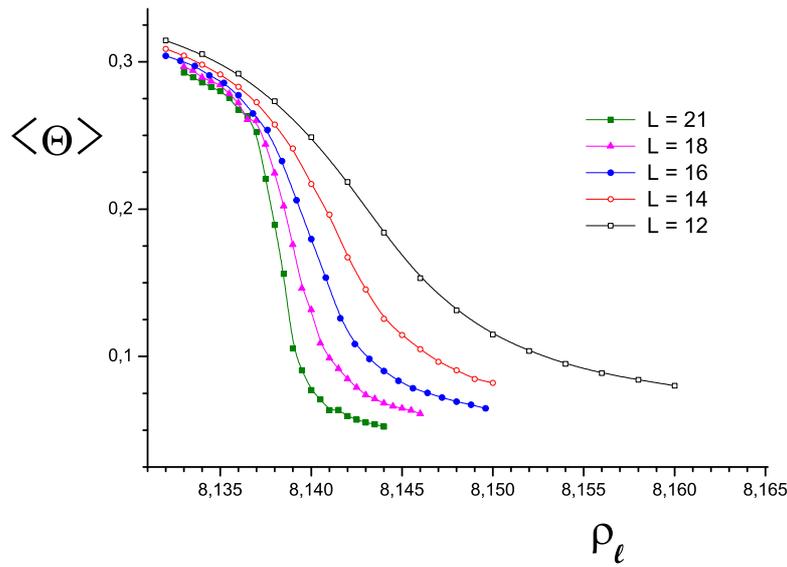
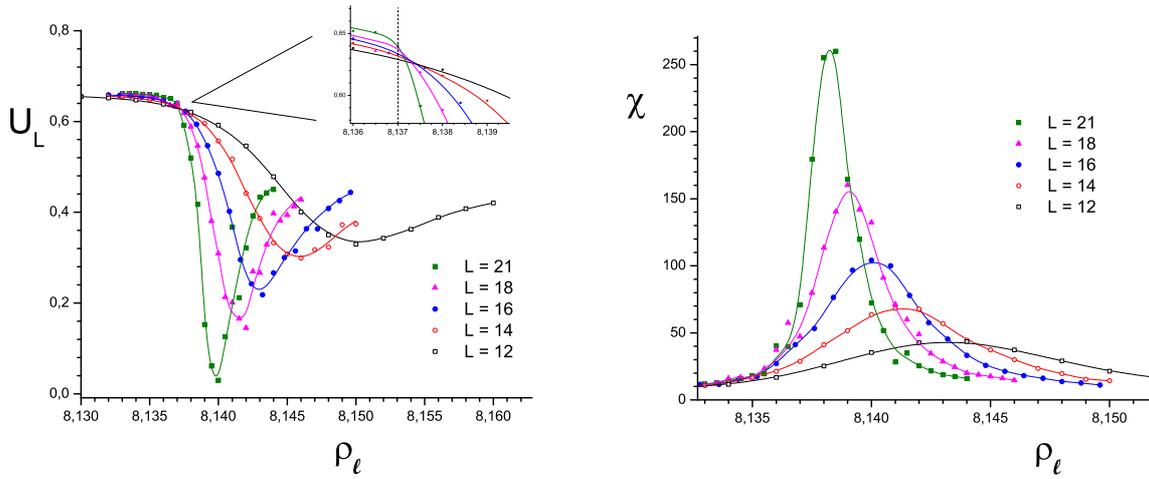


Figura 5.18: Comportamento do parâmetro de ordem para $L = 12, 14, 16, 18, 21$, em uma região de transição de fase de primeira ordem fraca ($\lambda = -4,4$, $\eta = 1$) próxima ao ponto tricrítico.

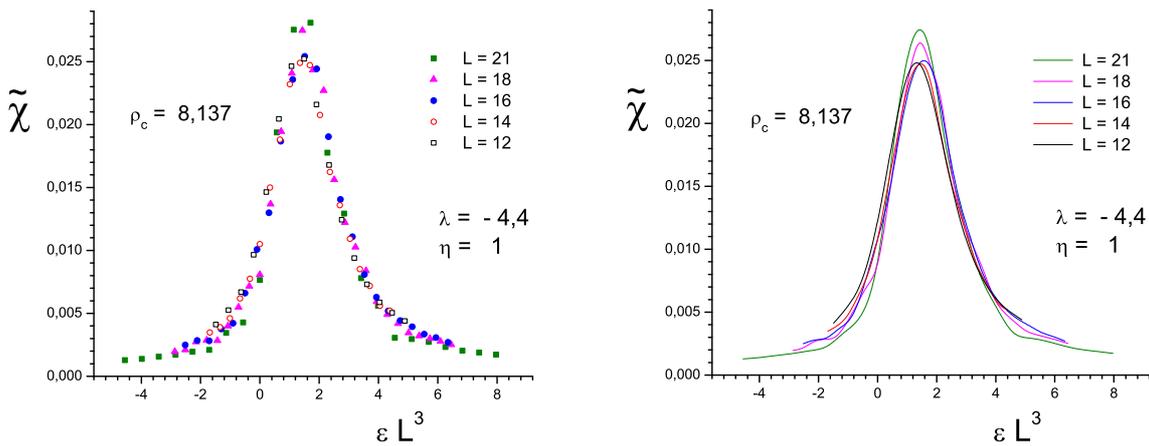
das estimativas, e tempos de simulação extremamente elevados são necessários para suplantar estas dificuldades. Apesar de ter sido utilizado o algoritmo de Wolff (não-local) nas simulações, aparentemente o problema não foi completamente suplantado. Outros algoritmos mostram-se mais eficientes ao simular transições de primeira ordem, como o amostramento multicanônico [31], onde mostra-se ser possível reduzir o tempo de relaxação característico mencionado acima para uma lei de potência em L .



(a)

(b)

Figura 5.19: Comportamento do cumulante de Binder (a) para $L = 12, 14, 16, 18, 21$, e suscetibilidade (b) em uma região de transição de fase de primeira ordem ($\lambda = -4,4$, $\eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico.



(a) Pontos simulados

(b) fitting B-spline do **Origin 7.5**.

Figura 5.20: Comportamento da função de escala da suscetibilidade mostrada na Fig. 5.19(b), (região de transição de fase de primeira ordem) usando (3.23).

5.4.2 Estimativas dos expoentes ν , γ e β

Escrevemos abaixo todas as relações de escala a serem utilizadas (capítulo 3), aplicadas ao modelo de estudo no presente trabalho, para estimar os expoentes críticos

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dU_L}{d\rho_l} \right|_{(\rho_l)_c} &\propto L^{1/\nu} \\
 \langle |\vec{\theta}| \rangle_L([\rho_l]_c) &\propto L^{-\beta/\nu} \\
 \chi_L([\rho_l]_c) &\propto L^{\gamma/\nu} \\
 \chi_L^{max} &\propto L^{\gamma/\nu},
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

e para estimar as funções de escala do parâmetro de ordem e da suscetibilidade

$$\begin{aligned}
 \tilde{\chi}(L^{1/\nu}\epsilon) &= L^{-\gamma/\nu} \chi_L(\epsilon) \\
 \langle \tilde{\Theta} \rangle(L^{1/\nu}\epsilon) &= L^{\beta/\nu} \langle \Theta \rangle_L(\epsilon),
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

onde ϵ é o parâmetro reduzido definido na segunda linha de (3.7). Posteriormente pode-se usar

$$(\rho_l)_{\chi^{max}} - (\rho_l)_c \propto L^{-1/\nu} \tag{5.12}$$

para, usando o valor obtido para o expoente ν , estimar o ponto crítico $(\rho_l)_c$ e compará-lo com a estimativa obtida pelo cumulante de Binder originalmente.

