



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física

Pós-Graduação em Física Aplicada

**Renormalização de Redes de Tensores: Uma  
Abordagem Analítica.**

**Ivelton Soares da Silva**

**Dissertação de Mestrado**

*Recife-PE*

*31 de agosto de 2016*

Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física

Pós-Graduação em Física Aplicada

Ivelton Soares da Silva

**Renormalização de Redes de Tensores: Uma Abordagem  
Analítica.**

Trabalho apresentado ao Programa de Mestrado em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Aduino José Ferreira de Souza

*Recife-PE*

*31 de agosto de 2016*

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE  
Biblioteca Central, Recife-PE, Brasil

S586a Silva , Ivelton Soares da  
Renormalização de redes de tensores : uma abordagem analítica  
Ivelton Soares da Silva. – 2016.  
75 f. : il.

Orientador: Aduino José Ferreira de Souza.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa  
de Pós-Graduação em Física, Recife, BR-PE, 2016.  
Inclui apêndices e referências.

1. Grupo de normalização 2. Modelo de ising 3. Rede de tensores I. Souza,  
Aduino José Ferreira de, orient. III. Título

CDD 530

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO**  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E EXTENSÃO E PÓS-GRADUAÇÃO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Renormalização de Redes de Tensores: Uma Abordagem  
Analítica.**

*Ivelton Soares da Silva*

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 31/08/2016 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

---

**Prof. Dr. Adauto José Ferreira de  
Souza**  
UFRPE

Banca Examinadora:

---

**Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e  
Barbosa**  
UFRPE

---

**Prof. Dr. Jairo Ricardo Rocha de  
Oliveira**  
UFRPE

*Recife-PE*  
*31 de agosto de 2016*

*Este trabalho é dedicado à minha esposa Viviani e ao meu filho Lucas.*

# Agradecimentos

Primeiramente à Deus pela minha saúde física e mental, sem isso não seria capaz de terminar esse trabalho. Quero agradecer à minha família pelo apoio em todos os momentos dessa caminhada, em especial a minha esposa Viviani pela paciência e dedicação. Aos meus pais pelo apoio incondicional e todo o amparo dado durante todo esse trabalho, sem esse apoio não teria chegado onde cheguei. Quero agradecer ao meu irmão Ivson pela força, apoio, compreensão e ao irmão Cleiton pelo incentivo nessa jornada. Ao grande amigo Flávio Anselmo pelo apoio e palavras motivadoras. Aos amigos que contribuíram de forma direta e indireta para a conclusão desse trabalho, são eles: Daniel, Francisco, Marília, Adson, Magda, Augusto, Danilo, Rubim, Alexandre, Thiago, Isabelly, Jorge, Maellyson. Ao meu orientador Adauto pelas instruções ao longo desse trabalho, pelo tempo e paciência dedicados. Ao Departamento de Física e a CAPES pelo apoio financeiro.

*“Você nunca achará o arco-íris, se você estiver olhando para baixo.”  
(Charles Chaplin)*

# Resumo

O grupo de renormalização na representação de rede de tensores vem se revelando uma poderosa ferramenta teórica para a análise de sistemas físicos fortemente interagentes. A técnica baseia-se na representação da função de partição do sistema em estudo, por uma rede de tensores, ou seja, a cada sítio da rede associamos um tensor translacionalmente invariante. O tensor codifica os estados associados aos graus de liberdade do sistema original. Os índices do tensor, a que chamamos de “pernas”, correspondem às ligações entre os sítios da rede tensorial. Assim, o cálculo da função de partição se reduz à contração de uma rede de tensores. Isto é, uma soma sobre os índices comuns à dois tensores quaisquer da rede. Aqui, aplicamos a técnica ao modelo de Ising definido em uma rede quadrada. Nesse caso, cada tensor possui quatro índices e cada índice ou perna pode assumir dois valores. Nosso procedimento consiste em subdividir a rede em blocos de quatro tensores, de forma que cada tensor faça parte apenas de um desses blocos. A contração da rede é realizada em etapas. Primeiro as pernas internas a cada bloco são contraídas. Isto resulta em outra rede, com a mesma geometria da rede original, porém o número de tensores é reduzido a quarta parte. Em princípio, o procedimento pode ser repetido até restar apenas um único tensor. A contração das pernas deste último tensor daria a função de partição exata. Porém o número de estados das pernas dos tensores resultante da contração cresce exponencialmente, limitando o uso prático de tal procedimento. Assim, precisamos “renormalizar” os tensores para limitar o número de estados, dos tensores a cada etapa do processo. A renormalização aqui empregada baseia-se na decomposição em valores singulares de alta ordem dos tensores (uma generalização da decomposição de uma matriz em valores singulares). Como resultado, apresentamos um cálculo analítico da função de partição do modelo de Ising na rede quadrada, mantendo apenas dois estados para o tensor renormalizado. Fomos capazes de obter a temperatura crítica com boa precisão, considerando a aproximação radical efetuada. Além disso, aplicamos, numericamente, o procedimento para dimensões de corte tão alta como manter até trinta estados no tensor renormalizado. A termodinâmica do modelo foi obtida com bom acordo com os resultados exatos conhecidos.

**Palavras-chaves:** Grupo de Renormalização, Modelo de Ising, Rede de Tensores.



# Abstract

The tensor network renormalization group is proving to be a powerful theoretical tool for the analysis of strongly interacting physical systems. The technique is based on the representation the partition function by a tensor network, where to each site of the network we associate a translationally invariant tensor. The tensor encodes the states associated with the degrees of freedom of the original system. The tensor indices, we call “legs”, correspond to the links between the sites of the tensor network. Thus, the calculation of the partition function reduces to the contraction of a tensor network. That is, a sum over the common leg of any two tensors. Here, we apply the technique to the Ising model defined on a square lattice. In this case, each tensor has four indices and each index or leg can take only two values. Our procedure is to divide the network into blocks, each one containing four tensors. And each tensor belongs only to one of these blocks. The contraction of the network is carried out in stages. First the inner legs of each block are contracted. This results in another tensor network, with the same geometry as the original network, but the number of tensors is reduced by four. In principle, the procedure can be repeated until we have only a single tensor. The contraction of the legs of the latter tensor gives the exact partition function. But the number of states of the legs of the resulting tensor contraction grows exponentially, limiting the practical use of such a procedure. Thus, we need to “renormalize” the resulting tensors to limit the number of states after each step of the process. The renormalization used here is based on high order singular value decomposition (a generalization of the singular value decomposition of a matrix). As a result, we present an analytical calculation of Ising model partition function in the square lattice, keeping only two states to the renormalized tensor. We were able to get the critical temperature with good accuracy considering the radical approach made. In addition, we apply the same procedure, numerically. In this case, we keep up to thirty states in the renormalized tensor. The thermodynamic model was obtained in good agreement with the known exact results.

**Key-words:** Renormalization Group, Model Ising, Tensor Network Tensor.

# Lista de Figuras

Figura 1 – Diagrama de Fases. . . . .	16
Figura 2 – Rede unidimensional com $N$ sítios espaçados uniformemente. A interação ocorre entre os vizinhos mais próximos. . . . .	22
Figura 3 – Rede em duas dimensões com 16 sítios nos vértices de quadrados. . . . .	22
Figura 4 – Rede cúbica com os sítios igualmente espaçados nos vértices dos cubos. . . . .	22
Figura 5 – Rede unidimensional em forma de anel. Devido as condições de contorno periódicas, os sítios de fronteira (1 e 9) se interligam fechando um anel, a distribuição das ligações torna-se uniforme. . . . .	23
Figura 6 – Rede quadrada. Em (a) a rede completa. Em (b) os sítios de fronteiras são representados por círculos brancos. Em (c) devido as condições de contorno periódicas, a rede é vista como um Toro. . . . .	24
Figura 7 – Esquema de dizimação em uma rede unidimensional. Os graus de liberdade associados aos sítios originais (bolas), são substituídos por outros (cruzes). Os sítios são dizimados aos pares e o parâmetro de rede da rede resultante é $2a$ . . . . .	26
Figura 8 – Esquema de dizimação em uma rede bidimensional. Os sítios originais (bolas), são substituídos por sítios renormalizados (cruzes), em um passo de renormalização. Neste exemplo, $b = 2$ e $d = 2$ . A rede original tem $N = 16$ sítios e a renormalizada tem $N' = 4$ . . . . .	26
Figura 9 – Rede unidimensional de sítios. Os sítios da rede original, e seus respectivos rótulos, são mostrados na linha superior. Na linha intermediária, a rede resultante da soma parcial sobre os sítios pares. A distância entre os vizinhos é o dobro da distância entre os vizinhos da rede original. Esta rede pode ser rotulada da mesma maneira que a rede original foi rotulada, como pode ser visto na terceira linha. A terceira linha é idêntica à primeira. Apenas a escala, distância entre os sítios vizinhos, foi alterada. O processo pode ser iterado somando sobre os sítios pares da nova rede “renormalizada”. . . . .	29
Figura 10 – Dizimação da metade dos sítios em uma rede quadrada. Os sítios remanescentes na rede dizimada formam também uma rede quadrada (rotacionada de $45^\circ$ ). Observe o bloco de sítios destacado pelo quadrado tracejado. . . . .	32
Figura 11 – Representação diagramática de um escalar, um vetor, uma matriz e um tensor com três índices. Observe que o número de pernas no diagrama está associado ao número de índices (ordem) do tensor. . . . .	37

Figura 12 – A contração do índice $m$ do diagrama da esquerda leva ao agrupamento dos índices $i$ e $k$ bem como $j$ e $l$ . À direita, a representação diagramática da contração. . . . .	38
Figura 13 – Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por $A_{i,j}$ e $B_{j,k}$ , os índices $i$ e $k$ são livres enquanto o índice $j$ é contraído. . . . .	38
Figura 14 – Representação diagramática de uma operação de agrupamento de dois índices. Um tensor de terceira ordem, $T_{ijk}$ , tem as pernas $j$ e $k$ agrupadas. A perna resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa e é rotulada pelo índice combinado $\beta = (j, k)$ . . . . .	39
Figura 15 – Produto entre dois tensores em uma rede unidimensional. Na primeira fileira os tensores são representados individualmente, cada perna indica um índice do tensor. Na segunda fileira observa-se que a cada par de tensores dentro do retângulo tracejado as pernas são ligadas, formando um índice comum. O tensor $M$ é o resultado da contração do índice comum entre dois tensores dentro do retângulo tracejado. . . . .	39
Figura 16 – Diagrama de uma rede de tensores com várias ligações entre os tensores e quatro índices livres. Todos os índices comuns entre os tensores são contraídos, os índices livres são pernas que não serão contraídas. O resultado da operação é um tensor de quarta ordem de índices $i, j, k$ e $m$ . . . . .	40
Figura 17 – Em (a) é representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dos eixos $x$ e $y$ . Em (b) temos os passos da contração e a renormalização de quatro estados. . . . .	43
Figura 18 – Em (a) uma rede “favo de mel” onde o tensor $T$ é de terceira ordem, $T_{xyz}$ . Em (b) é representada uma rede quadrada onde o tensor $T$ é de quarta ordem, $T_{xx'yy'}$ . . . . .	46
Figura 19 – Rede quadrada, cada sítio representa um tensor. O número de ligações entre um tensor e os vizinhos determina a ordem do tensor. Para a rede quadrada cada sítio possui quatro vizinhos mais próximos, há duas ligações horizontais e duas verticais. Cada ligação é um índice do tensor $T$ . Os índices são rotulados como $x, x', y, y'$ . A sequência dos índices, foi determinada de forma que na horizontal primeiro a ligação da esquerda e na vertical primeiro a ligação de cima. . . . .	50
Figura 20 – Os sítios da rede quadrada são representados por bolas pretas. A rede quadrada é dividida em blocos de spins, cada bloco encontra-se dentro do quadrado tracejado. As bolas vermelhas são os tensores renormalizados. . . . .	50
Figura 21 – Bloco de spins com quatro sítios. Cada sítio possui quatro ligações com os vizinhos mais próximos. . . . .	53

Figura 22 – Gráficos dos autovalores de $G$ . Observa-se no gráfico que os dois menores autovalores são inicialmente pequenos e não aumentam conforme $\beta$ cresce. Os dois maiores autovalores aumentam conforme $\beta$ cresce. A escala é logarítmica e $t = \tanh(\beta)$ . . . . .	54
Figura 23 – Fluxo de Renormalização para os tensores $t_1, t_2$ e $t_3$ . Dependendo do ponto de partida o sistema pode ir para uma fase ordenada ou para uma fase desordenada. . . . .	56
Figura 24 – Fator de escala em função do número de iterações. . . . .	57
Figura 25 – Fatores de escala em função da temperatura para o modelo de Ising. . . . .	58
Figura 26 – Energia interna do modelo de Ising com a técnica de rede de tensores. . . . .	58
Figura 27 – Calor específico. Fora da região crítica, para temperaturas menores ou maiores que a temperatura crítica o calor específico é constante. . . . .	59
Figura 28 – Magnetização. . . . .	59
Figura 29 – Magnetização em função do campo e de $\beta$ . . . . .	60
Figura 30 – Comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura do modelo de Ising para campo nulo. . . . .	60

# Lista de Tabelas

Tabela 2.1 – Observa-se que na medida que os valores de $K$ aumentam, $g(K) \approx K$ , e continua se aproximando até a iteração $i = 23$ . A partir da iteração $i = 24$ , verifica-se que $g(K) = K$ . A temperatura vai a zero após 1028 iterações. . . . .	31
Tabela 3.1 – Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Ising exato e do método utilizado. . . . .	57

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>14</b>
1.1	Transições de Fases e Fenômenos Críticos	14
1.2	Transições de Fases	16
1.3	Comportamento Crítico	18
1.3.1	Parâmetro de ordem	18
1.3.2	Funções Respostas	19
1.3.3	Correlação de Longo Alcance	19
<b>2</b>	<b>MATERIAL E MÉTODOS</b>	<b>21</b>
2.1	O Modelo de Ising	21
2.2	Redes de Spins Interagentes	21
2.3	Grupo de Renormalização	25
2.3.1	Grupo de Renormalização no Espaço Real	25
2.3.2	Análise de grupo de renormalização do modelo de Ising	27
2.4	Grupo de renormalização na representação de rede de tensores	34
2.4.1	Tensores	34
2.4.2	Representação diagramática de tensores	36
2.4.3	Decomposição em Valores Singulares	40
2.4.4	Representação por Rede de Tensores	44
2.5	Modelo de Ising por rede de tensores	46
<b>3</b>	<b>APLICAÇÕES E RESULTADOS</b>	<b>49</b>
3.1	Rede de Tensores	49
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>61</b>
	Referências	62
	<b>APÊNDICES</b>	<b>64</b>
	<b>A – MATRIZ U, MATRIZ Q E ELEMENTOS DE TENSORES</b>	<b>65</b>
	<b>B – MATRIZ G, DIAGONALIZAÇÃO E FATOR DE ESCALA</b>	<b>71</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O objetivo deste capítulo introdutório é apresentar o conceito de transição de fases e motivar a necessidade de um procedimento teórico sistemático para se lidar com as peculiaridades de tal fenômeno. Vamos também introduzir o conceito de universalidade no contexto dos fenômenos críticos e definir alguns termos e grandezas físicas que serão usadas ao longo desta dissertação.

### 1.1 Transições de Fases e Fenômenos Críticos

A constituição microscópica da matéria ordinária é um assunto bem estabelecido. De fato, todas as propriedades observadas de um corpo podem ser compreendidas a partir de sua constituição microscópica, pelo menos em princípio. Ou seja, a partir do conhecimento dos átomos que o formam e das interações entre esses átomos, incluindo possivelmente os elétrons e certas propriedades dos núcleos desses átomos.

Não obstante, muitas vezes é preferível uma descrição “hidrodinâmica” ou do comportamento coletivo em escalas de tempo e comprimento grandes comparadas às escalas microscópicas. Em uma tal descrição, informações sobre a natureza atômica da matéria é ignorada. Ou seja, as variáveis apropriadas para descrever um sistema macroscópico não é mais o conjunto dos graus de liberdade microscópicos associados às partículas, porém um novo conjunto de variáveis contínuas, que variam suavemente no tempo e no espaço, que descrevem o movimento coletivo de um conjunto *macroscópico* de partículas. Tal ponto de vista é adotado na eletrodinâmica clássica, por exemplo.

A consequência mais marcante das interações entre partículas é o surgimento de novas fases (diferentes estados de agregação) da matéria cujo comportamento coletivo guarda pouca semelhança com aquele observado para um pequeno número das mesmas partículas [1]. Como se dá esse processo? Ou seja, como as partículas mudam de um estado macroscópico para um outro?

Formalmente, todas propriedades macroscópicas podem ser deduzidas da **energia livre** ou da **função de partição** [2]. Todavia, como *transições de fases* tipicamente correspondem a mudanças dramáticas nas *funções respostas* elas devem ser assinaladas por singularidades na energia livre. Como a função de partição canônica de um número finito de partículas é sempre analítica, transições de fases só podem estar associadas a sistemas com um número infinitamente grande de partículas, isto é, ao **limite termodinâmico**. Assim, o estudo das transições de fases está relacionado à busca pela origem das várias singularidades na energia livre, bem como a caracterização de tais singularidades.

Vamos examinar um exemplo simples, tal qual aqueles enfeites imantados que afixamos no corpo do refrigerador doméstico.

Suponha que tomemos um desses “ímãs”, que é um exemplo de um objeto feito de um material *ferromagnético*, e meçamos algumas de suas propriedades tal qual a sua magnetização. Dividindo a amostra em mais ou menos duas partes iguais, para uma mesma temperatura e o mesmo campo magnético, as propriedades de cada parte serão as mesmas que as exibidas pela amostra inteira. Se repetirmos o processo, a afirmação anterior continua sendo válida. Porém, cedo ou tarde, depois de muitas iterações, alguma coisa diferente deve acontecer, já que sabemos que o magneto é feito de elétrons e íons e, fatalmente, o número dessas partículas em qualquer das subdivisões da amostra será muito pequeno em comparação com o número total contido na amostra original. Neste limite, passaremos a observar um comportamento típico de uma escala microscópica.

A escala de comprimento característica na qual as propriedades das partes começam a diferir marcadamente daquelas da amostra original define um **comprimento de correlação**. Esta é a escala de comprimento que mede a região na qual as flutuações dos graus de liberdade microscópicos são correlacionados. As partículas contidas em regiões separadas por uma distância maior que o comprimento de correlação não se influenciam mutuamente, seus movimentos são independentes ou descorrelacionados.

A experiência nos ensina que um ferromagneto pode mudar abruptamente seu comportamento macroscópico quando as condições externas, tal qual temperatura ou campo magnético, são variadas. Os pontos nos quais isto acontece são chamados de *pontos críticos* e eles marcam a transição de uma fase para outra. No nosso exemplo do ferromagneto uniaxial, existem essencialmente duas maneiras para a transição ocorrer. No primeiro caso, os dois estados de cada lado do ponto crítico coexistem no ponto crítico. Tais transições envolvem um comportamento descontínuo de propriedades macroscópicas e são chamadas de **primeira ordem**. Por exemplo, o gelo derrete à pressão normal e a zero graus Celsius, porém é possível observar a coexistência em equilíbrio do gelo (sólido) e água (líquido). O comprimento de correlação nessas transições de fases de primeira ordem é geralmente finito. No segundo caso, a transição é contínua, e o comprimento de correlação torna-se efetivamente infinito. As flutuações tornam-se correlacionadas sobre todas as



distâncias, o que obriga o sistema inteiro a ficar em uma única fase, que chamamos de *crítica*. As duas fases, uma de cada um dos lados da transição, devem se tornar idênticas quando o ponto crítico é atingido. No caso do ferromagneto uniaxial, a magnetização vai continuamente a zero no ponto crítico. Nesse caso, a transição é dita ser de **segunda ordem**.

O comportamento de um sistema na vizinhança do seu ponto crítico numa transição de fases de segunda ordem é denominado de *fenômeno crítico* e a divergência do comprimento de correlação na vizinhança deste ponto sugere que as propriedades observadas próximo do ponto crítico seja mais ou menos independente de certos detalhes microscópico do sistema. Assim, podemos esperar que o comportamento de vários sistemas microscopicamente distintos sejam praticamente o mesmo, uma vez que são as flutuações coletivas de longo alcance do sistema que em última análise determinarão suas propriedades. Entender esta **universalidade** é um dos objetivos dos estudos no campo dos fenômenos críticos.

Destas observações, concluímos que as propriedades críticas na vizinhança de uma transição de fases de segunda ordem pertencem a um número limitado de possíveis classes de universalidade definidas não pelos detalhes dos parâmetros microscópicos do material, porém pelas simetrias fundamentais do sistema. Por exemplo, quando estudamos as propriedades críticas de um ferromagneto uniaxial, estamos também aprendendo sobre a natureza da transição líquido-gás [3].

## 1.2 Transições de Fases

Nesta seção consideraremos mais detalhadamente um exemplo clássico de uma transição de fases. Vamos discutir a condensação de um gás para um estado líquido. O diagrama de fases representado na figura 1 exibe diversas características importantes das transição de fases de segunda ordem. No plano temperatura *versus* pressão, a transição de

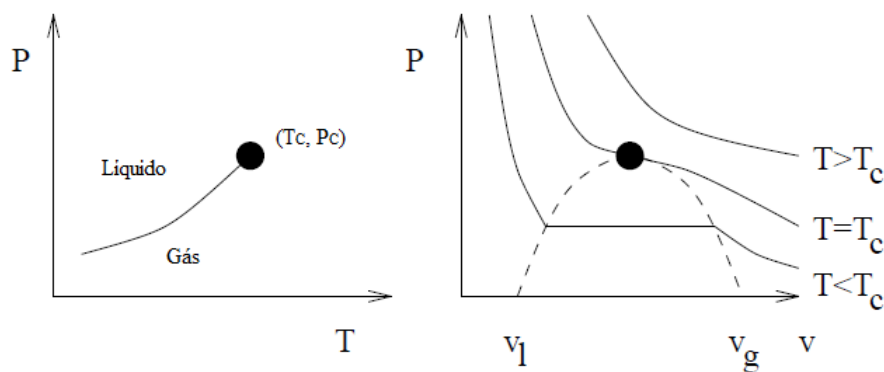


Figura 1 – Diagrama de Fases.

fases ocorre ao longo de uma linha que termina em um ponto crítico  $(T_C, P_C)$ . Já no plano

pressão *versus* volume reduzido (volume dividido pelo número de partículas), a transição aparece como um intervalo de coexistência, correspondendo a uma mistura de gás e líquido de  $\rho_g = 1/v_g$  e  $\rho_l = 1/v_l$  para temperaturas  $T < T_C$ . Como a linha de coexistência termina, é possível ir da fase gasosa para a fase líquida continuamente (sem uma transição de fases) contornando o ponto crítico. Assim, não há uma diferença fundamental entre as fases líquida e gasosa, isto é, não há mudança de uma simetria fundamental.

