



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

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado
utilizando Gilt-TNR

Josival dos Santos

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

21 de Fevereiro de 2020

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

Josival dos Santos

**Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado
utilizando Gilt-TNR**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação 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: Dr. Aduino José Ferreira de Souza

**Recife - PE
21 de Fevereiro de 2020**

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

S237e Santos, Josival dos

Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado
utilizando Gilt-TNR / Josival dos Santos. – 2020.

69 f.: il.

Orientador: Adauto José Ferreira de Souza.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de
Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife,
BR-PE, 2020.

Inclui referências.

1. Ising, Modelo de 2. Ferromagnetismo 3. Cálculo tensorial
4. Transformações de fase (Física estatística) 5. Grupo de
renormalização 6. Mecânica estatística 7. Renormalização (Física)
I. Souza, Adauto José Ferreira de, orient. II. Título

CDD 621

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

—

Josival dos Santos

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 21/02/2020 pela Comissão

Orientador:

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza
UFRPE

Banca Examinadora:

Dr. Antônio de Pádua Santos
UFRPE

Dr. Nilton Ferreira Frazão
UFCG

Jairo Ricardo Rocha de Oliveira
UFRPE - Suplente

"Uma das funções sociais da ciência é a de libertar as pessoas das superstições."

(Stevan Weinberg)

Dedico esta, bem como todas as minhas demais conquistas, a todos os meus amigos e familiares.

Agradecimentos

Agradeço imensamente à minha família pelo apoio e confiança que sempre me deram. Minha mãe Iris de Fátima, junto ao meu pai Lourival Justino, souberam me educar e incentivar a seguir um caminho. Minhas irmãs Laura Santos, Mari Santos e Josélia Santos pelo auxílio em momentos difíceis. E a minha amada Samara Alves, que me ajudou e me manteve calmo nos momentos mais difíceis.

Agradeço imensamente ao meu orientador Prof. Dr. Aduino José Ferreira de Souza, que de forma distinta e vital foi de essencial contribuição para a minha formação como pesquisador. Também um grande agradecimento ao professor Dr. Nilton Frazão por permitir o processamento dos cálculos desse trabalho no Laboratório de Simulação Computacional Modelagem de Nanomateriais (LabMol), UFCG-CES. Ao grande Antógenes Neto pelos auxílios como colega e secretário. E a todos professores do Departamento de Física - UFRPE, que contribuíram em minha formação acadêmica e incentivaram-me a buscar cada vez mais o conhecimento.

Aos meus colegas e amigos de curso que tive o privilégio de conhecer e dividir momentos importantes durante todo o curso: Djardiel Gomes (por sempre resolver o problema das máquinas quando eu não conseguia), Marconi Silva, Marcus Medeiros, Allan Muniz, Jessé Medeiros, Amanda Bianca, Juliana Maria, Diego Marques, Junior Leal, Lidiane Maria. Entre outros que contribuíram com essa jornada.

Agradeço também a CAPES pelo suporte financeiro.

Resumo

Empregamos um grupo de renormalização da rede de tensores proposto recentemente, chamado *Gilt-TNR*, esquema para estimar a temperatura crítica do sistema como função da razão entre as constantes de acoplamento. Diferentemente do grupo de renormalização de tensor padrão (TRG), o novo método é capaz de eliminar completamente as correlações de curto alcance durante o processo de renormalização. A técnica é baseada numa representação da função de partição do sistema por uma rede de tensores, na qual 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 dos tensores, que denominamos "pernas", correspondem às ligações entre os sítios da rede. Assim, o cálculo da função de partição se reduz à contração de uma rede de tensores. Aqui, aplicamos a técnica ao modelo de Ising definido em uma rede quadrada com interações antiferromagnéticas entre os pares de primeiros e segundos vizinhos. Nesse caso a rede quadrada é completamente frustrada. No processo de renormalização da rede de tensores, introduzimos um fator de escala que evita o crescimento sem limites da norma dos tensores. Esse fator de escala captura a não-analiticidade da energia livre. Assim, os valores críticos dos parâmetros foram obtidos localizando o ponto no qual o fator de escala apresenta uma singularidade. Examinamos valores dos diferentes parâmetros de frustração R . Localizamos o ponto crítico para cada valor de R e determinamos o valor dos expoentes críticos ao longo da linha de transição. Na região analisada, não encontramos evidências de transição de fase de primeira ordem ou de ponto tricrítico.

Palavras-chave: Grupo de Renormalização, Modelo de Ising, Rede de Tensores, Gilt-TNR.

Abstract

We employ a recently proposed group of tensor network called *Gilt-TNR*, scheme to estimate the critical temperature of the system as a function of the ratio between the coupling constants. Unlike the renormalization group of standard tensor (TRG), the new method is able to completely eliminate the correlations of short range during the renormalization process. The technique is based on a representation of the system partition function by a network of tensor, in which each site in the network we associate a translationally invariant tensor. The tensor encodes the associated states degrees of freedom of the original system. The indexes of the tensors, which you call "legs", correspond to links between network sites. Thus, the calculation of the partition function is reduced to the contraction of a network of tensor. Here, we apply the technique to the Ising model defined in a square network with antiferromagnetic interactions between pairs first and second neighbors. In this case, the square network is completely frustrated. In the process of renormalizing the tensor network, we introduced a scale factor that prevents the limitless growth of the tensor norm. This scale factor captures the non-analyticity of free energy. Thus, the critical values of the parameters were obtained locating the point at which the scale factor presents a singularity. We examine values of the different frustration parameters R . We find the critical point for each value of R and determine the value of the critical exponents along the transition line. At analyzed region, we found no evidence of first-order phase transition or tricritical point.

Keywords: Renormalization Group, Ising model, Tensor networks, Gilt-TNR.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Transições de Fases	4
1.2	Fenômenos Críticos	10
1.3	Estrutura do Trabalho	12
2	Material e Método	13
2.1	Grupo de Renormalização	15
2.2	Grupo de Renormalização na representação de redes de tensores	17
2.2.1	Tensores	18
2.2.2	Representação diagramática de tensores	20
2.2.3	Representação da função de partição por rede de Tensores	24
2.2.4	Grupo de renormalização de tensores	27
2.3	Gilt: Graph independent local truncation	31
2.4	Gilt-TNR	34
3	Resultados e Discussões	37
4	Conclusões	52
	Referências	55

Lista de Figuras

1.1	Células unitárias da rede triangular e quadrada. Em (a), observamos o fenômeno da frustração geométrica.	4
1.2	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, em temperatura ambiente. Figura adaptada da referência [11].	7
1.3	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, para altas temperaturas. Figura adaptada da referência [11].	7
1.4	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, na temperatura crítica. Figura adaptada da referência [11].	8
1.5	O diagrama de fases de um ferromagneto no plano temperatura T versus campo magnético H . No ponto $T = T_c$ o sistema apresenta um comportamento completamente distinto de qualquer outro ponto e está na fase crítica. Antes do ponto crítico temos uma fase e após ele, outra fase. Figura adaptada da referência [11].	9
1.6	Representação do comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura. Figura adaptada da referência [11].	10
2.1	Representação diagramática de um escalar, um vector, 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.	21
2.2	A contração do índice m do diagrama da esquerda leva ao agrupamento dos índices i e k bem como j e l . A direita, a representação diagramática da contração.	22

2.3	Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por A_{ij} e $B_{j,k}$, os índices i e k são livres enquanto que j é contraído.	22
2.4	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 pernas resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa é rotulada pelo índice combinado $\beta_{j,k}$	23
2.5	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 observe-se que a cada par de tensores dentro do retângulo tracejado as pernas são ligadas, formando um índice comum. O tensor M é resultado da contração do índices comum entre dois tensores dentro do retângulo tracejado.	23
2.6	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 contração é um tensor de quarta ordem de índices i, j, k e m	24
2.7	Porção de uma rede quadrada e uma plaqueta em destaque. À direita explicitamos os rótulos dos quatro sítios que compõem a plaqueta. Em vermelho, o sítio da rede dual e suas ligações, juntamente com as variáveis duais associadas às ligações (linhas tracejadas). Figura retirada da referência [1].	26
2.8	Representação diagramática da função de partição do modelo de Ising na rede quadrada. O tensor original (inicial) é designado T_0 e por conveniência, omitimos os índices associados às pernas. Impomos condições de contorno periódicas, indicada pelas linhas curvas nas extremidades da rede.	28
2.9	Na parte esquerda temos o tensor inicial T_0 que deve ser fatorado nas duas diagonais, resultando em quatro novos tensores F_1, F_2, F_3 e F_4 . Os σ corresponde ao número de estados associados as pernas do tensor.	29

2.10	Fatoração do tensor T_0 em uma diagonal para criar os novos tensores F_1 e F_3 . Primeiro rescrevemos o tensor original como uma produto de matrizes, então a matriz diagonal é fatorada resultando na matriz identidade que é absorvida em U e V	29
2.11	Na parte esquerda temos representada a rede original com tensores T_0 que são fatorados para formar uma nova rede. Figura retirada da internet.	30
2.12	Contraindo tensores da rede original. vamos obter uma nova rede, mas com a mesma geometria da rede original. Na nova rede o número de tensores foi reduzido em $N/4$, onde N é o número de tensores da rede original. A nova rede esta rotacionada 45° em relação a rede original.	30
2.13	Rede quadrada de tensores, onde foi dividida em plaquetas de quatro tensores, os índices internos dos tensores serão contraídos para formar uma nova rede porém com a mesma geometria da rede original.	32
2.14	Escolhemos uma plaqueta qualquer da rede quadrada de tensores. Fatorando os tensores na diagonal a plaqueta é retirada da rede. Seleccionamos a perna R , que iremos truncar.	32
2.15	Podemos interpretar R como a perna que queremos truncar na plaqueta. Representamos a perna da rede como uma linha que será contraída no passo (i). No passo (ii) observamos um produto de matrizes, sendo U uma matriz unitária e U^\dagger sua transposta. No ultimo passo (iii) obtemos o vetor t , que tem componentes i	32
2.16	Com a plaqueta selecionada da rede de tensores, o primeiro passo é substituir R na perna que queremos truncar. No passo (ii) decompomos o tensor por meio de uma SVD. No passo (iii), um par de U e U^\dagger foram cancelados e vemos que o ambiente do espectro S , que é uma matriz diagonal, está multiplicando diretamente os elementos de t	33

2.17	Na primeira figura, temos os tensores da rede original que ainda encontram-se contaminados. Então, matrizes são inseridas entre os tensores. Fatorando estas matrizes através de uma SVD, e as peças são absorvidas nos tensores vizinhos, que resulta em uma nova rede que contém dois tipos de tensores. Figura adaptada da referência [4].	34
2.18	Uma iteração do processo <i>Gilt-TNR</i> . Em (i), quatro matrizes M'_1, \dots, M'_4 são inseridas entre os tensores vizinhos. Estas matrizes são fatoradas no passo (ii) e as peças são absorvidas nos tensores vizinhos no passo (iii). Isso resulta em uma rede quadriculada com dois tipos de tensores B_1 e B_2 , que então passam por uma iteração TRG regular, etapas (iv) e (v). O sombreamento vermelho representa resíduos das correlações de curto alcance. Porém, no final do processo, todas essas correlações foram eliminadas. Figura adaptada da referência [4].	35
3.1	Fator de escala (s_c) em função da temperatura (T) onde observamos a convergência para o modelo de Ising na rede quadrada (caso $R = 0$). Na cor preta observamos o comportamento com o <i>TRG</i> que não elimina totalmente as correlações de curto alcance, que foram eliminadas com a aplicação do <i>Gilt-TNR</i>	42
3.2	Diagrama de fase para $R > -1/2$ para o modelo de Ising frustrado no plano temperatura <i>versus</i> parâmetro de frustração. A frustração do sistema cresce a medida que R vai a -0.5 , sendo tão drástica em -0.5 que faz a temperatura ir a zero.	44
3.3	Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = 0.0$. Note que quanto mais próximo estamos do ponto crítico maior será o número de iterações necessárias para o sistema convergir.	46
3.4	Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n) para diferentes parâmetros de frustração $R = 0.0$ e $R = -0.1$. Nós observamos que o valor de R não interfere na convergência do fator de escala.	47

3.5	Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.1$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.	48
3.6	Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.3$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.	49
3.7	Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.45$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.	50

Capítulo 1

Introdução

Um grande desafio na física moderna continua sendo trabalhar com sistemas físicos constituídos por muitos corpos e este problema torna-se ainda mais difícil quando seus constituintes interagem entre si. Uma simples interação entre seus constituintes torna o sistema complexo e difícil de prever seu comportamento. No intuito de descrever as propriedades destes sistemas, pode-se em princípio utilizar os fundamentos da dinâmica e tentar resolver as equações de movimento, seja em termos da Mecânica Clássica ou Quântica. Mas, uma vez que estes sistemas são constituídos por um número muito grande de partículas, esta tarefa torna-se impossível.

Como alternativa para simplificar o trabalho com materiais que apresentem um grande número de moléculas, é necessário fazer uso de sistemas idealizados. Apenas em situações idealizadas é possível aplicar regras simples, que ajudem os físicos a descrever e entender esses tipos de sistemas. Isso, permite, por exemplo, entender o que ocorre com sistemas termodinâmicos, fluidos e ferromagnetos próximos à uma transição de fase.

Nos últimos anos, vêm crescendo o interesse da comunidade científica por métodos que simplifiquem cálculos extremamente difíceis quando se trata do estudo de sistemas físicos. Redes tensoras constituem uma linguagem visual e um conjunto de ferramentas matemáticas muito eficiente no tratamento de sistemas físicos. As redes tensoras com peças interconectadas capturam as propriedades relevantes de um sistema. Desta maneira, em vez de se pensar em equações complicadas, desenhamos diagramas de rede para vários casos. As peças que

compõem estas redes são um conjunto de tensores nos quais alguns ou todos os seus índices podem ser contraídos por uma ordem estabelecida. Contrair os índices de uma rede tensora é chamado, por simplicidade, de contração da rede tensora. Nesta formulação diagramática, os tensores são representados por formas e os índices dos tensores são representados por linhas emergentes das formas. Diferentemente das equações, os diagramas de rede permitem lidar com expressões complicadas de maneira visual. Dessa forma, muitas propriedades se tornam aparentes. Há uma propriedade importante das redes tensoras que devemos enfatizar, é o número total de operações que devem ser realizadas para obter o resultado final de uma contração da rede tensora que depende muito da ordem em que os índices na rede são contraídos.

Tendo conhecimento de como se comporta os graus de liberdade microscópicos de um sistema físico e como se dá suas interações, podemos escrever a função de partição de um sistema clássico, ou seja, podemos escrever uma soma ponderada de todas as configurações microscópicas do sistema. A função de partição contém todas as informações das propriedades coletivas de um sistema de muitos corpos em equilíbrio termodinâmico. No entanto, analisar funções de partição não é uma tarefa fácil. Porém, o procedimento de representar funções de partição por rede de tensores, abriu um caminho para abordagens do cálculo dessas funções. Em uma representação da função de partição do sistema por redes de tensores, calcular a função de partição consiste em fazer uma contração da rede de tensores. Esta contração pode ser feita de diversas maneiras. Embora, a forma mais conhecida para contrair uma rede de tensores é implementando a técnica do Grupo de Renormalização [2].

O algoritmo mais utilizado como ferramenta teórica na contração de rede tensoras para a análise de sistemas físicos nos quais seus constituintes microscópicos interagem fortemente, é o chamado Grupo de renormalização tensorial (TRG) (sigla em inglês) [3]. A técnica é baseada numa representação da função de partição do sistema por uma rede de tensores, na qual a cada sítio da rede associamos um tensor translacionalmente invariante. O tensor codifica os estados associados aos graus de liberdade do sistema. Os índices dos tensores, que chamamos pernas, correspondem às ligações entre os sítios da rede.

Na abordagem por rede de tensores, há a necessidade de fatorar matrizes, manipular tensores e seus respectivos índices. Na parte que diz respeito à fatoração de matrizes,

existe diferentes possibilidades de realizar este procedimento, por exemplo, através de uma **descomposição em valores singulares** [4, pp. 471] (Singular Values Decomposition), abreviado como SVD. A SVD é uma forma de fatorar uma matriz. Mas, existem outros tipos de fatoração como, por exemplo, **fatoração LU** [4, pp. 142], **fatoração QR** [4, pp. 405], **fatoração Cholesky** [4].