Para fazer uso das relações acima, estimamos as grandezas $\langle |\vec{\Theta}| \rangle_L(\rho_l)$, $\chi_L(\rho_l)$, $U_L(\rho_l)$ e $dU_L/d\rho_l$ para valores de ρ_l situados na região crítica. Depois, busca-se os pontos de interseção do cumulante para estimar $(\rho_l)_c$, a ser utilizado nas relações de escala.

Estimar $dU_L/d\rho_l$ através da diferenciação da curva do cumulante de Binder não é adequado, já que para obter estimativas razoáveis seria necessário calcular U_L para valores muito próximos de ρ_l , o que exigiria tempos de simulação proibitivamente altos. Ao invés disso, calcula-se a derivada do cumulante diretamente nas simulações, da seguinte forma: Deriva-se a expressão (3.25), obtendo

$$\frac{dU_L}{d\rho_l} = \frac{1}{3\langle \vec{\Theta}^2 \rangle^2} \left\{ 2 \frac{\langle \vec{\Theta}^4 \rangle}{\langle \vec{\Theta}^2 \rangle} \frac{d\langle \vec{\Theta}^2 \rangle}{d\rho_l} - \frac{\langle d\vec{\Theta}^4 \rangle}{d\rho_l} \right\}. \tag{5.13}$$

Derivando em seguida a expressão (2.10) com a fonte externa $j = 0$ para a grandeza $\vec{\Theta}^{2k}$,

$$\vec{\Theta}^{2k} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{n}} \vec{\theta}^{2k}(\vec{n}) \quad k \in \mathfrak{R}, \tag{5.14}$$

e com a ação dada por (2.22), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\vec{\Theta}^{2k}\rangle}{d\rho_l} &= -\frac{1}{Z_E} \left\{ \int \mathcal{D}\vec{\theta} \vec{\Theta}^{2k} \Psi e^{-S_E} + \overbrace{\frac{1}{Z_E} \frac{dZ_E}{d\rho_l}}^{\langle\Psi\rangle} \int \mathcal{D}\vec{\theta} \vec{\Theta}^{2k} e^{-S_E} \right\} \\ &= \langle\vec{\Theta}^{2k}\rangle\langle\Psi\rangle - \langle\vec{\Theta}^{2k} \Psi\rangle, \end{aligned} \quad (5.15)$$

onde $\Psi \equiv \sum_{\vec{n}} \vec{\theta}^{\vec{n}}$. Usando a expressão acima para $k = 1$ e 2 , a equação (5.13) fica [9]:

$$\frac{dU_l}{d\rho_l} = (1 - U_L) \left\{ \langle\Psi\rangle - 2 \frac{\langle\vec{\Theta}^2 \Psi\rangle}{\langle\vec{\Theta}^2\rangle} + \frac{\langle\vec{\Theta}^4 \Psi\rangle}{t\langle\vec{\Theta}^4\rangle} \right\}. \quad (5.16)$$

A susceptibilidade do campo, definida como

$$\chi \equiv \frac{\partial\langle|\vec{\Theta}|\rangle}{\partial j}, \quad (5.17)$$

pode ser estimada [32, 31] pela expressão

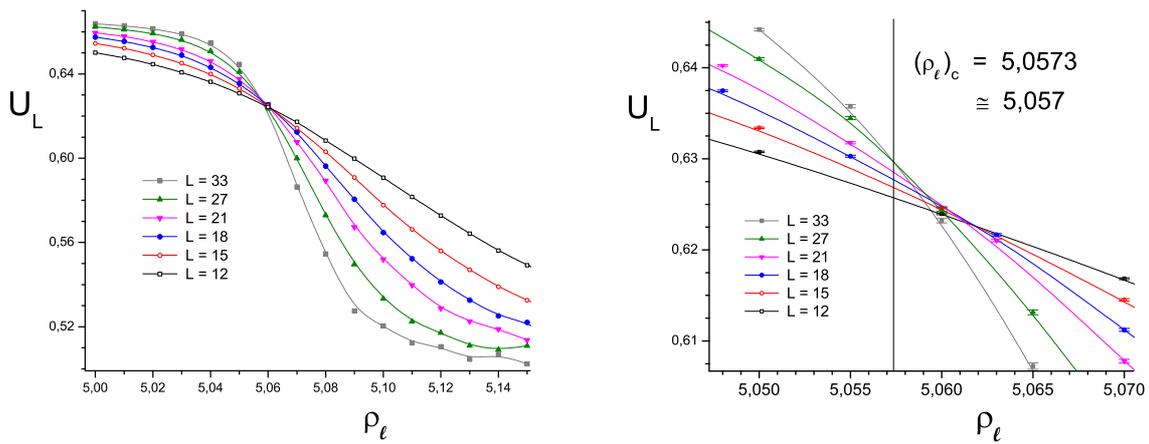
$$\chi = V \left(\langle\vec{\Theta}^2\rangle - \langle|\vec{\Theta}|^2\rangle \right), \quad (5.18)$$

a qual pode ser deduzida utilizando-se novamente a expressão (2.10).

Escolheu-se primeiramente uma região de transição de segunda ordem próxima ao ponto tricrítico, determinada pelos valores dos parâmetros $\lambda = -3$ e $\eta = 1$. As estimativas são feitas para tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 , e o algoritmo escolhido para tal é o algoritmo de Wolff com sobre-relaxação. Na figura 5.21 o comportamento de U_L é plotado contra ρ_l . Nota-se o cruzamento das curvas para os diferentes tamanhos de rede na região crítica. Levando em conta correções nas interseções de cumulantes entre tamanhos diferentes de redes [29, 30], o critério utilizado para estimar o ponto crítico é considerar o cruzamento entre as curvas referentes aos maiores tamanhos de rede. Neste caso, isto corresponde a considerar o cruzamento entre as curvas de $L = 33$ com $L = 27$. Consideramos que a acuidade desta estimativa se limite a quatro algarismos significativos, logo, obtemos para o valor de ρ crítico

$$(\rho_l)_c = 5,0568 \approx 5,057. \quad (5.19)$$

As curvas para a susceptibilidade e para a derivada do cumulante do campo estão desenhadas na Figura 5.22. Nota-se que tanto o máximo da susceptibilidade quanto o mínimo da derivada do cumulante aproximam-se do ponto crítico ao se aumentar o tamanho da rede.



(a) Comportamento geral do cumulante em uma região mais ampla de ρ_l . (b) Região crítica. A estimativa de $(\rho_l)_c$ corresponde à linha vertical tracejada.

Figura 5.21: Comportamento do cumulante de Binder em uma região de transição de fase de segunda ordem ($\lambda = -3$, $\eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico.

