



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
através do grupo de renormalização na representação de redes de
tensores.

Jaiver Chicangana Cifuentes

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

19 de março de 2018

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

Jaiver Chicangana Cifuentes

**Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado
através do grupo de renormalização na representação de redes de
tensores.**

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: Aduino José Ferreira de Souza

**Recife - PE
19 de março de 2018**

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

C569e Cifuentes, Jaiver Chicangana
Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado através do grupo de renormalização na representação de redes de tensores / Jaiver Chicangana Cifuentes – 2018.
96 f.: il.

Orientador: Aduino José Ferreira de Souza.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, BR-PE, 2018.

Inclui referências e apêndice(s).

1. Grupo de renormalização 2. Modelo de Ising 3. Rede de tensores 4. Frustração I. Souza, Aduino 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

Estudo de transições de fases em um antiferromagneto frustrado através do grupo de renormalização na representação de redes de tensores.

Jaiver Chicangana Cifuentes

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 05/03/2018 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Adauto José Ferreira de Souza
DF - UFRPE

Banca Examinadora:

Dr. Francisco George Brady Moreira
DF - UFRN

Dr. Ramón Enrique Ramayo Gonzáles
DF - UFRPE

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

Agradecimentos

Este trabalho de dissertação realizado na Universidade Federal Rural de Pernambuco é um esforço no qual, direta ou indiretamente, participaram pessoas diferentes, revisando, corrigindo, tendo paciência, encorajando-me, me acompanhando em tempos de crise e em momentos de felicidade. Este trabalho me permitiu tirar proveito da competência e experiência de muitas pessoas que gostaria de agradecer nesta seção.

Em primeiro lugar, para o meu conselheiro de dissertação, Dr. Adauto José Ferreira de Souza, meus mais amplos agradecimentos por ter me confiado esse trabalho pessoalmente, por sua paciência diante da minha inconsistência, por sua valiosa direção e apoio para seguir este caminho de dissertação e alcançar o conclusão disso. De quem experiência e educação foram a minha fonte de motivação e curiosidade durante este tempo.

Todos os companheiros e amigos, onde quer que estejam, e sem exceção da minha turma, merecem muitas boas palavras, pois com eles compartilhei espaço e inúmeras horas de trabalho e bons tempos, o que não tem preço. Por todo o tempo que me deram, pelas conversas que tirei tanta vantagem, pelo apoio e amizade.

Obrigado pelos bons e maus momentos, por aguentar-me e por me ouvir. Eles estavam sempre lá no bem e no mal, em tempos com mais confiança no trabalho do que eu. Quem pode pedir mais? Nós fomos animados ao longo do caminho, e isso sempre ajuda. A todos eles, obrigado.

Um agradecimento especial a Angela, Cibele, Felipe A., Issac, Tiago H., Tiago Q. e

Willdauany, por estar sempre ao meu lado.

Não posso esquecer mais graças às pessoas de fora, Girlane Alves, Ricardo Barros e Lucia Paulino, que me receberam muito bem durante a minha estadia e por me dar a oportunidade de viver dentro e fora.

Tudo isso nunca teria sido possível sem o apoio incondicional concedido e o amor que me inspirou mais pais, irmão e familiares, que incondicionalmente entendiam cada vez mais meus momentos. Que, apesar da distância, eles estavam sempre do meu lado para saber como meu processo estava acontecendo. As palavras nunca serão suficientes para testemunhar minha apreciação e minha gratidão.

A todos vocês, meu maior reconhecimento e gratidão.

Resumo

O grupo de renormalização na representação de rede de tensores é uma ferramenta teórica para a análise de sistemas físicos nos quais seus constituintes microscópicos interagem fortemente. A técnica é baseada numa representação da função 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. Ou seja, uma soma sobre as pernas comuns a cada par de tensores. Aqui, aplicamos a técnica ao modelo 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. Este 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. Dessa forma, levantamos o diagrama de fases do modelo no plano temperatura \times razão entre as constantes de acoplamento entre primeiros e segundos vizinhos.

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

Abstract

The tensor network renormalization group is a theoretical framework for the analysis of strong interacting physical systems. The technique is based on a representation of the system partition function by a tensor network, in which one associates to each of its site a translationally invariant tensor. The tensor encodes the states associated with the degrees of freedom of system. The indexes of the tensors, which are called “legs”, correspond to the links between the sites of the network. Thus, the calculation of the partition function is reduced to the contraction of a tensor network. That is, a sum over the legs common to each pair of tensors. Here, we apply the technique to the Ising model defined in a square lattice with antiferromagnetic interactions between the pairs of first neighbors and the pairs of second neighbors. In this case the square lattice is fully frustrated. In the process of renormalization of the tensor network, we introduced a scale factor that avoids unrestricted growth of the tensor norm. This scale factor captures any singularity presents in the free energy. Thus, the critical values of the parameters were obtained by locating the point at which the scale factor presents a singularity. In this way, we obtain the phase diagram of the model in the plane temperature \times ratio between the coupling constants between first and second neighbors.