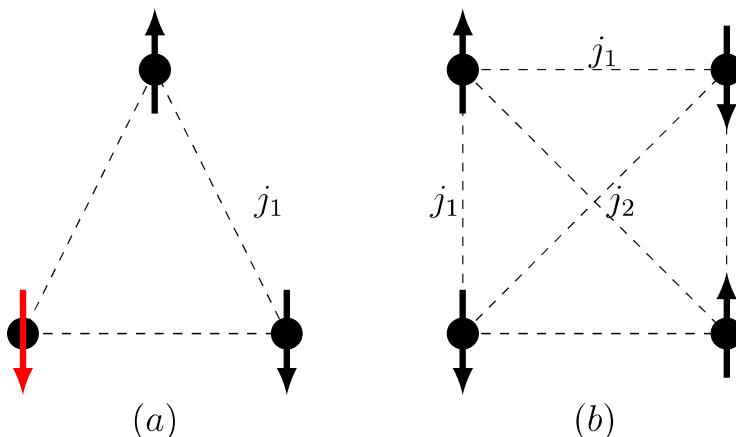
Há também a *SVD* de alta ordem, denominada de *HOSVD-Higher-Order Singular Decomposition*, que é na verdade uma generalização da decomposição de uma matriz em valores singulares, para tensores. O que difere a *SVD* da *HOSVD* é que a *HOSVD* é utilizada na descomposição de tensores, enquanto a *SVD* é utilizada na descomposição de matrizes.

Apesar do algoritmo *TRG* ser uma importante ferramenta na contração de rede tensores, este método, não implementa adequadamente uma transformação de grupo de renormalização. Assim, alguns detalhes das correlações locais sobrevivem durante o processo de renormalização, não produzindo resultados precisos para os parâmetros críticos. Diante, deste problema, a solução encontrada foi um algoritmo chamado *graph-independent local truncations*, ou *Gilt* [5]. Este, novo algoritmo age na rede truncando pernas selecionadas. Neste processo é possível remover correlações locais no entorno da perna selecionada. Podemos aplicar este processo a qualquer tipo de rede, sem modificar sua geometria. Apenas os tensores no entorno da perna selecionada sofre modificações.

A frustração no sistema ocorre nas situações onde, numa rede, os spins não encontram estabilidade entre as interações com seus vizinhos. Este conflito entre os spins pode resultar da geometria da rede ou devido à competição entre as interações [6]. Uma classe de sistemas interagentes particularmente difícil de estudar são os sistemas frustrados. Tomemos os exemplos das redes triangular e quadrada em duas dimensões como na figura (1.1).

A parte *a* da figura (1.1) mostra uma célula unitária de uma rede triangular com seus spins interagindo antiferromagneticamente, $j_1 < 0$. Neste caso, os spins se alinham de maneira alternada, de modo que o sistema não apresenta uma magnetização espontânea macroscópica a baixas temperaturas [7]. Para minimizar sua energia, cada par de spin tende a se alinhar em sentidos opostos como ilustrado pelas setas pretas da figura (1.1). Note que o terceiro spin, representado pela seta vermelha, não consegue satisfazer simultaneamente uma orientação antiferromagnética com outros spins. A este fato, nos referimos como

Figura 1.1: Células unitárias da rede triangular e quadrada. Em (a), observamos o fenômeno da frustração geométrica.



frustração geométrica. Efeito semelhante ocorre no exemplo da parte *b* da mesma figura. Neste outro caso, os quatro spins nos vértices da rede quadrada estão orientados antiferromagneticamente, minimizando assim a energia do sistema. Porém, caso a interação entre os segundos vizinhos, representada pelas linhas diagonais na figura (1.1) *b*, seja antiferromagnética ($j_2 < 0$), vemos que esta configuração de spins não minimiza a energia entre os pares de segundos vizinhos. Por outro lado, se invertermos qualquer um dos spins a interação entre ele e seu segundo vizinho passa a ser satisfeito em razão da frustração da interação com seus primeiros vizinhos. Este segundo caso ilustra a frustração da interação com seus primeiros vizinhos. Este segundo caso ilustra a frustração devido à competição entre as interações. A configuração de mínima energia depende da intensidade relativa das interações.

1.1 Transições de Fases

No intuito de entender o comportamento de sistemas físicos nos dedicamos ao estudo das propriedades macroscópicas de tais sistemas. Em específico, aqui, estamos mais interessados em sistemas físicos constituídos por um grande número de partículas (átomos ou moléculas). Este tipo de sistema apresenta comportamento que dificilmente conseguiríamos prever se partíssemos de uma descrição microscópica. Além disso, esses sistemas podem

apresentar comportamento bastante diversos com pequenas modificações nas condições de suas vizinhanças.

Parâmetros externos a um sistema físico, ou seja, aqueles associados ao ambiente no qual ele se encontra, influenciam na organização interna de seus constituintes. Exemplo de tais parâmetros são a temperatura e a pressão. A variação de tais parâmetros podem alterar temporariamente ou permanentemente o estado do sistema. Em alguns casos, há uma completa reorganização interna da matéria que se reflete numa drástica alteração das propriedades macroscópicas do sistema. A esta mudança brusca de estados do sistema denominamos de uma transição de fases [8]. Analisar, estes tipos de sistema consiste em medir suas propriedades, sejam, elas temperatura, densidade ou magnetização. Mudanças no estado macroscópico de sistemas físicos é de grande interesse na comunidade científica e o exemplo mais comum é a transição de fases da água. A água pode aparentemente ser encontrada em três formas distintas que são os estados sólido, líquido e gasoso. Por exemplo, quando tiramos uma garrafa contendo cerveja congelada da geladeira e a deixamos repousar, com o passar do tempo o que antes era sólido torna-se líquido, ou seja, a substância sofre uma transição de fases que esta associada à mudanças microscópicas que acontecem na organização das moléculas.

As transições de fase, estão presentes nos mais diversos sistemas. Um outro exemplo, onde podemos observar fenômeno de transições de fases é no preparo de uma papa. Nesse caso o amido de milho, substância formada pela união sucessiva de várias moléculas, quando usado no preparo de papa é adicionado a água e mexido para que seja dissolvido de forma homogênea. Para uma dada pressão e uma densidade, a mistura atinge o ponto ideal para consumo. A este ponto, podemos nos referir, como um dos diversos pontos críticos que o sistema apresenta para as diversas transições de fases que ocorrem durante o processo.

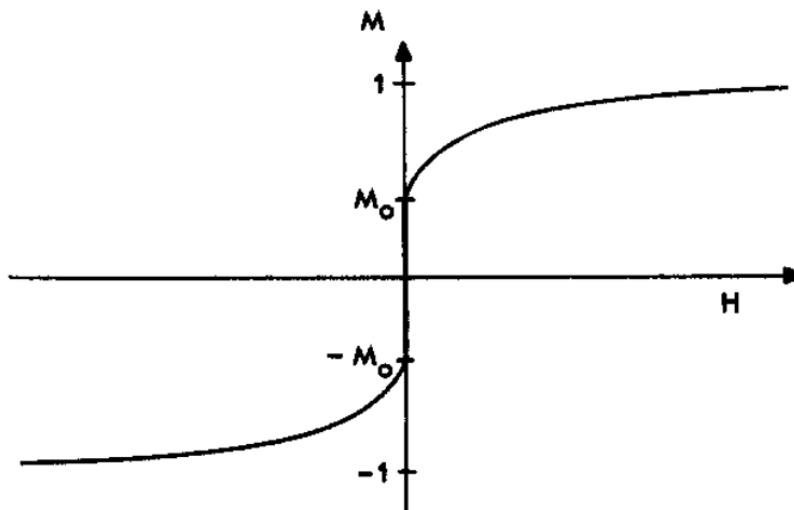
Com o surgimento da mecânica estatística no século *XIX*, procurou-se entender o que ocorreria com sistemas termodinâmicos, fluidos e ferromagnetos (entre outros) próximos à uma transição de fase (criticalidade). Nas proximidades destes pontos observamos que os fenômenos são caracterizados por comportamentos descontínuos ou singularidades em algumas funções termodinâmicas e conseqüentemente, por mudanças repentinas em suas propriedades devido à variação de um parâmetro externo como a temperatura, campo magnético,

pressão, etc. Resultados já conhecidos na literatura [9, 10], revelam que independentemente do sistema em estudo, há comportamento geral a todos os sistemas de uma mesma classe, isto é, apresentam um conjunto de propriedades e simetrias características daquela classe que independe da natureza das interações e dos elementos constituintes do sistema. Esse comportamento foi chamado de universalidade [11].

Transições de fases também podem estar associados a sistemas que não sejam fluidos. Por exemplo, sistemas magnéticos. Os materiais magnéticos mais evidentes são os ferromagnéticos, constituídos pelo ferro (Fe), cobalto (Co) e níquel (Ni). À temperatura ambiente, eles exibem uma magnetização espontânea. Quando aquecidos, esta magnetização desaparece para uma determinada temperatura, denominada temperatura crítica, tornando o material paramagnético. No estado ferromagnético as interações entre os spins favorecem o alinhamento paralelo dos spins. No estado antiferromagnético as interações provoca um alinhamento antiparalelo dos spins. O estado paramagnético é caracterizado do ponto de vista macroscópico pela resposta linear a um campo magnético aplicado. Na ausência de campo, uma amostra de material paramagnético não exibe magnetização. Aplicando-se um campo, a amostra adquire uma magnetização que cresce linearmente com a intensidade do campo aplicado. Por outro lado, se o campo for reduzido até se anular, a magnetização também se reduz e acaba se anulando [7].

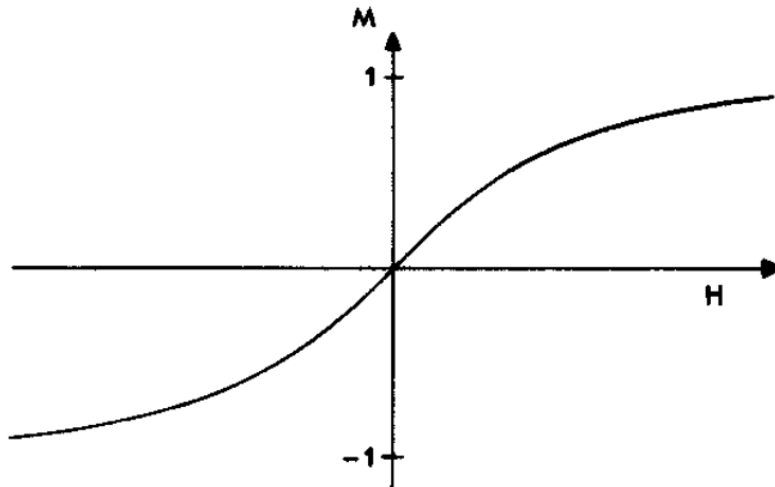
Para entender melhor como ocorre a transição de fase nos sistemas magnéticos, vamos usar um exemplo, disponível na referência [12]. Considere uma barra de ferro em temperatura ambiente, submetido a um campo magnético de intensidade H , que se encontra alinhado paralelamente ao seu eixo. Devido a ação do campo magnético a barra estará quase que completamente magnetizada se a intensidade do campo for suficientemente alta. Em unidades apropriadas, podemos dizer que sua magnetização, M , é $+1$. Porém, se a intensidade de H é reduzido à zero, observamos que M diminui, mas, não para zero. Em $H = 0$ existe uma magnetização residual M_0 , que chamamos de magnetização espontânea. Se o experimento for repetido, considerando o campo magnético orientado no sentido inverso, a magnetização torna-se -1 e se aproxima de $-M_0$ à medida que a intensidade do campo vai a zero. A curva $M(H)$ apresenta uma descontinuidade para $H = 0$ à temperatura ambiente. A função $M(H)$ deve apresentar o comportamento esboçado na figura (1.2).

Figura 1.2: Comportamento da magnetização em função do campo magnético, em temperatura ambiente. Figura adaptada da referência [11].



Como a magnetização da barra de ferro muda repentinamente de sinal em $H = 0$, consideramos que neste ponto o sistema experimenta uma transição de fases. Se a temperatura aumenta ligeiramente, $M(H)$ tem um comportamento semelhante ao gráfico (1.2). Porém, a magnetização espontânea é menor que a anterior.

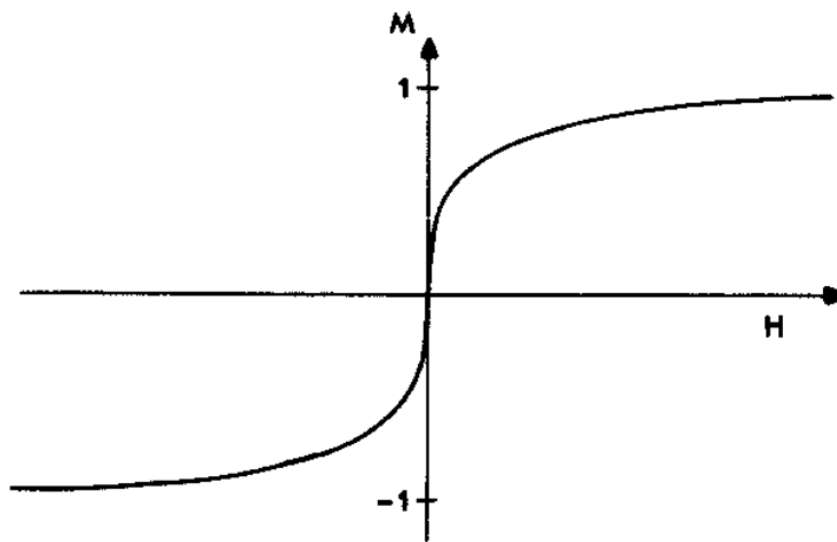
Figura 1.3: Comportamento da magnetização em função do campo magnético, para altas temperaturas. Figura adaptada da referência [11].



Caso a temperatura seja aumentada para um valor muito acima da temperatura ambiente e o experimento descrito anteriormente seja repetido, observamos que $M(H)$ apresenta o comportamento mostrado figura 1.4. Em altas temperaturas a magnetização é nula a campo nulo. Note ainda, que $M(H)$ é contínua e tem derivada contínua em $H = 0$, ou seja, é analítica neste ponto.

Portanto, deve existir um valor crítico da temperatura, T_c , a partir do qual a transição deixa de ocorrer. Em T_c , verificamos que $M(H)$ é contínua em $H = 0$, porém sua derivada é infinita neste ponto. Ver figura (1.4).

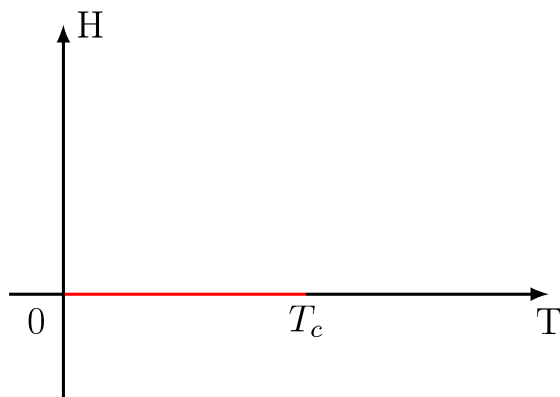
Figura 1.4: Comportamento da magnetização em função do campo magnético, na temperatura crítica. Figura adaptada da referência [11].



O diagrama de fases (1.5) representa, um resumo do comportamento da função $M(T, H)$ para os estados observados anteriormente no plano temperatura *versus* campo magnético. A magnetização é uma função contínua em todos os pontos do plano $T \times H$, exceto sobre a linha vermelha que estende-se de $(0, 0)$ até um ponto terminal $(T_c, 0)$. Sobre a linha de coexistência de fases, a magnetização pode assumir tanto valores positivos quanto negativos. Quando $T > T_c$, $M_0 = 0$, o sistema encontra-se na fase paramagnética. No entanto, quando o valor da temperatura é crítico $T = T_c$, o sistema possui um comportamento peculiar e apresenta-se numa fase crítica.

O corte é uma linha de transições de fases. Seu ponto final $(T_c, 0)$ é conhecido como ponto crítico. Como dito acima, a função $M(H, T)$ é singular neste ponto, e um dos aspectos mais fascinantes da mecânica estatística é o estudo desse comportamento singular próximo ao ponto crítico.

Figura 1.5: O diagrama de fases de um ferromagneto no plano temperatura T versus campo magnético H . No ponto $T = T_c$ o sistema apresenta um comportamento completamente distinto de qualquer outro ponto e está na fase crítica. Antes do ponto crítico temos uma fase e após ele, outra fase. Figura adaptada da referência [11].

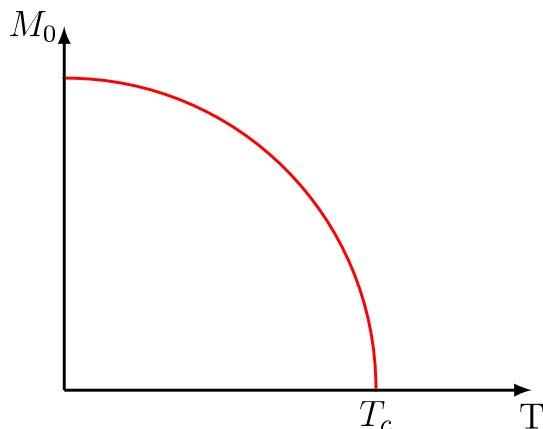


Na fase ferromagnética $T < T_c$, o material ainda está magnetizado na ausência de campo externo, em alguma direção particular. Dizemos que o material apresenta magnetização espontânea que é uma função de T e pode ser definida como o limite a ser tomado através de valores positivos de H , ou seja

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H, T). \quad (1.1)$$

o comportamento típico da magnetização espontânea é mostrada na figura (1.6). Ela é positiva para $T < T_c$ e identicamente nula para $T > T_c$. Em alguns materiais, a orientação da magnetização espontânea ocorre aleatoriamente. Estes são *ferromagnetos isotrópicos*. Em outros materiais, a magnetização espontânea tende a se alinhar preferencialmente na direção de algum eixo particular associado à estrutura cristalina, estes são conhecidos como *ferromagnetos uniaxiais*.