Em seguida, são realizadas novas simulações da magnetização, da suscetibilidade, do cumulante e de sua derivada no ponto crítico (5.19) para os diferentes tamanhos de rede, a fim de realizar os escalonamentos (5.10). Os resultados, mostrados nas Figuras (5.23) e (5.24), são

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{\nu} &= 0,5408(7) \\ \frac{\gamma}{\nu} &= 1,790(3) \\ \frac{1}{\nu} &= 1,310(9) . \end{aligned} \tag{5.20}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \beta &= 0,413(3) \\ \gamma &= 1,366(12) \\ \nu &= 0,763(5) . \end{aligned} \tag{5.21}$$

Vale lembrar que a imprecisão das estimativas (5.20) vem dos ajustes lineares pelo método de mínimos quadrados, realizados pelo **Origin 7.5**. Estas estimativas não são seguras, pois não englobam outras fontes de erros advindas da estimativa do ponto crítico. Para a análise de escalonamento seguinte, será feita uma análise mais consistente de erros.

Finalmente, de posse das estimativas dos expoentes críticos, constroem-se as funções de escala (5.11), mostradas na Figura 5.25 para diferentes tamanhos de rede. Observa-se, com boa precisão,

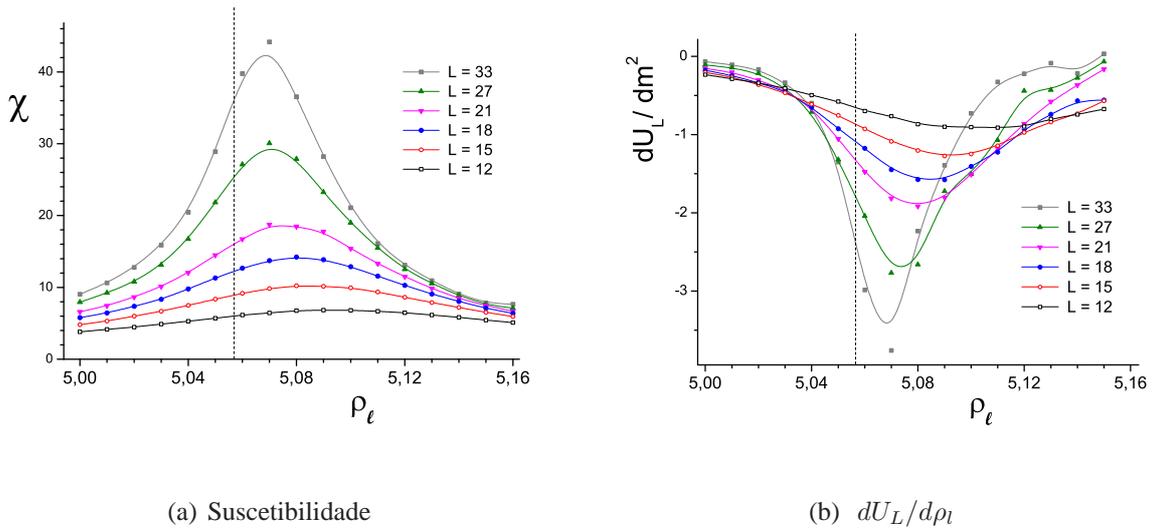
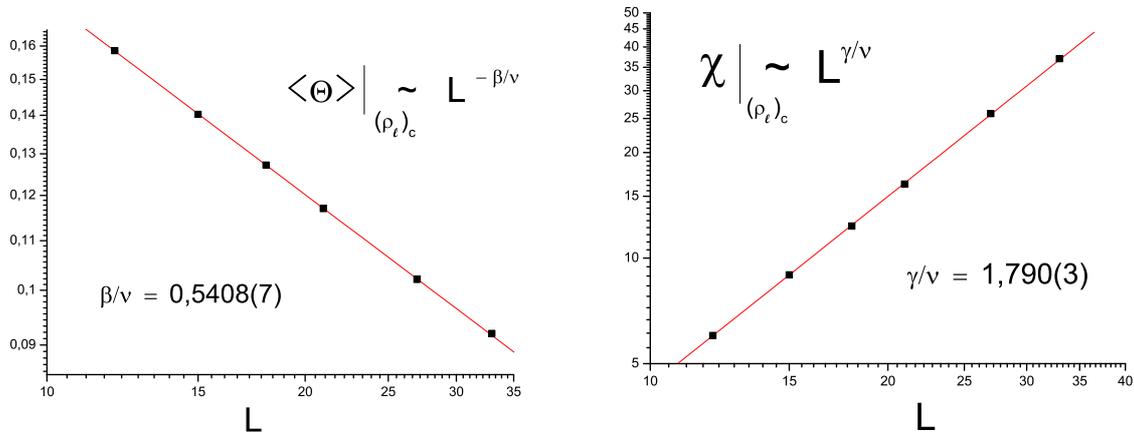


Figura 5.22: Região de transição de fase de segunda ordem ($\lambda = -3$, $\eta = 1$), próxima ao ponto tricrítico. A linha vertical tracejada corresponde à estimativa do ponto crítico pelo cumulante.

que as curvas coincidem entre si. Ao se afastar da região crítica, os pontos para a função de escala do parâmetro de ordem começam a divergir entre si. Esse resultado é esperado, devido ao fato de as leis de escala perderem a validade quando o comprimento de correlação diminui a valores finitos (subseção 3.1.1). No caso da suscetibilidade (Fig. 5.25(b)), a construção da função de escala é mais sensível aos erros nas estimativas de $\chi(\rho_l)$, principalmente próximo ao pico. Nesta região, pode-se observar que os pontos referentes aos tamanhos maiores de rede apresentam grandes desvios, devido ao fato de terem sido estimados com menos estatística (menos passos de MC), dado o maior gasto de tempo computacional para cada passo, proporcional ao volume (L^3) da rede.



(a) Escalonamento de (5.10) (segunda linha). O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de β/ν .

(b) Escalonamento de (5.10) (terceira linha). O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de γ/ν .

Figura 5.23: Escalonamento da magnetização (esquerda) e da suscetibilidade (direita) no ponto $(\rho_l)_c = 5,0568$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 , em escala logarítmica.

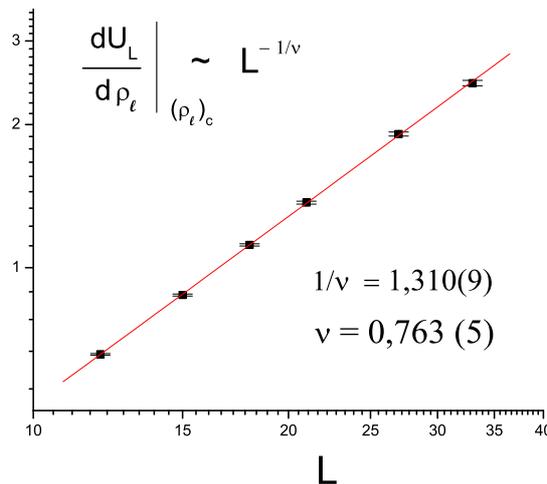
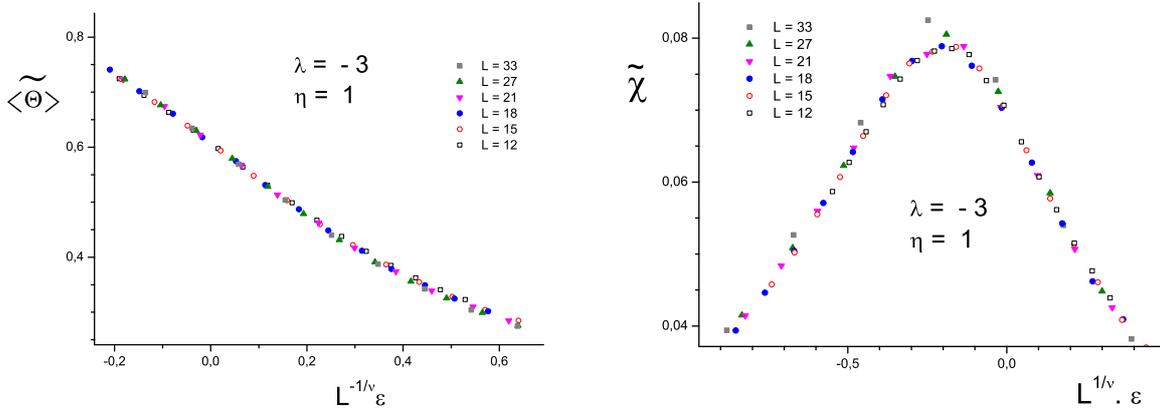


Figura 5.24: Escalonamento de (5.10) (primeira linha), no ponto $\rho_l = 5,0568$, $\lambda = -3$, $\eta = 1$ para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 , em escala logarítmica. O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de β/ν .