Além disso, da discussão anterior, a energia livre deste sistema é uma função analítica no plano temperatura *versus* pressão exceto em alguns ramos ao longo das fronteiras entre as fases. Com um olhar cuidadoso na vizinhança do ponto crítico percebe-se que a diferença entre as densidades da coexistência das fases líquida e gasosa desaparece a medida que nos aproximamos de  $T_C$ . Podemos notar também que as isotermas no plano pressão *versus* volume tornam-se progressivamente mais “horizontais” quanto mais perto  $T_C$  estivermos. Isto implica que a compressibilidade isotérmica, a taxa com que a densidade muda com a pressão,  $\kappa_T = -(1/V)(\partial V/\partial P)_T$  diverge no limite em que  $T$  tende a  $T_C$  com  $T > T_C$ . Além disso, é um fato experimental que o fluido adquire uma aparência “leitosa” próximo à criticalidade. Este fenômeno, conhecido com opalescência crítica, sugere a existência de flutuações coletivas no gás em comprimentos de onda grande o bastante para espalhar a luz visível. Essas flutuações devem necessariamente envolver um grande número de partículas, e um procedimento que considere apenas o comportamento médio das partículas deve ser apropriado para a descrição dessas flutuações.

As transições de fases são comumente classificadas em transições descontínuas (primeira ordem), as fases coexistem, e transições contínuas (segunda ordem), [4]. Sempre que a passagem de uma fase para outra ocorra de maneira abrupta, ou seja, para valores bem definidos dos parâmetros externos, como a pressão e a temperatura, dizemos que se trata de uma transição de fases.

Segundo a termodinâmica, podemos determinar relações entre algumas grandezas físicas como a energia livre de Gibbs ( $G$ ), energia livre de Helmholtz ( $F$ ), entropia ( $S$ ), volume ( $V$ ), calor específico ( $C$ ), compressibilidade ( $\kappa$ ), ou susceptibilidade magnética ( $\chi$ ), onde, [1],[2],

$$S = -\left.\frac{\partial F(T, V, N)}{\partial T}\right|_{V, N} = -\left.\frac{\partial G(T, P, N)}{\partial T}\right|_{P, N} \quad (1.1)$$

$$V = \left.\frac{\partial G(T, P, N)}{\partial P}\right|_{T, N} \quad (1.2)$$

$$f(T, h) = -T \frac{1}{N} \ln Z \left.\frac{\partial G(T, P, N)}{\partial P}\right|_{T, N}. \quad (1.3)$$

Uma transição de fases descontínua apresenta coexistência de fases, há um salto descontínuo no parâmetro de ordem. Exemplos são as transições líquido-vapor ou sólido-líquido. Já para uma transição contínua não há descontinuidades de volume ou magnetização o

parâmetro de ordem se anula continuamente. Exemplos são uma transição líquido-vapor ou uma transição da fase magnética para a fase paramagnética. Nas transições contínuas ocorre uma divergência nas segundas derivadas, como por exemplo, do calor específico, compressibilidade e magnetização

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}, \quad (1.4)$$

$$\kappa = -\frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 G}{\partial P^2}, \quad (1.5)$$

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}. \quad (1.6)$$

### 1.3 Comportamento Crítico

O comportamento singular na vizinhança do ponto crítico é caracterizado por um conjunto de índices conhecidos como expoentes críticos. Esses expoentes descrevem a não-analiticidade de várias funções termodinâmicas. Um fato extraordinário é que transições tão diferentes quanto a líquido-gás e a ferromagnética discutidas anteriormente podem ser descritas pelo mesmo conjunto de expoentes críticos e, por esta razão, dizemos que elas pertencem à mesma classe de universalidade. Nesta seção definiremos os expoentes críticos mais comumente encontrados.

#### 1.3.1 Parâmetro de ordem

Por definição, existe mais de uma fase de equilíbrio sobre uma linha de coexistência. O **parâmetro de ordem** é uma função termodinâmica que é diferente em cada fase e, portanto, pode ser usado para distinguir cada uma das possíveis fases de um material. Para um magneto uniaxial, o parâmetro de ordem é a magnetização total  $M(H, T)$ , ou densidade de magnetização,

$$m(H, T) = \frac{M(H, T)}{V}. \quad (1.7)$$

Para campo magnético nulo,  $m$  anula-se para um paramagneto e é não-nula em um ferromagneto, isto é,

$$m(T, H \rightarrow 0^+) \propto \begin{cases} 0, & \text{se } T > T_C, \\ |t|^\beta, & \text{se } T < T_C, \end{cases} \quad (1.8)$$

onde a temperatura reduzida é definida como  $t = (T - T_C)/T_C$ . Assim o comportamento singular do parâmetro de ordem ao longo da linha de coexistência é caracterizado pelo

expoente crítico  $\beta$ . Por outro lado, ao longo da isoterma crítica seu comportamento singular é descrito pelo expoente  $\delta$ , definido por

$$m(T = T_C, H) \propto H^{1/\delta}. \quad (1.9)$$

Note que no caso da transição líquido-gás distinguimos as duas fases ao longo da linha de coexistência através da densidade,  $\rho$ . Isto permite definir a diferença entre as densidades como um parâmetro de ordem para esta transição. Ou seja,  $\rho - \rho_C$  se anula quando a densidade da substância atinge o valor crítico  $\rho_C$ .

### 1.3.2 Funções Respostas

Um sistema próximo a seu ponto crítico é altamente sensível à perturbações externas. Por exemplo, vimos que no ponto crítico líquido-gás a compressibilidade isotérmica  $\kappa_T = -(1/V)\partial V/\partial P|_T$  diverge. Isto implica que uma leve variação na pressão pode causar uma variação colossal no volume da amostra, alterando de forma drástica a densidade da substância.

A compressibilidade mede de fato a susceptibilidade do sistema. De maneira geral, a susceptibilidade de um sistema é a resposta do seu parâmetro de ordem a uma variação de seu campo conjugado. A divergência da susceptibilidade é governada por um outro expoente crítico,  $\gamma$ . Para um magneto, a grandeza análoga à compressibilidade isotérmica é a susceptibilidade magnética à campo nulo

$$\chi(T, H \rightarrow 0^+) = \left. \frac{\partial m}{\partial H} \right|_{H=0^+} \propto |t|^{-\gamma}. \quad (1.10)$$

Em princípio, dois expoentes  $\gamma$  e  $\gamma'$  são necessários para descrever as divergências de cada um dos dois lados da transição de fases. Porém, em muitos casos, a mesma singularidade governa ambos os lados. Por isso fizemos  $\gamma' = \gamma$  na última equação.

Da mesma forma, a capacidade térmica representa como um sistema responde a uma variação de temperatura, e sua singularidade a campo nulo é descrita pelo expoente  $\alpha$ ,

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \propto |t|^{-\alpha}, \quad (1.11)$$

onde  $E$  é a energia interna. Aqui também consideramos que as divergências acima e abaixo da transição são governadas pelo mesmo expoente, como é geralmente o caso.

### 1.3.3 Correlação de Longo Alcance

A função de correlação é uma medida de como as flutuações locais em uma parte do sistema afeta aquelas em uma outra parte do sistema. Tipicamente, tais influências se estendem por uma distância característica  $\xi$ , conhecida como comprimento de correlação.

Ou seja, as flutuações nas proximidades do ponto  $\vec{x}_0$  de um sistema não são fortemente afetadas por aquelas flutuações que ocorrem no exterior de uma esfera de raio  $\xi$  centrada em  $\vec{x}_0$ . Em muitos casos, a função de correlação  $G(|\vec{x} - \vec{x}_0|)$  decai exponencialmente para separações  $|\vec{x} - \vec{x}_0| > \xi$ ,

$$G(|\vec{x} - \vec{x}_0|) \propto \exp(-|\vec{x} - \vec{x}_0|/\xi). \quad (1.12)$$

Na criticalidade, as flutuações estão correlacionadas sobre todas as distâncias implicando na divergência do comprimento de correlação. O expoente crítico  $\nu$  controla o comportamento do comprimento de correlação e é definido por

$$\xi(T, H = 0) \propto |t|^{-\nu}. \quad (1.13)$$

Em resumo, o comportamento singular das funções termodinâmicas no entorno do ponto crítico, o ponto terminal da linha de coexistência, pode ser caracterizado por um conjunto de expoentes críticos. Observações experimentais indicam que esses expoentes são universais, independentes da substância e, de certa forma, independente da natureza da transição. Além disso, a divergência das funções respostas, bem como das flutuações, indicam que as correlações tornam-se de longo alcance na vizinhança deste ponto. Uma descrição teórica dos fenômenos críticos constitui-se em um desafio pois não há como aplicar uma espécie de “princípio de superposição”. Ou seja, dividir o sistema em partes mais ou menos independentes e descrever o comportamento do todo como uma soma sobre as contribuições de suas partes.

Porém, as flutuações responsáveis pelas correlações envolvem muitas partículas e, no próximo capítulo introduziremos um método, o Grupo de Renormalização, que permite substituir os graus de liberdade locais por uma espécie de média sobre os estados das partículas dentro de determinada região do sistema. Isto equivale a olhar o sistema em uma escala diferente. Assim, o grupo de renormalização nos habilita a lidar com as flutuações do sistema em diversas escalas de comprimento.

# Capítulo 2

## Material e Métodos

### 2.1 O Modelo de Ising

Como vimos na introdução, uma transição de fases ocorre quando uma pequena variação em um parâmetro externo, como temperatura ou pressão, causa uma mudança qualitativa de larga escala no estado de um sistema. O modelo de Ising é um exemplo de uma descrição idealizada de um determinado sistema físico. Este modelo foi inventado por Lenz [5] com o propósito de explicar o ferromagnetismo, isto é, o aparecimento de uma *magnetização espontânea* em alguns materiais para temperaturas suficientemente baixas. O modelo de Ising tem esse nome em homenagem a Ernst Ising, que na primeira metade da década de 1920, desenvolveu sua tese de doutorado sob a orientação de Lenz [6]. O esforço de Ernst Ising resultou no primeiro trabalho científico sobre o modelo de Ising, que foi capaz de obter uma solução analítica na versão unidimensional do modelo. O resultado foi algo decepcionante, pois o modelo não apresentou uma magnetização espontânea [5]. Não obstante, a ideia original do Lenz mostrou-se excepcionalmente rica e rende frutos até hoje, quase cem anos depois.

De um ponto de vista mais geral, o propósito do modelo de Ising é explicar como interações de curto alcance entre os constituintes microscópicos de um material leva ao aparecimento de um comportamento correlacionado de longo alcance entre tais partículas.

### 2.2 Redes de Spins Interagentes

Para definir o modelo de Ising iniciamos com uma rede, que consideraremos um conjunto finito de pontos (sítios ou vértices) regularmente espaçados embebidos no espaço de dimensão  $d = 1, 2, 3, \dots, D$ . Em uma dimensão, a rede é simplesmente uma cadeia de pontos sobre uma linha, ver figura 2, que podemos enumerar de 1 a  $N$ . Em qualquer dimensão,  $N$  denotará sempre o número de sítios da rede. Para a dimensão  $d = 2$ , a rede

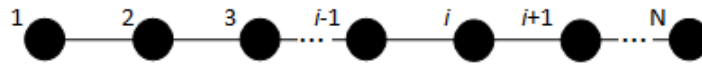


Figura 2 – Rede unidimensional com  $N$  sítios espaçados uniformemente. A interação ocorre entre os vizinhos mais próximos.

será formada por quadrados justapostos como na figura 3.

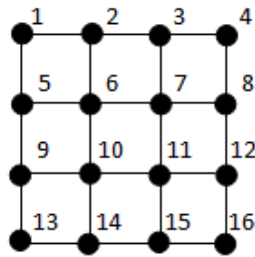


Figura 3 – Rede em duas dimensões com 16 sítios nos vértices de quadrados.

Em três dimensões, teremos uma rede cuja unidade geradora são cubos, como podemos ver da figura 4. Tal rede é denominada de rede cúbica simples. Para uma dimensão qualquer  $d > 3$ , não é possível fazer um desenho da rede. Porém, podemos defini-la pela translação de sua unidade básica (célula unitária) como nos exemplos anteriores [7].

Nas figuras das redes, cada seguimento entre os sítios é chamado de uma **ligação**. Os sítios conectados por uma ligação são chamados de vizinhos mais próximos ou primeiros

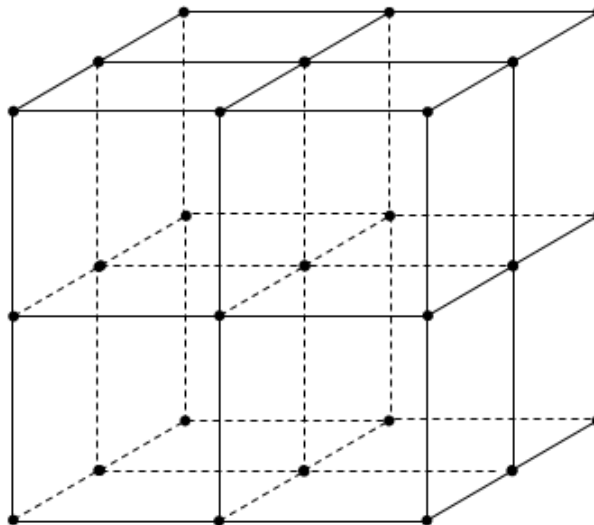


Figura 4 – Rede cúbica com os sítios igualmente espaçados nos vértices dos cubos.

vizinhos. Para as redes aqui consideradas, se excluirmos os sítios nas “fronteiras”, cada sítio de uma rede  $d$ -dimensional tem  $2d$  primeiros vizinhos.

O fato do número de primeiros vizinhos de um sítio na fronteira ser diferente do número de vizinhos de um sítio no interior da rede, quebra a simetria de translação da rede. Uma forma de restaurar a simetria é a adoção de uma condição de contorno periódica, ou seja, introduzimos ligações extras conectando os sítios nas fronteiras de lados opostos. Isto corresponde a transformar a cadeia em um anel, conforme a figura 5, ou a rede quadrada em um toro, conforme figura 6.

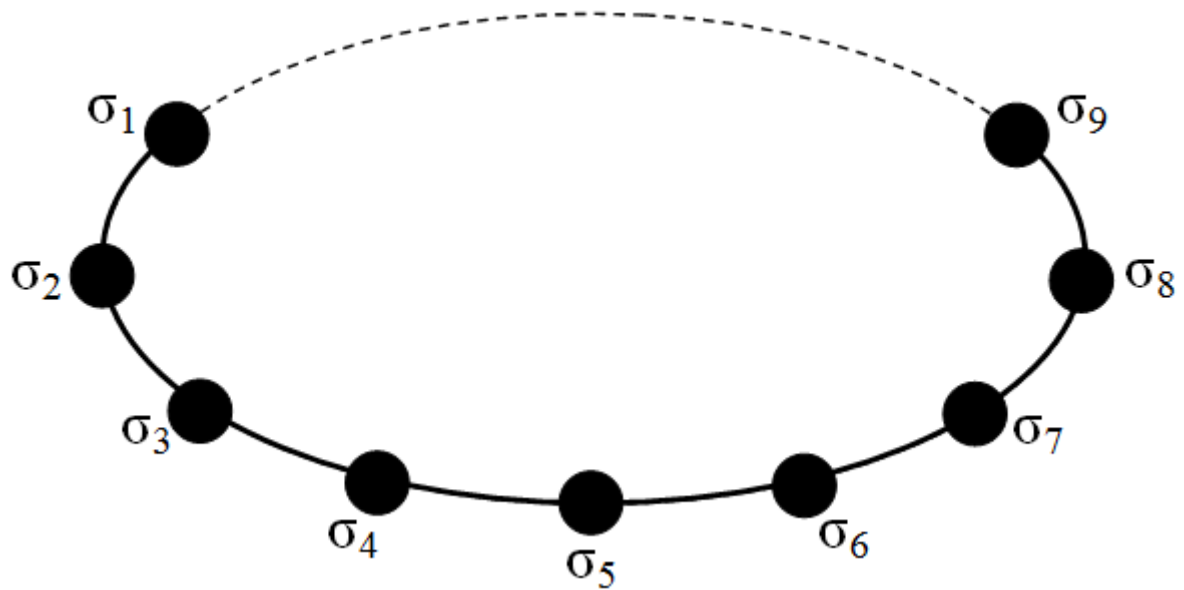


Figura 5 – Rede unidimensional em forma de anel. Devido as condições de contorno periódicas, os sítios de fronteira (1 e 9) se interligam fechando um anel, a distribuição das ligações torna-se uniforme.

Vamos agora associar a cada sítio,  $i = 1, 2, \dots, N$ , da rede, uma variável  $\sigma_i$ . As variáveis  $\sigma_i$ , por definição, só podem assumir dois valores,  $\sigma_i = \pm 1$ . Ou seja, cada sítio da rede pode estar apenas em um de dois possíveis *estados*. Quando atribuímos valores  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N)$  para cada um dos sítios da rede, dizemos que o sistema se encontra em um particular *microestado* ou em uma dada *configuração*.

Para modelar o ferromagnetismo, basta pensar que os sítios da rede são ocupados por átomos de um material magnético, como o ferro por exemplo. Cada átomo tem um momento magnético que pode apontar na direção de um dado eixo fixo, ou na direção contrária a este eixo. Se escolhermos o eixo orientado na direção  $z$ , por exemplo,  $\sigma_i$  designa a componente  $z$  do momento magnético atômico em unidades apropriadas.

O próximo passo para a definição do modelo é estabelecer o *hamiltoniano* do sistema. O hamiltoniano é a energia total do sistema e é uma função da configuração em que este



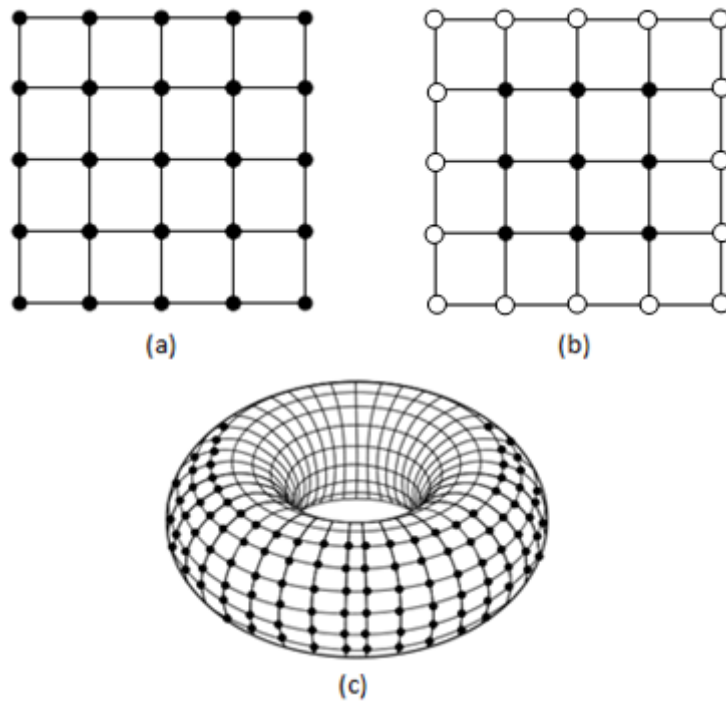


Figura 6 – Rede quadrada. Em (a) a rede completa. Em (b) os sítios de fronteiras são representados por círculos brancos. Em (c) devido as condições de contorno periódicas, a rede é vista como um Toro.

se encontra. Além disso, o hamiltoniano governa a dinâmica do sistema. Para o modelo de Ising, assumimos que há interação apenas entre pares de átomos que são primeiros vizinhos. Podemos ainda considerar a presença de um campo magnético externo atuando sobre o material. Nestas circunstâncias, a energia de cada configuração  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$  é dada por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.1)$$

onde  $J > 0$  é uma constante que fixa a escala de energia e  $H$  a intensidade do campo magnético externo dirigido ao longo do eixo  $z$ . Na equação 2.1, a segunda soma é sobre todos os sítios da rede, enquanto a primeira é sobre todos os pares de primeiros vizinhos. Fisicamente,  $J$  corresponde a energia de interação entre um spin em um dado sítio e um de seus primeiros vizinhos. Note ainda que  $\mathcal{H}$  tem dimensão de energia, uma vez que as variáveis  $\sigma_i$  são adimensionais. O ferromagnetismo está associado à escolha de  $J > 0$ , pois configurações com a maioria dos pares de primeiros vizinhos no mesmo estado,  $\sigma_i = \sigma_j$ , têm energias mais baixas que configurações com os membros destes pares em estados contrários. O hamiltoniano 2.1 mais a rede, cujos sítios abrigam os átomos, define o modelo de Ising.

## 2.3 Grupo de Renormalização

A técnica de Grupo de Renormalização, utilizada para o entendimento de transições de fases, foi apresentada em 1971 por Kenneth Wilson [8], que recebeu o Prêmio Nobel de Física 1982 por esta contribuição. O método de Wilson é muito geral e tem ampla aplicabilidade, pode ir muito além do campo de transições de fases [9]. O Método é sistemático e funciona muito bem para calcular grandezas que caracterizam os sistemas críticos, como expoentes críticos e equações de estado [10]. Essa abordagem foi aplicada em muitos problemas envolvendo fenômenos críticos, incluindo as leis de escala entre expoentes críticos e universalidade [8], como também tornou-se uma técnica largamente utilizada em física da matéria condensada e foi posteriormente vista em muitas aplicações em outros ramos da física, tais como sistemas dinâmicos e caos, fractais, e sistemas desordenados. Dentro desta área de investigação, no entanto, a teoria pode ser vista como uma extensão e implementação de ideias fenomenológicas sugeridas por Leo Kadanoff na década de 1960 [11].

A teoria de Wilson divide-se em dois ramos, um na área da teoria de campos, que realiza renormalizações no espaço dos momentos, e o outro que trabalha com quantidades que dependem da posição no espaço de coordenadas usuais, chamando de espaço real [12], também conhecido como Grupo de Renormalização de Migdal-Kadanoff (GRMK).

### 2.3.1 Grupo de Renormalização no Espaço Real

Um sistema de spins na rede próximo ao ponto crítico apresenta grande dificuldade de tratamento devido a necessidade de se lidar com um número muito grande de graus de liberdade fortemente correlacionados [9].

A ideia da técnica de grupo de renormalização é reduzir o número de graus de liberdade do sistema e manter suas simetrias para preservar as suas propriedades críticas [13].