Figura 1.6: Representação do comportamento da magnetização espontânea em função da temperatura. Figura adaptada da referência [11].



1.2 Fenômenos Críticos

Fenômenos críticos são assim denominados por ocorrerem nas proximidades de um ponto crítico. Ou seja, próximo ao ponto do diagrama de fases do sistema onde a transição é de segunda ordem. As funções termodinâmicas obedecem certas leis de potência (como a susceptibilidade magnética, por exemplo) cujos expoentes não são inteiros, os denominados expoentes críticos [13].

Todos os fenômenos que ocorrem nas proximidades de um ponto crítico são denominados Fenômenos Críticos (FC). O ponto crítico é, em geral, o ponto final de uma curva finita que separa duas fases distintas de um sistema. No entorno deste ponto, é possível passar de um estado a outro da matéria sem haver uma mudança abrupta entre os estados [13]. Este comportamento pode ser descrito por uma medida do grau de ordem entre os limites de um sistema de transição de fase, característico de cada substância.

Outrossim, nas proximidades de seu respectivo ponto crítico, diferentes sistemas comportam-se de modo semelhante. De fato, a estrutura microscópica das substâncias torna-se irrelevante e sistemas diferentes exibem as mesmas propriedades críticas. Sistemas físicos distintos que apresentam o mesmo comportamento crítico são ditos pertencerem à mesma classe de universalidade. Assim, estudar uma substância no ponto crítico permite obter

informação gerais para todas as substâncias pertencentes à mesma classe de universalidade.

Para sistemas na mesma classe de universalidade os expoentes e as funções de escala são os mesmos na vizinhança do ponto crítico. Portanto, podemos usar modelos mínimos para estudar um determinado tipo de criticalidade. O problema reside então na identificação dos sistemas que pertencem a uma determinada classe. Um dos modelos mais simples estudado do ponto de vista da mecânica estatística clássica é o modelo de Ising [14]. Este é um dos poucos modelos de partículas interagentes com solução exata conhecida. Apesar de sua simplicidade, não se conhece uma solução exata para o modelo de Ising em três dimensões.

No estudo das transições de fases, o conceito de universalidade está relacionado às propriedades termodinâmicas de um sistema nas proximidades do ponto crítico. Sistemas com um mesmo conjunto de expoentes críticos formam uma classe de universalidade, que independe da natureza das interações e dos elementos constituintes do sistema. Caracteriza-se apenas pelo alcance das interações microscópicas, se estas são de longo ou curto alcance, pela dimensão espacial do sistema e o número de componentes do parâmetro de ordem. Em alguns sistemas, a presença de impurezas ou defeitos aleatórios pode afetar a classe de universalidade [10].

O modelo de Ising [14] com interações apenas entre primeiros vizinhos é um raro exemplo de sistema estatístico exatamente solúvel que exibe uma transição de fase. Porém, não existe solução conhecida se adicionar acoplamento com segundos vizinhos ou um campo magnético externo. Dessa forma, é preciso confiar em algum tipo de aproximação para analisar o problema.

Neste trabalho estudamos o comportamento do modelo de Ising com interações entre pares de primeiros e segundos vizinhos em uma rede quadrada. Como as interações são todas antiferromagnéticas, a rede quadrada torna-se frustrada e o estado fundamental do sistema depende da razão, entre as constantes de acoplamento de primeiros e segundos vizinhos $J_2/|J_1|$. No caso em que estamos analisando, não existe campo magnético externo atuando sobre o sistema. Nosso principal objetivo é obter o diagrama de fases do sistema no plano temperatura *versus* o parâmetro de frustração R . Assim, é possível de observar como se comporta a temperatura crítica do sistema para diferentes valores de R . Vamos calcular os expoentes críticos ao longo da linha de transição. Estes expoentes nos fornece informações

importantes acerca do sistema, como por exemplo, a classe de universalidade do sistema.

Como já é conhecido que o algoritmo TRG não fornece resultados confiáveis na criticidade, vamos usar o método *Gilt* como uma maneira de corrigir as deficiências do TRG. Procedemos com uma única etapa do *Gilt*, aplicada no ponto em que o *TRG* falha ao eliminar as correlações locais. Essa combinação do *Gilt* com o TRG é chamado *Gilt-TNR*. É uma transformação rápida, simples e generalizável para qualquer tipo de rede tensoras.

Na literatura, podemos encontrar diversos trabalhos relacionados ao tipo de sistema que estamos analisando. Como é o caso da referência [15], onde verifica-se que as transições de fase entre as fases antiferromagnéticas e paramagnéticas ($R > -0.5$) próximas a $R = -0.5$ são de primeira ordem e ainda afirmam a existência de um ponto tricrítico na região analisada. Porém, esses resultados foram obtidos utilizando a teoria de campo médio, que não permite o cálculo dos expoentes críticos, sendo impossível de descrever toda a física do sistema. Diferentemente, do método aqui empregado, que é capaz de descrever corretamente todo o comportamento crítico do sistema.

1.3 Estrutura do Trabalho

Esta dissertação está estruturada em 4 capítulos. Neste primeiro capítulo, expomos, a motivação e objetivo do trabalho, como também, alguns conceitos que são importantes para compreensão do método aqui empregado. Além disso, apresentamos, qual o tipo de sistema que estamos trabalhando. Subsequentemente, no capítulo 2, estão expostos os fundamentos necessários sobre o método e material. Como aplicamos tal modelo e como é possível implementar para diferentes casos. No capítulo 3, apresentamos e discutimos os resultados de nossa investigação e análise com a implementação do método *Gilt-TNR* em uma rede tensorial. Por fim, no capítulo 4, apresentamos as conclusões do trabalho.

Capítulo 2

Material e Método

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. Quando fazemos o estudo de transições de fases precisamos fazer uso de modelos idealizados que descrevam certas características de sistemas reais, como exemplo de um sistema idealizado citamos o modelo de Ising. Este modelo foi proposto em 1925 por Wilhelm Lenz [14], com propósito de explicar o ferromagnetismo, ou seja, o aparecimento de uma *magnetização espontânea* em alguns materiais para temperaturas suficientemente baixas.

Nesta dissertação, consideramos uma rede quadrada na qual a cada sítio, i , associamos uma variável do tipo Ising $\sigma_i = \pm 1$. Não estamos levando em consideração a ação de um campo magnético externo. Porém, além das interações entre primeiros vizinhos usuais, também, levamos em consideração a interação entre segundos vizinhos. Além disso, ambas as interações são antiferromagnéticas. Ou seja, favorecem o alinhamento antiparalelo dos pares de spins interagentes. A interação entre segundos vizinhos introduz uma frustração geométrica ou melhor, o estado fundamental do sistema torna-se não trivial.

As propriedades de um sistema termodinâmico em equilíbrio são descritas pela função de partição. Esta função por definição, contém toda informação relevante que considerada sobre um sistema. Resolver o hamiltoniano do sistema, consiste em calcular a função de

partição que para um sistema clássico de N graus de liberdade é dada por

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta\mathcal{H}(\sigma)) \quad (2.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura e a soma se estende sobre todas as configurações possíveis do sistema $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$. De posse da função de partição obtém-se a energia livre do Gibbs:

$$G = -k_B T \ln Z \quad (2.2)$$

e, por conseguinte, toda a termodinâmica do sistema.

Um passo importante no estudo do nosso sistema é definir o *hamiltoniano*, que corresponde a energia total do sistema e é uma função da configuração em que este se encontra. No nosso caso, como não estamos considerando campo magnético externo atuando sobre o sistema, o hamiltoniano, é

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (2.3)$$

onde $J_1 < 0$ e $J_2 < 0$ são as constantes de acoplamento entre os primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Como ambas constantes de acoplamento são negativas, há uma tendência dos spins a se alinharem antiparalelamente de modo que obtemos o modelo anti-ferromagnético. Note que a primeira soma na equação anterior corre sobre todos os pares de primeiros vizinhos e a segunda soma corre todos os pares de segundos vizinhos, sendo que cada par entra uma só vez na soma. Em tal sistema, a disposição dos spins delinea uma estrutura geométrica chamada rede. Por exemplo, para uma dimensão os spins estão uniformemente espaçados e alinhados ao longo de uma reta. Em duas dimensões um arranjo possível é aquele cuja célula unitária da rede seja quadrada, estando os vértices ocupados por spins. Para o caso tridimensional uma possibilidade é a rede ser cúbica com os spins ocupando os seus vértices.

O estado fundamental do hamiltoniano (2.3) é conhecido para uma rede quadrada. A saber, quando o valor do parâmetro de frustração $R = J_2/|J_1| > -1/2$ a configuração de menor energia corresponde ao estado *antiferromagnético de Néel*, no qual os spins de uma sub-rede da rede quadrada apontam em uma direção enquanto os da outra sub-rede apontam na direção oposta. Por outro lado, para $R = J_2/|J_1| < -1/2$ o sistema ordena-se com os spins de uma mesma fileira paralelos uns aos outros, porém a orientação de uma fileira para outra é antiferromagnética. Esse último estado é conhecido na literatura como ordem superantiferromagnética. O ponto crítico separando estas duas fases encontra-se em $R = -1/2$ no qual a temperatura crítica é suprimida para zero.

2.1 Grupo de Renormalização

As teorias do Grupo de Renormalização [16] surgiram na década de 70, mais precisamente em 1971, com o artigo de **K. G. Wilson** [17], que recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1982 por esta contribuição. O método de Wilson refere-se a um aparato matemático que permite a investigação sistemática das mudanças de sistema físico quando visto em diferentes escalas e surgiu como a síntese de várias técnicas aplicadas com o objetivo de prever o comportamento de sistemas diversos próximos à criticalidade.

Sistemas que apresentam transições de fases possuem vários comportamentos em comum. No final do século XIX com o surgimento da Mecânica Estatística, procurou-se entender microscopicamente o que ocorria com sistemas termodinâmicos no entorno do ponto onde ocorre a transição de fases, à chamada de região crítica. Nessa região, grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular, caracterizado pelas flutuações de suas propriedades termodinâmicas. Por exemplo, para entendermos como nessa região a transição líquido/gás e a transição ferromagnética/paramagnética tem o mesmo comportamento, analisamos um conjunto de expoentes crítico universais que definem as leis de potência características desses sistemas e são fundamentais para descrever qualitativamente o comportamento crítico do sistema. Assim, sistemas que apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos podem ser agrupados em uma mesma classe de universalidade. Isto significa que sistemas físicos distintos em dadas condições possuem comportamentos críticos idênticos [11].

Todos os sistemas físicos que formam uma mesma superfície crítica definem uma classe de universalidade dos sistemas críticos. Todos os sistemas físicos na superfície crítica serão direcionados para um mesmo ponto fixo K sob o efeito de operações de grupo de renormalização, ou seja, eles apresentarão o mesmo comportamento crítico. A diferença entre os sistemas físicos estabelece-se nos campos de escala irrelevantes, os quais não têm influência no comportamento crítico.

As teoria de grupo de renormalização (GR) foram construídas ao longo de muitos anos. É um processo que trabalha sobre um sistema modificando sua escala de comprimento em que informações menos importantes em pequenas escala de distâncias são repetidamente descartadas até que apenas as informações mais importantes permaneçam ao fim do processo. Esta ideia, surgiu como uma proposição para o cálculo de expoentes críticos e é uma das soluções mais bem sucedidas para o estudo das transições de fase, que consiste em nos aproximarmos do ponto crítico, onde o comprimento de correlação seria tão grande ($\xi \rightarrow \infty$) que o sistema se torna invariante por escala [18]. Na criticalidade, não importa o número de transformações, as propriedades do sistema permanecem inalteradas porque os pontos fixos da transformação foram atingidos.

A técnica do Grupo de Renormalização divide-se em duas classes, uma relacionada à área da teoria de campos conhecida como técnica do espaço-K, que recebe esse nome por tratar de quantidades escritas em termos de transformadas de Fourier. Nessa primeira classe a teoria realiza renormalização no espaço dos momentos. A segunda classe recebe o nome de grupo de renormalização no espaço real [2], também conhecido como Grupo de Renormalização de Migdal-Kadanoff (GRMK). O termo espaço real se refere ao fato de essa técnica envolver quantidades que dependem da posição no espaço de coordenadas usual.

O método do grupo de renormalização no espaço real é apropriado quando se trabalha com modelos baseados em redes que apresentam simetria de escala discreta. Uma rede tem simetria de escala se ao agruparmos os sítios da rede em blocos e substituirmos esses blocos por um único sítio que representa todos os sítios do bloco (inclusive com suas interações) conseguimos produzir uma rede semelhante à inicial exceto por um fator de escala.

Utilizando esse processo alteramos o comprimento de escala do sistema obtendo assim uma nova rede reduzida com um número menor de sítios e um número menor de interações.

Porém, matemos as simetrias do sistema para preservar suas propriedades críticas.

2.2 Grupo de Renormalização na representação de redes de tensores

A ideia do grupo de renormalização na representação de redes de tensores é um método amplamente utilizado por ser considerado simples de implementar e uma eficiente ferramenta teórica no estudo de sistemas físicos fortemente interagentes. Podendo ser aplicado no estudo de transições de fase em diferentes sistemas, como por exemplo, ao modelo de Ising, definido em uma rede quadrada com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos que é o caso do nosso sistema. Enfatizamos que as interações entre segundos vizinhos ocorre na diagonal de cada plaqueta da rede quadrada o que torna o sistema frustrado.

O método para estudar modelos clássicos em duas dimensões foi proposto inicialmente por **Levin** e **Nave**, em 2007 [3]. Eles propuseram um método para realizar uma transformação de bloco a la Kadanoff (*Coarse-graining*) com a propriedade de deixar invariante a função de partição do sistema e sem a necessidade de introduzir novos acoplamentos nas variáveis renormalizadas. A técnica foi batizada de grupo de renormalização tensorial (TRG Tensor Renormalization Group) [19].

A grosso modo, 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 de quatro sítios, de modo que cada sítio pertença a um único bloco, e contrair os índices internos ao bloco. A contração destes índices resulta em uma nova rede, com um tensor associado a cada bloco do sistema original. A nova rede possui $N/4$ sítios. O mapeamento entre os dois sistemas é, em princípio, exato. Porém, o número de elementos dos novos tensores cresce exponencialmente e alguma forma de renormalização é necessária para tornar o método factível na prática. Para a conveniência do leitor faremos um breve resumo das propriedades de tensores e de algumas operações com estes objetos.