(a) Função de escala para o parâmetro de ordem (5.11) (segunda linha). Os pontos começam a divergir entre si ao se afastar da região crítica ($\epsilon = 0$).
 (b) Função de escala para o parâmetro de ordem (5.11) (segunda linha). O resultado mostra uma imprecisão maior em relação à função do parâmetro de ordem (ao lado), principalmente para redes maiores.

Figura 5.25: Funções de escala universais para o parâmetro de ordem (esquerda) e a suscetibilidade (direita) nas proximidades do ponto crítico $(\rho_l)_c = 5,0568$ com $\lambda = -3$, $\eta = 1$, para redes $L = 12, 15, 18, 21, 27$ e 33 . Foram utilizadas as estimativas (5.20) para os expoentes críticos.

Pode-se ainda testar a relação de hiperescalonamento (3.22), a fim de verificar a consistência das estimativas entre si (o resultado deve ser consistente com zero) :

$$0,5408(7) + \frac{1}{2}1,790(8) - \frac{3}{2} = -0,064(5) . \quad (5.22)$$

Observa-se que, no entanto, o resultado não é consistente com zero. Isto pode dever-se à não consideração de todas as fontes de erro, sobretudo a da estimativa do ponto crítico. Contudo, a hipótese de erro sistemático não está descartada, e mais simulações, próximas e afastadas do ponto tricrítico, são necessárias para analisar este caso.

Os valores estimados dos expoentes para esta região do espaço de parâmetros ($\lambda = -3$, $\eta = 1$) são comparados com os da literatura na tabela 5.3. Nota-se uma clara divergência com a literatura, maior do que as estimativas de erros. Isto evidencia a existência de correções de escala nos expoentes críticos, supostamente existentes ao aproximar-se do ponto tricrítico [21].

A fim de evitar essas correções, analisamos em seguida uma região de transição contínua consideravelmente afastada do ponto tricrítico, definida pelos parâmetros

$$\lambda = 25 , \eta = 0 . \quad (5.23)$$

Efetivamente, ao anular a constante de acoplamento sêxtica, estamos considerando a teoria ϕ^4 , ou o modelo de G-L (não estendido).

A Figura 5.26(a) permite uma estimativa do ponto crítico análoga ao caso anterior. Nesta, o cruzamento entre as curvas das redes maiores ocorre em $\rho \approx -44,914$. Limitando novamente a precisão em quatro algarismos significativos, tem-se

$$(\rho_l)_c = -44,914 \approx -44,91 . \quad (5.24)$$

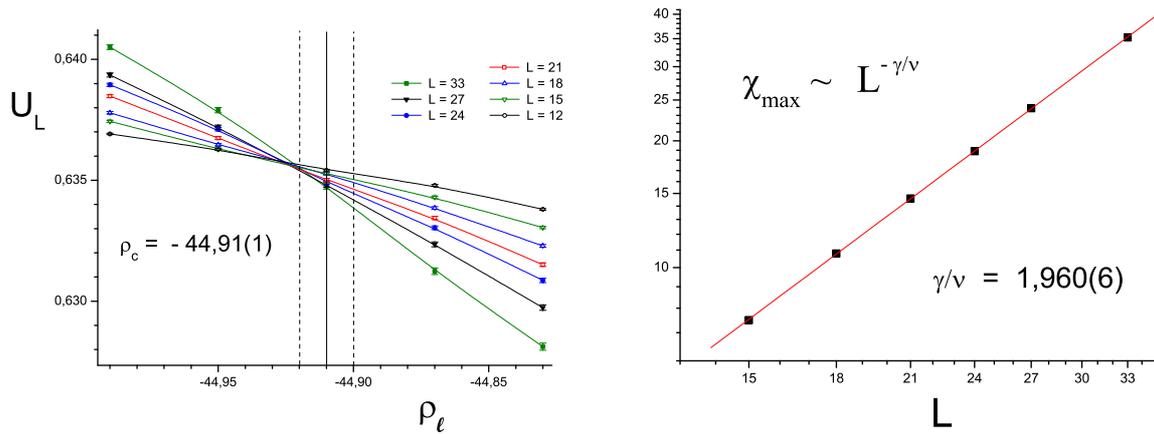
Devido à falta de uma estimativa quantitativa do erro na expressão acima, considera-se na figura uma imprecisão no último algarismo significativo ($\Delta\rho = 0,01$), delimitada por linhas verticais tracejadas.

Para a mesma simulação, um escalonamento do máximo da suscetibilidade (quarta linha de (5.10)) foi realizado e mostrado na Figura 5.26(b). O resultado obtido foi

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1,960(6) , \quad (5.25)$$

no qual o erro novamente refere-se ao desvio padrão do ajuste (método dos mínimos quadrados).

A seguir, novas simulações são feitas no ponto crítico analogamente à região anterior, incluindo também, porém, os pontos delimitados pelas barras de erro verticais da Figura 5.26(a), como é



(a) Cumulante de Binder. A estimativa de $(\rho_l)_c$ corresponde à linha vertical cheia, enquanto a incerteza é representada pelas linhas tracejadas.

(b) Escalonamento de (5.10) (quarta linha). O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de γ/ν .

Figura 5.26: Região de transição de segunda ordem ($\lambda = 25$, $\eta = 0$), afastada do ponto tricrítico.

mostrado nas figuras 5.27 e 5.28. Todos os escalonamentos e ajustes são realizados então para os três pontos, consistindo desta forma em uma maneira de propagar o erro em (5.24) para as estimativas dos expoentes, de forma semelhante à realizada em [9]. Os desvios obtidos são consistentes com a imprecisão de cada ajuste, exceto para o caso da magnetização, onde os primeiros são aproximadamente 3 vezes maiores do que o erro nos ajustes; logo, consideramos os desvios uma boa estimativa final para os erros dos expoentes calculados. Tem-se então, para as estimativas diretas dos expoentes dos escalonamentos,

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\gamma}{\nu}\right]^{max} &= 1,960(6) \\
 \frac{\gamma}{\nu} &= 1,975(8) \\
 \frac{\beta}{\nu} &= 0,5222(66) \\
 \frac{1}{\nu} &= 1,336(39),
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

onde a primeira linha refere-se ao resultado (5.25). Os erros correspondem sempre ao maior desvio verificado para a estimativa. As duas estimativas de γ/ν estão de acordo aproximadamente⁶ dentro de 1Δ . Escolhemos a estimativa obtida pelo escalonamento no ponto crítico (segunda linha), dada a estimativa mais confiável do erro neste caso.