Uma transformação de grupo de renormalização, aumenta algumas distâncias características que descrevem o sistema, ou seja, há mudança no parâmetro de rede, mas se o sistema for visto de forma ampliada, o parâmetro de rede observado será outro com um fator multiplicativo  $b$ . Na figura 7 observa-se uma rede de sítios em uma dimensão  $d = 1$ , ou seja, os sítios estão sobre uma reta, o parâmetro de rede é  $a$  [14]. Reescalando a rede por um fator  $b$ , um novo parâmetro de rede é estabelecido e a distância entre os vizinhos mais próximos, torna-se

$$a' = ba, \quad (2.2)$$

o fator de escala  $b$  define a redução dos graus de liberdade da rede, para uma rede de dimensão  $d$ , ele é definido como:

$$b^d = \frac{N}{N'} \quad (2.3)$$

onde  $N$  é o número de sítios da rede original e  $N'$  é o número de sítios da rede renormalizada. Na figura 8, por exemplo, observa-se uma rede de sítios em duas dimensões,  $d = 2$ , originalmente com  $N = 16$ , sítios e após a renormalização o número de sítios é reduzido para  $N' = 4$ , resultando em  $b = 2$ .

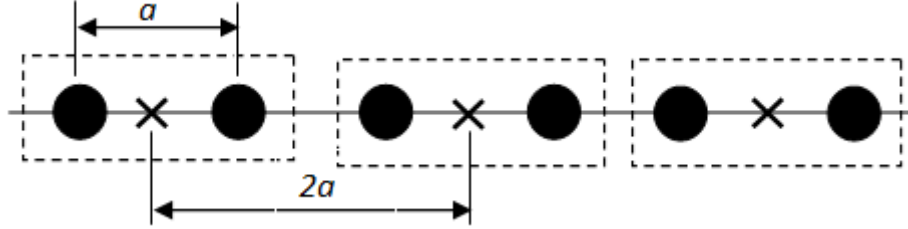


Figura 7 – Esquema de dizimação em uma rede unidimensional. Os graus de liberdade associados aos sítios originais (bolinhas), são substituídos por outros (cruzes). Os sítios são dizimados aos pares e o parâmetro de rede da rede resultante é  $2a$ .

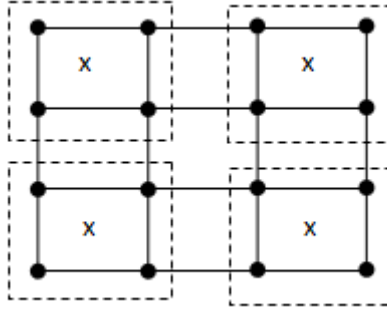


Figura 8 – Esquema de dizimação em uma rede bidimensional. Os sítios originais (bolinhas), são substituídos por sítios renormalizados (cruzes), em um passo de renormalização. Neste exemplo,  $b = 2$  e  $d = 2$ . A rede original tem  $N = 16$  sítios e a renormalizada tem  $N' = 4$ .

Uma transformação de grupo de renormalização pode ser vista como a atuação de um operador de renormalização  $R$  sobre o hamiltoniano do sistema[14]. O operador  $R$  representa o efeito da transformação de renormalização e o hamiltoniano renormalizado  $\mathcal{H}'$  pode ser formalmente escrito como

$$\mathcal{H}' = R\mathcal{H}. \quad (2.4)$$

O processo pode ser repetido iterativamente. Assim,

$$\mathcal{H}'' = R\mathcal{H}' \quad (2.5)$$

e, na  $n$ -ésima iteração,

$$\mathcal{H}^{(n+1)} = R\mathcal{H}^{(n)}. \quad (2.6)$$

Observe que o operador  $R$  não depende da iteração  $n$ , ou seja, do estágio do processo de transformação do sistema [9]. O hamiltoniano original pode ser parametrizado por um número qualquer de constantes de acoplamentos  $K_1, K_2 \dots$  ou, como veremos logo mais em um exemplo, o processo de renormalização induz novas interações entre os graus de liberdade renormalizados. É conveniente considerar os parâmetros  $K_1, K_2 \dots$  como sendo as componentes de um vetor  $\mathcal{K}$ . Agora, a transformação 2.6 implica em uma relação entre os acoplamentos após sucessivas aplicações da transformação do grupo de renormalização, ou seja,

$$\mathcal{K}^{(n+1)} = R(\mathcal{K}^{(n)}). \quad (2.7)$$

A transformação 2.7 descreve como as interações entre os graus de liberdade se modificam sob a ação do grupo de renormalização. Se

$$\mathcal{K}^{(n+1)} = \mathcal{K}^{(n)} = \mathcal{K}^* \quad (2.8)$$

dizemos que o ponto fixo da transformação foi alcançado e o hamiltoniano do sistema irá corresponder a um ponto fixo  $\mathcal{K}^*$ . Nesse ponto o sistema é invariante sob transformação de escala.

A energia livre do sistema por número  $N$  de sítios é

$$f_N = -\frac{(k_B T)}{N} \ln Z, \quad (2.9)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura absoluta e  $Z$  a função de partição canônica,

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(\mathcal{H}(\sigma)). \quad (2.10)$$

A soma em 2.10 corre sobre todas as possíveis configurações  $\sigma$  e no hamiltoniano,  $\mathcal{H}(\sigma)$ , já está incluído o fator  $-1/k_B T$ .

Como dito anteriormente, uma transformação de renormalização reduz o número de graus de liberdade de  $N$  para  $N/b^d$ , ver equação 2.3 e a ilustração da figura 8. Na construção de uma transformação de grupo de renormalização, impomos que a função de partição seja invariante sob a ação da transformação. Assim, uma relação entre a função de partição para um sistema com o número  $N$  de sítios da rede original, e o número de sítios  $N'$  da rede renormalizada é

$$Z_{N'}(\mathcal{H}') = Z_N(\mathcal{H}). \quad (2.11)$$

### 2.3.2 Análise de grupo de renormalização do modelo de Ising

A teoria de grupo de renormalização pode parecer muito abstrata, porém uma aplicação da técnica pode esclarecer e mostrar como se dá a operacionalização da mesma. Portanto, vamos ilustrar a técnica com o modelo de Ising unidimensional na ausência de

campo magnético externo. Ainda e que este modelo não exiba transição de fases, vários aspectos da técnica de grupo de renormalização podem ser enfatizados.

Na ausência do campo magnético,  $H = 0$ , o hamiltoniano 2.1, torna-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.12)$$

A função de partição do sistema é escrita

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}). \quad (2.13)$$

A soma corre sobre todas as configurações  $\sigma$  do sistema. Fazendo  $K = \beta J$ , com  $\beta = 1/k_B T$ , e explicitando a soma na equação 2.12, a função de partição torna-se

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{K(\dots + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 + \dots + \sigma_{i-1} \sigma_i + \sigma_i \sigma_{i+1} + \dots)}. \quad (2.14)$$

Observe a primeira linha da figura 9.

A primeira ideia na técnica de grupo de renormalização é remover do problema uma fração finita de graus de liberdade [15]. Por exemplo, somando sobre um subconjunto dos graus de liberdade. Os termos da soma no argumento da exponencial em 2.14 podem ser rearranjados de forma que os sítios pares apareçam uma única vez em algum dos fatores. De forma que a exponencial pode ser fatoradas na seguinte forma

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp[K\sigma_2(\sigma'_1 + \sigma_3)] \exp[K\sigma_4(\sigma_3 + \sigma_5)] \cdots. \quad (2.15)$$

Agora, somando sobre os índices pares, temos

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \dots} \{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_3)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_3)] \} \\ \times \{ \exp[K(\sigma_3 + \sigma_5)] + \exp[-K(\sigma_3 + \sigma_5)] \} \cdots. \quad (2.16)$$

A segunda ideia importante na técnica é organizar o resultado da soma parcial da função de partição de forma que este tenha a mesma estrutura da função de partição original [15]. Porém, a nova função de partição corresponder há um modelo de Ising com  $N/2$  sítios e, possivelmente, uma constante de acoplamento diferente  $K'$ . Se este procedimento é factível, é possível repetir o processo indefinidamente. A cada iteração, o número de graus de liberdade do sistema é reduzido à metade. Essencialmente, obteríamos uma relação de recorrência que permite calcular  $Z_{N'}$  a partir de um outro sistema com uma outra constante de acoplamento.

Vamos, portanto, tentar construir a relação de recorrência acima referida. Para tal, vamos procurar uma nova constante de acoplamento  $K'$  tal que

$$e^{K(\sigma_i + \sigma_{i+2})} + e^{-K(\sigma_i + \sigma_{i+2})} = f(K) e^{K'(\sigma_i \sigma_{i+2})}, \quad (2.17)$$

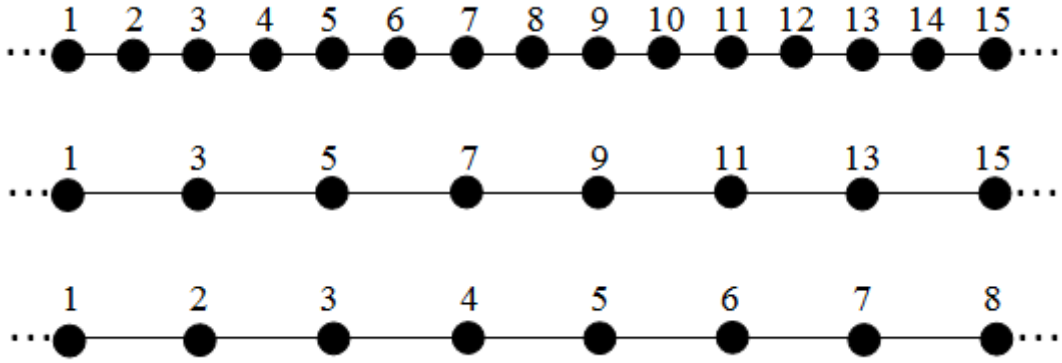


Figura 9 – Rede unidimensional de sítios. Os sítios da rede original, e seus respectivos rótulos, são mostrados na linha superior. Na linha intermediária, a rede resultante da soma parcial sobre os sítios pares. A distância entre os vizinhos é o dobro da distância entre os vizinhos da rede original. Esta rede pode ser rotulada da mesma maneira que a rede original foi rotulada, como pode ser visto na terceira linha. A terceira linha é idêntica à primeira. Apenas a escala, distância entre os sítios vizinhos, foi alterada. O processo pode ser iterado somando sobre os sítios pares da nova rede “renormalizada”.

para todos  $\sigma_i = \pm 1$ . O fator  $f(K)$  foi introduzido para garantir que o sistema de equações acima tenha solução única. Sendo possível encontrar uma solução, então a função de partição do sistema renormalizado torna-se

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots} f(K) \exp(K' \sigma_1 \sigma_3) f(K) \exp(K' \sigma_3 \sigma_5) \dots, \quad (2.18)$$

a qual pode ser reescrita como

$$Z = [f(K)]^{N/2} \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots} e^{K'(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_5 + \sigma_5 \sigma_7 + \dots)}, \quad (2.19)$$

compare com a equação 2.14 e figura 9. Assim, podemos escrever

$$Z(K, N) = [f(K)]^{N/2} Z(K', N/2), \quad (2.20)$$

essa é a relação de recorrência desejada. Esta transformação é chamada de *Transformação de Kadanoff*. Para determinar  $K'$  e  $f(K)$  da equação 2.17 basta resolver um sistema de equações com os valores possíveis de  $\sigma_i$  e  $\sigma_{i+2}$ .

Com  $\sigma_i = \sigma_{i+2} = \pm 1$ , resulta

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K)e^{K'}, \quad (2.21)$$

a outra possibilidade é  $\sigma_i = -\sigma_{i+2} = \pm 1$ ,

$$2 = f(K)e^{-K'} \quad (2.22)$$

ou

$$f(K) = 2e^{K'} \quad (2.23)$$

assim, há duas equações para duas incógnitas. A solução consiste em

$$K' = (1/2) \ln \cosh(2K), \quad (2.24)$$

e

$$f(K) = 2\sqrt{\cosh(2K)}. \quad (2.25)$$

De posse das duas equações, a relação de recorrência está completa. A menos de um fator  $-k_B T$ , a energia livre do sistema é dada por

$$Ng(K) = \ln Z_N. \quad (2.26)$$

Como  $Ng(K)$  é uma energia livre, visto que energias livres são extensivas,  $g(K)$  deve ser intensiva, ou seja, não dependa do tamanho do sistema. A partir da relação recursão para as funções de partições em diferentes tamanhos,

$$\ln Z(K, N) = (N/2) \ln f(K) + \ln Z(K', N/2), \quad (2.27)$$

temos que

$$g(K) = (1/2) \ln f(K) + (1/2)g(K') \quad (2.28)$$

ou ainda

$$g(K') = 2g(K) - \ln \left[ 2\sqrt{\cosh(2K)} \right]. \quad (2.29)$$

As equações 2.24, 2.25 e 2.29 são chamadas de equações de grupo de renormalização. Se a função de partição é conhecida para um valor de  $K'$ , pode-se gerar a energia livre para outros valores dessa recursão ou “renormalização”. Com a renormalização obtida a partir das equações 2.24 e 2.29 a nova constante de acoplamento,  $K'$ , calculada a partir da equação 2.25 é sempre menor que  $K$ .

As inversas das equações 2.24 e 2.29 formam um conjunto alternativos de equações, são elas

$$K = \frac{1}{2 \cosh(e^{2K'})}, \quad (2.30)$$

e

$$g(K) = \frac{1}{2}g(K') + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{K'}{2}. \quad (2.31)$$

Começando as iterações com a equação 2.30, a cada iteração o valor de  $K$  aumenta e tende ao infinito. Por outro lado a utilização de forma iterativa das equações 2.24 e 2.25, reduz sucessivamente o valor de  $K'$  até zero. Quando  $K = 0$  ou infinito, dizemos que os pontos fixos da transformação foram atingidos [15].

Tabela 2.1 – Observa-se que na medida que os valores de  $K$  aumentam,  $g(K) \approx K$ , e continua se aproximando até a iteração  $i = 23$ . A partir da iteração  $i = 24$ , verifica-se que  $g(K) = K$ . A temperatura vai a zero após 1028 iterações.

i	K	g(K)	Exato
1	0,01	ln 2	0,693197
2	0,100334	0,698147	0,698172
3	0,327447	0,745814	0,745827
4	0,636247	0,883204	0,883210
5	0,972710	1,106299	1,106302
6	1,316710	1,386078	1,386080
7	1,662637	1,697968	1,697968
8	2,009049	2,026876	2,026877
9	2,355582	2,364536	2,364537
10	2,702146	2,706633	2,706634
11	3,048717	3,050963	3,050963
⋮	⋮	⋮	⋮
22	6,861026	6,861027	6,864027
23	7,207599	7,207600	7,207600
24	7,554173	7,554173	7,554173
25	7,900746	7,900746	7,900746
⋮	⋮	⋮	⋮
1026	354,820910	354,820910	354,820910
1027	355,167484	355,167484	355,167484
1028	$\infty$	355,514057	$\infty$
1029	$\infty$	$\infty$	$\infty$

A Tabela 2.1 mostra os valores de  $K$  e  $g(K)$  a cada iteração  $i$ , os valores são obtidos aplicando as equações 2.30 e 2.31, começando com um pequeno valor da constante de acoplamento,  $K' = 0,01$ , as interações entre os spins podem ser desprezadas e

$$Z(K', N) = Z(0,01, N) \approx Z(0, N) = 2^N.$$

Portanto

$$g(K' = 0,01) = \ln 2. \quad (2.32)$$

Com o valor de  $K'$  substituído na equação 2.30 encontra-se  $K$ . Com os valores de  $K'$  e a estimativa de  $g(K')$  encontra-se o valor de  $g(K)$  na equação 2.31. O novo valor para  $K'$  é gerado a partir da equação 2.24 e a próxima iteração é calculada. Depois de várias iterações o ponto fixo da transformação é atingido, nesse caso o infinito.

Vamos agora analisar um sistema que exhibe uma transição de fases. Consideremos, pois, o modelo de Ising em uma rede quadrada sem campo magnético externo. Um pedaço da rede é mostrado na figura 10, na qual rotulamos alguns dos sítios. Note que esta rede pode ser vista como a composição de duas sub-redes, de tal forma que cada sítio de uma



das sub-redes só tenha primeiros vizinhos que pertencem à outra e vice-versa. Por exemplo, o sítio rotulado por 5 na figura 10 pertence a uma sub-rede, enquanto que seus vizinhos, de rótulos 1, 2, 3 e 4 pertencem à outra sub-rede. O sítio de rótulo 6 pertence à mesma sub-rede que o 5. Esta situação é análoga ao caso unidimensional, onde cada sítio par tem vizinhos ímpares e vice-versa. Dessa forma, é possível escolher um subconjunto de sítios da rede quadrada e realizar uma soma parcial da função parcial do sistema, de maneira completamente análoga ao caso unidimensional, e reduzir o número de graus de liberdade do sistema à metade. Como ilustrado na figura 10, após somar sobre os graus de liberdade de uma das sub-redes, a rede resultante é uma rede quadrada rotacionada de  $45^\circ$  e parâmetro de rede  $\sqrt{2}$  vezes o da rede original. A rede “renormalizada” é vista à esquerda da figura 10.

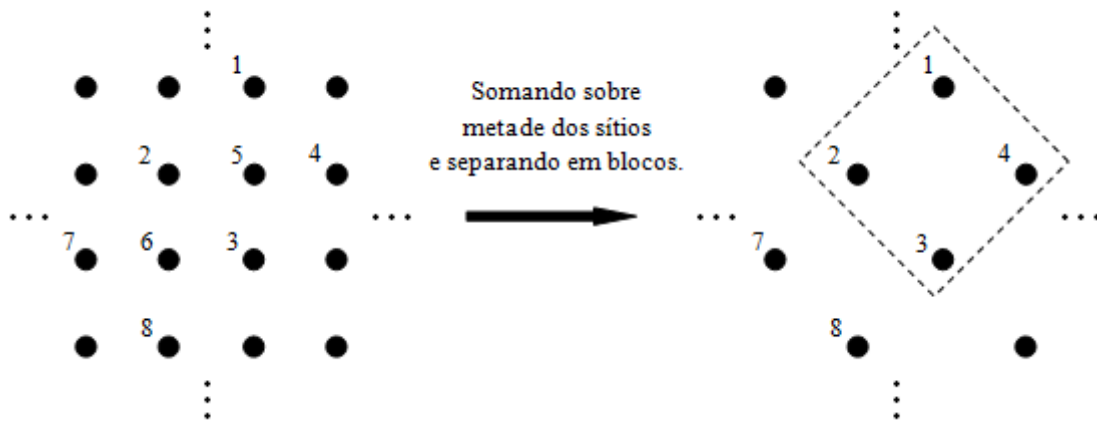


Figura 10 – Dizimação da metade dos sítios em uma rede quadrada. Os sítios remanescentes na rede dizimada formam também uma rede quadrada (rotacionada de  $45^\circ$ ). Observe o bloco de sítios destacado pelo quadrado tracejado.

Seja  $\mathcal{A}$  a sub-rede que contém os sítios 5 e 6, conforme a figura 10, e  $\mathcal{B}$  a sub-rede contendo os demais sítios. A função de partição pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{\cdots [K\sigma_5(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)] + [K\sigma_6(\sigma_2+\sigma_3+\sigma_7+\sigma_8)] \cdots}. \quad (2.33)$$

Executando as somas sobre os spins da sub-rede  $\mathcal{A}$ , obtemos

$$Z = \sum_{\{\sigma \in \mathcal{B}\}} \cdots \{ \exp [K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)] + \exp [-K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)] \} \\ \times \{ \exp [K(\sigma_2 + \sigma_7 + \sigma_8 + \sigma_3)] + \exp [-K(\sigma_2 + \sigma_7 + \sigma_8 + \sigma_3)] \} \cdots. \quad (2.34)$$

Analogamente ao caso unidimensional, deseja-se agora encontrar uma transformação de Kadanoff, que transforma a função de partição do sistema com  $N$  spins em uma função de partição de um sistema com  $N/2$  spins. Um procedimento similar ao anterior, sugere

que tentemos escrever o hamiltoniano renormalizado com interações apenas entre primeiros vizinhos. Isto corresponderia a escrever o primeiro termo entre chaves da equação 2.34 da forma

$$\exp[K'(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4)]. \quad (2.35)$$

A próxima etapa seria determinar uma expressão para o acoplamento  $K'$  exigindo que a expressão acima seja igual ao correspondente termo da equação 2.34 para todos os possíveis valores das variáveis de spins do bloco considerado. As quatro possibilidades de arrumação dos valores das variáveis são

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = \pm 1,$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1,$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1$$

e

$$\sigma_1 = -\sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1.$$

Note porém que a soma,  $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4$  na equação 2.34, pode assumir um dos cinco possíveis valores  $\{-4, -2, 0, 2, 4\}$ . Enquanto que, a soma dos produtos na equação 2.35 só pode assumir três valores distintos, a saber,  $\{-4, 0, 4\}$ . Assim sendo, não é possível obter um sistema de equações consistente que forneça um mapa que leva  $K$  em  $K'$ , mesmo com a introdução de uma função de  $K$  como foi feito no caso unidimensional. Uma possibilidade é introduzir novos termos de acoplamentos entre os spins do bloco. Por exemplo, introduzir no hamiltoniano renormalizado um termo

$$K_2(\sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_4)$$

de interação de segundos vizinhos e um outro termo de interação de quatro spins,

$$K_3\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4.$$

Mais detalhes pode ser visto na referência [15].

Para nossos objetivos, é suficiente observar que esta proliferação de novos acoplamentos é regra geral na aplicação da técnica de grupo de renormalização à sistemas não triviais. Além disso, não existe um método sistemático para escrever uma relação de recorrência entre as funções de partição do sistema com  $N$  spins e aquela com  $N/2$  spins. Finalmente, após algumas considerações (ver [16]), a relação de recorrência entre o acoplamento original e o renormalizado é

$$K' = \frac{3}{8} \ln \cosh(4K). \quad (2.36)$$

Não obstante as várias aproximações envolvidas na obtenção do mapeamento 2.36, este apresenta um ponto fixo não-trivial que indica a ocorrência de uma transição de fases.

Fazendo  $K' = K = K_c$  em 2.36, obtemos  $K_c = 0,50698$ . Este valor é surpreendentemente próximo do valor exato  $K_c = 0,44069$ .