2.2.1 Tensores

Podemos entender tensores como entidades matemáticas empregadas para descrever propriedades ou atributos de objetos com várias componentes. São muito usados em física e engenharias, por exemplo. Eles são categorizados em uma hierarquia de acordo com sua ordem: por exemplo, um número comum é um tensor de ordem zero (também conhecido como escalar), um vetor é um tensor de ordem um, uma matriz é um tensor de ordem dois, e assim por diante [20]. Embora os tensores de ordem baixa possam ser facilmente representados com símbolos matemáticos como T_{ijkl} (onde o número de índices representa a ordem do tensor), essa notação se torna muito complicada quando começamos a falar de tensores de ordem superiores. Nesse ponto, é útil começar a usar a notação diagramática, onde simplesmente um círculo (ou alguma outra forma) com várias linhas ou pernas saindo dela. O número de pernas sendo o mesmo da ordem do tensor. Nesta notação, um escalar é apenas um círculo, um vetor tem uma única perna, uma matriz tem duas pernas, etc. Cada perna do tensor também possui uma dimensão, que é o tamanho dessa perna. O benefício de representar tensores dessa maneira é que além de uma visão geométrica de como esta sendo descrita a operação, ainda é possível codificar operações matemáticas. 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

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

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 [21]

$$A'_{ij} = \sum_{k,l} \frac{\partial x'_i}{\partial x_k} \frac{\partial x'_j}{\partial x_l} A_{kl} \quad (2.5)$$

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

Nem todo tensor obedece uma transformação da forma 2.5. Nesses casos, distinguimos

o tipo do tensor pela localização de seus índices. Por exemplo,

$$T_j^i = \sum_{k,l} \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} T_l^k \quad (2.6)$$

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 em 3 dimensões possui 9 componentes, T_{11}, \dots, T_{33} de tal forma que sob uma rotação se transforma com $T \rightarrow T'$ com

$$T'_{ij} = \sum_k \sum_j A_{ik} A_{jl} T_{kl}. \quad (2.7)$$

A transformação acima pode ser escrita como

$$T' = ATA^{-1} \quad (2.8)$$

Tendo em conta que A é unitária. 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

$$T_{lm}^{ijk} = T_{lm}^{kji} \quad (2.9)$$

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

$$T_{lm}^{ijk} = -T_{lm}^{kji} \quad (2.10)$$

ou a troca de índices resulta 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 [20]. Tensores de mesma ordem e tipo podem ser somados ou subtraídos, resultado em um outro tensor de mesma ordem e tipo

$$S_{ij}^k = A_{ij}^k + B_{ij}^k \quad (2.11)$$

e

$$D_{ij}^k = A_{ij}^k - B_{ij}^k \quad (2.12)$$

É também possível obter 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

$$T_{ijk} = U_{ij}W_k \quad (2.13)$$

$$T^{ijkl} = U^{ij}W^{kl} \quad (2.14)$$

e

$$T_{ij}^{kl} = U_{ij}W^{kl} \quad (2.15)$$

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

$$T_j^l = \sum_i T_{ij}^{il} \quad (2.16)$$

contraindo novamente, o tensor de ordem zero é obtido,

$$T = T_j^j = \sum_i T_{ij}^{il} \quad (2.17)$$

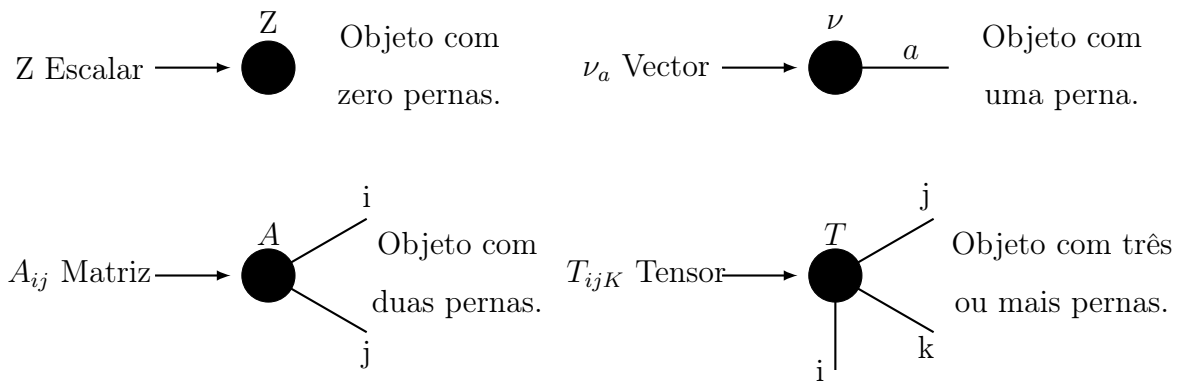
Após as contrações, temos como resultado tensores diferentes do tensor original, embora ainda sendo representados pela letra T . A distinção entre eles é dada pelos seus respectivos índices, o tensor do tipo T_j^l é diferente do tensor do tipo T_{ij}^{kl} .

2.2.2 Representação diagramática de tensores

A função de partição de um modelo de spins pode ser representada por uma rede de tensores. Esta representação é uma forma gráfica de codificar a função de partição que contém informação do sistema e nos fornecer uma maneira alternativa de trabalhar com operações matemáticas. Nesta representação, cada tensor que constitui a rede tem uma ordem determinada por seu próprio número de pernas. No processo de contração da rede, as pernas conectadas, que formam as arestas no diagrama serão contraídas. Embora, exista diversas maneiras de contrair uma rede de tensores, devemos estabelecer um padrão de contração dos índices de vários tensores que formarão uma nova rede. Ao fim do processo o número de pernas pendentes restantes determina a ordem do tensor resultantes.

Podemos escrever a função de partição como um produto tensorial entre tensores associados aos graus de liberdade dos spins. Assim, efetuar uma soma 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 visto 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.

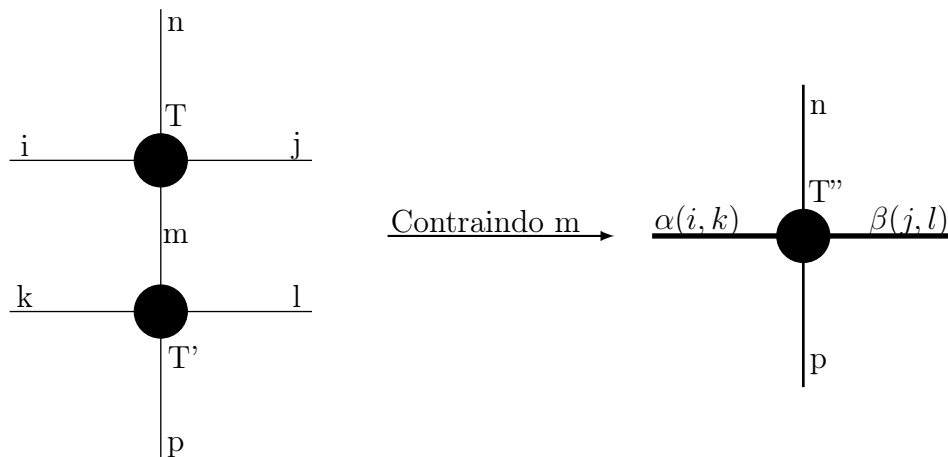
Figura 2.1: Representação diagramática de um escalar, um vector, uma matriz e um tensor com três índices. Observe que o número de pernas no diagrama está associado ao número de índices (ordem) do tensor.



Uma forma conveniente de se lidar com tensores e redes de tensores é empregar uma notação diagramática para as equações [22]. Na figura (2.1) apresentamos os diagramas que representam um escalar, um vector, 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. Esse conjunto de formas geométricas quando conectados por linhas resultantes da conexão das pernas associados ao índice comum a dois tensores, forma o que chamamos de rede de tensores.

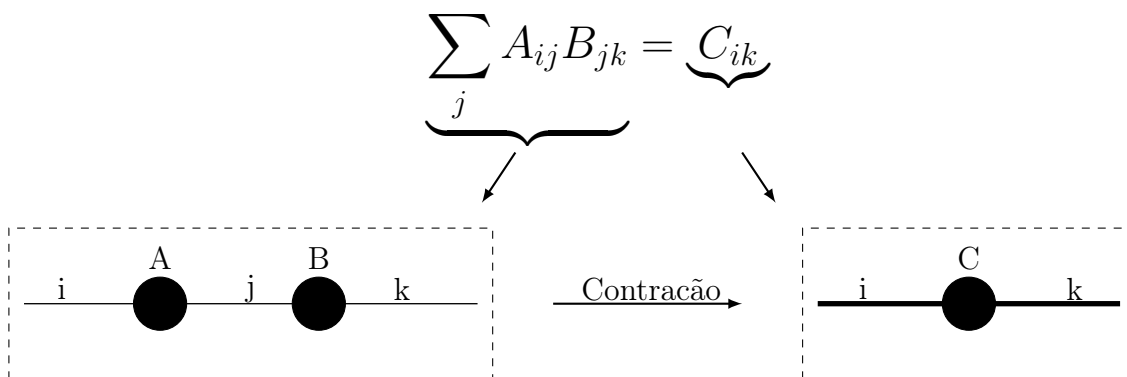
A contração de um particular índice em uma rede de tensor pode levar ao agrupamento de dois ou mais índices, ver o exemplo da figura 2.2. Note o agrupamento dos índices i e k dando origem ao índice composto α . Da mesma forma, os índices j e l combinam-se em β .

Figura 2.2: A contração do índice m do diagrama da esquerda leva ao agrupamento dos índices i e k bem como j e l . A direita, a representação diagramática da contração.



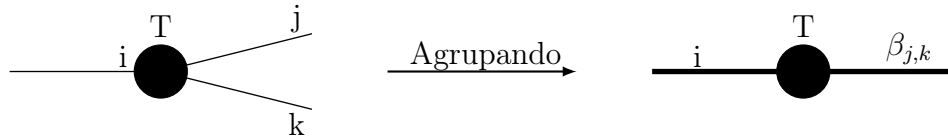
Como um exemplo vamos representar um produto matricial nesta notação diagramática. Lembre-se que cada elemento da matriz produto envolve a soma de um índice comum às duas matrizes a serem multiplicadas, ou seja, a uma contração de índice. A figura 2.3 mostra o produto de duas matrizes A e B , que resulta na matriz C , tanto em forma de equações quanto a correspondente representação diagramática.

Figura 2.3: Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por A_{ij} e $B_{j,k}$, os índices i e k são livres enquanto que j é contraído.



De maneira geral, o agrupamento de dois índices, como na figura (2.4), 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

Figura 2.4: 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 pernas resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa e rotulada pelo índice combinado $\beta_{j,k}$.



que associa o par de índices originais (j, k) ao resultante β .

A figura (2.5), 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 índices.

$$\sum_j T_{ij} T_{jl} = T_{il} \tag{2.18}$$

Pernas livres correspondem a índices que não serão contraídos, ver figura 2.6. 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 2.5: 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 observe-se que a cada par de tensores dentro do retângulo tracejado as pernas são ligadas, formando um índice comum. O tensor M é resultado da contração do índices comum entre dois tensores dentro do retângulo tracejado.

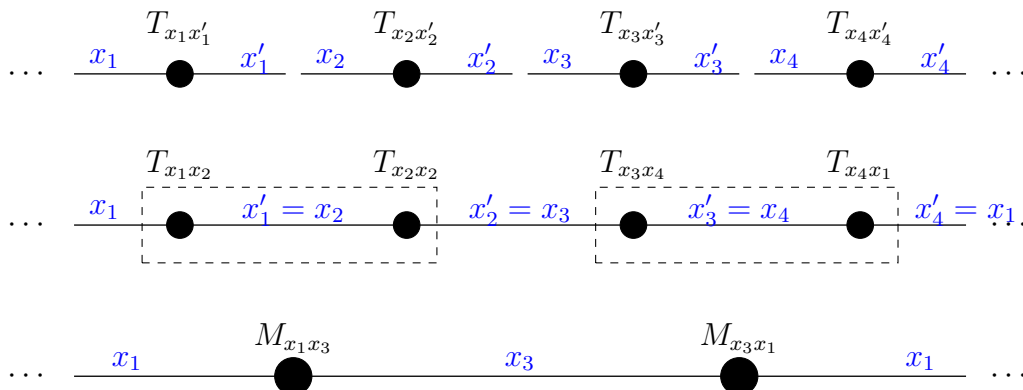
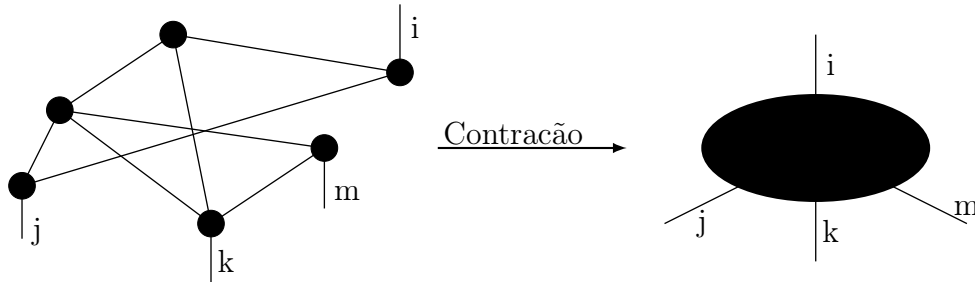


Figura 2.6: Diagrama de uma rede de tensores com várias ligações entre os tensores e quatro índices livres. Todos os índices comuns entre os tensores são contraídos, os índices livres são pernas que não serão contraídas. O resultado da contração é um tensor de quarta ordem de índices i, j, k e m .



2.2.3 Representação da função de partição por rede de Tensores

Uma representação de um modelo estatístico clássico por uma rede tensorial é uma extensão multi-dimensional da representação da função de partição como um produto de matrizes de transferências no caso unidimensional. Todos os modelos estatísticos clássicos com interações de curto alcance, como o modelo Ising, podem ser expressos como modelos de rede de tensores [1]. Existem duas maneiras de representar a função de partição de um sistema estatístico clássico em uma forma de rede de tensores. Uma é a representação na rede dual à original, que é o tipo de representação que iremos empregar nesta dissertação. Uma outra possibilidade é a representação na rede original. Para o modelo considerado aqui, esta última representação é inconveniente [1].

- **Representação na rede dual:** Esse tipo de transformação é particularmente útil se o número de coordenadas da **rede dual** for menor que o número de coordenadas da rede original.

Se o modelo estatístico original incluir não apenas as interações entre os vizinhos mais próximos, mas também as interações de muitos sítios dentro de cada célula unitária constitucional, por exemplo, a interação de quatro pontos dentro de cada plaqueta em uma rede quadrada, um modelo de rede tensorial ainda pode ser definido na rede dual sem aumentar a dimensão da ligação do tensor. Esta é outra vantagem para representar a função de partição no espaço dual [1].

- **Representação na rede original:** A segunda abordagem é definir o tensor na **rede original**, através de decomposições em valores singulares de certas matrizes que representam as interações locais entre pares de sítios. Esta abordagem também pode ser implementada em todos os tipos de redes. A ordem do tensor é igual ao número de coordenadas da rede se houver apenas interações entre sítios vizinhos [23].

Como um exemplo, vamos considerar o modelo de Ising em uma rede quadrada sem campo magnético externo

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.19)$$

onde J é a constante de acoplamento e $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots\}$ indica uma dada configuração do sistema.

A função de partição deste sistema é

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)} = \sum_{\sigma} \exp\{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j\} = \sum_{\sigma} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j}. \quad (2.20)$$

A função de partição (2.20) pode ser reescrita da seguinte forma

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{\square ijkl} \exp[\beta J(\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_i)/2]. \quad (2.21)$$

Na equação (2.21), o produto é efetuado sobre todos os quadrados elementares (plaquetas) da rede quadrada e os índices estão definidos na figura 2.7. O fator $1/2$ é introduzido no expoente acima porque cada ligação é compartilhada por dois quadrados.

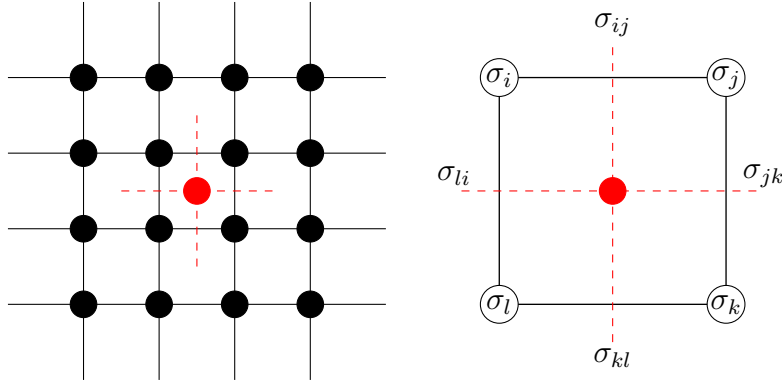
A cada ligação da rede quadrada, associamos uma variável dual, correspondente a um par de spins interagentes, definida por

$$\sigma_{ij} = \sigma_i \sigma_j \quad (2.22)$$

Essa nova variável também assume apenas dois valores $\sigma_{ij} = 1$ ou -1 , correspondendo a um estado de spins paralelos ou antiparalelos. A função de partição pode então ser expressa como

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_{ij} - \sigma_i \sigma_j) \prod_{\square ijkl} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}. \quad (2.23)$$

Figura 2.7: Porção de uma rede quadrada e uma plaqueta em destaque. À direita explicitamos os rótulos dos quatro sítios que compõem a plaqueta. Em vermelho, o sítio da rede dual e suas ligações, juntamente com as variáveis duais associadas às ligações (linhas tracejadas). Figura retirada da referência [1].



Em cada plaqueta, é simples mostrar que

$$\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li} = \sigma_i\sigma_j\sigma_j\sigma_k\sigma_k\sigma_l\sigma_l\sigma_i = 1. \quad (2.24)$$

Este vínculo é satisfeito para cada plaqueta, independente das variáveis de spin originais. Assim, as funções delta podem ser ignoradas desde que um termo $(1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li})/2$ seja incluído para cada plaqueta. Pois o fator é nulo sempre que o vínculo (2.24) for violado. Desta forma, a função de partição torna-se

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{\square ijkl} \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}. \quad (2.25)$$

Neste ponto, associamos a cada sítio da rede dual (uma plaqueta da rede original) um tensor T , cujos elementos são dados por

$$T_{\sigma_{ij}, \sigma_{jk}, \sigma_{kl}, \sigma_{li}} = \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}. \quad (2.26)$$

Somar sobre as configurações σ corresponde a varrer todos os valores possíveis dos índices do tensor T . Assim, denotando por i um sítio da rede dual e renomeando as os índices de T , podemos escrever

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i x'_i y'_i}, \quad (2.27)$$

onde o traço agora é tomado sobre os índices (pernas) do tensor associado aos sítios da rede dual. A equação 2.27 é a representação da função de partição por uma rede de tensores. A contração da rede fornece a função de partição do sistema.