⁶ Δ corresponde à soma das estimativas de erro dos valores (no caso, de γ/ν).

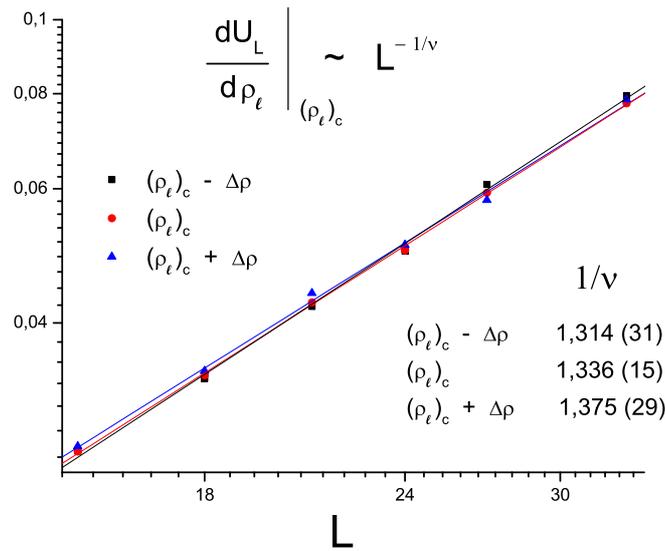


Figura 5.27: Escalonamento de (5.10) (primeira linha) no ponto $\rho_l = -44,91$, $\lambda = 25$, $\eta = 0$ para redes $L = 15, 18, 21, 24, 27, 33$. O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de $1/\nu$.

Os resultados individuais para os expoentes críticos nesta região do espaço de parâmetros ($\lambda = 25$, $\eta = 0$) ficam

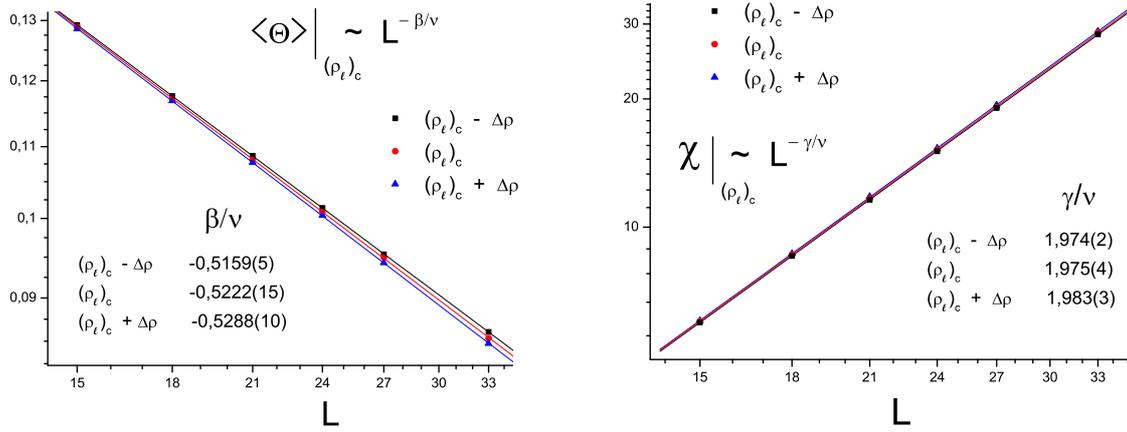
$$\begin{aligned}
 \beta &= 0,391(17) \\
 \gamma &= 1,48(5) \\
 \nu &= 0,749(23) \\
 \eta &= 0,025(8), \tag{5.27}
 \end{aligned}$$

onde o expoente η é obtido da primeira linha de (3.21).

Pode-se ainda conferir a consistência dos resultados através da quarta linha da relação (5.12), usando a localização dos picos da suscetibilidade (ρ_{max}) obtidos na primeira simulação e a estimativa do expoente ν , para assim estimar novamente $(\rho_l)_c$. O resultado deve ser compatível com a estimativa (5.24). Dessa forma, na Figura 5.29 é obtido o ponto crítico, pela estimativa do coeficiente linear de $\rho_{max} \times L^{-1/\nu}$. O resultado obtido,

$$(\rho_l)_c = -44,914 \approx -44,90(4), \tag{5.28}$$

está de pleno acordo com (5.24).



(a) Escalonamento de (5.10) (segunda linha). O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de β/ν .

(b) Escalonamento de (5.10) (terceira linha). O coeficiente angular do ajuste linear corresponde à estimativa de γ/ν .

Figura 5.28: Escalonamento da magnetização (esquerda) e da suscetibilidade (direita) no ponto $(\rho_l)_c = -44,91$, $\lambda = 25$, $\eta = 0$ para redes $L = 15, 18, 21, 24, 27$ e 33 , em escala logarítmica.

Como último teste, a relação de hiperescalonamento (3.22) é calculada para este regime de transição, utilizando para γ/ν a estimativa (5.25)

$$0,5222(66) + \frac{1}{2}1,960(6) - \frac{3}{2} = 0,0022 \pm 0,0096 \quad (5.29)$$

e a estimativa dada na segunda linha de (5.26)

$$0,5222(66) + \frac{1}{2}1,975(8) - \frac{3}{2} = 0,0097 \pm 0,0106. \quad (5.30)$$

Ambas as estimativas são consistentes com zero, embora o valor escolhido como estimativa final do expoente γ/ν (5.26) tenha se mostrado menos acurado no cálculo acima.

Na figura 5.30 são mostradas as funções de escala (5.11) para esta região de transição, utilizando-se as estimativas (5.26) e (5.24). A precisão obtida mostrou-se grande em todo o intervalo considerado de ρ_l , principalmente para $\langle \tilde{\Theta} \rangle$.

Como resultado final desta seção, abaixo foram dispostas na tabela 5.3 as principais estimativas feitas na literatura para os expoentes críticos da classe de universalidade $O(4) 3d$, utilizando o modelo escalar ou o de Heisenberg.