A aplicação da técnica de grupo de renormalização para o caso unidimensional, mostra que o grupo de renormalização tem uma solução elegante e bem próxima da solução exata. Este trabalho de dissertação apresenta uma técnica de resolução por rede de tensores que obtém resultados equivalentes aos obtidos pela técnica de grupo de renormalização. Mas para a abordagem por rede de tensores, há a necessidade de fatorar matrizes, manipular tensores e seus respectivos índices. Veremos que a ligação entre os tensores ocorre quando os índices comuns de tensores vizinhos são contraídos. Na parte que envolve a fatoração de matrizes, dentre várias técnicas, a utilizada para trabalhar com rede de tensores é a decomposição de valores singulares também rotulada como *SVD*, *Singular Value Decomposition*, bem como uma generalização de alta ordem, que é utilizada em problemas de renormalização de estados de uma rede de tensores.

## 2.4 Grupo de renormalização na representação de rede de tensores

Neste capítulo, uma representação tensorial de um sistema de spins interagentes, definido numa rede, será apresentada. Para a conveniência do leitor faremos um breve resumo das propriedades de tensores e de algumas operações com estes objetos.

### 2.4.1 Tensores

Tensores são entidades matemáticas empregadas para descrever propriedades ou atributos de objetos com várias componentes. São muito usados em física e engenharias, por exemplo. Eles são uma generalização de escalares e vetores [17]. O que caracteriza se a grandeza é escalar, vetorial ou tensorial é como ela se transforma sob uma rotação, esse comportamento é caracterizado pelo o que é denominado de “ordem” do tensor. Para grandezas escalares, por exemplo, o tensor é dito de ordem zero, pois grandezas escalares são invariantes por rotação, como por exemplo massa e distância. A ordem (ou classificação) de um tensor é definida pelo número de índices necessários para descrevê-lo, no caso dos escalares, que são números individuais, o tensor possui ordem zero. Dada uma base de referência, um tensor pode ser representado como um arranjo multidimensional de valores numéricos ou funções e sua ordem será a dimensionalidade do arranjo necessário para representá-lo, ou equivalentemente, o número de índices necessários para identificar um dos componentes desse arranjo. Vale ressaltar que não é qualquer tipo de arranjo numérico que corresponde a um tensor. As componentes de um tensor satisfazem certas propriedades

sob uma transformação do sistema de coordenadas. Por exemplo, o arranjo quadrado

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

só formará um tensor se suas componentes  $A_{ij}$ , expressas no sistema de coordenadas  $(x_1, x_2, x_3)$ , se transformarem de acordo com [18]

$$A'_{ij} = \sum_{k,l} \frac{\partial x'_i}{\partial x_k} \frac{\partial x'_j}{\partial x_l} A_{kl}, \quad (2.38)$$

para o sistema de coordenadas  $(x'_1, x'_2, x'_3)$ .

Nem todo tensor obedece uma transformação da forma 2.38. Nesses casos, distinguimos o tipo do tensor pela localização de seus índices. Por exemplo,

$$T_j^{i} = \sum_{k,l} \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^l}{\partial x^j} T_l^k \quad (2.39)$$

é um tensor misto. Ele é contravariante em relação ao índice  $i$  (superior) e covariante em relação ao índice  $j$  (inferior). Esta distinção só é relevante em sistemas de coordenadas não cartesianos e será ignorada daqui por diante.

Um tensor de segunda ordem possui 9 componentes,  $T_{11}, \dots, T_{33}$ , de tal forma que sob uma rotação se transforma com  $T \rightarrow T'$  com

$$T'_{ij} = \sum_k \sum_l A_{ik} A_{jl} T_{kl}. \quad (2.40)$$

A transformação acima pode ser escrita como

$$T' = AT A^{-1} \quad (2.41)$$

Tais transformações são denominadas transformações de semelhança. Em relação a simetria temos tensores simétricos ou anti-simétricos, dependendo da relação entre os índices, por exemplo se

$$T_{lm}^{ijk} = T_{lm}^{kji} \quad (2.42)$$

para todas as combinações possíveis entre  $i$  e  $k$ , o tensor é dito simétrico, pois apresenta simetria em tais índices. Já no caso de

$$T_{lm}^{ijk} = -T_{lm}^{kji} \quad (2.43)$$

ou a troca de índices resultar em um tensor nulo, para todas as combinações possíveis entre  $i$  e  $k$ , o tensor é dito anti-simétrico, pois apresenta anti-simetria em tais índices

Com tensores podemos realizar algumas operações [17]. Tensores de mesma ordem e tipo podem ser somados ou subtraídos, resultando em um outro tensor de mesma ordem e tipo

$$S_{ij}^k = A_{ij}^k + B_{ij}^k \quad (2.44)$$

e

$$D_{ij}^k = A_{ij}^k - B_{ij}^k \quad (2.45)$$

É também possível formar um tensor a partir do produto de dois outros. Vários produtos entre tensores podem ser definidos. O produto externo ou produto direto entre dois tensores é determinado da forma

$$T_{ijk} = U_{ij}W_k, \quad (2.46)$$

$$T^{ijk} = U^{ij}W^k \quad (2.47)$$

e

$$T_{ij}^{kl} = U_{ij}W^{kl}. \quad (2.48)$$

Para um tensor misto, os índices podem sofrer contração igualando dois desses índices, a soma ocorre sobre eles, ou seja,

$$T_j^l = T_{ij}^{il}, \quad (2.49)$$

contraindo novamente, o tensor de ordem zero é obtido,

$$T = T_j^j = T_{ij}^{ij}. \quad (2.50)$$

Após as contrações, temos como resultado tensores diferentes do tensor original, embora ainda sendo representados pela letra  $T$ . A distinção entre eles é dada pelos seus respectivos índices, o tensor do tipo  $T_j^l$  é diferente do tensor do tipo  $T_{ij}^{kl}$ .

## 2.4.2 Representação diagramática de tensores

Como veremos na subseção 2.4.4 a função de partição de um modelo de spins numa rede qualquer pode ser escrita como um produto tensorial entre tensores associados aos graus de liberdade dos spins. O produto envolve a soma de produtos de elementos de tensores. De forma que uma soma é efetuada sobre todos os valores dos índices comuns entre os tensores. Somar sobre um dado índice é chamado de contração do índice. Um índice comum a dois tensores pode ser interpretado como uma ligação entre eles. Assim, os tensores podem ser vistos como os nós ou vértices de um grafo e os índices suas arestas. Tal grafo é o que nós chamaremos de uma rede de tensores. A soma sobre todos os possíveis índices de uma dada rede de tensores é denominada contração da rede de tensores.

Uma forma conveniente de se lidar com tensores e redes de tensores é empregar uma notação diagramática para representar as equações [19]. Na figura 11 apresentamos os diagramas que representam um escalar, um vetor, uma matriz e um tensor de terceira ordem. Nestes diagramas tensores são representados por formas geométricas (bolas, triângulos,

quadrados, ...) e índices são representados por linhas que saem dessas formas as quais denominamos pernas. Logo, uma rede de tensores é um conjunto de formas geométricas interconectadas por linhas resultantes da conexão das pernas associadas ao índice comum a dois tensores.

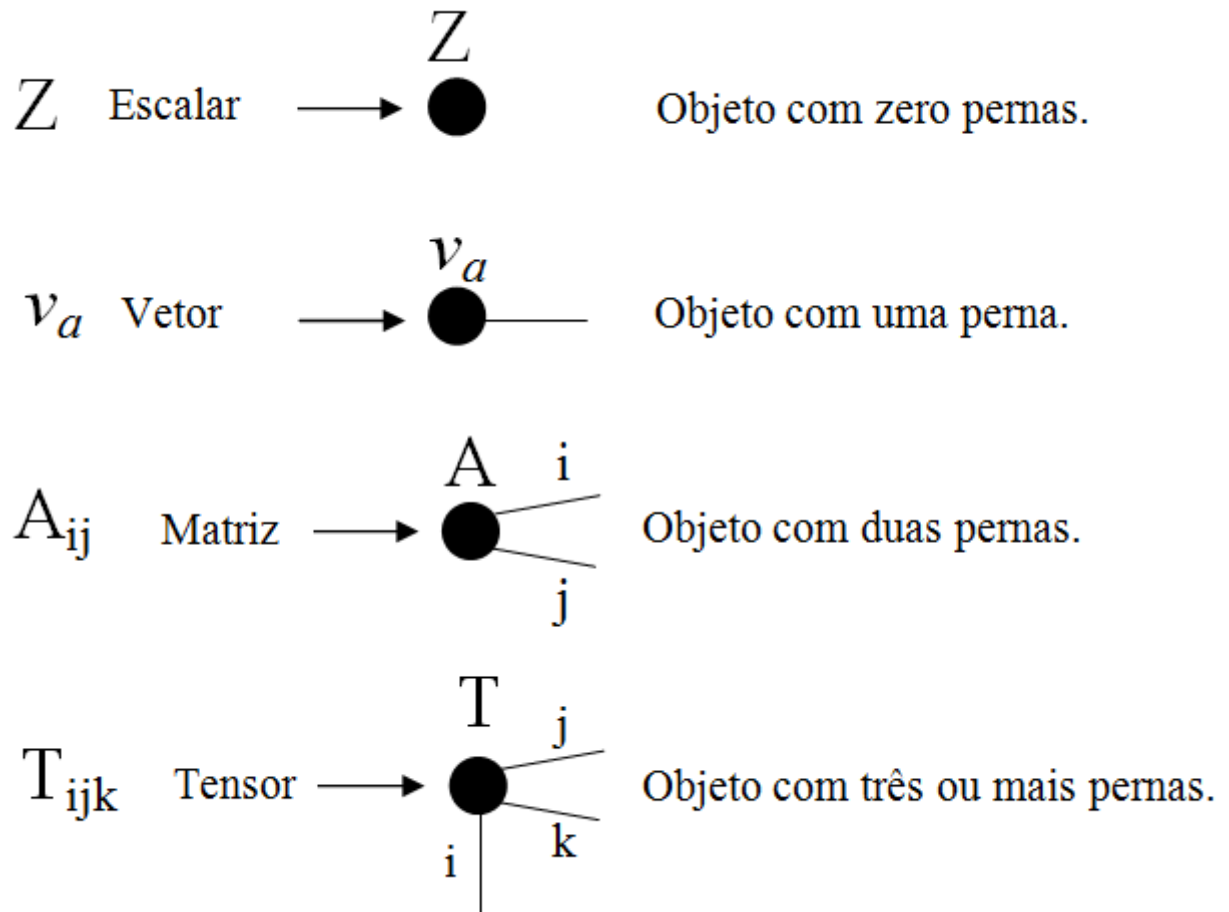


Figura 11 – Representação diagramática de um escalar, um vetor, uma matriz e um tensor com três índices. Observe que o número de pernas no diagrama está associado ao número de índices (ordem) do tensor.

A contração de um particular índice em uma rede de tensores pode levar ao agrupamento de dois ou mais índices, ver o exemplo da figura 12. Note o agrupamento dos índices  $i$  e  $k$  dando origem ao índice composto  $\alpha$ . Da mesma forma, os índices  $j$  e  $l$  combinam-se em  $\beta$ .

Como um exemplo vamos representar um produto matricial nesta notação diagramática. Lembre-se que cada elemento da matriz produto envolve a soma sobre um índice comum às duas matrizes a serem multiplicadas, ou seja, a uma contração de índice. A figura 13 mostra o produto de duas matrizes  $A$  e  $B$ , que resulta na matriz  $C$ , tanto em forma de equação quanto a correspondente representação diagramática.

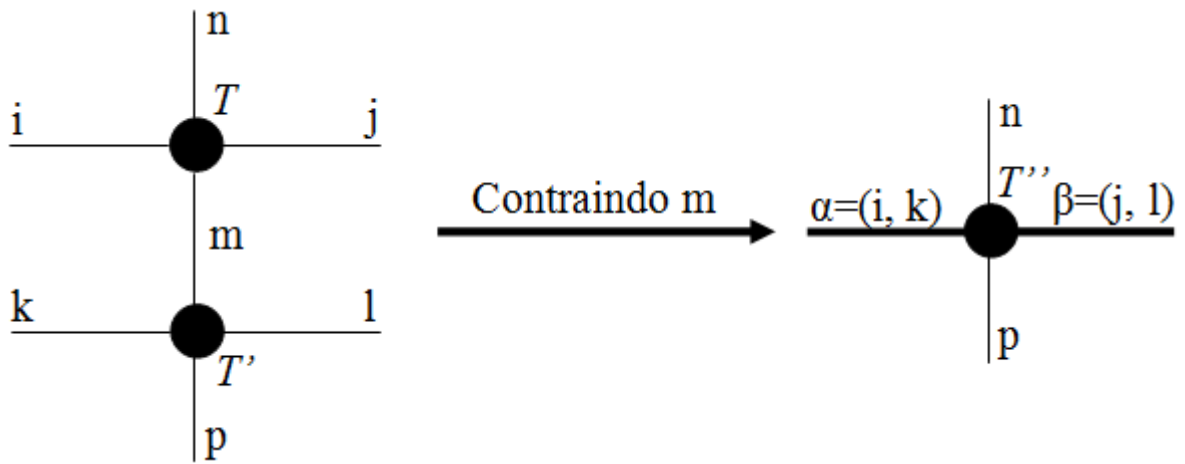


Figura 12 – A contração do índice  $m$  do diagrama da esquerda leva ao agrupamento dos índices  $i$  e  $k$  bem como  $j$  e  $l$ . À direita, a representação diagramática da contração.

De maneira geral, o agrupamento de dois índices, como na figura 14, produz um outro índice que assume valores no conjunto formado pelo produto direto dos conjuntos nos quais os índices originais assumem valores. A notação  $\beta = (j, k)$  indica qualquer relação biunívoca que associa o par ordenado de índices originais  $(j, k)$  ao resultante  $\beta$ .

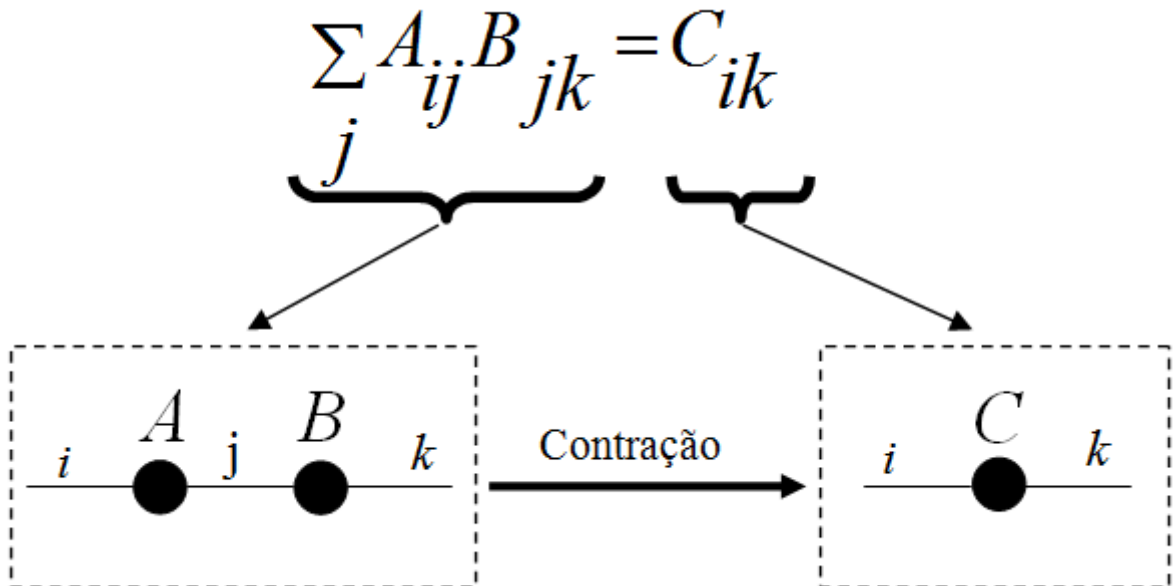


Figura 13 – Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por  $A_{i,j}$  e  $B_{j,k}$ , os índices  $i$  e  $k$  são livres enquanto o índice  $j$  é contraído.

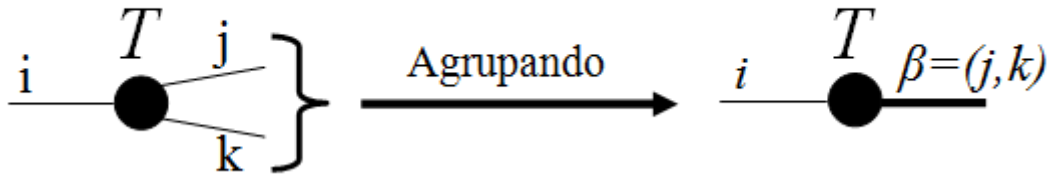


Figura 14 – Representação diagramática de uma operação de agrupamento de dois índices. Um tensor de terceira ordem,  $T_{ijk}$ , tem as pernas  $j$  e  $k$  agrupadas. A perna resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa e é rotulada pelo índice combinado  $\beta = (j, k)$ .

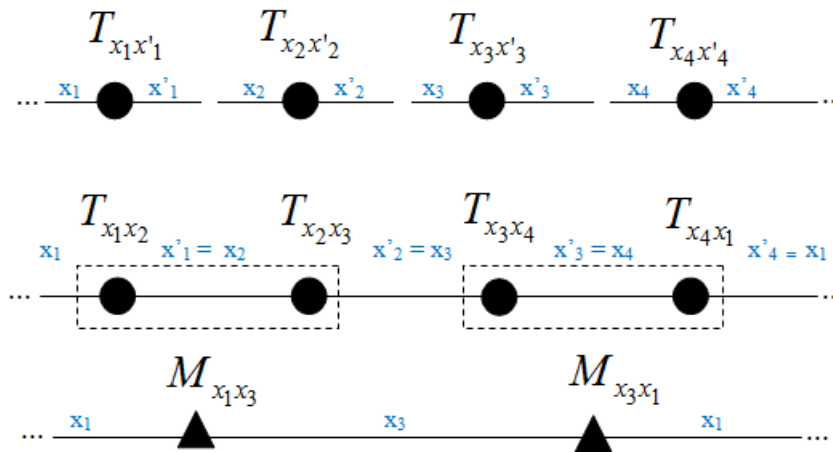


Figura 15 – Produto entre dois tensores em uma rede unidimensional. Na primeira fileira os tensores são representados individualmente, cada perna indica um índice do tensor. Na segunda fileira observa-se que a cada par de tensores dentro do retângulo tracejado as pernas são ligadas, formando um índice comum. O tensor  $M$  é o resultado da contração do índice comum entre dois tensores dentro do retângulo tracejado.

A figura 15 mostra o produto entre tensores em uma rede unidimensional. O produto de dois tensores é a contração das pernas comuns, ou seja, se há dois tensores com um índice comum, será feita uma soma de produtos sobre tal índice,

$$\sum_j T_{ij} T_{jl} = T_{il}. \tag{2.51}$$

Pernas livres correspondem a índices que não serão contraídos, ver figura 16. Decorre daí que a contração de uma rede de tensores pode resultar em um outro tensor quando restar pernas livres ou um escalar, caso contrário.



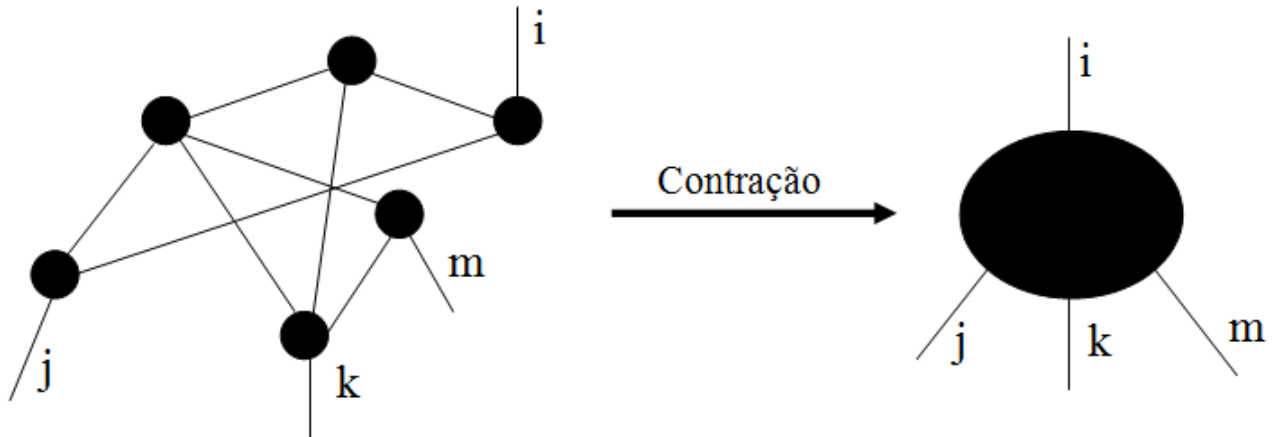


Figura 16 – Diagrama de uma rede de tensores com várias ligações entre os tensores e quatro índices livres. Todos os índices comuns entre os tensores são contraídos, os índices livres são pernas que não serão contraídas. O resultado da operação é um tensor de quarta ordem de índices  $i$ ,  $j$ ,  $k$  e  $m$ .

### 2.4.3 Decomposição em Valores Singulares

A decomposição em valores singulares - *Singular Value Decomposition* - *SVD*, é um tipo de fatoração de uma matriz [20]. A *SVD* de uma matriz qualquer  $M_{m \times n}$ , é uma fatoração na forma  $M = U \Sigma V^\dagger$  onde  $\Sigma$  é uma matriz retangular diagonal real e não-negativa,  $U$  e  $V$  são unitárias e  $V^\dagger$  é a matriz hermitiana conjugada à matriz  $V$ .

Os valores singulares são iguais a raiz quadrada dos autovalores  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  da matriz simétrica  $M^T M$ , ou seja

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1}, \quad \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2}, \quad \dots, \quad \sigma_n = \sqrt{\lambda_n}$$

são os valores singulares de  $M$ .

Explicitamente, a *SVD* permite escrever

$$M_{m \times n} = U_{m \times m} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \end{bmatrix} V_{n \times n}^\dagger, \quad (2.52)$$

os números  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$  são os valores singulares de  $M$  organizados na ordem do maior para o menor valor [21].

Na decomposição em valores singulares as matrizes  $U$ ,  $\Sigma$  e  $V^\dagger$  satisfazem as seguintes condições:

1.  $V = [v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n]$  diagonaliza ortogonalmente  $M^T M$ .

2. Os elementos da diagonal de  $\Sigma$  são  $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1}$ ,  $\sigma_2 = \sqrt{\lambda_2}$ ,  $\dots$   $\sigma_n = \sqrt{\lambda_n}$ , sendo  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , os autovalores de  $M^T M$  associados aos vetores coluna de  $V$  e ordenados de tal modo que  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$ .
3.  $u_i = Mv_i/\sigma_i$ , com  $i = 1, 2, \dots, n$ .