2.2.4 Grupo de renormalização de tensores

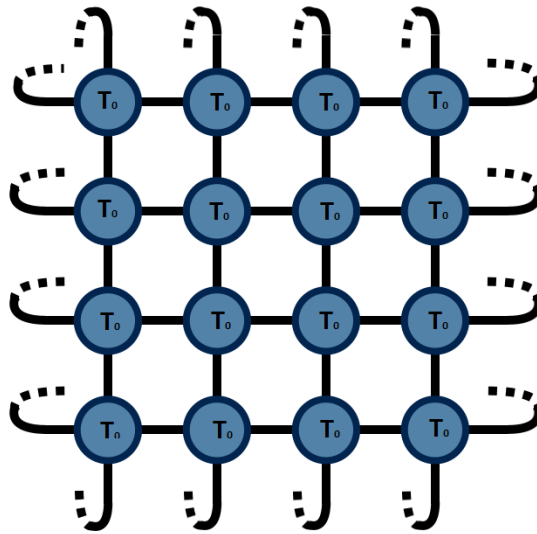
Como já discutimos, um dos métodos mais utilizado como ferramenta teórica no estudo de sistemas físicos fortemente interagentes é o Grupo de renormalização de tensores (TRG) [3]. No cálculo da função de partição de um sistema físico, representamos a função de partição por uma rede de tensores, ver figura 2.8. Nesta representação cada sítio da rede representa um tensor que codifica os estados associados aos graus de liberdade do sistema original. Para o modelo de Ising na rede quadrada, os elementos dos tensores são dados pela equação (2.26). Nessa representação, calcular a função de partição corresponde a contrair a rede de tensores. A contração direta da rede é praticamente inviável. Por exemplo, suponha que a rede seja dividida em blocos de quatro sítios de maneira que um dado sítio pertença a um único bloco. Uma forma iterativa de contrair a rede consiste em somar sobre os índices internos de cada bloco de quatro tensores. O resultado seria uma rede quadrada formada pelo tensor resultante da contração, porém com um número menor de sítios. O processo pode ser repetido até restar um único tensor. Finalmente, as pernas deste tensor seriam contraídas para resultar no valor da função de partição. O problema com este procedimento reside no fato que o número de estados de cada perna do tensor resultante cresce exponencialmente com o número de iterações, tornando o processo numericamente impossível.

Uma alternativa para a contração de rede de tensores é usar o algoritmo TRG, cujo procedimento é semelhante ao processo descrito acima, porém intercalado com uma aproximação na qual apenas um número fixo de estados é mantido a cada etapa do processo. A seguir, vamos detalhar o algoritmo TRG na contração de uma rede de tensores.

Para contrair uma rede de tensores, decompomos os tensores da rede original e em seguida contraímos os índices (ou pernas) internos dos tensores gerados pela decomposição da rede original. Fazer este processo de decomposição dos tensores é importante, pois nesta representação da função de partição por redes de tensores, calcular a função de partição de um

determinado sistema consiste em contrair a rede de tensores. Este processo de contração da rede, se realizado de forma correta, garante bons resultados no cálculo da função de partição.

Figura 2.8: Representação diagramática da função de partição do modelo de Ising na rede quadrada. O tensor original (inicial) é designado T_0 e por conveniência, omitimos os índices associados às pernas. Impomos condições de contorno periódicas, indicada pelas linhas curvas nas extremidades da rede.



Na figura 2.8, representamos uma rede tensorial composta por N tensores T_0 . Onde N está associado ao número de tensores que compõe a rede. Assim, para melhor compreensão do método TRG, vamos tomar como exemplo a rede tensorial da figura (2.8), que vamos nos referir como sendo a rede tensorial original. Com a função de partição representada por uma rede tensorial, devemos fatorar cada tensor T_0 da rede original nas duas diagonais. A fatoração de cada tensor T_0 resulta em quatro novos tensores, que vamos chamar de F_1 , F_2 , F_3 e F_4 . Porém, cada novo tensor tem agora três pernas, como está representado na figura 2.9. Esta fatoração do tensor T_0 pode ser feita de várias maneiras, uma maneira é usar a *decomposição em valores singulares* [4, pp. 471], abreviado como SVD.

Na figura 2.10, está representado como é feita a decomposição do tensor T_0 em uma diagonal, resultando nos tensores F_1 e F_3 . Observe T_0 como um produto de matrizes. Uma matriz linha U com um índice coletivo σ_l e σ_t , uma matriz coluna V com um índice coletivo σ_b e σ_r e uma matriz diagonal. Fatorando ainda mais à matriz diagonal S , como $S = \sqrt{S}\sqrt{S}$, onde cada fator \sqrt{S} é absorvido em U e V para criar os tensores F_1 e F_3 , figura (2.10).

Figura 2.9: Na parte esquerda temos o tensor inicial T_0 que deve ser fatorado nas duas diagonais, resultando em quatro novos tensores F_1 , F_2 , F_3 e F_4 . Os σ corresponde ao número de estados associados as pernas do tensor.

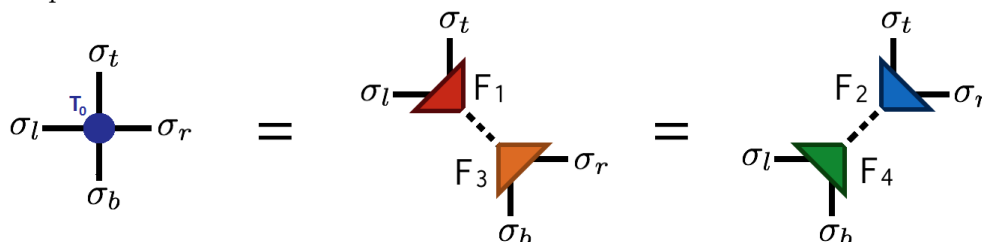
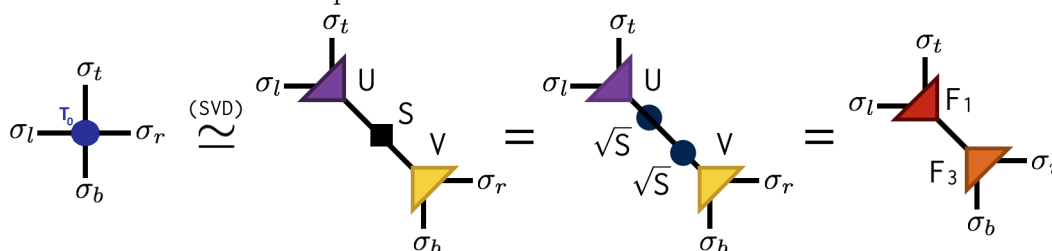


Figura 2.10: Fatoração do tensor T_0 em uma diagonal para criar os novos tensores F_1 e F_3 . Primeiro rescrevemos o tensor original como uma produto de matrizes, então a matriz diagonal é fatorada resultando na matriz identidade que é absorvida em U e V .

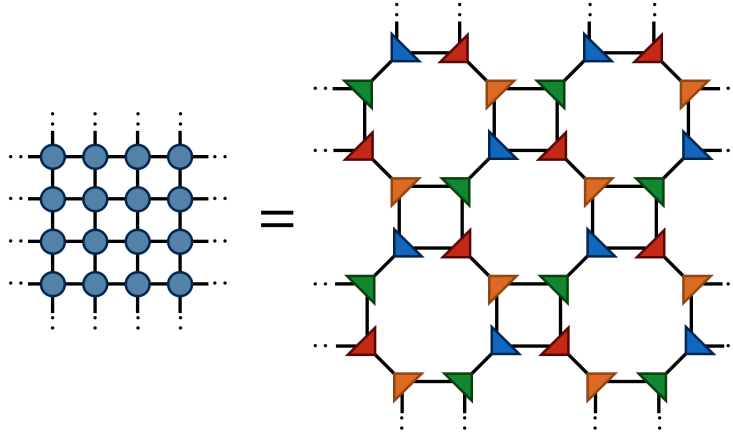


Na decomposição a SVD é feita apenas aproximadamente, decompondo a matriz num produto dos fatores de outras três matrizes: $A = USV$, onde U e V são matrizes ortogonais ($MM^T = I$) e S é diagonal. No processo, mantemos apenas os maiores valores singulares e descartamos as colunas de U e V correspondente aos valores singulares menores. Esse truncamento é importante para manter o custo computacional do algoritmo TRG sob controle.

Então, decomparamos todos os N tensores T_0 que compõem a rede tensorial original. Feita a decomposição de T_0 nas duas diagonais e recombinando os novos tensores, vamos obter a estrutura mostrada na figura (2.11). Observe que cada tensor T_0 gerou quatro novos tensores F_1 , F_2 , F_3 e F_4 , que serão contraídos, figura (2.11).

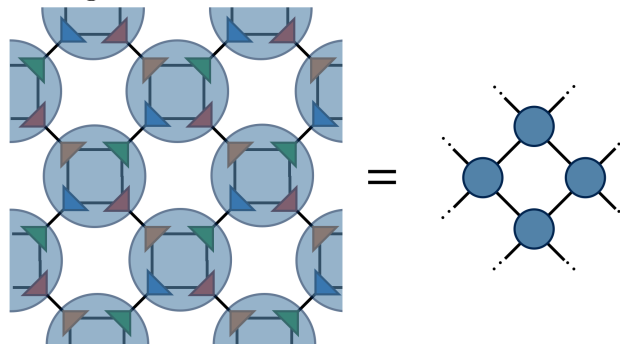
Contraíndo grupo de quatro tensores F da rede tensorial, vamos obter uma nova rede de tensores T_1 , que tem quatro índices, assim como T_0 . A contração de tensores T_1 em um padrão de rede quadrada fornecem o mesmo resultado (até erros de truncamento SVD) de quando contraímos os tensores originais T_0 , a vantagem é que agora existe apenas metade dos tensores T_0 (cada T_0 consiste em dois F 's enquanto cada T_1 consiste em quatro F 's).

Figura 2.11: Na parte esquerda temos representada a rede original com tensores T_0 que são fatorados para formar uma nova rede. Figura retirada da internet.



Apesar de seu sucesso como ferramenta numérica o algoritmo *TRG* não implementa uma transformação de grupo de renormalização adequada na rede. Afinal, o problema com o *TRG* é que um subconjunto das correlações locais da rede não são removidas na transformação de grupo de renormalização, permanecendo na rede após o processo de renormalização e danificando o resultado.

Figura 2.12: Contraíndo tensores da rede original. vamos obter uma nova rede, mas com a mesma geometria da rede original. Na nova rede o número de tensores foi reduzido em $N/4$, onde N é o número de tensores da rede original. A nova rede esta rotacionada 45° em relação a rede original.



Os problemas do *TRG* foram abordadas pela primeira vez com a introdução do algoritmo *Tensor Network Renormalization (TNR)* [24]. O algoritmo *TNR* é uma transformação de GR adequada que fornece resultados mais precisos que o *TRG* na mesma dimensão de ligação, embora com um custo computacional mais alto. O *TNR* foi estudado em outros contextos, como holografia, defeitos topológicos e teorias de campo [25, 26]. Outros algoritmos também

são proposto para solucionar as deficiências do *TRG*, como *Loop-TNR* [27] e *TNR+* [28]. Todos eles resolvem os problemas do *TRG* à sua maneira, removendo todos os detalhes que influenciam no resultado final dos parâmetros críticos.

No entanto, tanto o *TNR* quanto o *Loop-TNR* têm suas deficiências. Mais importante, generalizá-los para outros tipos de rede, em particular redes tridimensionais (*3D*) não é fácil. *TNR* é especificamente projetado para a estrutura quadrada, embora a filosofia é claro, aplicá-lo em outros contexto exigiria redesenhar significativamente o algoritmo. *Loop-TNR* é um pouco mais fácil de se adaptar a outras estruturas em *2D*, mas também uma generalização para *3D* está longe de ser trivial. Apesar de vários esquemas que generalizam esses algoritmos para *3D* podem ser construídos, eles parecem ser caracteristicamente atormentados por custos computacionais imensamente altos. Além disso, ambos *Loop-TNR* e *Loop-TNR+* são significativamente mais complicados de implementar do que o *TRG*, pois substituem um método simples *SVD* truncado com otimizações iterativas que dependem de um palpite inicial e pode ter problemas com convergência e mínimos da função de custo [5].

2.3 Gilt: Graph independent local truncation

Considere uma rede tensorial quadrada em que cada plaqueta é composta por quatro tensores, figura (2.13). Seleccionamos uma plaqueta qualquer e a removemos da rede, figura (2.14). Seja R uma perna dessa plaqueta que queremos truncar. Vamos permitir que R seja qualquer perna da rede. Embora podemos trabalhar com uma rede tensorial arbitrária, nesse caso vamos nos concentrar no tratamento de uma rede quadrada.

Para truncar a perna R figura (2.14), o primeiro passo é considerar R como sendo uma matriz identidade que pode ser representada por uma linha, figura (2.15). No passo (i), R é representado como um objeto que pode ser contraído (ii) de modo que vamos obter a matriz unitária U e sua transformada U^\dagger , como representado na figura (2.15). Quando contraímos as pernas superiores no passo (iii) da figura (2.15), vamos obter um objeto com uma única perna que é um vetor (t) e um objeto com duas pernas, uma matriz U^\dagger . Então, podemos substituir R na plaqueta original de tal maneira que a interferência deste objeto na plaqueta seja mínima.

Figura 2.13: Rede quadrada de tensores, onde foi dividida em plaquetas de quatro tensores, os índices internos dos tensores serão contraídos para formar uma nova rede porém com a mesma geometria da rede original.

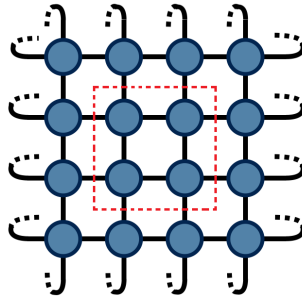


Figura 2.14: Escolhemos uma plaqueta qualquer da rede quadrada de tensores. Fatorando os tensores na diagonal a plaqueta é retirada da rede. Selecionamos a perna R , que iremos truncar.

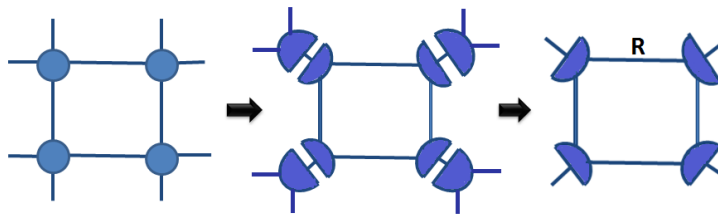
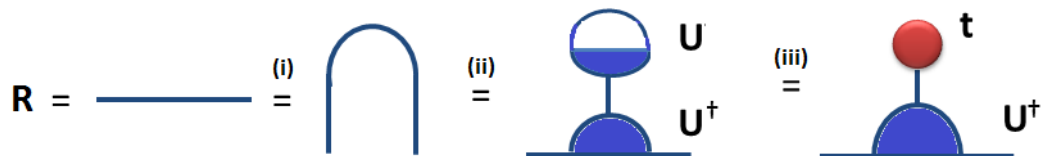


Figura 2.15: Podemos interpretar R como a perna que queremos truncar na plaqueta. Representamos a perna da rede como uma linha que será contraída no passo (i). No passo (ii) observamos um produto de matrizes, sendo U uma matriz unitária e U^\dagger sua transposta. No ultimo passo (iii) obtemos o vetor t , que tem componentes i .



onde t é o vetor, com componentes

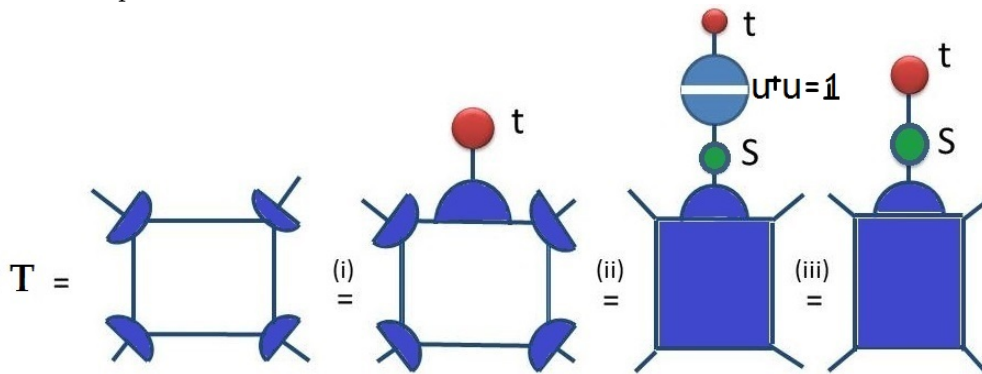
$$t_i = Tr U_i \tag{2.28}$$

aqui introduzimos o simbolo i para o vetor t que tem seu i -ésima componente 1 e todos os outros 0.

Poderíamos fazer essa mudança de base em qualquer base unitária, já que $UU^\dagger = 1$, mas escolhemos a base dos vetores singulares que nos permite ver imediatamente como podemos modificar R sem causar um grande erro. Para isso, observe figura (2.16).

Na figura (2.16), T é a plaqueta retirada da rede tensorial original. Substituindo R na perna que queremos truncar como podemos observar no passo (i) figura (2.16). No passo (ii), decompos o tensor t usando uma SVD . No ultimo passo, as matrizes U e U^\dagger são canceladas e os elementos da matriz diagonal S está multiplicando diretamente os elementos de t . Com esse procedimento podemos substituir a perna original R , que era apenas a matriz identidade, por um objeto que ira modificar o ambiente o seu entorno.