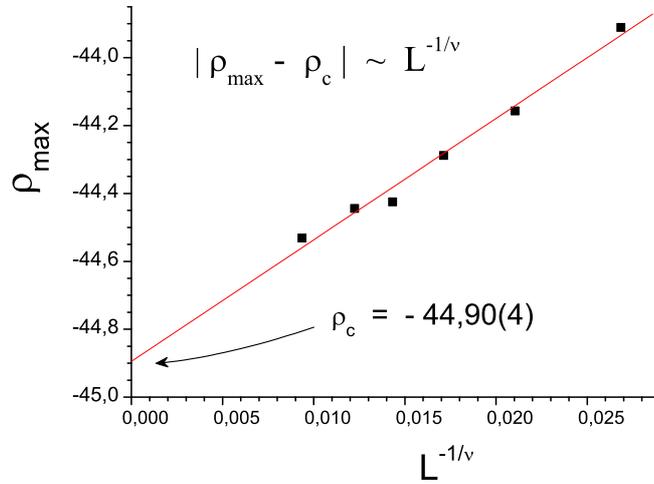
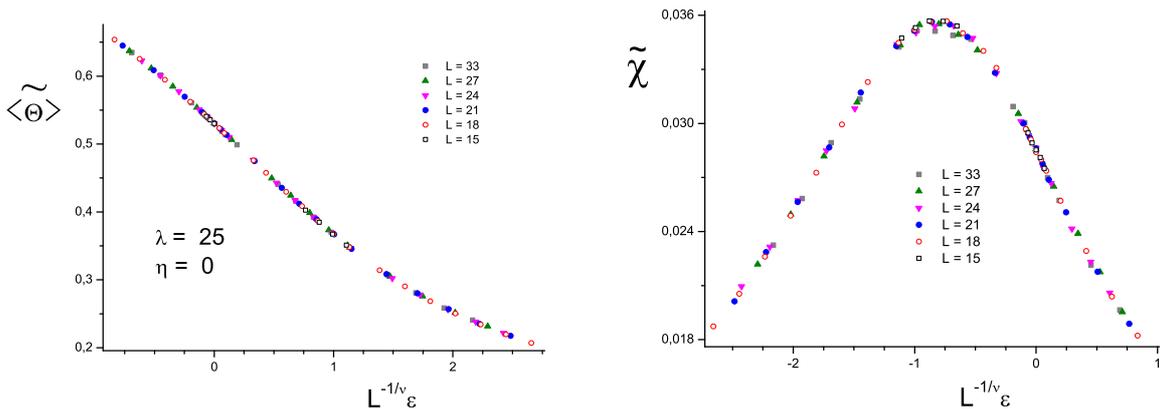


Figura 5.29: Escalonamento de (5.12). O coeficiente linear fornece a estimativa de $(\rho_l)_c$. O resultado é consistente com o obtido em (5.24).



(a) Função de escala do parâmetro de ordem.

(b) Função de escala da suscetibilidade.

Figura 5.30: Funções de escala análogas às da Figura 5.25 para $\lambda = 25$, $\eta = 0$, próximas do valor crítico $(\rho_l)_c = -44,91$. Foram usadas as estimativas (5.26) para os expoentes críticos.

Método	ref.	ν	γ	β	η
MC	este trabalho ^a	0,763(5)	1,366(12)	0,413(3)	0,210(3)
MC	este trabalho ^b	0,749(23)	1,48(5)	0,391(17)	0,025(8)
MC	[10]	0,749(2)	1,471(5)*	0,388(11)*	0,0365(10)
MC	[49]	0,739(2)*	1,461(6)*	0,3785(6)	0,024(2)*
MC	[45]	0,7525(10)	1,476(3)*	0,391(3)*	0,0384(12)
MC	[9]	0,7479(90)	1,477(18)	0,3836(46)	0,0254(38)
AT	[46]	0,750(3)	1,474(4)	0,388(6)*	0,035(9)*
expansão- ϵ	[47]	0,737(8)	1,447(18)*	0,382(6)*	0,0360(40)
T.P. d=3	[47]	0,741(6)	1,456(15)*	0,384(5)*	0,0350(45)

Tabela 5.3: Estimativas de expoentes críticos encontradas na literatura (todas as referências são encontradas em [10]) e obtidas neste trabalho (primeira linha) para a classe de universalidade $O(4)$ em $d = 3$. Os expoentes marcados com * foram calculados a partir de outros expoentes fornecidos nas referências, usando as relações de hiperescala (3.21) e (3.22). ^a Expoentes calculados próximo ao ponto tricrítico ($\lambda = -3$, $\eta = 1$). ^b Expoentes calculados longe do ponto tricrítico ($\lambda = 25$, $\eta = 0$).

5.5 Diagrama de fases

Para finalizar a análise, o diagrama de fases obtido da teoria $\phi^6 O(4)$ é exposto na Figura 5.31, para valores do parâmetro sêxtico $\eta = 0$ e $\eta = 1$. No primeiro caso, correspondente à teoria ϕ^6 , somente há transições contínuas, enquanto no segundo os dois regimes de transição são delimitados pelo ponto tricrítico determinado na seção 5.3.

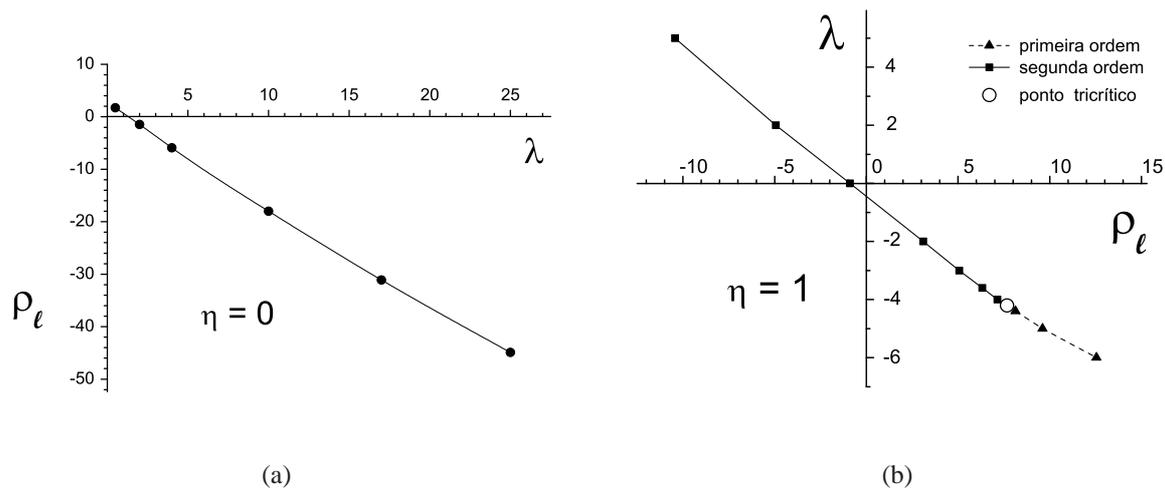


Figura 5.31: Diagrama de fases da teoria $\phi^6 O(4)$ em três dimensões, para $\eta = 0$ (esquerda) e $\eta = 1$ (direita).

Capítulo 6

Conclusão e perspectivas

Neste trabalho foram estudadas as propriedades de teorias escalares com simetria interna $O(4)$ em três dimensões, através de simulações de MC do modelo de G–L estendido com interações do tipo $\lambda\phi^4 + \eta\phi^6$. A implementação do método para o modelo escalar ϕ^4 foi verificada, através da comparação com alguns resultados prévios de [42].

O ponto tricrítico do modelo, onde ocorre a junção das linhas de transição de primeira e segunda ordens, foi localizado para $\eta = 1$ através de duas formas distintas (análise de histerese e evolução das condições iniciais), e os resultados obtidos foram compatíveis entre si.

Tendo separado as regiões com diferentes regimes de transição, foram feitas análises de FSS em duas regiões próximas ao ponto tricrítico, porém, de ordens diferentes de transição, assim como em uma região de transição contínua longe do ponto tricrítico (caracterizando uma transição “forte” de segunda ordem).

O resultado obtido para o escalonamento (3.23) na região crítica de primeira ordem está de acordo com o previsto [28], embora, como nesta referência, a qualidade do resultado para a função de escala (Figura 5.20) não tenha sido muito boa, especialmente para redes maiores. Para obter resultados mais precisos, seriam necessários tempos de simulação maiores e/ou outros algoritmos mais eficientes do que o de Metropolis ou de Wolff para este tipo de transição (p. ex., algoritmo multicanônico).