Um exemplo de uma *SVD* será mostrado agora. Para o exemplo uma matriz  $M$  quadrada e simétrica foi escolhida de forma proposital, pois servirá como base para a seção que trata da representação de um modelo de spin por uma rede de tensores. Seja, então, uma matriz  $M$  dada por

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

com  $\beta$  e  $J$  números reais, por enquanto, arbitrários. Os autovalores de  $M^T M$ , são soluções de  $\det(M^T M - \lambda I) = 0$ , com

$$M^T M = \begin{pmatrix} e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} & 2 \\ 2 & e^{2\beta J} + e^{-\beta J} \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Denotando por  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  o maior e o menor autovalor, temos que os valores singulares de  $M$  são

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{2[\cosh(2\beta J) - 1]} = 2 \cosh(\beta J) \quad (2.55)$$

e

$$\sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{2[\cosh(2\beta J) + 1]} = 2 \sinh(\beta J). \quad (2.56)$$

Os valores singulares compõe a diagonal da matriz  $\Sigma$ , portanto

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Sejam  $v_1$  e  $v_2$  os autovetores de  $M^T M$  associados à  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ , respectivamente. Temos portanto,

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

e

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

resultando em,

$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Os autovetores da matriz  $U$  são dados por

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} Mv_i. \quad (2.61)$$

De maneira que a matriz  $U$  é

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

Verifica-se que  $U = V$ , como era esperado, já que  $M$  é simétrica.

Há também a alta ordem da *SVD* é o que chamamos de *HOSVD* - *Higher-Order Singular Value Decomposition*, que é na verdade uma generalização da decomposição de uma matriz em valores singulares. O que difere a *SVD* da *HOSVD* é que a *HOSVD* é utilizada na decomposição de tensores, enquanto a *SVD* é utilizada na decomposição de matrizes. Na seção 2.4.2 foi apresentada a representação diagramática dos tensores. No trabalho aqui desenvolvido os tensores serão contraído de quatro em quatro, ou seja a cada quatro sítios teremos uma contração formano apenas um portanto para uma rede com  $N$  sítios, a cada contração ela será reduzida em  $N/4$ . As contrações ocorrem tanto na horizontal como na vertical e podemos o tensor como

$$T_{xx'yy'}^{(n)} = \sum_{i,k,j,m} T_{x_1iy_1m} T_{ix'_1y_2j} T_{kx'_2jy'_2} T_{x_2kmy'_1}. \quad (2.63)$$

com o novo tensor, que foi resultado da contração, podemos aplicar a *HOSVD*, de forma que o tensor fique na forma [22]

$$M_{xx'yy'}^{(n)} = \sum S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'}^R U_y^U U_{y'}^D. \quad (2.64)$$

Os  $U$ 's que aparecem na equação 2.64 são matrizes unitárias e  $S$  é o tensor núcleo de  $M^{(n)}$ . Como as contração ocorrem nas duas direções, teremos ligações duplas na vertical e na horizontal conforme a figura 17.

Para trabalhar com a equação 2.64, algumas propriedades devem ser observadas para qualquer índice  $j$ :

1. Ortogonalidade

$$\langle S :, j, :, : | S :, j', :, : \rangle = 0, j \neq j' \quad (2.65)$$

2. Pseudodiagonal

$$|S :, j, :, j| \geq |S :, j', :, :|, j < j' \quad (2.66)$$

onde  $\langle S :, j, :, j | S :, j', :, : \rangle$  é o produto interno de dois tensores e  $|S :, j, :, :|$  é a norma [22].

Para determinar o tensor  $T^{(n+1)}$  após uma contração, basta determinar as quatro matrizes unitárias da equação 2.64. Para isso devemos transformar o tensor  $M_{xx'yy'}$  em uma matriz, para tal transformação um índice será considerado fixo para formar o índice da coluna e os outros três índice serão fixados para formar o índice da linha. Como exemplo

$$M_{xx'yy'} = M'_{x,x'yy'}, \quad (2.67)$$

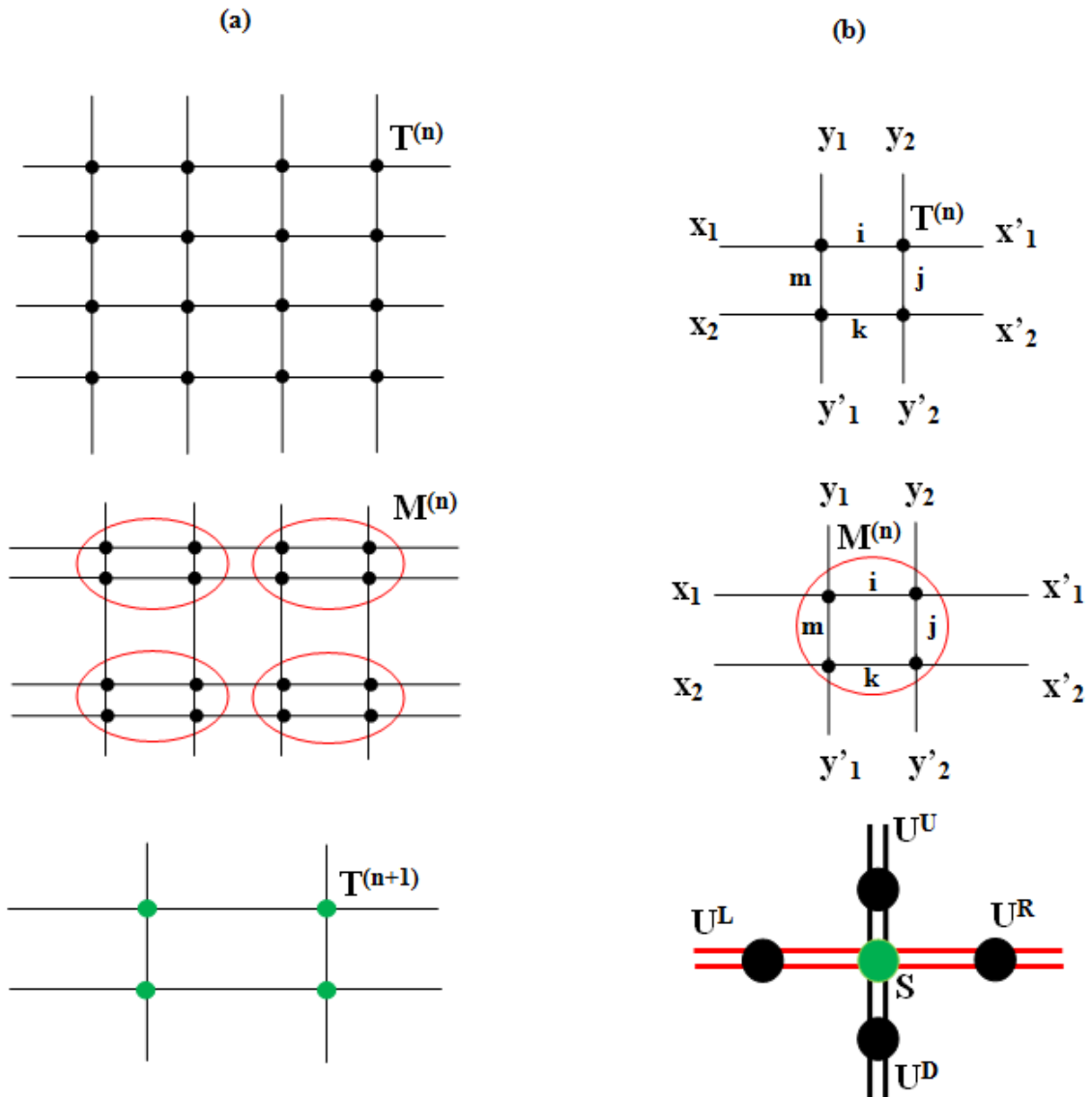


Figura 17 – Em (a) é representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dos eixos  $x$  e  $y$ . Em (b) temos os passos da contração e a renormalização de quatro estados.

onde o primeiro índice  $,x$ , é considerado o índice das linhas e os índices  $x'y'$  juntos, serão o índice da coluna da matriz.

Para determinar a matriz  $U^L$ , por exemplo, simétrica, a *SVD* seria

$$M'M^\dagger = U^L \Sigma^L (U^L)^\dagger, \quad (2.68)$$

onde a matriz diagonal,  $\Sigma$ , representa os autovalores de  $MM^\dagger$ , e também é verdade que

$$|S_{i, :, :, :}|^2 = \Sigma_i^L \quad (2.69)$$

### 2.4.4 Representação por Rede de Tensores

O hamiltoniano 2.1, sem campo magnético, é escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.70)$$

A função de partição deste sistema é

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}},$$

ou seja

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j\} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j},$$

que pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} W(\sigma_i, \sigma_j), \quad (2.71)$$

onde

$$W(\sigma_i, \sigma_j) = e^{[\beta J \sigma_i \sigma_j]} \quad (2.72)$$

define uma matriz cujos índices de linha e coluna são  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$ , respectivamente. Como os valores de  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  são  $\pm 1$ , a seguinte convenção,

$$\begin{aligned} W(1, 1) &\rightarrow W_{11}; \\ W(1, -1) &\rightarrow W_{12}; \\ W(-1, 1) &\rightarrow W_{21}; \\ W(-1, -1) &\rightarrow W_{22}, \end{aligned}$$

permite escrever os elementos da matriz  $W$  na forma

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

A partir da equação 2.72, substituindo os valores de  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$ , a matriz  $W$  para o modelo de Ising é

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}. \quad (2.74)$$

A matriz  $W$  é real e simétrica. Isto decorre da simetria do hamiltoniano 2.70 e fica evidente a partir da equação 2.72. Matrizes simétricas possuem autovalores reais e como veremos mais abaixo seus autovalores são positivos. Assim a matriz  $W$  é simétrica e positiva definida. Agora decomponamos  $W$  em valores singulares conforme a seção 2.4.3,

$$W(\sigma_i, \sigma_j) = \sum_l U(\sigma_i, l) \Sigma_l V(\sigma_j, l), \quad (2.75)$$

e definindo

$$Q_a(\sigma, l) = U(\sigma, l)\Sigma_l^{1/2} \quad (2.76)$$

e

$$Q_b(\sigma, l) = V(\sigma, l)\Sigma_l^{1/2}, \quad (2.77)$$

expressamos a matriz  $W$  da seguinte forma

$$W = Q_a Q_b^T. \quad (2.78)$$

Agrupando todos os elementos das matrizes  $Q$ 's que se conectam ao sítio  $i$  um tensor local pode ser definido somando-se sobre os estados  $\sigma_i$  [23],

$$T_{x,y,z,\dots} = \sum_{\sigma_i} Q(\sigma_i, x)Q(\sigma_i, y)Q(\sigma_i, z)\cdots, \quad (2.79)$$

a ordem do tensor é igual ao número de ligações de cada sítio da rede. Ou seja, depende da rede como mostrado na figura 18. A dimensão dos índices dos tensores é igual número de estados do sítio. Logo, para um modelo de Ising, é igual a dois. A representação da função de partição por uma rede de tensores é

$$Z = Tr \prod_i T_{x_i, y_i, z_i, \dots}, \quad (2.80)$$

onde o traço indica a contração de todos os índices (pernas) que conectam um sítio a outro.

Na figura 18, observa-se duas redes, em (a) uma rede “favo de mel” e em (b) uma rede quadrada. Os respectivos tensores das redes “favo de mel” e quadrada são escritos da seguinte forma

$$T_{xyz} = \sum_{\sigma_i} Q(\sigma_i, x)Q(\sigma_i, y)Q(\sigma_i, z) \quad (2.81)$$

e

$$T_{xx'yy'} = \sum_{\sigma_i} Q(\sigma_i, x)Q(\sigma_i, x')Q(\sigma_i, y)Q(\sigma_i, y'). \quad (2.82)$$

Conforme o exemplo da *SVD* na seção 2.4.3, para a matriz  $W$  positiva e simétrica, da equação 2.74, as matrizes unitárias  $U$  e  $V$  são iguais, portanto as equações 2.76 e 2.77 são iguais, ou seja,  $Q_a = Q_b = Q$ . Os valores singulares de  $W^T W$ ,  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ , formarão a matriz diagonal

$$\lambda = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

com os elementos da matriz  $Q$  sendo determinados por

$$\begin{aligned} Q_{11} &= U_{11}\lambda_1^{1/2} \\ Q_{12} &= U_{12}\lambda_2^{1/2} \\ Q_{21} &= U_{21}\lambda_1^{1/2} \\ Q_{22} &= U_{22}\lambda_2^{1/2} \end{aligned} \quad (2.84)$$

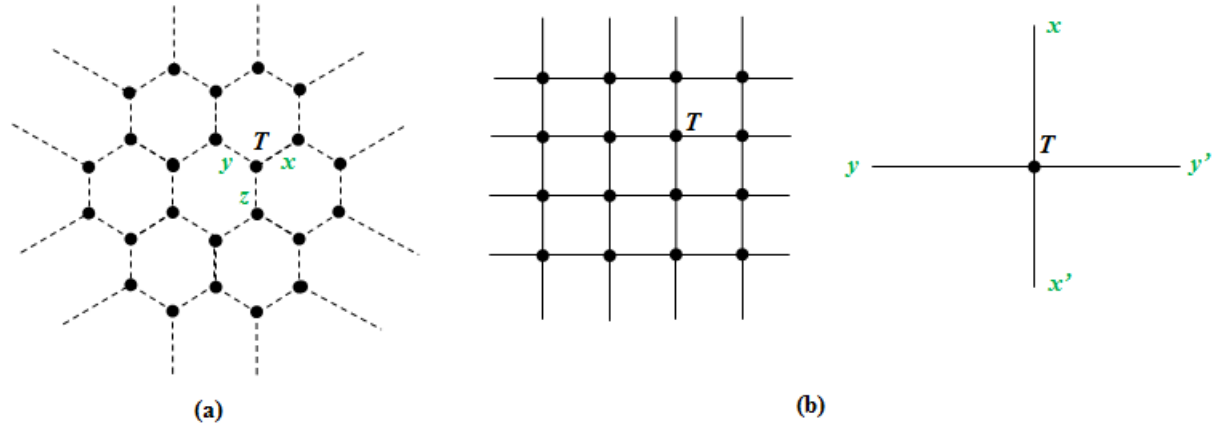


Figura 18 – Em (a) uma rede “favo de mel” onde o tensor  $T$  é de terceira ordem,  $T_{xyz}$ . Em (b) é representada uma rede quadrada onde o tensor  $T$  é de quarta ordem,  $T_{xx'yy'}$ .

como

$$U = V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

temos a matriz

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J)} & \sqrt{\sinh(\beta J)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J)} & -\sqrt{\sinh(\beta J)} \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

## 2.5 Modelo de Ising por rede de tensores

O modelo de Ising em uma dimensão pode ser resolvido por rede de tensores. Para isso o ponto de partida será o hamiltoniano 2.1 e uma rede unidimensional com  $N$  sítios com um parâmetro de rede  $a$  conforme foi mostrado na figura 7.

Com o hamiltoniano 2.1, os elementos da matriz  $W$  podem ser determinados da seguinte forma [23],

$$W(\sigma_i, \sigma_j) = \exp \left[ \beta J \sigma_i \sigma_j + \frac{\beta H}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \right]. \quad (2.86)$$

Conforme a convenção da equação 2.73, escrever a matriz  $W$  na presença do campo externo resulta em

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix}. \quad (2.87)$$

As raízes quadradas dos autovalores de  $W^T W$  são os valores singulares  $\sigma_i$  de  $W$ . Com

$$W^T W = \begin{pmatrix} e^{2\beta J + 2\beta H} + e^{-2\beta J} & e^{\beta H} + e^{-\beta H} \\ e^{\beta H} + e^{-\beta H} & e^{2\beta J - 2\beta H} + e^{-2\beta J} \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

os autovalores são,

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta H) \pm e^{\beta J} \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}} \quad (2.89)$$

O cálculo da matriz  $U$  e da matriz  $Q$  se encontra no apêndice A. Os elementos de matrizes são expressões enormes e pouco elucidativas. Para facilitar o desenvolvimento, a matriz  $Q$  será escrita como

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ a & -b \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

Como a matriz  $W$  da equação 2.87 é simétrica, e com as equações 2.75 e 2.79, os tensores para uma dimensão são

$$T_{xx'}^i = \sum_{\sigma_i} Q_{\sigma_i x} Q_{\sigma_i x'}, \quad (2.91)$$

e com a convenção anteriormente adotada

$$T_{xx'}^i = Q_{1x} Q_{1x'} + Q_{2x} Q_{2x'}. \quad (2.92)$$

O valor de cada elemento de tensor é calculado fazendo os índices  $x$  e  $x'$  assumirem os seus dois valores possíveis. Como exemplo, segue o cálculo dos elementos  $T_{11}$ ,  $T_{12}$ ,  $T_{21}$  e  $T_{22}$

Elemento  $T_{11}$ :

$$\begin{cases} T_{11} = Q_{11}Q_{11} + Q_{21}Q_{21} \\ T_{11} = a^2 + a^2 \\ T_{11} = 2a^2 \end{cases} \quad (2.93)$$

Elemento  $T_{12}$ :

$$\begin{cases} T_{12} = Q_{11}Q_{12} + Q_{21}Q_{22} \\ T_{12} = ab - ab \\ T_{12} = 0 \end{cases} \quad (2.94)$$

Elemento  $T_{21}$ :

$$\begin{cases} T_{21} = Q(1,2)Q(1,1) + Q(2,2)Q(2,1) \\ T_{21} = (+b)a + (-b)a \\ T_{21} = 0 \end{cases} \quad (2.95)$$

Elemento  $T_{22}$ :

$$\begin{cases} T_{22} = Q(1,2)Q(1,2) + Q(2,2)Q(2,2) \\ T_{22} = bb + (-b)(-b) \\ T_{22} = 2b^2 \end{cases} \quad (2.96)$$

Temos a matriz  $T$ ,

$$T = \begin{pmatrix} 2a^2 & 0 \\ 0 & 2b^2 \end{pmatrix}. \quad (2.97)$$

A cada renormalização um tensor  $M$ , resultante da contração dos índices comuns entre dois tensores, é gerado, que também é diagonal e igual a  $M = T^2$ . Em uma



representação matricial a forma do tensor  $M$  é

$$M = \begin{pmatrix} T_{11}^2 & 0 \\ 0 & T_{22}^2 \end{pmatrix}, \quad (2.98)$$

a função de partição na representação de uma rede tensorial conforme a equação 2.80

$$Z = Tr \prod_{i=1}^N T_{ij}^{(i)}, \quad (2.99)$$

onde para o produto de  $N$  tensores,

$$Z = \sum_{ij} (T_{ij})^N, \quad (2.100)$$

resulta

$$Z = Tr \begin{pmatrix} T_{11}^N & 0 \\ 0 & T_{22}^N \end{pmatrix} \quad (2.101)$$

$$Z = T_{11}^N + T_{22}^N \quad (2.102)$$

ou seja

$$Z = T_{11}^N \left[ 1 + \left( \frac{T_{22}}{T_{11}} \right)^N \right], \quad (2.103)$$

como  $T_{11} > T_{22}$

$$Z = T_{11}^N. \quad (2.104)$$

Conhecendo a função de partição em termo dos tensores da rede a energia livre é

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (2.105)$$

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \{T_{11} + T_{22}\} \quad (2.106)$$

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ T_{11} \left[ 1 + \left( \frac{T_{22}}{T_{11}} \right) \right] \right\}, \quad (2.107)$$

e

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln T_{11}, \quad (2.108)$$

aqui são as equações da função de partição e da energia livre em função dos elementos de tensores.

A matriz  $U$  foi explicitada no apêndice. São expressões grandes e foram obtidas com a utilização do *maxima* que é um *software* de manipulação simbólica.

## Capítulo 3

# Aplicações e Resultados

### 3.1 Rede de Tensores

A técnica de grupo de renormalização na representação de rede de tensores é um método que vem se revelando como uma excelente ferramenta teórica para o estudo de sistemas físicos fortemente interagentes. Nosso trabalho mostra a aplicação do método em uma rede quadrada de Ising.

O método para estudar modelos clássicos em duas dimensões foi proposto inicialmente por Levin e Nave, em 2007 [24], eles propuseram um método de *Coarse-graining*, granulação grossa em tradução livre, para a técnica de grupo de renormalização de tensores (*TRG - Tensor Renormalization Group*).

A técnica de grupo de renormalização na representação de rede de tensores em uma rede quadrada de Ising com  $N$  sítios, consiste em dividir a rede em blocos e contrair os índices internos ao bloco. Um bloco é formado por quatro sítios, de modo que um sítio pertença a apenas um bloco [14]. Na figura 20 cada bloco é representado por um quadrado tracejado. Em cada sítio da rede associamos um spin, portanto esse bloco formado por quatro sítios é rotulado como *bloco de spins* [25]. De forma geral, uma rede de tensores é equivalente a uma rede de sítios. Os quatro tensores de um bloco de spins são renormalizados ao mesmo tempo, resultando em um único tensor para cada bloco. A ordem do tensor em uma rede de tensores depende do número de ligações com os vizinhos. Para uma rede quadrada com  $N$  sítios o tensor é de quarta ordem, pois há quatro ligações entre o tensor e os seus vizinhos mais próximos. Cada ligação é um índice do tensor. O tensor obtido a partir da contração dos índices comuns entre os tensores internos ao bloco define uma expressão exata para a função de partição, conforme a equação 2.80. A cada renormalização a rede se reduz de  $N/4$  o número de tensores, mas a função de partição  $Z(N)$ , continuará sendo idêntica a função de partição  $Z(N/4)$  da nova rede com  $N/4$ . Para uma rede quadrada, conforme a figura 19, a função de partição é escrita da seguinte

forma

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i}, \quad (3.1)$$

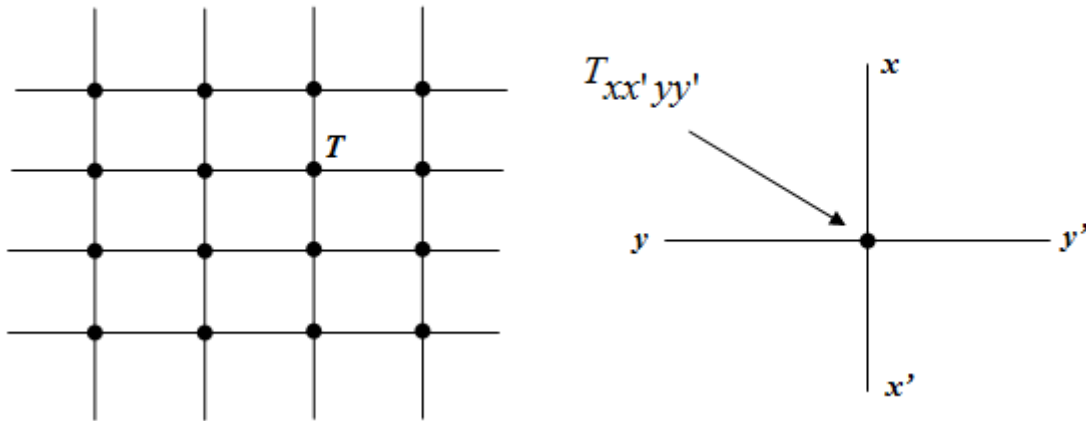


Figura 19 – Rede quadrada, cada sítio representa um tensor. O número de ligações entre um tensor e os vizinhos determina a ordem do tensor. Para a rede quadrada cada sítio possui quatro vizinhos mais próximos, há duas ligações horizontais e duas verticais. Cada ligação é um índice do tensor  $T$ . Os índices são rotulados como  $x, x', y, y'$ . A sequência dos índices, foi determinada de forma que na horizontal primeiro a ligação da esquerda e na vertical primeiro a ligação de cima.