Figura 2.16: Com a plaqueta selecionada da rede de tensores, o primeiro passo é substituir R na perna que queremos truncar. No passo (ii) decompos o tensor por meio de uma SVD . No passo (iii), um par de U e U^\dagger foram cancelados e vemos que o ambiente do espectro S , que é uma matriz diagonal, está multiplicando diretamente os elementos de t .



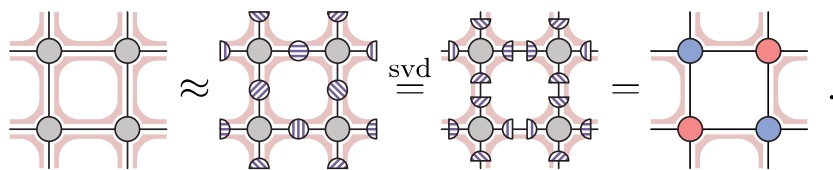
Aqui apresentamos uma solução na forma de um algoritmo para executar a contração de redes tensores, tal algoritmo, é chamado de *graph-independent local truncations* ou *Gilt*. O procedimento usa o espectro do ambiente para truncar a dimensão da ligação de uma única perna em uma rede e nesse processo pode remover correlações locais em uma vizinhança dessa perna. Pode ser igualmente aplicado com facilidade a qualquer perna da rede, modificando apenas os tensores próximos à perna que está sendo truncada, deixando a geometria da rede intacta.

2.4 Gilt-TNR

O algoritmo Gilt descrito na seção anterior pode ser usado de diversas maneiras e em diferentes partes de redes tensorial. Neste trabalho, nos concentramos na aplicação do método em redes quadradas, embora possa ser generalizável para outros tipos de rede. Nosso objetivo, é corrigir o problema que o TRG tinha com acumulações de curto alcance.

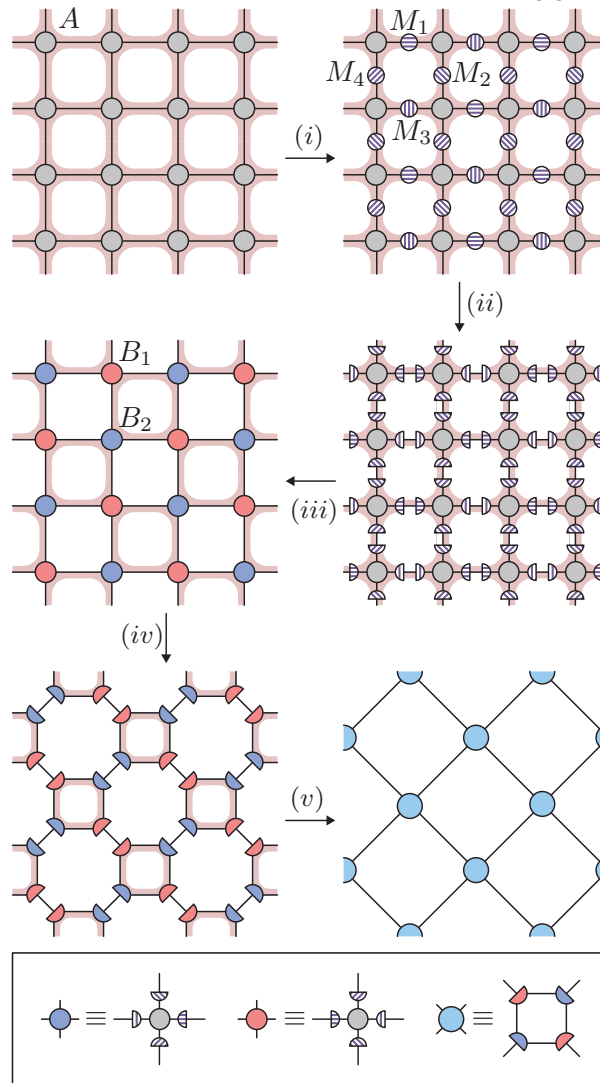
Lembre-se, que o problema com o TRG era que ele lidava adequadamente apenas com correlações locais ao redor de cada plaqueta. Isso pode ser facilmente corrigido precedendo cada etapa do TRG com uma etapa em que o Gilt é aplicado às plaquetas problemáticas. Para isso, matrizes podem ser criadas em todas as pernas ao redor de uma plaqueta da rede, usando estas matrizes para mudar a vizinhança plaqueta, como representado na figura (2.17). Observe que essas matrizes precisam ser criadas e aplicadas em série, não em paralelo, pois cada uma modifica o ambiente para as outras plaquetas. Elas removem todos os detalhes internos à plaqueta, modificando os tensores nos cantos da plaqueta. Na figura, as sobras vermelhas ilustram como ocorre a remoção dos detalhes que prejudicam a observação dos parâmetros críticos.

Figura 2.17: Na primeira figura, temos os tensores da rede original que ainda encontra-se contaminados. Então, matrizes são inserida entre os tensores. Fatorando estas matrizes através de uma SVD, e as peças são absorvidas nos tensores vizinhos, que resulta em uma nova rede que contém dois tipos de tensores. Figura adaptada da referência [4].



Fazendo pequenas modificações na rede tensorial o *Gilt* fornece uma maneira de corrigir adequadamente as deficiências que o TRG tinha com correlações de curto alcance. Chamamos essa combinação de *Gilt* e *TRG* de *Gilt-TNR* [5]. Com uma etapa em que o *Gilt* é aplicado, os detalhes que restavam da aplicação do *TRG* são totalmente eliminadas com

Figura 2.18: Uma iteração do processo *Gilt-TNR*. Em (i), quatro matrizes M'_1, \dots, M'_4 são inseridas entre os tensores vizinhos. Estas matrizes são fatoradas no passo (ii) e as peças são absorvidas nos tensores vizinhos no passo (iii). Isso resulta em uma rede quadriculada com dois tipos de tensores B_1 e B_2 , que então passam por uma iteração TRG regular, etapas (iv) e (v). O sombreamento vermelho representa resíduos das correlações de curto alcance. Porém, no final do processo, todas essas correlações foram eliminadas. Figura adaptada da referência [4].



uma transformação de RG adequada, rápida, simples e generalizável para redes tensorial. Uma iteração completa é mostrada na figura (2.18), como remover adequadamente todos os detalhes das correlações de curto alcance e tal eficiência do método é comprovado pelos resultados obtidos e que serão apresentados no capítulo 3. O *Gilt-TNR* é realmente uma transformação de grupo de renormalização adequada, com a estrutura correta de pontos fixos

universais.

De acordo com a referência [5], ao corrigir o problema que o *TRG* tinha com correlações de curto alcance, o algoritmo *Gilt-TNR*, nos permite resolver o mesmo problema que o *TNR*, *Loop-TNR* e *TNR +* resolveram, só que de uma outra maneira. Assim, o *Gilt-TNR* produz resultados que se compara aos melhores resultados alcançado com outros algoritmos. Além disso, a ordem do custo computacional do algoritmo *Gilt-TNR* é a mesma dos algoritmos *TNR* e *Loop-TNR*.

Existe vantagens usar o algoritmo *Gilt-TNR* em relação aos outros algoritmos citados anteriormente, como sua simplicidade e generalização a diferentes tipos de redes tensorial. Uma implementação do algoritmo *Gilt-TNR* requer apenas a adição de um passo simples e crucial ao *TRG*, é uma implementação de trabalho mínimo que requer apenas centenas de linhas de código. Diferente de qualquer outro algoritmo de grupo de renormalização da rede tensorial o *Gilt-TNR* não requer um procedimento de otimização iterativo, o que exigiria um palpite inicial e pode sofrer variações na velocidade de convergência ou ficar preso em locais mínimos. Além disso, a aplicação do *Gilt-TNR* a outros tipos de redes, que não seja a rede quadrada é simplesmente uma questão de mudar a vizinhança T que é usada na etapa em que o *Gilt* é aplicado (em uma rede hexagonal, por exemplo, T consistiria naturalmente em um único hexágono) e escolher uma maneira de colocar tensores juntos e passar para a próxima escala de comprimento [5].

Além, desta maneira que estamos utilizando existem muitas outras possibilidades de combinar o *Gilt* com o *TRG* ou com outros algoritmos de contração de redes tensorial. Algumas possibilidades incluem a aplicação do método para todas as plaquetas, em vez de apenas metades delas ou considerando regiões maiores, por exemplo, considerar a vizinhança de duas plaquetas no procedimento *Gilt*. Esse método de otimização para matrizes M' que implementamos também pode ser combinado com o algoritmo *TNS* [27]. Então, escolhemos a implementação do método *Gilt-TNR* por ser simples de implementar, mais ágil que algumas outras opções de algoritmos conhecidos e por produzir resultados precisos.

Capítulo 3

Resultados e Discussões

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising em uma rede quadrada, com interações antiferromagnéticas tanto entre primeiros vizinhos quanto entre segundos vizinhos. O hamiltoniano do sistema é descrito por

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (3.1)$$

onde as constantes $J_1 < 0$ e $J_2 < 0$, correspondem à energia de interação entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. A primeira soma corre apenas sobre os pares de primeiros vizinhos e a segunda sobre os pares de segundo vizinhos. À cada sítio da rede associamos um spin ou variável de Ising, que assume valores ± 1 . Observe que o hamiltoniano deste sistema é frustrado na rede quadrada. Na referência [15], o diagrama de fases no plano temperatura *versus* parâmetro de frustração $R = J_2/|J_1|$ deste sistema foi obtido através de uma teoria de campo médio. Os autores afirmam que as transições de fase entre os estados antiferromagnético e paramagnético para ($R > -0.5$), próximos a ($R = -0.5$) são de primeira ordem e se transformam em segunda ordem para $R > R_{tcp}$, com (T_{tcp}, R_{tcp}) , sendo as coordenadas do ponto tricrítico. Aqui, implementamos um novo método denominado *Gilt-TNR* [5], para solucionar os problemas que o grupo de renormalização tensorial (TRG) tinha em eliminar completamente as correlações de curto alcance. Tais correlações, não permite uma identificação correta dos expoentes críticos do sistema. O *Gilt-TNR*, demonstrou ser um algoritmo muito eficaz em lidar com as correlações de curto alcance, permitindo a obtenção

dos expoentes críticos do sistema.

Em uma representação da função de partição do sistema (3.1) em forma de uma rede de tensores translacionalmente invariante, temos

$$Z = \text{Tr} \prod_{i=1}^N T_{x_i y_i x'_i y'_i}, \quad (3.2)$$

com o tensor T dado por

$$T_{x_i y_i x'_i y'_i} = e^{\beta |J_1| [\sigma_i \sigma_l + \sigma_j \sigma_k + \sigma_i \sigma_j + \sigma_l \sigma_k + R(\sigma_i \sigma_k + \sigma_j \sigma_l)]/2} \quad (3.3)$$

cujos índices tem dimensão igual a 2. N é o número de sítios (número de graus de liberdade do sistema) da rede. Por conveniência, impomos que $T_{1111} = 1$, de forma que a função de partição para uma rede quadrada, torna-se

$$Z = s_0^N \text{Tr} \prod_{i=1}^N T_{x_i y_i x'_i y'_i}, \quad (3.4)$$

com o fator $s_0 = T_{1111}$ antes da normalização.

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. Uma etapa do processo de renormalização consiste em substituir os tensores originais da rede por novos tensores resultantes da contração dos índices internos destes tensores. Essa contração, define uma expressão exata entre a função de partição de N tensores que a cada renormalização a rede se reduz para $N/4$ o número de tensores. A soma sobre todos os estados resulta em um tensor de quarta ordem, $T'_{X_i X'_i Y_i Y'_i}$, onde cada índice assume, quatro valores [29]. O tensor T' define uma expressão exata para a função de partição

$$Z = s_0^N \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/4} T'_{X_i X'_i Y_i Y'_i}. \quad (3.5)$$

O fator s_0 aparece devido à normalização. Observe, ainda, que o produtório contém apenas $N/4$ termos. Porém, como os índices originais assumem dois valores, isso implica que os novos índices assumem cada um deles quatro valores. Dessa forma, o número de elementos de T' iguala $4^4 = 256$ elementos. A cada transformação o número de sítios é reduzido de $1/4$. Enquanto que o número de estados cresce 2^{2n} , onde n é o número de iterações.

A cada iteração do processo de renormalização, os elementos de tensor são normalizados. Ou seja, fazemos $s_1 = T'_{1111}$ e, em seguida, $T'_{1111} \rightarrow 1$ após a normalização do tensor, de forma que após a primeira iteração, a função de partição do sistema torna-se

$$Z = s_0^N s_1^{N/4} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/4} T'_{X_i X'_i Y_i Y'_i}. \quad (3.6)$$

Durante o procedimento anterior, note que o número de estados cresce com 2^{4n} , 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 pelo truncamento do número de estados do tensor associado ao bloco. Assumindo que seja possível truncar o número de estados após cada transformação de bloco, na segunda iteração temos

$$Z = s_0^N s_1^{N/4} s_2^{N/16} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/16} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(2)}. \quad (3.7)$$

Na iteração de ordem n , podemos escrever

$$Z = s_0^N s_1^{N/4} s_2^{N/16} \dots s_n^{N/2^{2n}} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/2^{2n}} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(n)}. \quad (3.8)$$

A única aproximação contida na equação (3.9) 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 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 (3.8), temos

$$f = -\frac{1}{N} \left[N \log s_0 + \frac{N}{4} \log s_1 + \dots + \frac{N}{2^{2n}} \log s_n + \log \left(\text{Tr} \prod_{i=1}^{N/2^{2n}} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(n)} \right) \right]. \quad (3.9)$$

A equação (3.9) pode ser reescrita como

$$f = -\log s_0 - \frac{1}{4} \log s_1 - \dots - \frac{1}{2^{2n}} \log s_n - \frac{1}{N} \log(Z^n). \quad (3.10)$$

onde

$$Z^{(n)} = \text{Tr} \prod_i^{N/2^{2n}} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(n)} \quad (3.11)$$

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

Durante o processo de renormalização se faz necessário truncar o número de estados do tensor obtido pela transformação de bloco. O número de estados mantidos a cada etapa do processo é D_c^4 , onde D_c é a dimensão do índice renormalizados. Os resultados obtidos para as funções termodinâmicas dependem de D_c .

No fluxo de renormalização os tensores, dependendo do ponto de partida no sistema, podem convergir para uma fase ordenada ou para uma fase desordenada. Pois, existe apenas quatro valores distintos de elementos não nulos do tensor renormalizado. O primeiro tem valor unitário por construção. Os demais, dependem da temperatura e da ordem da iteração da transformação de grupo de renormalização. Assim, observamos o comportamento do fator de escala em função do número de iterações, n . Dependendo de onde nos localizamos no sistema e qual a precisão de nosso algoritmo, à medida que iteramos a transformação de GR, o sistema pode convergir para valores acima ou abaixo do ponto crítico, os chamados, pontos fixos *instáveis* da transformação de GR. Uma outra possibilidade é o sistema convergir para

um ponto fixo *estáveis*, que esta associado ao ponto crítico. Quando o sistema convergi para um ponto fixo estável, dizemos que o ponto crítico do sistema foi atingido.

Depois de um certo número de iterações no processo de renormalização o tensor converge e se torna independente de n . Qualquer singularidade na energia livre deve se refletir no fator de escala $S_\infty(T)$, o valor de $S_n(T)$ na temperatura T após o tensor atingir o ponto fixo, que denominamos fator de escala [30]. O comportamento do fator de escala pode ser observado analisando valores do inverso da temperatura β na vizinhança do ponto fixo instável. O fator de escala assume apenas três valores no limite $n \rightarrow \infty$. Estes valores ou pontos fixos, da transformação correspondem às fases de baixas temperatura (ordenada) e altas temperaturas (desordenada). No ponto crítico $\beta = \beta_c$, o fator de escala $s_\infty(T)$ é descontínuo e não diferenciável.

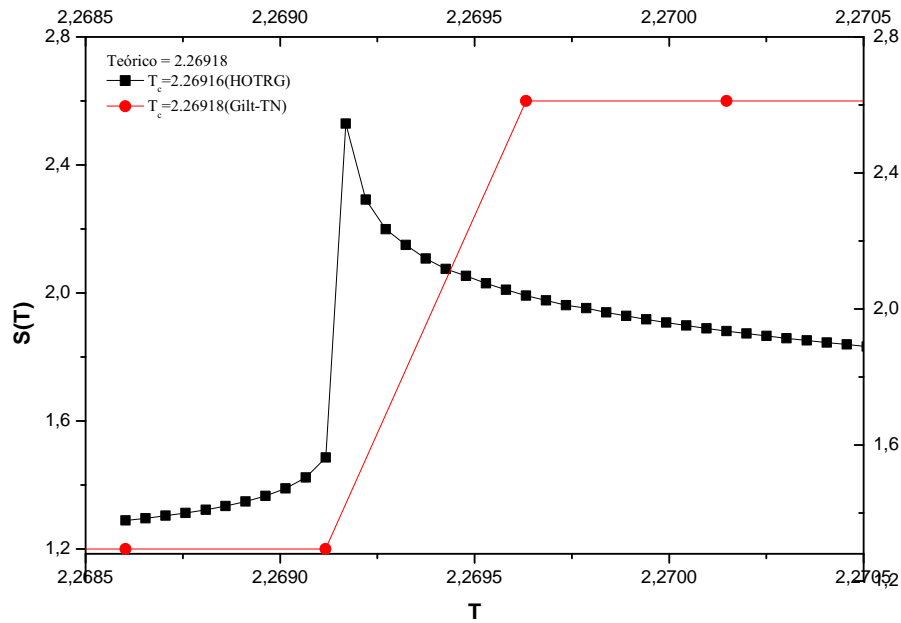
Portanto, vale salientar que o fator de escala na análise de sistemas físicos é uma importante grandeza que nos fornece informações sobre a física do sistema, ele indica a temperatura que ocorre uma transição de fase. Com base na análise de como se comporta o fator de escala é possível determinar, por exemplo, a temperatura crítica do sistema.