Nas regiões de transição de segunda ordem, os expoentes críticos dados pelas equações (3.6) e (3.20) foram estimados através da análise de FSS, e os resultados comparados com outros da literatura na Tabela 5.3. Longe do ponto tricrítico, os expoentes calculados neste trabalho estão plenamente consoantes com os da literatura, especialmente em [10, 9]. As funções de escala da magnetização e da suscetibilidade também foram obtidas com sucesso, confirmando a grande

acurácia na determinação dos expoentes críticos. Próximo ao ponto tricrítico, porém, observam-se desvios significativos nos valores dos expoentes, acima das estimativas de erro. Apesar de não ter sido feita uma análise rigorosa dos erros neste caso, os resultados evidenciados pelas funções de escala mostram uma precisão razoável na estimativa dos expoentes, comparável à da análise anterior (longe do ponto tricrítico). Isto evidencia a existência de correções de escala nos expoentes na “zona tricrítica”, discutidas em [21].

Por último, é mostrado o diagrama de fases para o modelo, com $\eta = 0$, correspondente à teoria $\phi^4 O(4)$ (onde somente há transições contínuas), e $\eta = 1$.

A comparação exitosa dos expoentes críticos estimados no modelo trabalhado (em transições de fase contínuas) com os do modelo de Heisenberg $O(4)$ comprova que ambos estão na mesma classe de universalidade. Porém, considerou-se $\eta = 0$ nesta análise, sendo efetivamente considerado então o modelo ϕ^4 . A futuro pretende-se estimar os expoentes em uma região de transição de fase contínua com $\eta \neq 0$ longe da região tricrítica, a fim de confirmar a universalidade para o modelo ϕ^6 . Já que as durações das simulações realizadas foram moderadas, procurar-se-á também aumentar a estatística para futuras simulações.

No presente trabalho, considerou-se $j = 0$ na ação (2.7). No entanto, comparações das teorias escalares diretamente com a QCD envolvem [13, 8] estimar funções de escala da forma

$$M/h^{1/\delta} = f(t/h^{1/\beta\delta}), \quad (6.1)$$

onde M é a magnetização, h é o campo magnético externo e t é a temperatura reduzida para o modelo de Heisenberg. Neste, a correspondência com a QCD se dá traduzindo h como a massa dos quarks e M como o condensado quiral (1.5). Buscar-se-á uma relação desse tipo para o modelo escalar $O(4)$, a fim de compará-lo com a QCD da mesma maneira.

Ainda no contexto de comparações com a QCD, outra análise de interesse seria estudar as correções dos expoentes críticos, bem como analisar funções de escala, na região tricrítica, de forma que relações entre as massas dos quarks (sobretudo do quark *strange*) e a localização do ponto tricrítico possam ser estabelecidas [6].

Apêndice A

Atualização local do campo

No tocante aos algoritmos de MC, a definição das atualizações locais dos campos é fundamental para a obtenção de bons resultados. Além de gerar corretamente a distribuição desejada de probabilidades de estados, é necessário que a condição de ergodicidade seja satisfeita. Neste sentido, a definição (4.10) é indicada e normalmente utilizada [42, 10], visto que não restringe os valores do campo a algum intervalo limitado, o que significa que, a princípio, cada uma das componentes dos campos pode assumir qualquer valor real $\theta_i = (-\infty, \infty)$. Isso não seria o caso atualizando, por exemplo, os campos da forma

$$\theta_i(\vec{n}) \mapsto \theta'_i(\vec{n}) = b \cdot r_{(i)}, \quad r_{(i)} = [-1, 1], \quad (\text{A.1})$$

de maneira que os campos fossem limitados ao intervalo $\theta_i = (-b, b)$.

Quanto ao valor de b em (4.10), como comentado na seção 4.3, deve-se ajustar seu valor de forma a ser o maior possível, sem reduzir a taxa de aceitação muito abaixo de 0,5. Neste caso, interferiria na qualidade do algoritmo, alterando a precisão na geração de estados com a probabilidade desejada, além de deixar o algoritmo mais lento, demorando muitos passos para fazer alterações no campo. Na tabela A.1, é mostrada a taxa média de aceitação aproximada para diferentes valores de b . As médias são tomadas considerando diferentes regiões no espaço de parâmetros, sendo a diferença do valor da taxa entre as fases ordenada e simétrica do campo da ordem de 20 a 30% (próximo a uma região crítica). Vê-se que os valores maiores de b têm uma taxa de aceitação muito pequena, não sendo, portanto, adequados. Logo, o caso que melhor se ajusta às condições descritas acima é

$$b = 0,6. \quad (\text{A.2})$$

Por conseguinte, esse é o valor escolhido nas atualizações locais do campo, tanto no algoritmo de

Metropolis quanto no de Wolff.

b	taxa de aceitação
0,3	0,42
0,4	0,31
0,5	0,26
0,6	0,13
0,75	0,07

Tabela A.1: *Estimativas da taxa de aceitação média para diferentes valores de b em (4.10). A melhor escolha corresponde a $b = 0,6$.*

Apêndice B

Condições de contorno periódicas

Para reduzir efeitos de rede finita [48], são consideradas condições de contorno periódicas na rede, i.e., não há bordas “livres”, e todos os sítios possuem o mesmo número de vizinhos. Um exemplo clássico são as condições periódicas toroidais ¹

$$\theta(x) = \theta(x + aL \hat{e}_i) \quad i = 1, 2, \dots, d . \quad (\text{B.1})$$

Para este trabalho, contudo, foram utilizadas condições de contorno *helicoidais*. A diferença desta para as do tipo toroidal está em que, em uma das dimensões, os extremos se conectam como uma “hélice”, como mostra a Figura B.1 para uma rede bidimensional. Desta forma, espera-se maximizar a eficiência do acesso, na memória RAM, dos valores armazenados dos campos em cada sítio da rede [32].

Vale lembrar que, no limite ao contínuo, espera-se que os efeitos de tamanho finito se anulem e os resultados independam das condições iniciais escolhidas.

¹Pode-se imaginar uma rede bidimensional com condições de contorno toroidais como um plano que se “fecha” no formato de um toróide.

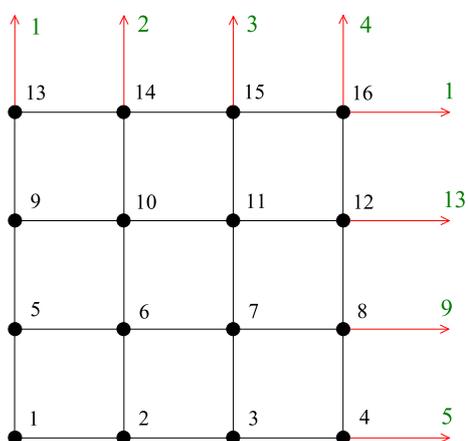


Figura B.1: *Condições de contorno helicoidais em uma rede bidimensional. Os números distinguem os sítios da rede, representados pelos pontos. As interações representadas pelas setas vermelhas indicam condições de contorno helicoidais.*