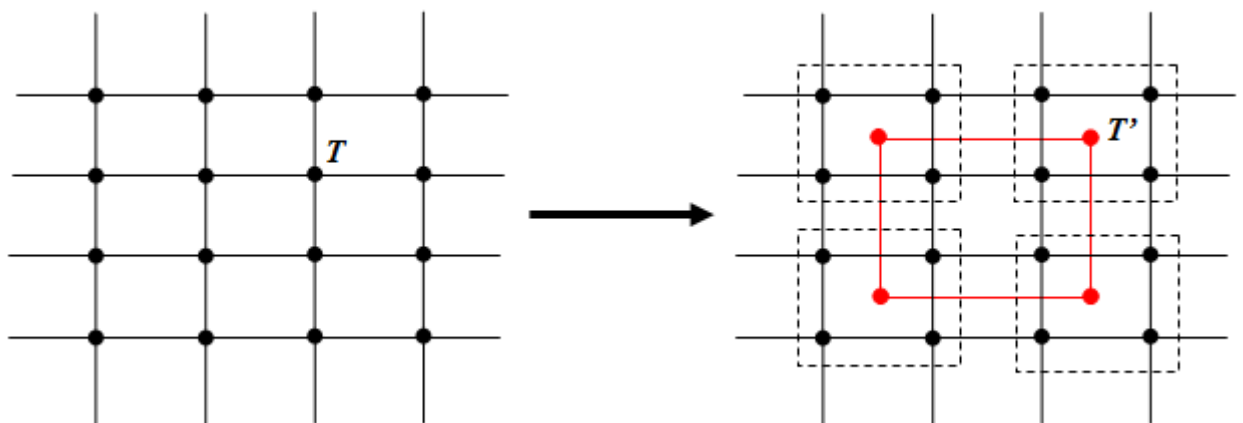


Figura 20 – Os sítios da rede quadrada são representados por bolas pretas. A rede quadrada é dividida em blocos de spins, cada bloco encontra-se dentro do quadrado tracejado. As bolas vermelhas são os tensores renormalizados.

O traço da função de partição é uma soma sobre todos os índices, tomando como referência a matriz  $Q$  na equação 2.85 e a equação 2.82, temos os elementos do tensor

local  $T$  definidos em cada sítio da rede como

$$T_{x_i x'_i y_i y'_i} = \sum_S Q_{Sx_i} Q_{Sx'_i} Q_{Sy_i} Q_{Sy'_i}. \quad (3.2)$$

A matriz  $Q$  na equação 2.85, com  $J = 1$ , torna-se

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta)} & \sqrt{\sinh(\beta)} \\ \sqrt{\cosh(\beta)} & -\sqrt{\sinh(\beta)} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

onde  $\beta$  é o inverso da temperatura,  $\beta = 1/T$ . Cada um dos índices pode assumir dois valores, gerando 16 elementos para o tensor inicial. Os índices são rotulados como 0 ou 1, vamos explicitar três desses elementos, que são escritos da seguinte forma

$$T_{0000} = \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} \implies T_{0000} = \sum_S Q_{S0}^4 \implies T_{0000} = Q_{00}^4 + Q_{10}^4$$

que resulta em,

$$T_{0000} = 2 \cosh^2 \beta.$$

$$T_{0001} = \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} Q_{S1} \implies T_{0001} = \sum_S Q_{S0}^3 Q_{S1} \implies T_{0001} = Q_{00}^3 Q_{01} + Q_{10}^3 Q_{11}.$$

que resulta em,

$$T_{0001} = 0.$$

$$T_{0011} = \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S1} Q_{S1} \implies T_{0011} = \sum_S Q_{S0}^2 Q_{S1}^2 \implies T_{0011} = Q_{00}^2 + Q_{10}^2$$

que resulta em,

$$T_{0011} = 2 \sinh(\beta) \cosh(\beta).$$

Seguindo a mesma regra, calcula-se todos os outros. Considerando o primeiro elemento do tensor como um fator de escala, ou seja,

$$\alpha_0 = T_{0000} \quad (3.4)$$

podemos normalizar todos os outros, de modo que,  $T_{0000} = 1$  e  $T_{0011} = \tanh(\beta)$ . No cálculo dos elementos de tensores verifica-se que todos que apresentam uma quantidade ímpar do dígito 1 no índice são nulos e aqueles que apresentam uma quantidade par do dígito 1 no índice são iguais a  $\tanh(\beta)$ . Se chamarmos  $t = \tanh(\beta)$ , podemos escrever os 16 elementos do tensor inicial, da seguinte forma

$$\begin{aligned} T_{0000} &= 1, & T_{0001} &= 0, & T_{0010} &= 0, & T_{0011} &= t, \\ T_{0100} &= 0, & T_{0101} &= t, & T_{0110} &= t, & T_{0111} &= 0, \\ T_{1000} &= 0, & T_{1001} &= t, & T_{1010} &= t, & T_{1011} &= 0, \\ T_{1100} &= t, & T_{1101} &= 0, & T_{1110} &= 0, & T_{1111} &= t^2. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Percebe-se que inicialmente há quatro valores distintos entre todos os elementos de tensores,  $\{0, 1, t, t^2\}$ . Após o cálculo dos novos elementos de tensor haverá oito elementos nulos, impomos novamente que o primeiro elemento do tensor seja igual a 1, através de uma normalização e com essa imposição temos um novo fator de escala, ou seja, a cada renormalização temos

$$\alpha_1 = T'_{0000} \quad (3.6)$$

onde  $T'_{0000}$  é o primeiro elemento do tensor renormalizado. Os elementos restantes assumirão três valores possíveis, identificados como  $t_1, t_2$  e  $t_3$ .

$$[1, 0, 0, t_2, 0, t_1, t_1, 0, 0, t_1, t_1, 0, t_2, 0, 0, t_3]. \quad (3.7)$$

Inicialmente, como podemos observar em 3.5, temos  $t_1 = t_2 = t$  e  $t_3 = t^2$ , com  $T_{1001} = T_{0110} = T_{1001} = T_{0101} = t_1$ ,  $T_{1100} = T_{0011} = t_2$ ,  $T_{1111} = t_3$ . Na medida que o sistema é renormalizado,  $t_1, t_2$  e  $t_3$  fluem para os pontos fixos.

A figura 21 mostra um bloco de quatro spins da rede original e suas respectivas pernas. A primeira etapa do processo de renormalização consiste em substituir os tensores do bloco por outro, resultante da contração dos índices internos ao bloco. A soma sobre todos os estados resulta em um tensor de quarta ordem,  $T'_{XX'YY'}$ , onde cada índice assume, agora, quatro valores [25],

$$T'_{X(x_1, x_2)X'(x'_1, x'_2)Y(y_1, y_2)Y'(y'_1, y'_2)} = \sum_{i, k, j, m} T_{x_1 i y_1 m} T_{i x'_1 y_2 j} T_{k x'_2 j y'_2} T_{x_2 k m y'_1}. \quad (3.8)$$

O tensor  $T'$  define uma expressão exata para a função de partição

$$Z = \alpha_0^N \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/4} T'_{XX'YY'}. \quad (3.9)$$

O fator  $\alpha_0$  aparece devido à normalização. Observe, ainda, que o produtório agora contém apenas  $N/4$  termos, porém o número de estados de cada sítio passa de 2 para 4 estados. A cada transformação o número de sítios é reduzido de  $1/4$ . Enquanto que o número de estados cresce como  $2^{2n}$ , onde  $n$  é o número de iterações. Ou seja, o número de estados em cada sítio se prolifera exponencialmente tornando o procedimento impraticável. Uma forma de impedir o crescimento sem limites do número de estados é através de uma “renormalização” do tensor associado ao bloco. Tal renormalização pode ser realizada através de uma decomposição de valores singulares de alta ordem, seguida do truncamento do número de estados do tensor associado ao bloco.

Escolhendo a representação,  $X(0, 0) = 1, X(1, 1) = 2, X(1, 0) = 3, X(0, 1) = 4$  [25], para os índices do tensor do bloco e denotando-o por  $M$  em uma iteração qualquer, a HOSVD envolve a diagonalização da seguinte matriz

$$G_{XX'} = \sum_{X''Y''} M_{XX''Y''} M_{X'X''Y''}^*. \quad (3.10)$$

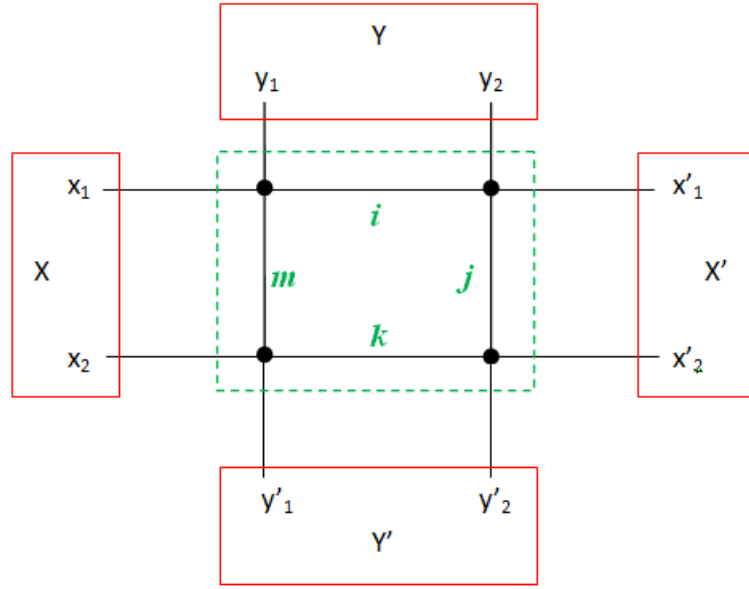


Figura 21 – Bloco de spins com quatro sítios. Cada sítio possui quatro ligações com os vizinhos mais próximos.

A escolha acima, torna a matriz  $G$  bloco diagonal. De forma que não há ligação entre os estados correspondendo a  $X = 1$  e  $X = 2$ , com os estados associados a  $X = 3$  e  $X = 4$ . Os seus elementos,  $G_{XX'}$ , estão em função de  $t$ , com  $t = \tanh(\beta)$  e  $\beta = 1/k_B T$ . Explicitamente temos,

$$G = \begin{bmatrix} 5t^4 + 2t^2 + 1 & t^6 + 6t^4 + t^2 & 0 & 0 \\ t^6 + 6t^4 + t^2 & t^8 + 2t^6 + 5t^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t^6 + 4t^4 + 2t^2 & 4t^5 + 4t^3 \\ 0 & 0 & 4t^5 + 4t^3 & 2t^6 + 4t^4 + 2t^2 \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Uma expressão analítica para os autovalores de  $G$  é apresentada no Apêndice B e na figura 22 mostramos como estes variam em função do parâmetro  $t$ . Observe que apenas dois, dos quatro, autovalores contribuem significativamente para a transformação. Assim, vamos manter apenas os dois estados correspondentes aos dois maiores autovalores da matriz  $G$ .

A cada iteração do processo de renormalização, os elementos de tensor são normalizados. Assim, após a primeira iteração, a função de partição do sistema torna-se

$$Z = \alpha_0^N \alpha_1^{N/4} Tr \prod_{i=1}^{N/4} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(1)}, \quad (3.12)$$

com  $\alpha_1 = T_{1111}^1$  e  $T_{1111}^1 \rightarrow 1$  após a normalização do tensor. Da mesma forma, na segunda

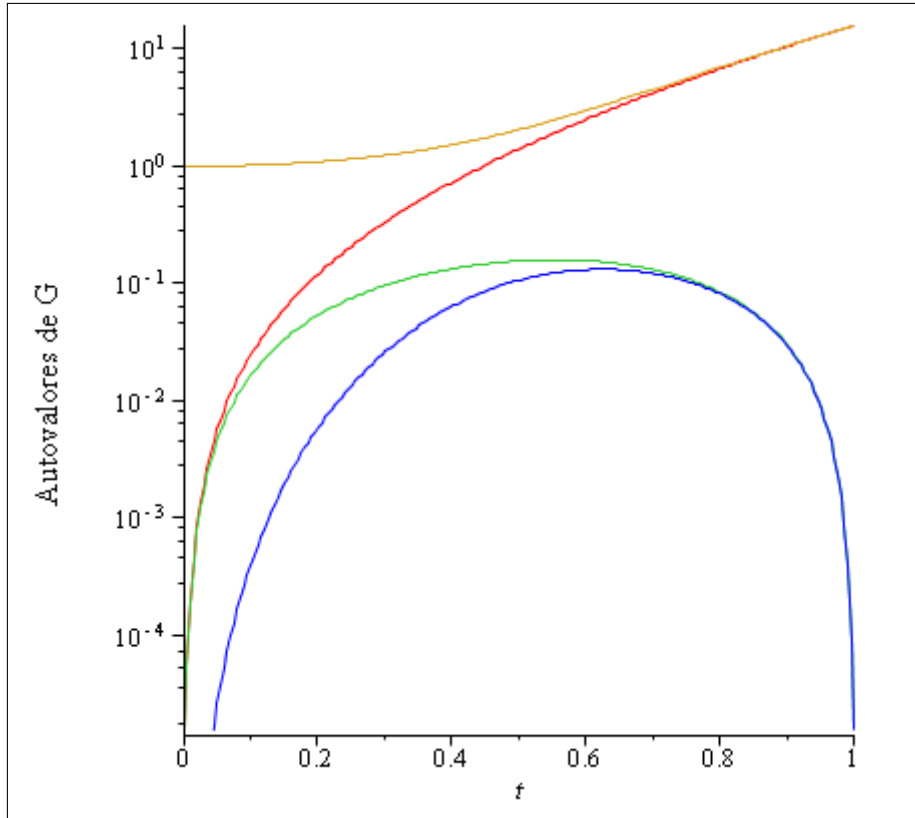


Figura 22 – Gráficos dos autovalores de  $G$ . Observa-se no gráfico que os dois menores autovalores são inicialmente pequenos e não aumentam conforme  $\beta$  cresce. Os dois maiores autovalores aumentam conforme  $\beta$  cresce. A escala é logarítmica e  $t = \tanh(\beta)$ .

iteração, temos

$$Z = \alpha_0^N \alpha_1^{N/4} \alpha_2^{N/16} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/16} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(2)}. \quad (3.13)$$

Na iteração de ordem  $n$ , podemos escrever

$$Z = \alpha_0^N \alpha_1^{N/4} \alpha_2^{N/16} \dots \alpha_n^{N/2^{2n}} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/2^{2n}} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(n)}. \quad (3.14)$$

A única aproximação contida na equação 3.14 consiste no truncamento do número de estados mantidos no processo de renormalização.

A energia livre do sistema é  $F = -(k_B T) \ln Z$  ou  $-\beta F = \ln Z$ , com  $\beta = 1/k_B T$  e  $T$  a temperatura do sistema. Note que a forma de  $Z$  na equação 3.14 garante a extensividade da energia livre, ou seja, a energia livre é proporcional ao número de partículas,  $N$ . É conveniente trabalhar com a energia livre por número de sítios da rede, ou melhor,  $f = -\beta F/N$ .

Da equação 3.14, temos

$$f = -\frac{1}{N} \left[ N \log \alpha_0 + \frac{N}{4} \log \alpha_1 + \cdots + \frac{N}{2^{2n}} \log \alpha_n + \log \left( Tr \prod_{i=1}^{N/2^{2n}} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(n)} \right) \right]. \quad (3.15)$$

A equação acima pode ser reescrita como

$$f = -\log \alpha_0 - \frac{1}{4} \log \alpha_1 - \frac{1}{16} \log \alpha_2 - \cdots - \frac{1}{2^{2n}} \log \alpha_n - \frac{1}{N} \log (Z^{(n)}), \quad (3.16)$$

onde

$$Z^{(n)} = Tr \prod_{i=1}^{N/2^{2n}} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(n)} \quad (3.17)$$

é a função de partição de um sistema com apenas  $N/2^{2n}$  partículas.

Como observado anteriormente, há apenas quatro valores distintos de elementos não nulos do tensor renormalizado. O primeiro tem valor unitário por construção. Os demais, denotados  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_3$ , dependem da temperatura e da ordem da iteração da transformação de grupo de renormalização,  $n$ . Na figura 23 mostramos a evolução dos valores desses elementos em função de  $n$  para duas temperaturas distintas. A saber, uma com  $\beta$  levemente acima de 0,411594547 e a outra com  $\beta$  levemente abaixo deste valor. Para a temperatura mais alta,  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_3$  convergem para zero à medida que iteramos a transformação de GR. Ao contrário, na temperatura mais baixa, a transformação leva os elementos de tensor para o valor unitário. Ao atingir esses valores o tensor não evolui mais. Estes são pontos fixos estáveis da transformação e correspondem as fases de baixas temperaturas (ordenada) e altas temperaturas (desordenada). A figura também indica a existência de um ponto fixo *instável*, correspondente à temperatura de transição entre as duas fases. De fato, é possível perceber da figura 23 que para  $n > 20$  o tensor converge e se torna independente de  $n$ . Assim, a série na equação 3.16 deve convergir, devido ao fator  $2^{2n}$  no denominador, no limite  $n \rightarrow \infty$ . Exceto talvez no ponto crítico, quando a energia livre torna-se não analítica.

Assim, qualquer singularidade na energia livre deve se refletir em  $\alpha_\infty(T)$ , o valor de  $\alpha_n(T)$  na temperatura  $T$  após o tensor atingir o ponto fixo, que denominamos fator de escala [26]. Uma expressão para o fator de escala encontra-se no apêndice B e seu comportamento em função do número de iterações,  $n$ , é mostrado na figura 24 para valores de  $\beta$  na vizinhança do ponto fixo instável. Nota-se que, o fator de escala assume apenas três valores no limite  $n \rightarrow \infty$ . Para  $\beta$  abaixo de um certo  $\beta_C$  o fator de escala converge para a unidade. Quando  $\beta > \beta_C$  temos que  $\alpha_\infty(\beta) \rightarrow 8$  (não mostrado na figura). No ponto crítico,  $\beta = \beta_C$ , o fator de escala é dado por  $\alpha_\infty(\beta_C) = 1,130$ . Assim, o fator de escala  $\alpha_\infty(T)$  é descontínuo e não diferenciável no ponto crítico.

Para verificar a influência do número de estados no processo de renormalização, iteramos o grupo de renormalização numericamente mantendo até 30 estados no tensor renormalizado.



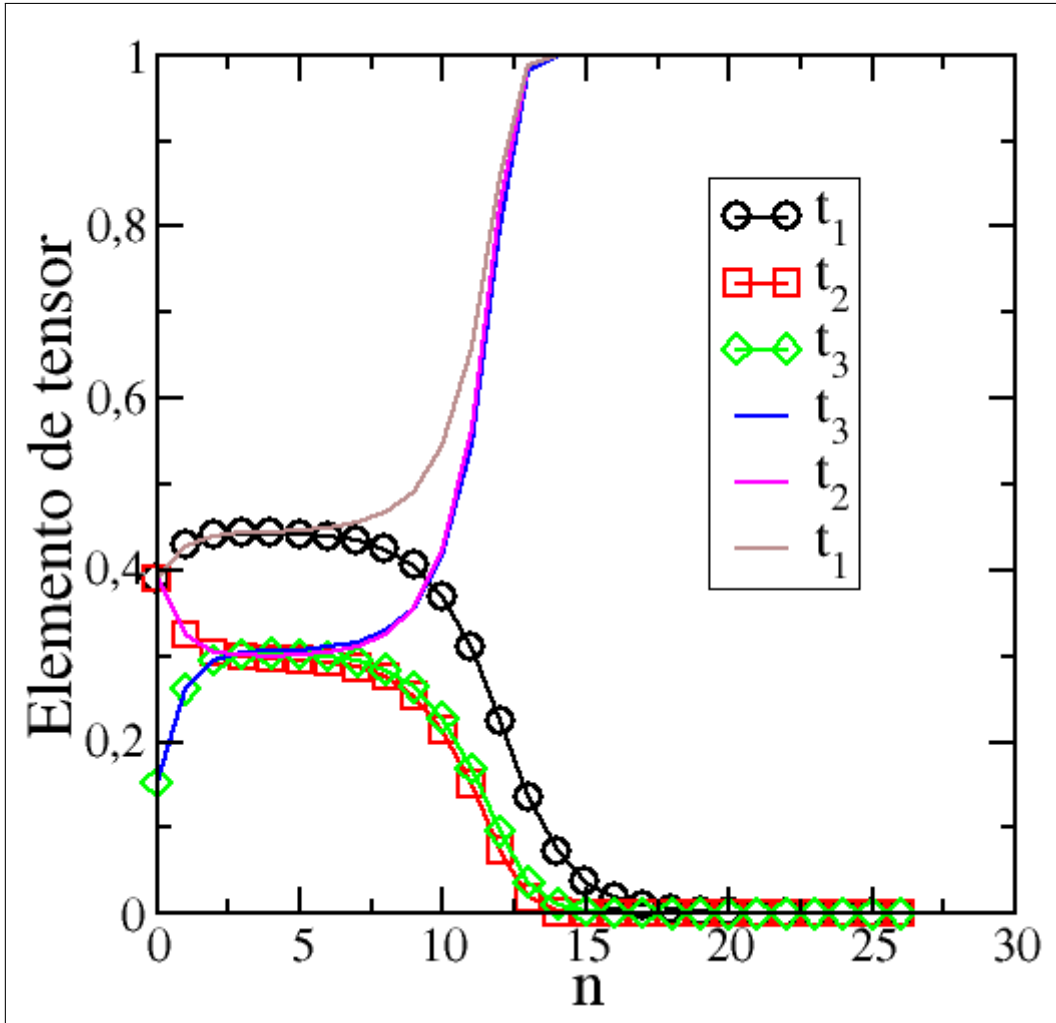


Figura 23 – Fluxo de Renormalização para os tensores  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_3$ . Dependendo do ponto de partida o sistema pode ir para uma fase ordenada ou para uma fase desordenada.