Calculamos o fator de escala s_c , em função do número de iterações n que o sistema realiza, antes de convergir para um ponto fixo. O número de iterações necessárias para o sistema convergir está associado a distância das fronteiras de fase. Tendo em vista que quanto mais próximo do ponto da transição de fase estiver, maior o número de iterações necessário para que o sistema assuma o ponto fixo estável do sistema.

Na Figura (3.1), observamos o comportamento do fator de escala (s_c) em função da temperatura (T), para o modelo de Ising. Utilizando dois métodos distintos, localizamos o ponto em que ocorre a transição de fase do sistema que é sinalizado por um salto no gráfico. Na cor preta temos o resultado obtido com o *TRG*, método esse que já é conhecido por não eliminar totalmente as correlações de curto alcance. Para temperaturas abaixo da crítica observamos que o fator de escala assume vários pontos fixos instáveis, quando na verdade esperávamos que o sistema convergisse para um único ponto fixo, localizado abaixo do valor da temperatura crítica.

Na cor vermelha observamos o resultado obtido com o novo método que implementamos, chamado *Gilt-TNR*. Este método, elimina totalmente as correlações de curto alcance. Neste

Figura 3.1: Fator de escala (s_c) em função da temperatura (T) onde observamos a convergência para o modelo de Ising na rede quadrada (caso $R = 0$). Na cor preta observamos o comportamento com o *TRG* que não elimina totalmente as correlações de curto alcance, que foram eliminadas com a aplicação do *Gilt-TNR*.



caso, também observamos o salto no gráfico, indicando o ponto da transição de fase, mas diferentemente do que foi observado com o *TRG*, com o *Gilt-TNR* para temperaturas tanto abaixo como acima da temperatura crítica o fator de escala assume um único ponto fixo estável, apresentando assim um comportamento degrau, que já era esperado por só existir os três pontos no sistema.

Comparando como se comporta os dois métodos para um caso que já é conhecido na literatura [31], observamos que para temperaturas tanto acima quanto abaixo da crítica, o fator de escala assume vários pontos fixos, não sendo possível de distinguir qual o valor correto. Isso nos mostra a ineficiência do método *TRG* quando comparado ao *Gilt-TNR*. O *TRG*, não nos fornece precisão suficiente nos resultados para que seja possível de distinguir quais os ponto fixo *instável* correto no sistema.

Porém, ambos os métodos aplicado ao modelo de Ising, conseguiram localizar o ponto em que ocorre a transição de fase que é caracterizado por uma singularidade quando T igual

a 2,26919. Valor este muito próximo do resultado exato [31],

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,26918531421. \quad (3.12)$$

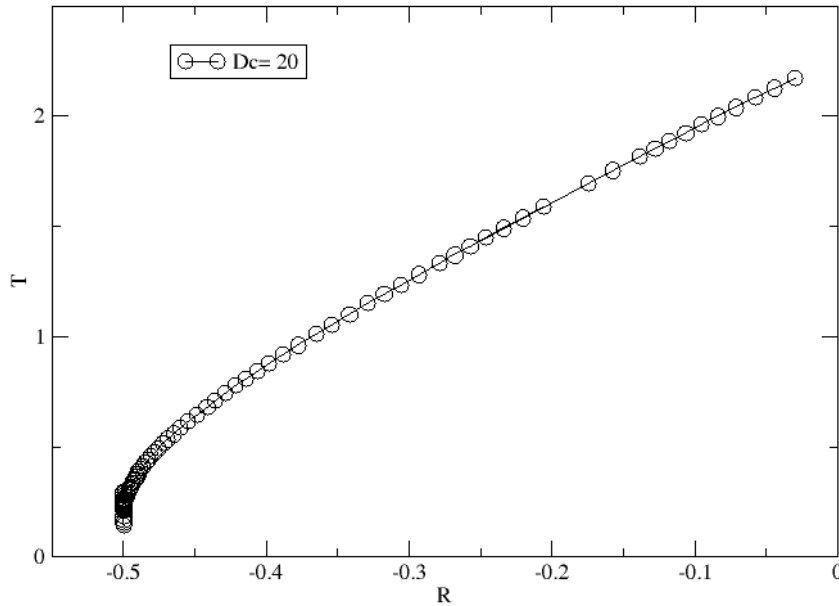
Nosso principal objetivo nessa primeira parte do trabalho foi verificar a eficiência dos métodos que estávamos utilizando. Com o método *TRG*, o resultado apresentou um comportamento não preciso, onde observamos que para temperaturas abaixo da crítica, o fator de escala converge para diferentes pontos fixos. Já com a implementação do *Gilt-TNR*, o gráfico localizou exatamente o ponto para o qual o sistema converge, após o processo de renormalização. Assim, a implementação do método *Gilt-TNR*, demonstrou um grau de confiança aceitável para realizarmos nossos cálculos e obter os resultados para os parâmetros críticos que estávamos interessados.

Obtivemos o diagrama de fases no plano temperatura (T) *versus* parâmetro de frustração (R), para o modelo de Ising frustrado na rede quadrada, no intervalo $-1/2 < R < 0$, figura (3.2). Para isso, mantivemos a dimensão de corte fixa, $D_C = 20$. Os resultados para $T_C(R)$ mostram uma dependência fraca com o valor da dimensão de corte. Isso se deve a escala que utilizamos na figura (3.2), caso mude o escala, talvez não seja mais possível de observar o mesmo resultado para um outro valor de dimensão de corte.

Observamos uma dependência da temperatura crítica T_c em função do parâmetro de frustração R . Pois, a medida que nos aproximamos do ponto da transição de fases ($R = -1/2$), o valor da temperatura diminui, isso em consequência do aumento da frustração no sistema, que se torna tão forte em $R = -1/2$ que faz a temperatura ir à zero no ponto da transição de fases. Podemos observar uma ótima concordância dentro da escala utilizada para a dimensão de corte que empregamos. Esse resultado serve como um teste do código numérico que utilizamos e de referência para a escolha da dimensão de corte, uma vez que o tempo de computação escala com a dimensão de corte D_c .

Para $R \in (-1/2, 0)$ a temperatura de transição, $T_c(R)$, em função do parâmetro de frustração R , deve decrescer a partir de zero até o valor 2,26918, que corresponde ao valor da temperatura crítica. Na localização da transição de fases para um determinado R , contido nessa região é necessário estimar o ponto crítico com boa precisão, pois a estimativa

Figura 3.2: Diagrama de fase para $R > -1/2$ para o modelo de Ising frustrado no plano temperatura *versus* parâmetro de frustração. A frustração do sistema cresce a medida que R vai a -0.5 , sendo tão drástica em -0.5 que faz a temperatura ir a zero.



correta vai refletir no cálculo dos expoentes crítico. Para isso, delimitamos um intervalo que imaginamos o ponto crítico contido e vamos observando como se comporta o fator de escala, para diferentes pontos contidos nessa região escolhida. Ao longo da linha de transição, figura (3.2), escolhemos alguns valores do parâmetro de frustração (R), no objetivo de calcular os expoentes críticos ao longo dessa linha de transição.

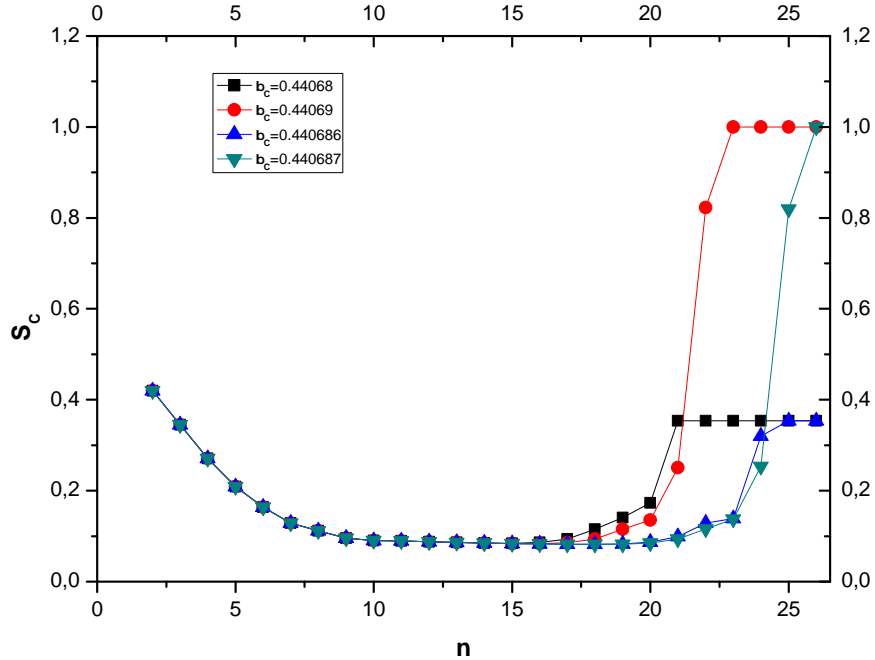
Na Tabela (4.1), demonstramos como é realizado o procedimento da localização de um ponto crítico no plano temperatura *versus* parâmetro de frustração, no qual o fator de escala apresenta um máximo ou uma descontinuidade. Esse ponto pode ser localizado através de um algoritmo que realizar um processo do tipo bissecção na localização do ponto crítico. Com isso, economizamos tempo computacional uma vez que faz muito menos avaliações da grandeza $s_c(T, R)$. O primeiro passo, consiste em marcar um intervalo inicial que vamos estreitando em torno do ponto crítico, o limite do quanto podemos chegar próximo do ponto crítico é a precisão da maquina utilizada no procedimento. O β_{min} , corresponde ao valor que se encontra abaixo da temperatura crítica. O β_{max} corresponde ao valor que esta localizado acima da temperatura crítica.

Tabela 4.1: Determinamos a temperatura crítica β_c , para o parâmetro de frustração $R = 0.0$, cujo resultado já é conhecido na literatura. Observe que no procedimento vamos cercando a temperatura crítica na busca pelo resultado mais preciso.

β_{\min}	β_{\max}
0.440684	0.440786
0.440684	0.440735
0.440684	0.4407095
0.44068658984375003	0.44068678906250003
0.44068668945312506	0.44068678906250003
0.44068673925781254	0.44068678906250003
0.44068673925781254	0.4406867641601563
0.4406867517089844	0.4406867641601563
0.4406867517089844	0.44068675793457035

No diagrama de fases, localizamos o ponto em que ocorre a transição de fase para o parâmetro de frustração ($R = 0.0$). Observem figura (3.3), quanto mais próximo nos localizamos do ponto crítico, maior é o número de iterações necessárias para o fator de escala convergir. Isso, é observado com o número de casas decimais corretas que podemos obter no processo de renormalização. Com uma precisão de cinco casas decimais corretas foram necessárias 21 iterações para o fator de escala convergir. Com seis casas correta, nossa precisão em relação a localização do ponto crítico melhora, ou seja, estamos mais próximos do ponto crítico, nesse caso é necessário um número de iterações maior para que o fator de escala venha a convergir. Note que os valores abaixo do ponto crítico convergem todos para o mesmo ponto fixo instável, o mesmo é observado para valores acima do ponto crítico. Para o caso $R = 0.0$, determinamos o ponto crítico, com uma precisão de seis casas decimais corretas. Esta precisão pode ir além deste valor calculado, caso assim queiramos. Podemos determinar o ponto crítico na precisão de máquina. No nosso caso, calculamos apenas com seis casas decimais corretas, devido ao fato do custo computacional que cresce exponencialmente. Esse crescimento esta relacionado a complexidade do sistema que estávamos trabalhando.

Figura 3.3: Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = 0.0$. Note que quanto mais próximo estamos do ponto crítico maior será o número de iterações necessárias para o sistema convergir.

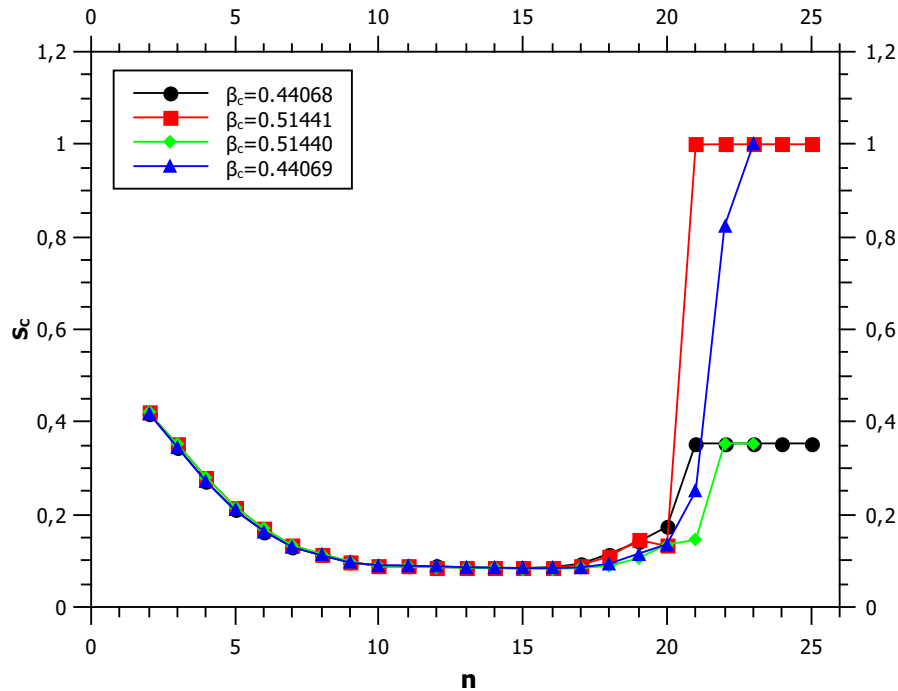


Observamos o comportamento do sistema no caso da rede quadrada frustrada. Estudamos o comportamento das funções termodinâmicas para o caso $R \neq 0$. Como sabemos que o ponto $R = J_2/|J_1| = -1/2$ separa os dois estados fundamentais, a saber, o *estado de Néel* da fase *superantiferromagnética*, vamos tratar separadamente o caso $R > -1/2$.

Na figura (3.4), observamos o fator de escala em função do número de iterações, para os parâmetro de frustração ($R = 0.0$) e ($R = -0.1$). Comparando os resultados, observamos que a convergência do fator de escala para ambos parâmetros de frustração apresentou o mesmo comportamento, ou seja, o sistema depois de convergi assume os mesmo pontos fixos estáveis, após o mesmo número de iterações. Isso, nos mostra a eficiência do método empregado, já que o valor da temperatura crítica de ($R = 0.0$) já era conhecido. A precisão de maquina utilizado nesse calculo não foi suficiente para localizarmos o ponto fixo estável, por isso, observamos no gráfico apenas os pontos fixos instáveis.