Apêndice C

Algoritmo local

Neste apêndice é mostrado um fragmento do código que realiza as atualizações locais descrito na seção 4.3. Comentários são antecidos por `//` na mesma linha.

```
void LatticeSweep()
{
    double Cp_Viz[N], novo_Cp[N];
    double Delta_S=0.0, Cp_Sq =0.0, novo_Cp_Sq=0.0, proj=0, Sq_Viz=0;

    for (x = 0; x < VOL; x++) // atualização cada ponto da rede
    {
        for (i = 0; i < N; i++)
        {
            Cp_Viz[i] = Cp[up][i] + Cp[down][i] + // calcula soma
                       Cp[left][i] + Cp[right][i] + // dos vizinhos
                       Cp[front][i] + Cp[behind][i];

            novo_Cp[i] = Cp[x][i] + random * b ; // novo valor para a
                                                // componente [i] do campo

            novo_Cp_Sq += novo_Cp[i] * novo_Cp[i];
            Cp_Sq      += Cp[x][i] * Cp[x][i];

            Delta_S += (Cp[x][i] - novo_Cp[i]) * Cp_Viz[i]; // variação do termo
                                                           // cinético da ação
        }

        Delta_S += MLSQ * (novo_Cp_Sq - Cp_Sq) +
                  LAMBDA * (novo_Cp_Sq * novo_Cp_Sq - phi_Sq * Cp_Sq) +
                  ETA * (novo_Cp_Sq * novo_Cp_Sq * novo_Cp_Sq - Cp_Sq * Cp_Sq * Cp_Sq);

        if (Delta_S < 0 || ranmar() < exp(-Delta_S)) // testa se aceita a mudança
        {
            for (i = 0; i < N; i++)
                Cp[x][i] = novo_Cp[i];
        }

        for (i = 0; i < N; i++) // sobre-relaxação
        {
            proj += Cp[x][i] * Cp_Viz[i];
            Sq_Viz += Cp_Viz[i] * Cp_Viz[i];
        }

        for (i = 0; i < N; i++)
            Cp[x][i] = -Cp[x][i] + 2 * proj * Cp_Viz[i] / Sq_Viz;
    }
}
```

Código 1: Fragmento de atualização local dos campos usado nos algoritmos de Metropolis e de Wolff, com sobre-relaxação.

Referências Bibliográficas

- [1] E. V. Shuryak, *The QCD Vacuum, Hadrons and Superdense Matter* (2^a ed.), World Scientific, Cingapura (2004).
- [2] H. Meyer-Ortmanns, *Rev. of Mod. Physics* **68**, 473–598 (1996).
- [3] M. S. Turner, E. Kolb, *The Early Universe*, Westview Press, Nova Iorque (1994).
- [4] F. Wilczek, *QCD in Extreme Conditions*, arXiv:hep-ph/0003183v1.
- [5] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories An Introduction* (3^a ed.), 2 World Scientific, Cingapura (2005).
- [6] F. Wilczek, *Int. J. of Mod. Phys. A* **7**, 3911–3925 (1992).
- [7] J. Engels, T. Mendes, *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **83-84**, 700-702 (2000).
- [8] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes, T. Schulze, *Phys. Lett. B* **514** 299-308 (2001).
- [9] K. Kanaya, S. Kaya, *Phys. Rev. D* **51** 2404–2410 (1995).
- [10] M. Hasenbusch, *J. Phys. A* **34**, 8221–8236 (2001).
- [11] K. Huang, *Quarks, Leptons & Gauge Fields* (2^a ed.), World Scientific, Cingapura (1992).
- [12] A. Zee, *A Quantum Field Theory in a Nutshell*, Princeton University Press, New Jersey (2003).
- [13] Y. Iwasaki, K. Kanaya, S. Kaya, S. Sakai, T. Yoshié, *Phys. Rev. D* **54**, 7010–7031 (1996).
- [14] F. R. Brown, F. P. Butler, H. Chem, N. H. Christ, Z. Dong, W. Schaffer, L. I. Unger, A. Vaccarino, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2491–2494 (1990).
- [15] M. Shifman (ed.), *At the Frontier of Particle Physics. Handbook of QCD (Ioffefest)*, World Scientific, Cingapura (2001).

- [16] R. D. Pisarski, F. Wilczek, *Phys. Rev. D* **29**, 338–341 (1984).
- [17] K. Rajagopal, F. Wilczek, *Nucl. Phys. B* **399**, 395–425 (1993).
- [18] A. Patterson, *Nucl. Phys. B* **190**, 188 (1981).
- [19] H. Gausterer, S. Sanielevici, *Phys. Lett. B* **209**, 533 (1988).
- [20] Y. Iwasaki, K. Kanaya, S. Kaya, T. Yoshié, arXiv:hep-lat/9609022v1.
- [21] I. D. Lawrie, S. Sarback, *Phase Transitions and critical Phenomena* vol. 9, Academic Press, Nova Iorque (1984).
- [22] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Perseu Books, Massachusetts (1995).
- [23] M. G. do Amaral, C. A. de Carvalho, R. C. Shellard, *Rev. Bras. de Física*, **14**, 24–41 (1984).
- [24] C. M. Wu, P. Y. Zhao, Z. K. Zhu, Y. S. Song, S. J. Dong, H. P. Ying, S. S. Xue, *Nucl. Phys. B* **9**, 31–34 (1989).
- [25] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Clarendon Press, Oxford (1994).
- [26] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, World Scientific, Cingapura (1984).
- [27] K. Binder, D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **30**, 1477–1485 (1984).
- [28] K. Binder, M. S. S. Challa, D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **34**, 1841–1852 (1986).
- [29] K. Binder, D. P. Landau, K. Vollmayr, H. Deutsch, J. D. Reger, M. Scheucher, *Int. J. Mod. Phys. C* **3**, 1025–1058 (1992).
- [30] I. M. C. Plasencia, *Estudio En El Retículo de Transiciones de Primer Orden en Dimensión 4*, Tese de Doutorado, Universidad de Zaragoza, arXiv:hep-lat/9806021v1.
- [31] K. Binder, D. P. Landau, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Nova Iorque (2000).
- [32] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford (2001).

- [33] H. Gould, J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems*, Addison-Wesley Publ. Co., Reading (1996).
- [34] M. N. Barber, D. Toussaint, R. B. Pearson, *Phys. Rev. B* **32**, 1720–1730 (1985).
- [35] S. L. Adler, *Phys. Rev. D* **23**, 2901–2904 (1981).
- [36] U. Wolff, *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **17**, 93–102 (1990).
- [37] R. Gupta, G. W. Kilcul, A. Patel, S. R. Sharpe and Ph. de Forcrand, *Mod. Phys. Lett.* **A3**, 1367 (1988).
- [38] R. H. Swendsen, J-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58** 86–88 (1987).
- [39] I. Montvay, G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge University Press, Nova Iorque (1994).
- [40] H. Müller-Krumbhaar, K. Binder, *J. Stat. Phys.* **8**, 1 (1973).
- [41] B. Efron, *SIAM Review* **21**, 460.
- [42] K. Huang, E. Manousakis, J. Polonyi, *Phys. Rev. D* **35**, 3187–3192 (1987).
- [43] M. Creutz, L. Jacobs, C. Rebbi, *Phys. Rep.* **95**, 201–282 (1983).
- [44] J. Lee, M. Kosterlitz, *Phys. Rev. B* **43**, 3265–3277 (1990).
- [45] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayot, A. M. Sodupe, *Phys. Lett. B* **387**, 125 (1996).
- [46] P. Butera, M. Comi, *Phys. Rev. B* **56**, 8212 (1997).
- [47] R. Guida, Zinn-Justin, *J. Phys. A* **31**, 8103.
- [48] D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **13**, 2997–3011 (1976)
- [49] J. Engels, T. Mendes, *Nucl. Phys. B* **572** 289-304 (2000).