O gráfico da figura 25 mostra que o comportamento do fator de escala em função da temperatura apresenta uma singularidade quando  $T$  é igual a 2,26919. Este valor é muito próximo do resultado exato[27],

$$k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,26918531421. \quad (3.18)$$

No gráfico da energia interna, figura 26, observa-se que a baixas temperaturas a concavidade está voltada para cima. Há um ponto de inflexão na criticidade do sistema e para temperaturas maiores que a crítica a curva torna-se voltada para baixo.

O calor específico a baixas temperaturas é constante, ao se aproximar da criticidade há um aumento e uma singularidade é observada na temperatura crítica, indicando uma transição de fases. Para temperaturas maiores que a crítica, o calor específico tende a ser constante, ver figura 27.

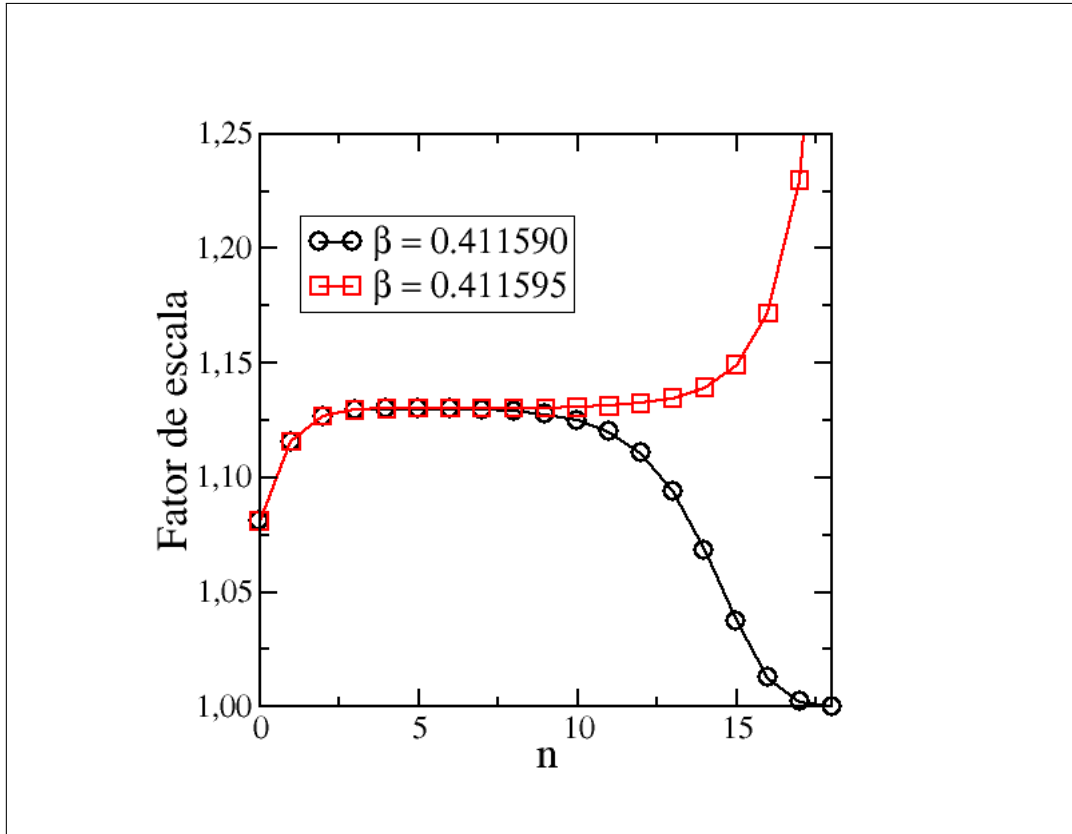


Figura 24 – Fator de escala em função do número de iterações.

Na figura 28 observamos o valor absoluto da magnetização em função de  $T$ , enquanto no gráfico da figura 29, a magnetização está em função de  $h$  e  $\beta$ . Observa-se que para os maiores valores de  $h$  a magnetização vai para 1 com diferentes curvas, cada uma para diferentes temperaturas. Para baixas temperaturas a fase do sistema é ordenada. A susceptibilidade magnética observada na figura 30 é inversamente proporcional à temperatura, decrescendo de forma exponencial como encontrado na equação 1.10, que é governada pelo expoente crítico  $\gamma$ .

Na Tabela 3.1 há uma comparação dos valores críticos encontrados quando se utiliza o modelo de Ising exato e os encontrados pelo método utilizado.

Modelo	Ising - Exato	Ising - Método utilizado
$\alpha$	$0(\log)$	0.134
$\beta$	0.125	0.108
$\gamma$	1.75	1.65
$\delta$	15	16
$\nu$	1	0.933
$\eta$	0.25	0.23

Tabela 3.1 – Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Ising exato e do método utilizado.

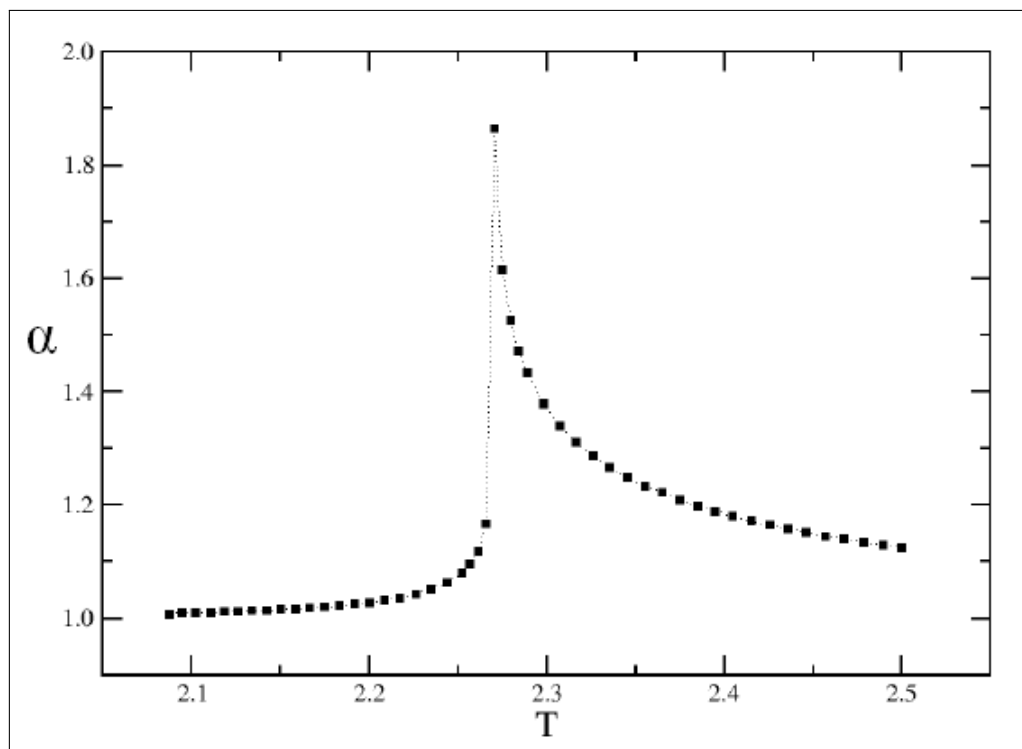


Figura 25 – Fatores de escala em função da temperatura para o modelo de Ising.

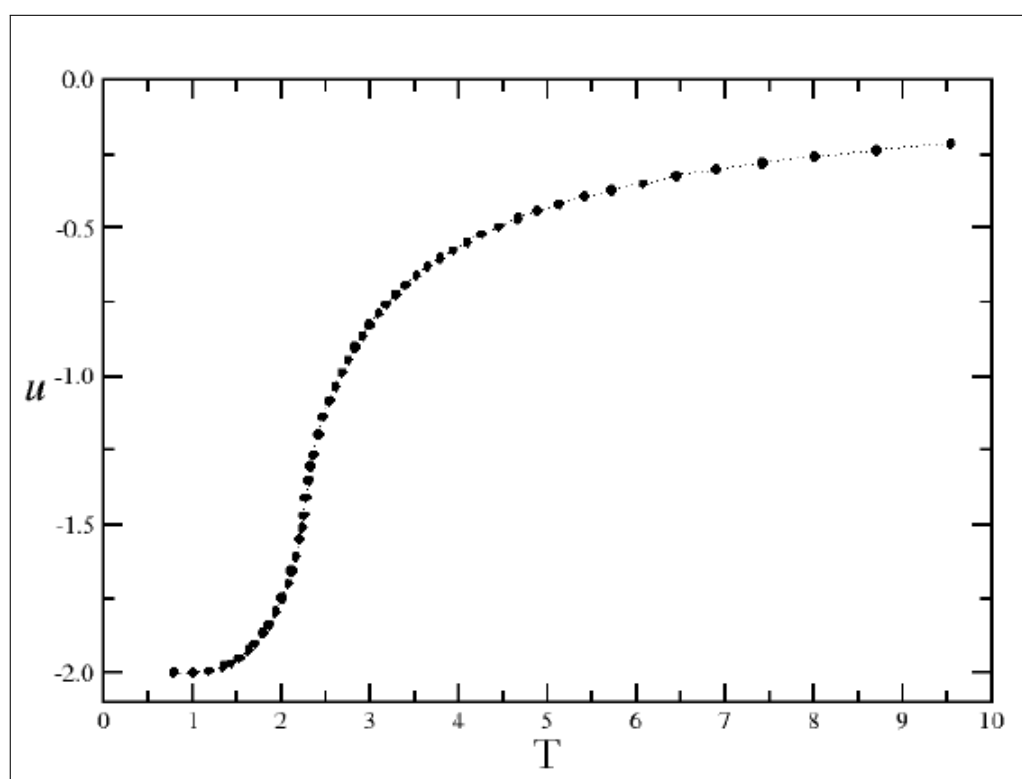


Figura 26 – Energia interna do modelo de Ising com a técnica de rede de tensores.

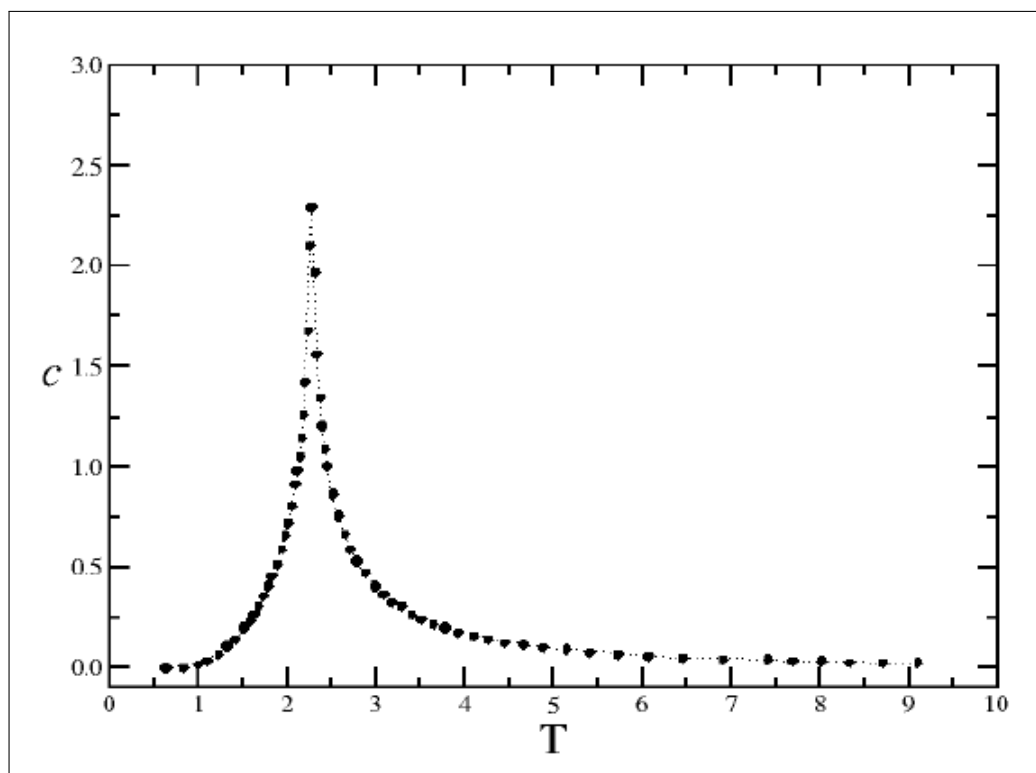


Figura 27 – Calor específico. Fora da região crítica, para temperaturas menores ou maiores que a temperatura crítica o calor específico é constante.

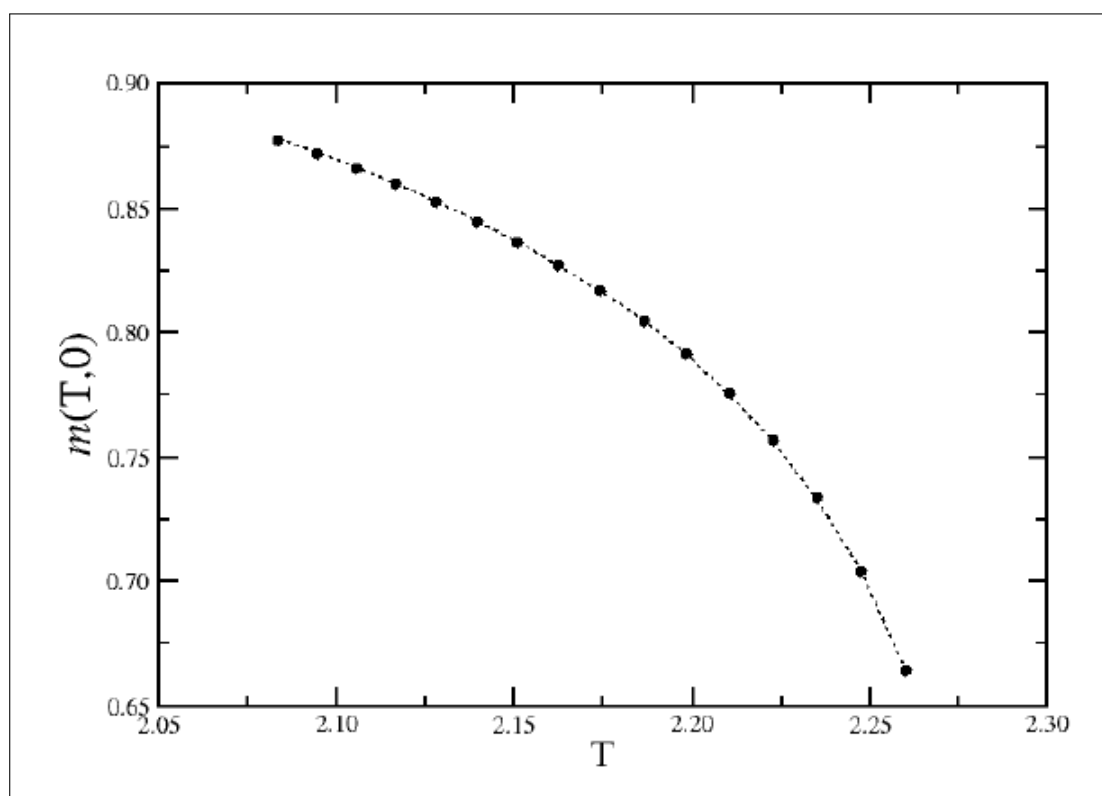


Figura 28 – Magnetização.

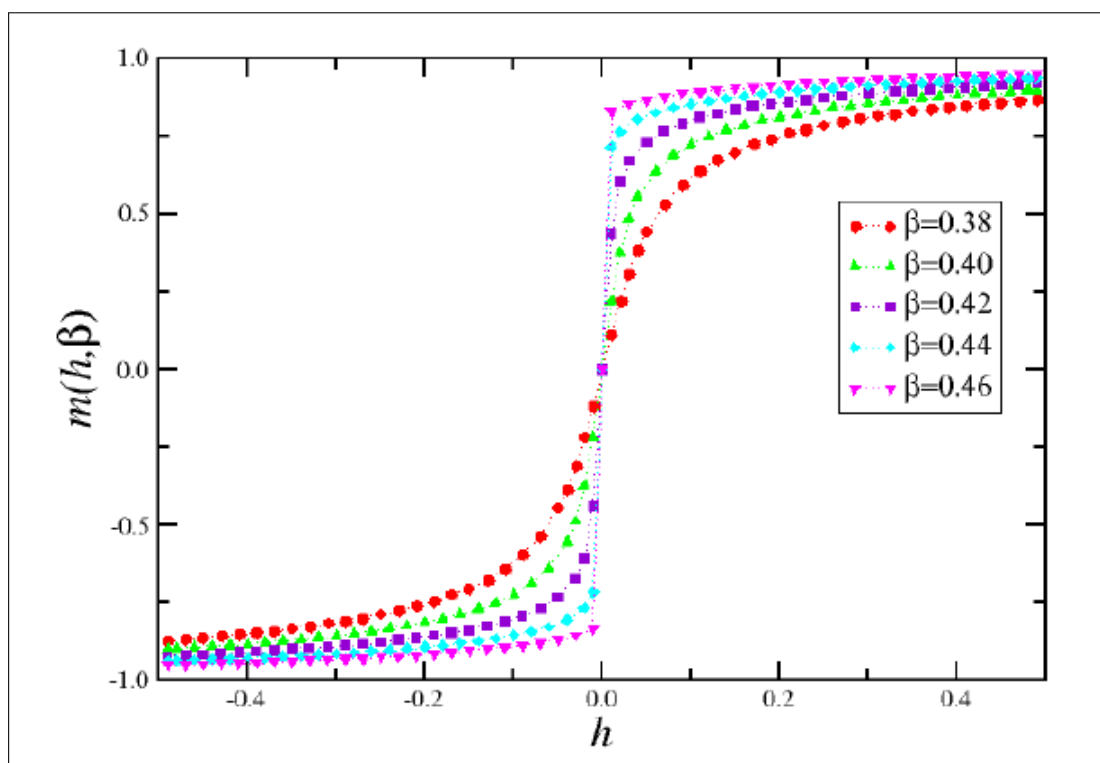


Figura 29 – Magnetização em função do campo e de  $\beta$ .

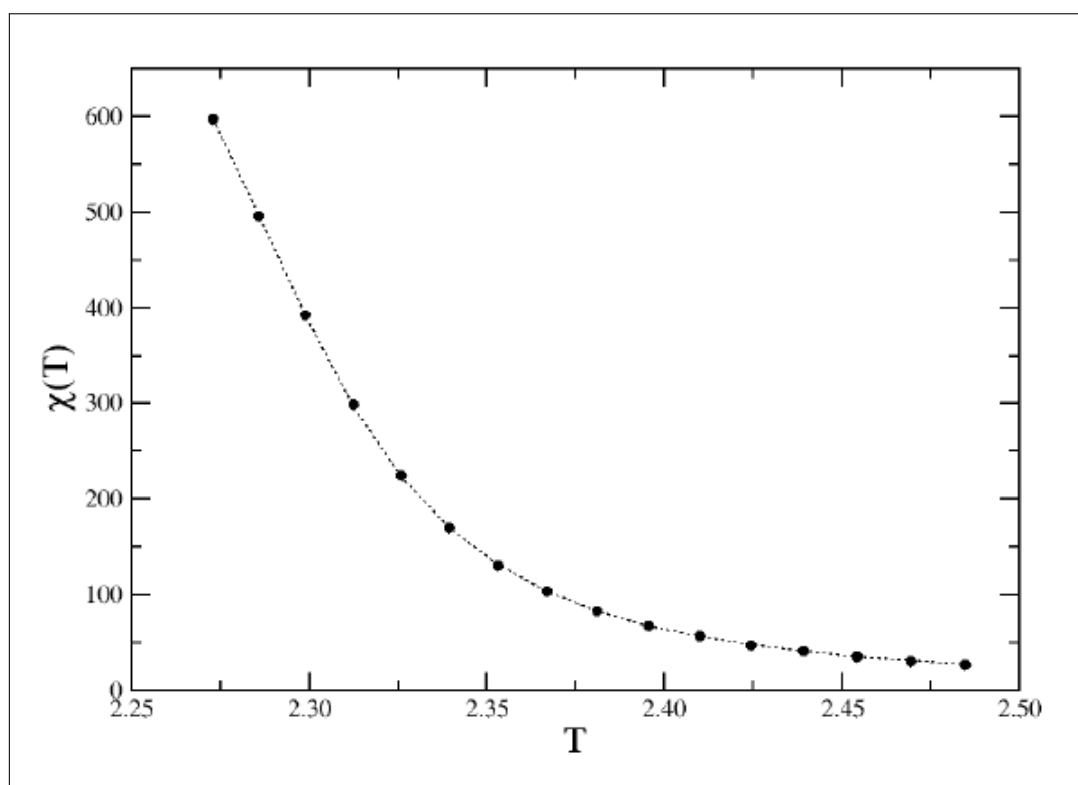


Figura 30 – Comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura do modelo de Ising para campo nulo.

## Capítulo 4

### Conclusão

A técnica empregada nesta dissertação consiste em uma implementação do formalismo do grupo de renormalização numa representação de rede de tensores. Os resultados obtidos são satisfatórios e mostram que o procedimento é uma boa opção para a abordagem de problemas de mecânica estatística, particularmente os que envolvem fenômenos críticos. A termodinâmica do modelo de Ising através da técnica aqui estudada não deixa a desejar em relação a qualquer outra que possa ser empregada no estudo do modelo de Ising. Também é importante salientar sobre o fator de escala, que é uma grandeza que trás informações sobre a termodinâmica do sistema, ele indica a temperatura que o corre uma transição de fase, tal fator ainda não é observado na literatura. Com a informação do fator de escala podemos obter a temperatura crítica. O fator de escala é para nós a melhor contribuição que deixamos para futuros colaboradores que se interessem por esta área de estudo. Vale também salientar que a dimensão de corte não influencia de forma significativa nos resultados, para o cálculo do fator de escala é importante observar que intuitivamente pode-se pensar que quanto maior a dimensão de corte melhor seria o resultado, mas isso não é observado, portanto fixar uma dimensão de corte deixa o trabalho mais econômico e não há com que se preocupar em diferenças significativas no resultado final.