Na busca por um β_c , referente ao parâmetro de frustração $R = -0.1$, fornecemos uma dimensão de corte inicial $D_C = 20$ e fomos aumentando gradativamente, ou seja, a medida

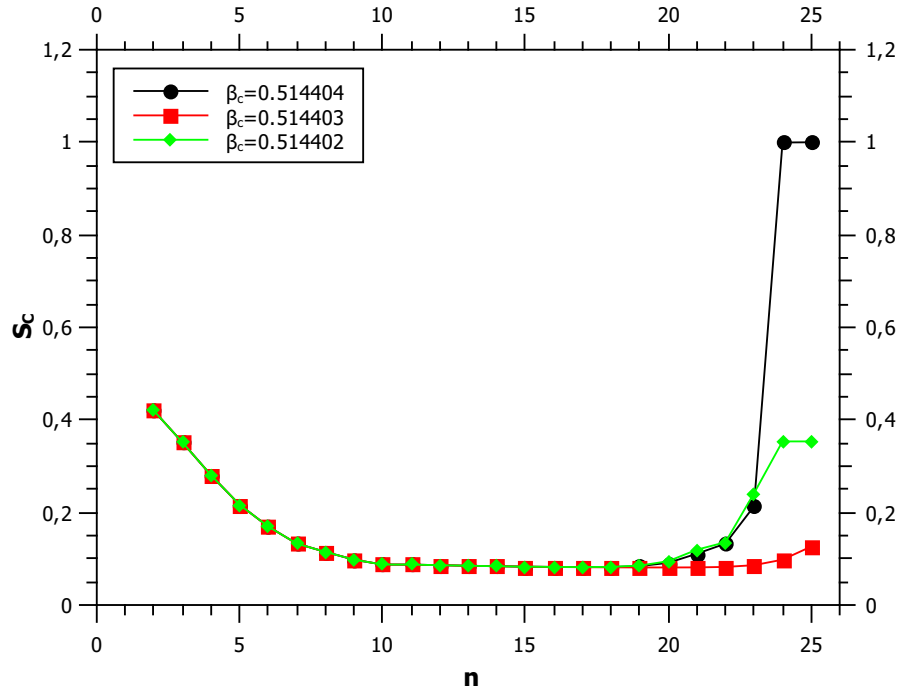
Figura 3.4: Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n) para diferentes parâmetros de frustração $R = 0.0$ e $R = -0.1$. Nós observamos que o valor de R não interfere na convergência do fator de escala.



que nos aproximamos o ponto crítico precisamos de uma dimensão de corte cada vez maior. Com isso, localizamos o ponto da transição de fases $\beta_c = 0.514403$, para este valor de R . Neste caso, o ponto crítico foi obtido com precisão de seis casas decimais corretas, figura (3.5). Assim, localizamos os três pontos fixos do sistema, que corresponde à $\beta_c = 0.514404$ e $\beta_c = 0.514402$, que são pontos fixos instáveis que se encontram localizados acima e abaixo do ponto crítico e $\beta_c = 0.514403$, que corresponde ao ponto fixo estável do sistema, que definir como sendo o valor que mais se aproxima do valor exato da transição de fase transição de fases. Observe, que um número 20 iterações, não é suficiente para distinguir os três pontos fixos, por isso, a importância de realizar um grande número de iterações no processo.

Na figura (3.6), temos o gráfico para o parâmetro de frustração $R = -0.3$, observamos que após a iteração de número 21, o fator de escala assume os três pontos fixos, os dois triviais ou instável, que são $\beta_c = 0.796796$ e $\beta_c = 0.796798$ e o ponto fixo não trivial ou estável que corresponde ao ponto da transição de fases $\beta_c = 0.796797$. Observe, que nas pri-

Figura 3.5: Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.1$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.

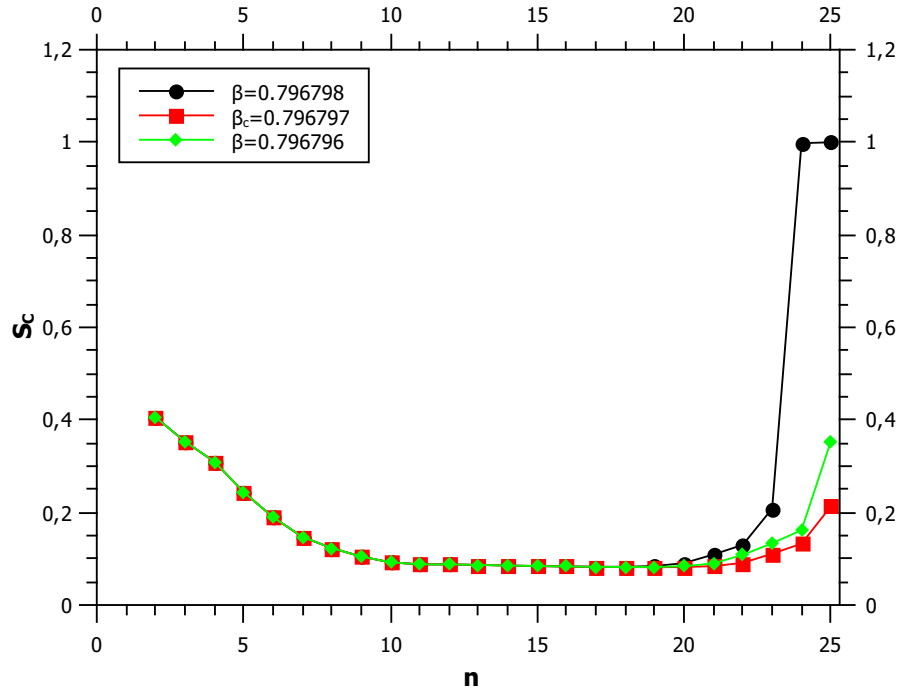


meiras iterações o sistema ainda encontra-se contaminado sendo impossível do fator de escala distinguir os pontos fixos do sistema, só após um certo número de iterações, característico para cada sistema é que é possível de observar o comportamento do fator de escala.

Calculamos o fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para ($R = -0.45$). Como já observado no diagrama de fases que a frustração do sistema cresce a medida que R vai a $-1/2$, sendo tão drástica neste ponto que faz a temperatura ir à zero. Com isso o custo computacional também cresce com o aumento da frustração. Próximo da transição de fases a frustração é tão drástica que uma dimensão de corte $D_C = 120$, já não é mais suficiente para distinguir os pontos fixos. Com isso em $R = -0.45$, foi necessário uma dimensão de corte $D_C = 160$, para localizar os pontos fixos do sistema.

Como já discutido, ao longo da linha de transição escolhemos diferentes valores de R , para os quais determinamos os expoentes críticos. Os parâmetros de frustração foram $R = 0.0, -0.1, -0.2, -0.3$ e -0.45 . Como o custo computacional crescia exponencialmente

Figura 3.6: Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.3$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.

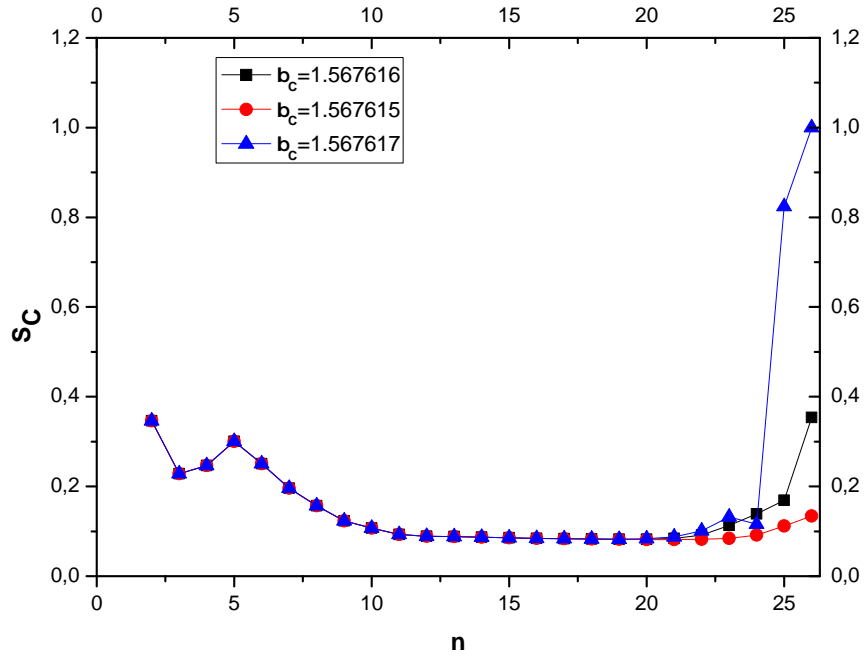


com o valor de R , não foi possível trabalhar com valores de R menor que -0.45 . Para os valores iniciais de R , com uma dimensão de corte $D_c = 120$, foi possível localizar os pontos críticos. Porém, a medida que R vai a $-1/2$, a frustração do sistema aumenta e torna-se inviável a dimensão de corte antes utilizada.

Mostramos o comportamento do fator de escala s_c , em função da temperatura para vários valores do parâmetro de frustração R . Como seria esperado, a temperatura de transição diminui à medida que $R \rightarrow -1/2$ pela direita. Desta forma, foi possível fazer gráfico da temperatura contra o parâmetro de frustração.

Na figura (3.7), mostramos como se comporta o fator de escala em função de um valor do parâmetro de frustração próximo da transição de fase. Note, que independente de onde escolhermos R no diagrama o fator de escala vai assumir o mesmo comportamento. Assumindo, sempre os três pontos fixos do sistema. Isso, nos permite uma orientação de onde esteja localizado o ponto crítico e a qual distância nos encontramos do seu valor exato.

Figura 3.7: Fator de escala (s_c) em função do número de iterações (n), para o parâmetro de frustração $R = -0.45$. Observamos que o fator de escala (s_c) assume os três pontos fixos, os dois triviais e o não trivial.



Assim, variamos o parâmetro de frustração, R , no intervalo $[-0.5, 0]$ e o programa localiza o valor de T no qual o fator de escala s_c atinge o valor máximo para aquele particular valor de R . É possível procurar a singularidade de maneira inversa. Fixando um valor para a temperatura, T , e realizar a busca do valor de R que maximiza s_c . Este último procedimento é mais apropriado quando $T_c(R)$ é próximo de zero.

Procedendo da forma descrita acima foi possível, obter o diagrama de fases no plano $T \times R$. Calculamos, alguns pontos críticos ao longo da linha de transição na ordem da precisão de máquina. Na Tabela, mostramos resultados obtidos para diferentes valores de R .

Para valores de R próximos de zero, é trivial determinar o valor correto de $1/T$, já que nessa região a frustração do sistema não é tão drástica. Porém, a medida que nos aproximamos do ponto da transição de fase, onde a frustração do sistema faz a temperatura ir a zero, a dificuldade de localizar o ponto crítico aumenta, isso reflete no resultado dos

valores dos expoentes crítico. Pois, para uma estimativa do correta da tais expoentes é necessário, que estejamos exatamente no ponto crítico. Note, que em $R = -0.45$, devido a frustração do sistema, é necessário uma dimensão de corte $D_C = 160$ na localização do ponto crítico.

Tabela 4.2: Estimativa de alguns parâmetros críticos do sistema, utilizando o algoritmo *Gilt-TNR*. Na primeira coluna, temos os parâmetros de frustração R que usamos. Na segunda coluna, a Dimensão de corte D_c empregada. Nas colunas seguintes, temos estimativas para a temperatura crítica $1/T$, expoente crítico β associado a magnetização ou parâmetro de ordem, expoente crítico ν associado ao comprimento de correlação.

R	Dc	1/T	β	ν
0.0	120	0.440687	0.125081	1.000431
-0.1	120	0.514403	0.125000	1.000342
-0.2	120	0.621890	0.125027	1.000167
-0.3	120	0.796797	0.125031	1.000017
-0.45	160	1.567616	0.125350	0.994778

Resultados contidos na Tabela (4.2), mostra que ao longo da linha crítica nosso sistema se mantém com os mesmos expoentes da classe de universalidade do Ising [31], $\beta = 1/8$ e $\nu = 1$. O fato de alguns valores não coincidir com o valor exato do Ising, se deve a flutuações numéricas do cálculo e a complexidade do sistema aqui analisado. Não descartamos a possibilidade dos expoentes críticos mudar para valores mais próximos de -0.5 . Embora, não acreditamos nessa possibilidade. A complexidade do sistema a medida que nos aproximamos de -0.5 , torna-se muito drástica. O cálculos para nossa pesquisa foi realizado utilizando duas Workstations com 12 Núcleos e Memória Máxima de 64 GB. O custo computacional no processo de renormalização cresce exponencialmente com o aumento da frustração do sistema, sendo tão drástico próximo de $R = -1/2$, que tornou-se inviável avançar além do $R = -0.45$.

Capítulo 4

Conclusões

Nesta dissertação, estudamos uma generalização do modelo de Ising totalmente frustrado em redes quadradas por grupo de renormalização da rede tensorial. No modelo investigado, levamos em consideração as interações entre primeiros e segundos vizinhos. Tanto a constante de acoplamento entre os pares de primeiros vizinhos quanto aquela entre os pares de segundos vizinhos são antiferromagnéticas, isto é, favorecem o alinhamento antiparalelo do par de spins interagentes. Nesse caso o sistema é geometricamente frustrado.

O algoritmo de contração de rede de tensores (TRG) não elimina totalmente as correlações de curto alcance (emaranhados). Introduzimos um algoritmo eficiente para reduzir as dimensões da ligação em uma rede tensorial sem alterar sua geometria. O avanço recente é *Gilt – TNR* que combinado com o TRG permite eliminar completamente as correlações de curto alcance e obter os parâmetros críticos do sistema com boa precisão.

Determinamos o diagrama de fases, no plano temperatura *versus* parâmetro de frustração. Determinamos os valores dos expoentes críticos ao longo da linha de transição para diferentes parâmetros de frustração. Em nossos resultados não encontramos evidências da existência de um ponto tricrítico ou da transição de fase de primeira ordem na região analisada, como afirma a referência [15].

Portanto, verificamos que a classe de universalidade na região $-1/2 < R < 0$ continua do tipo Ising. Porém, aqui não investigamos o outro ramo do diagrama de fases $R < -1/2$. Tal estudo é necessário e é nossa intenção continuar a investigação nessa região.

Referências Bibliográficas

- [1] Jaiver Chicangana Cifuentes. *Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado através do grupo de renormalização na representação de redes de tensores*. Master's theses, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2018.
- [2] W. D. MCCOMB. *Renormalization Methods*. [S.l.]: Clarendon Press, 2004.
- [3] Michael Levin and Cody P. Nave. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120601, Sep 2007.
- [4] David C. Lay. *Álgebra lineal y sus aplicaciones*. PEARSON Education, third edition, 2007.
- [5] M. Hauru C. Delcamp, S. Mizera. Renormalization of tensor networks using graph-independent local truncations. *Phys. Review B*, 97:045111, May 2018.
- [6] Andreas Honecker Ansgar Kalz and Marion Moliner. Analysis of the phase transition for the ising model on the frustrated square lattice. *Phys. Rev. B*, 3:1818–1846, Nov 2011.
- [7] B. D. CULLITY and C. D. GRAHAM. *Introduction to magnetic materials*. pp. 171. Second Edition, .
- [8] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Livraria da Física, second edition, 2005.
- [9] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [10] M. D. Coutinho-Filho. Effect of random defects on the critical behaviour of ising models. *Journal of Physics C*, 6:1671–1692, 1974.

- [11] M. D. Coutinho-Filho. Reflexões sobre o desenvolvimento da mecânica estatística: Um tributo a ludwig boltzmann. *Química Nova*, 17:1844–1994, 1994.
- [12] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. ACADEMIC PRESS INC., 2004.
- [13] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971; L. P. Kadanoff, W. Gotze, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes, J. Kane, *Rev. Mod. Phys.* 39, 395, 1967.
- [14] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, Feb 1925.
- [15] A. Bobák, T. Lučivjanský, M. Borovský, and M. Žukovič. Phase transitions in a frustrated ising antiferromagnet on a square lattice. *Phys. Rev. E*, 91:032145, Mar 2015.
- [16] W. D. McComb. *Renormalization Methods A Guide for Beginners*. CLARENDON PRESS • OXFORD, 2004.
- [17] Kenneth G. Wilson. Renormalization group and strong interactions. *Phys. Rev. D*, 3:1818–1846, Apr 1971.
- [18] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics. 2nd Edition*. Elsevier Science, 1996.
- [19] Ivelton Soares da Silva. *Renormalização de rede de tensores: Uma abordagem analítica*. Master’s theses, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2016.
- [20] Wolfgang Hackbusch. *tensor spaces and numerical tensor calculus*. Springer Heidelberg Dordrecht London New York, 2012.
- [21] GEORGE ARFKEN; HANS J. WEBER. *Física Matemática - Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. Elsevier, 2007.
- [22] Román Orús. Exploring corner transfer matrices and corner tensors for the classical simulation of quantum lattice systems. *Phys. Rev. B*, 85:205117, May 2012.

-
- [23] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang. Renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. B*, 81:174411, May 2010.
- [24] G. Vidal G. Evenbly. Tensor network renormalization. *Phys. Review Lett.*, 115:180405, October 2015.
- [25] W. W. Ho D. Gaiotto M. Hauru, G. Evenbly and G. Vidal. Topological conformal defects with tensor networks. *Phys. Rev. B*, 94:115125, . 2016.
- [26] M. Miyaji T. Takayanagi P. Caputa, N. Kundu and K. Watanabe. Liouville action as path-integral complexity: From continuous tensor networks to ads/cft. *J. High Energ. Phys.*, 11:097, . 2017.
- [27] Z.-C. Gu S. Yang and X.-G. Wen. Loop optimization for tensor network renormalization. *Phys. Rev. Lett*, 118:110504, . 2017.
- [28] J. Haegeman M. Bal, M. Marien and F. Verstraete. Renormalization group flows of hamiltonians using tensor networks. *Phys. Rev. Lett*, 118:250602, . 2017.
- [29] Y. MEURICE. Accurate exponents from approximate tensor renormalizations. *Physical Review B*, 87:064422, . 2013.
- [30] SILVA A. F. M. R. Grupo de renormalização de redes de tensores aplicados a sistemas de spins clássicos. Master's thesis, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2014.
- [31] Lars Onsager. Crystal statistics i a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117, February 1944.