# Referências

- [1] OLIVEIRA, M. J. de. **Termodinâmica**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.
- [2] REIF, F. **Fundamentals of statistical and thermal physics**. [S.l.]: Waveland Press, 2009.
- [3] STANLEY, H. E. Introduction to phase transitions and critical phenomena. **Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena**, by H Eugene Stanley, pp. 336. Foreword by H Eugene Stanley. Oxford University Press, Jul 1987. ISBN-10: 0195053168. ISBN-13: 9780195053166, v. 1, 1987.
- [4] ATKINS, P. Paula J. **Atkins' physical chemistry**. [S.l.]: New York: Oxford University Press, 2002.
- [5] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**, Springer, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.
- [6] BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. [S.l.]: Courier Corporation, 2007.
- [7] REICHL, L. E.; PRIGOGINE, I. **A modern course in statistical physics**. [S.l.]: University of Texas press Austin, 1980. v. 71.
- [8] WILSON, K. G. Renormalization group and strong interactions. **Physical Review D**, APS, v. 3, n. 8, p. 1818, 1971.
- [9] EFRATI, E. et al. Real-space renormalization in statistical mechanics. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 86, n. 2, p. 647, 2014.
- [10] KADANOFF, L. P. Notes on migdal's recursion formulas. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 100, n. 1, p. 359–394, 1976.
- [11] KADANOFF, L. P. Scaling laws for ising models near tc. **Physics**, World Scientific, v. 2, n. 6, p. 263–272, 1966.
- [12] MCCOMB, W. D. **Renormalization Methods**. [S.l.]: Clarendon Press, 2004.
- [13] MARIS, H. J.; KADANOFF, L. P. Teaching the renormalization group. **Am. J. Phys**, v. 46, n. 6, p. 653–657, 1978.
- [14] SOUZA, A. Grupo de renormalização por simulação computacional: Abordagem por fenômenos críticos. Tese de Doutorado, UFPE, 1993.

- [15] CHANDLER, D. Introduction to modern statistical mechanics. **Introduction to Modern Statistical Mechanics**, by David Chandler, pp. 288. Foreword by David Chandler. Oxford University Press, Sep 1987. ISBN-10: 0195042778. ISBN-13: 9780195042771, v. 1, 1987.
- [16] CHANDLER, D. Introduction to modern statistical mechanics. **Introduction to Modern Statistical Mechanics**, by David Chandler, pp. 288. Foreword by David Chandler. Oxford University Press, Sep 1987. ISBN-10: 0195042778. ISBN-13: 9780195042771, v. 1, pág:146, 1987.
- [17] HACKBUSCH, W. **Tensor spaces and numerical tensor calculus**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 42.
- [18] ARFKEN, G.; WEBER, H. H. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. [S.l.]: Elsevier, 2007.
- [19] ORÚS, R. Exploring corner transfer matrices and corner tensors for the classical simulation of quantum lattice systems. **Physical Review B**, APS, v. 85, n. 20, p. 205117, 2012.
- [20] KLEMA, V. C.; LAUB, A. J. The singular value decomposition: Its computation and some applications. **Automatic Control, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 25, n. 2, p. 164–176, 1980.
- [21] STEWARD, G. **Introduction to matrix computation**. [S.l.]: Academic Press, New York, 1973.
- [22] XIE, Z. et al. Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition. **Physical Review B**, APS, v. 86, n. 4, p. 045139, 2012.
- [23] ZHAO, H. et al. Renormalization of tensor-network states. **Physical Review B**, APS, v. 81, n. 17, p. 174411, 2010.
- [24] LEVIN, M.; NAVE, C. P. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. **Physical Review Letters**, APS, v. 99, n. 12, p. 120601, 2007.
- [25] MEURICE, Y. Accurate exponents from approximate tensor renormalizations. **Physical Review B**, APS, v. 87, n. 6, p. 064422, 2013.
- [26] SILVA, A. F. M. R. Grupo de renormalização de redes de tensores aplicados a sistemas de spins clássicos. Dissertação de Mestrado, UFRPE, 2014.
- [27] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Physical Review**, APS, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944.
- [28] VODOPIVEC, A. wxmaxima. SourceForge. net, 2012.



# Apêndices

# APÊNDICE A

## Matriz U, Matriz Q e Elementos de Tensores

O *Software* utilizado foi o wxMaxima [28], que é um *Software* de livre acesso utilizado.

Vamos aqui explicitar os termos da matriz unitária  $U$ , a matriz  $Q$  e os elementos de tensores. As letras  $a$ ,  $b$  e  $c$  foram utilizadas inicialmente para diminuir o tamanho das expressões e facilitar a manipulação no programa *wxMaxima*, mas logo abaixo temos os valores dos termos da matriz  $U$ , da matriz  $Q$  e dos elementos de tensores em função exponencial, vejamos:

As letras  $a$ ,  $b$  e  $c$  assumem,

$$a = e^{\beta J + \beta H}; \quad b = e^{-\beta J}; \quad c = e^{\beta J - \beta H}. \quad (\text{A.1})$$

Os elementos  $U_{11}$  e  $U_{21}$ ,

$$U_{11} = U_{21} = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2 + c - a})^2}{4 \cdot b^2} + 1}} \quad (\text{A.2})$$

e os elementos  $U_{12}$  e  $U_{22}$ , onde  $U_{12} = -U_{22}$ ,

$$U_{12} = \frac{\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2 + c - a}}{2 \cdot b \cdot \sqrt{\frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2 + c - a})^2}{4 \cdot b^2} + 1}} \quad (\text{A.3})$$

substituindo, temos,

$$U_{11} = U_{21} \left( \frac{1}{\sqrt{\frac{(2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H})^2}{(\sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J}})^2 + 1}}}} \right) \quad (\text{A.4})$$

e

$$\begin{aligned}
 U_{12} = & \left( \frac{2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H}}{\left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J} \right)} \right) \times \\
 & \times \left( \frac{1}{\sqrt{\frac{(2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H})^2}{\left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J} \right)^2 + 1}}} \right)} \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

Vamos escrever os termos da matriz Q, onde temos  $Q_{11} = Q_{21}$  e  $Q_{12} = -Q_{22}$ ,

$$Q_{11} = Q_{21} = \frac{\sqrt{(c+a) \cdot \sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c^2 + 2 \cdot b^2 + a^2}}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{\frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c - a)^2}{4 \cdot b^2} + 1}} \quad (\text{A.6})$$

e

$$\begin{aligned}
 Q_{12} = & \left( \frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c - a) \cdot \sqrt{-(c+a) \cdot \sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c^2 + 2 \cdot b^2 + a^2}}{\times} \right) \\
 & \times \left( \frac{1}{2^{\frac{3}{2}} \cdot b \cdot \sqrt{\frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c - a)^2}{4 \cdot b^2} + 1}} \right) \quad (\text{A.7})
 \end{aligned}$$

substituindo,

$$\begin{aligned}
 Q_{11} = & \left( \sqrt{e^{\beta \cdot J + \beta \cdot H} + e^{\beta \cdot J - \beta \cdot H}} \right) \times \\
 & \times \left( \sqrt{\sqrt{e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} - 2 \cdot e^{2 \cdot \beta \cdot J} + 4 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} + 2 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J}} \right) \times \\
 & \times \left( \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{\frac{(2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H})^2}{\left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J} \right)^2 + 1}}} \right)} \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 Q_{12} = & \left( \sqrt{-(e^{\beta \cdot J + \beta \cdot H} + e^{\beta \cdot J - \beta \cdot H})} \right) \times \\
 & \times \left( \sqrt{\sqrt{e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} - 2 \cdot e^{2 \cdot \beta \cdot J} + 4 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} + 2 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J}} \right) \times \\
 & \times \left( (2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H}) \right) \times \\
 & \times \left( \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J} \right)} \right) \times \\
 & \times \left( \frac{1}{\sqrt{\frac{(2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H})^2}{\left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J} \right)^2 + 1}}} \right)} \quad (\text{A.9})
 \end{aligned}$$

Vamos escrever os elementos tensor  $T_{11}$  e  $T_{22}$ ,

$$T_{11} = \frac{(c+a) \cdot \sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c^2 + 2 \cdot b^2 + a^2}{\frac{(\sqrt{c^2 - 2 \cdot a \cdot c + 4 \cdot b^2 + a^2} + c - a)^2}{4 \cdot b^2} + 1} \quad (\text{A.10})$$

substituindo,

$$T_{11} = \left( \frac{(e^{\beta \cdot J + \beta \cdot H} + e^{\beta \cdot J - \beta \cdot H}) \cdot \sqrt{e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} - 2 \cdot e^{2 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J}} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J + \beta \cdot H)} + e^{2 \cdot (\beta \cdot J - \beta \cdot H)} + 2 \cdot e^{-2 \cdot \beta \cdot J}}{(2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + 3 \cdot \beta \cdot H} + 2 \cdot e^{4 \cdot \beta \cdot J + \beta \cdot H})^2}}{\left( \sqrt{e^{12 \cdot \beta \cdot J + 8 \cdot \beta \cdot H} - 2 \cdot e^{12 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 6 \cdot \beta \cdot H} + 8 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} + 4 \cdot e^{8 \cdot \beta \cdot J + 2 \cdot \beta \cdot H} + e^{12 \cdot \beta \cdot J} + e^{6 \cdot \beta \cdot J + 4 \cdot \beta \cdot H} - e^{6 \cdot \beta \cdot J}} \right)^2 + 1} \right) \quad (\text{A.11})$$

Como podemos ver são expressões grandes, sendo imprescindível à manipulação computacional para obter resultados considerando um campo magnético não nulo.

O cálculo dos elementos de tensor foi feito também na linguagem C. Segue o código do programa para o cálculo dos elementos de tensor.

```
#include <stdlib.h>

#include <stdio.h>

#include <time.h>

#include <string.h>

#include <math.h>

int main()
{

    FILE *ptr;

    static double beta, t, n[4], q[4], h[6], s2, p;

    static int Nit, i;

    printf("beta_□=□");
    scanf("%lf",&beta);
    printf("#_de_□iteracoes:□");

    scanf("%d",&Nit);

    t = tanh(beta);
```

```

n[1] = t;
n[2] = t;
n[3] = t*t;

```

```
ptr = fopen("saida.dat", "w");
```

```
for (i=0; i<Nit; ++i) {
```

```
    h[1] = n[2]*n[2]*n[2]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+
          2*n[1]*n[1]*n[1]*n[1]+2*n[1]*n[1]+1;
```

```
    h[2] = n[1]*n[1]*n[3]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[3]+
          4*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+n[1]*n[1];
```

```
    h[3] = n[3]*n[3]*n[3]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[3]*n[3]+
          n[2]*n[2]*n[2]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+
          2*n[1]*n[1]*n[1]*n[1];
```

```
    h[4] = (n[2]*n[2]+n[1]*n[1])*n[3]*n[3]+(2*n[1]*n[1]+1)*
          n[2]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[1]*n[1]+n[1]*n[1];
```

```
    h[5] = 4*n[1]*n[1]*n[2]*(n[3]+1);
```

```
    p = (sqrt(h[3]*h[3]-2*h[1]*h[3]+4*h[2]*h[2]+
             h[1]*h[1])+h[3]-h[1])/(2*h[2]);
```

```
    fprintf(ptr, "%g□%g□%g\n", n[1], n[2], n[3]);
```

```

q[2] = ((n[2]*n[2]*n[3]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[3]+
n[1]*n[1]*n[1]*n[1])*p*p*p*p+(n[1]*n[1]*n[3]*n[3]+
2*n[1]*n[1]*n[2]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+
2*n[1]*n[1]*n[2]+ n[1]*n[1])*p*p*p+(n[2]*n[2]*
n[3]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[3]+n[2]*n[2]+2*n[1]*
n[1]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[1]*n[1])*p*p+
(n[1]*n[1]*n[3]*n[3]+2*n[1]*n[1]*n[2]*n[3]+
2*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[2]+
n[1]*n[1])*p+n[2]*n[2]+2*n[1]*n[1]*n[2]+
n[1]*n[1]*n[1]*n[1])/((n[3]*n[3]*n[3]*n[3]+

```

$$\begin{aligned}
 & n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) * p * p * p * p + (4 * n[1] * n[1] * \\
 & n[3] * n[3] + 4 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2]) * p * p * p + \\
 & (4 * n[1] * n[1] * n[3] + 2 * n[2] * n[2] * n[2] * n[2] + \\
 & 4 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) \\
 & * p * p + (4 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1]) * p + \\
 & n[1] * n[1] * n[1] * n[1] + 1);
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q[1] = & ((n[1] * n[3] * n[3] * n[3] + 2 * n[1] * n[2] * n[3] * n[3] + \\
 & (n[1] * n[2] * n[2] + n[1] * n[1] * n[1]) * n[3] + 2 * n[1] * n[1] * \\
 & n[1] * n[2] + n[1] * n[1] * n[1]) * p * p * p * p + ((2 * n[1] * n[2] * \\
 & n[2] + 2 * n[1] * n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1]) * n[3] + 2 * n[1] * \\
 & n[2] * n[2] * n[2] + 2 * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[1] * \\
 & n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1]) * p * p * p + (n[1] * n[3] * n[3] * n[3] + \\
 & 2 * n[1] * n[2] * n[3] * n[3] + (n[1] * n[2] * n[2] + 2 * n[1] * n[1] * \\
 & n[1]) * n[3] + n[1] * n[2] * n[2] + (4 * n[1] * n[1] * n[1] + 2 * n[1]) * \\
 & n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1] + n[1]) * p * p + ((2 * n[1] * n[2] * n[2] + \\
 & 2 * n[1] * n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1]) * n[3] + 2 * n[1] * n[2] * n[2] * \\
 & n[2] + 2 * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[1] * n[2] + 2 * n[1] * \\
 & n[1] * n[1]) * p + n[1] * n[1] * n[1] * n[3] + n[1] * n[2] * n[2] + \\
 & (2 * n[1] * n[1] * n[1] + 2 * n[1]) * n[2] + n[1] * n[1] * n[1] + \\
 & n[1]) / ((2 * n[3] * n[3] * n[3] * n[3] + 2 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) * \\
 & p * p * p * p + (8 * n[1] * n[1] * n[3] * n[3] + 8 * n[1] * n[1] * n[2] * \\
 & n[2]) * p * p * p + (8 * n[1] * n[1] * n[3] + 4 * n[2] * n[2] * n[2] * n[2] + \\
 & 8 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) * p * p + \\
 & (8 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 8 * n[1] * n[1]) * p + 2 * n[1] * n[1] * \\
 & n[1] * n[1] + 2);
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 q[3] = & ((n[1] * n[1] * n[3] * n[3] + (2 * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * \\
 & n[2]) * n[3] + 2 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[2] + \\
 & 2 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1] + n[1] * n[1]) * p * p * p * p + (2 * n[1] * \\
 & n[1] * n[3] * n[3] + (4 * n[2] * n[2] + 8 * n[1] * n[1] * n[2]) * n[3] + \\
 & 4 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 8 * n[1] * n[1] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * \\
 & n[1] * n[1] + 2 * n[1] * n[1]) * p * p + n[1] * n[1] * n[3] * n[3] + \\
 & (2 * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[2]) * n[3] + 2 * n[1] * n[1] * n[2] * \\
 & n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[2] + 2 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1] + n[1] * \\
 & n[1]) / ((2 * n[3] * n[3] * n[3] * n[3] + 2 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) * \\
 & p * p * p * p + (8 * n[1] * n[1] * n[3] * n[3] + 8 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2]) * \\
 & p * p * p + (8 * n[1] * n[1] * n[3] + 4 * n[2] * n[2] * n[2] * n[2] + \\
 & 8 * n[1] * n[1] * n[2] * n[2] + 4 * n[1] * n[1] * n[1] * n[1]) * p * p +
 \end{aligned}$$

$$(8*n[1]*n[1]*n[2]*n[2]+8*n[1]*n[1])*p+2*n[1]*n[1]*n[1]*n[1]+2);$$

$$n[1] = q[1];$$

$$n[2] = q[2];$$

$$n[3] = q[3];$$

}

fclose(ptr);

return(0);

}

%\begin{equation}

%1/2+(1/2)\*t^8+t^6+5\*t^4+t^2+

%(1/2)\*sqrt(1+8\*t^4+4\*t^2+44\*t^6+142\*t^8+8\*t^12+44\*t^10+4\*t^14+t^16)

%\end{equation}

%

%\begin{equation}

%1/2+(1/2)\*t^8+t^6+5\*t^4+t^2-

%(1/2)\*sqrt(1+8\*t^4+4\*t^2+44\*t^6+142\*t^8+8\*t^12+44\*t^10+4\*t^14+t^16)

%\end{equation}

## APÊNDICE B

# Matriz $G$ , Diagonalização e Fator de escala

A matriz  $G$  é calculada com o auxílio do Software Máxima. Após encontrar os elementos de matriz devemos realizar a diagonalização, aqui escrevemos a matriz  $G$  com os seus respectivos autovalores e autovetores. Depois temos a equação para o fator de escala após a primeira iteração.

Código para o cálculo da Matriz  $G$ :

```

g(idx,Dim):=idx[4]*Dim[1]+
(idx[3]-1)*Dim[2]+
(idx[2]-1)*Dim[3]+
(idx[1]-1)*Dim[4]; \ onde a função g define a dimensão
de cada índice indexado.

T:[1,0,0,t,0,t,t,0,0,t,t,0,t,0,0,tš]; \ lista com os tensores
iniciais.

P:[1,0,0,t,0,t,t,0,0,t,t,0,t,0,0,tš]; \ cópia da lista T

M:[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0]; \ lista a ser preenchida após
a primeira iteração.

Q:[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,

```



```

0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0]; \ lista a ser preenchida após
a segunda iteração.

```

```
X: matrix ([1,4],[3,2]);
```

```
G: matrix ([0,0,0,0],[0,0,0,0],[0,0,0,0],[0,0,0,0]);
```

```

for x1 in [1,2] do
for x2 in [1,2] do
for xp in [1,2] do
for xq in [1,2] do
for y1 in [1,2] do
for y2 in [1,2] do
for yp in [1,2] do
for yq in [1,2] do
for xu in [1,2] do
for xd in [1,2] do
for yl in [1,2] do
for yr in [1,2] do

```

```

Q[g([X[x1][x2],X[xp][xq],Y[y1][y2],Y[yp][yq]],[8,16,32,64]):
Q[g([X[x1][x2],X[xp][xq],Y[y1][y2],Y[yp][yq]],[8,16,32,64]))+
P[g([x1,xu,y1,yl],[1,2,4,8]))*P[g([xu,xp,y2,yr],[1,2,4,8]))*
P[g([xd,xq,yr,yq],[1,2,4,8]))*P[g([x2,xd,yl,yp],[1,2,4,8]))];

```

```

for z in [1,2] do
for c in [1,2] do
for n in [1,2] do
for s in [1,2] do
for y in [1,2] do
for a in [1,2] do
for b in [1,2] do

```

M[g ([X[z][n], X[c][s], y, a], [1, 2, 4, 16])]:  
M[g ([X[z][n], X[c][s], y, a], [1, 2, 4, 16])] +  
T[g ([z, c, y, b], [1, 2, 4, 8])] \* T[g ([n, s, b, a], [1, 2, 4, 8])];

**for** i in [1, 2, 3, 4] **do**  
**for** j in [1, 2, 3, 4] **do**  
**for** k in [1, 2, 3, 4] **do**  
**for** l in [1, 2] **do**  
**for** m in [1, 2] **do**

G[i][j]:G[i][j]+M[g ([i, k, l, m], [1, 2, 4, 16])] \* M[g ([j, k, l, m], [1, 2, 4, 16])];

Matriz G:

$$\begin{pmatrix} 5 \cdot t^4 + 2 \cdot t^2 + 1 & t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2 & 0 & 0 \\ t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2 & t^8 + 2 \cdot t^6 + 5 \cdot t^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \cdot t^6 + 4 \cdot t^4 + 2 \cdot t^2 & 4 \cdot t^5 + 4 \cdot t^3 \\ 0 & 0 & 4 \cdot t^5 + 4 \cdot t^3 & 2 \cdot t^6 + 4 \cdot t^4 + 2 \cdot t^2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Autolavores:

$$v_1 = 2t^6 + 4t^5 + 4t^4 + 4t^3 + 2t^2 \quad (\text{B.2})$$

$$v_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}t^8 + t^6 + 5t^4 + t^2 + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 8t^4 + 4t^2 + 44t^6 + 142t^8 + 8t^{12} + 44t^{10} + 4t^{14} + t^{16}} \quad (\text{B.3})$$

$$v_3 = 2t^6 - 4t^5 + 4t^4 - 4t^3 + 2t^2 \quad (\text{B.4})$$

$$v_4 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}t^8 + t^6 + 5t^4 + t^2 - \frac{1}{2}\sqrt{1 + 8t^4 + 4t^2 + 44t^6 + 142t^8 + 8t^{12} + 44t^{10} + 4t^{14} + t^{16}} \quad (\text{B.5})$$

Com seus respectivos autovetores:

$$w_1 = [0, 0, 1, 1] \quad (\text{B.6})$$

$$w_2 = \left[1, \frac{1}{2t^2(t^4 + 6t^2 + 1)}\right]$$

$$\left(-1 + t^8 + 2t^6 - 2t^2 + \sqrt{1 + 8t^4 + 4t^2 + 44t^6 + 142t^8 + 8t^{12} + 44t^{10} + 4t^{14} + t^{16}}\right), 0, 0 \quad (\text{B.7})$$

$$w_3 = [0, 0, 1, 1] \quad (\text{B.8})$$

$$w_4 = \left[ 1, \frac{1}{2t^2(t^4 + 6t^2 + 1)} \right. \\ \left. (-1 + t^8 + 2t^6 - 2t^2 - \sqrt{1 + 8t^4 + 4t^2 + 44t^6 + 142t^8 + 8t^{12} + 44t^{10} + 4t^{14} + t^{16}}), 0, 0 \right] \quad (\text{B.9})$$

Expressão do fator de escala após a primeira iteração

$$\frac{(t^8 + t^4) \cdot \left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^4}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^4 \cdot \left( \frac{\left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2} + 1 \right)^2} + \\ 4 \cdot (t^6 + t^4) \cdot \left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^3 \\ (t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^3 \cdot \left( \frac{\left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2} + 1 \right)^2 + \\ 12 \cdot t^4 \cdot \left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2 \\ (t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2 \cdot \left( \frac{\left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2} + 1 \right)^2 + \\ 4 \cdot (t^4 + t^2) \cdot \left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right) \\ (t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2) \cdot \left( \frac{\left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2} + 1 \right)^2 + \\ \frac{t^4 + 1}{\left( \frac{\left( \frac{\sqrt{t^{16} + 4t^{14} + 8t^{12} + 44t^{10} + 142t^8 + 44t^6 + 8t^4 + 4t^2 + 1}}{2} + \frac{t^8}{2} + t^6 - t^2 - \frac{1}{2} \right)^2}{(t^6 + 6 \cdot t^4 + t^2)^2} + 1 \right)^2} \quad (\text{B.10})$$