Keywords: Renalization Group, Ising Model, Tensor Network, Frustration.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Transições de Fase e Fenômenos Críticos	2
1.2	Fenômenos Críticos	5
2	Método e Modelo	8
2.1	O modelo de Ising	8
2.2	Redes de Spins Interagentes	9
2.3	Fatoração de Matrizes	12
2.4	Decomposição em Valores Singulares (SVD)	13
2.5	Frustração magnética	14
2.6	Grupo de Renormalização	15
2.6.1	Análise de grupo de renormalização do modelo de Ising	16
2.7	Grupo de renormalização na representação de rede de tensores	23
2.7.1	Tensores	24
2.7.2	Representação diagramática de tensores	27
2.7.3	Fatoração de Matrizes: Descomposição em valores singulares	29
2.7.4	Representação por Rede de Tensores	34
2.7.5	Cadeia linear de Ising e rede de tensores	40
2.8	Antiferromagnto de Ising frustrado na rede quadrada	43
3	Resultados	45

3.1	Grandezas termodinâmicas	45
3.2	Renormalização	48
A	Tensor	63
B	Codigos Octave	69
B.1	Calculo Diagrama de Fase	69
B.2	Calculo Energia e Calor Específico	69
B.3	Calculo Ponto Máximo do Diagrama de Fase	70
B.4	dfridr	70
B.5	DriveTRG	72
B.6	GSS	73
B.7	TGR	74
B.8	Tensor Inicial	75
B.9	ContractX	76
B.10	ModeXX	76
B.11	RenormXX	76
B.12	ContractY	76
B.13	ModeYY	77
B.14	RenormYY	77
	Referências Bibliográficas	80

Lista de Figuras

1.1	Diagrama de fases simplificado da água. As linhas indicam onde ocorrem a transição entre os estados da substância. Em destaque, o ponto triplo onde ocorre a coexistência das três fases e o ponto crítico.	3
1.2	O semi-plano, que mostra o corte através da qual M é descontínua. Em outras posições M é uma função analítica de T e H	4
1.3	Magnetização espontânea como função da temperatura.	5
2.1	Rede unidimensional com N sítios espaçados uniformemente. A interação ocorre entre os vizinhos mais próximos	9
2.2	Rede em duas dimensões com 16 sítios nos vértices de quadrados. As interações ocorrem entre os vizinhos mais próximos	9
2.3	rede cúbica com os sítios igualmente espaçados nos vértices dos cubos	10
2.4	Rede unidimensional em forma de anel, devido às condições de contorno periódicas, os sítios de fronteira (1 e 9) se interligam formando um anel, a distribuição das ligações torna-se uniforme.	11
2.5	Ordenamento antiferromagnético de Néel (a) e a ordem superantiferromagnética (b).	13
2.6	Células unitárias da rede triangular e quadrada.	15

2.7	Rede unidimensional de sítios. Os sítios da rede original, e seus respectivos rótulos, são mostrados na linha superior. Na linha intermediária, a rede resultante da soma parcial sobre os sítios pares. A distância entre os vizinhos é o dobro da distância entre os vizinhos da rede original. Esta rede pode ser rotulada da mesma maneira que a rede original foi rotulada, como pode ser visto na terceira linha. A terceira linha é idêntica a primeira. Apenas a escala, distância entre os sítios vizinhos, foi alterada. O processo pode ser iterado somando sobre os sítios pares da nova rede “renormalizada”.	17
2.8	Dizimação da metade dos spins em uma rede quadrada. Onde estão os sítios que mostram uma sub-rede marcada por um quadrado tracejado, a sub-rede é girada 45° em relação à rede original	21
2.9	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.	27
2.10	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.	28
2.11	Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por A_{ij} e $B_{j,k}$, os índice i e k são livres em quanto j e contraído.	29
2.12	Representação diagramática de uma operação de agrupamento de dois índices. Um tensor de terceira ordem, T_{ij} , tem as pernas j e k agrupadas. A pernas resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa é rotulada pelo índice combinado $\beta_{j,k}$	29

2.13	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.	30
2.14	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	31
2.15	Representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dois eixos x e y	32
2.16	Em (a) é representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dois eixos x e y . Em (b) temos os passos da contração e a renormalização de quatro estados.	33
2.17	Uma célula unitária de uma rede quadrada e suas variáveis duais correspondentes.	36
2.18	O sitio central representa T_{x_p, x'_p, y_p, y'_p} e cada perna terá um rótulo, faz a representação diagramática da contração.	37
2.19	Em (a) uma rede “favo de mel” onde o tensor T é de terceira ordem, T_{xyz} . Em (b) é representada uma rede quadrada onde o tensor T é de quarta ordem $T_{xx'yy'}$	40
2.20	Uma célula unitária de uma rede quadrada e suas variáveis duais correspondentes apenas ao contorno.	44
3.1	Representação diagramática da contração de um bloco de tensores na rede quadrada ao longo dos eixos x e y	46
3.2	Fator de escala s_C em função da temperatura para modelo de Ising não-frustrado e vários valores da dimensão de corte D_c . O salto na curva indica a localização da transição de fases.	50

3.3	Comportamento do fator de escala para o modelo de Ising ($R = 0$) na região crítica.	50
3.4	Energia Interna do Modelo de Ising ($R = 0$) em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c	51
3.5	Calor Específico do modelo de Ising em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c	52
3.6	Fator de escala em função da temperatura para $R = -0,1$ e vários valores da dimensão de corte D_c	53
3.7	Energia Interna em função da temperatura para ($R = -0,1$) vários valores da dimensão de corte D_c	54
3.8	Calor Específico do parâmetro de frustração $R = -0,1$ em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c	54
3.9	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,2$ e vários valores da dimensão de corte D_c	55
3.10	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,3$ e vários valores da dimensão de corte D_c	55
3.11	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,6$ e vários valores da dimensão de corte D_c	56
3.12	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,7$ e vários valores da dimensão de corte D_c	57
3.13	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c	57
3.14	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c	58
3.15	Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c	58
3.16	Fator de escala em função da temperatura para valores de R em uma dimensão de corte $D_c = 12$	59

3.17	Diagrama de fases do modelo de Ising frustrado, no plano temperatura \times parâmetro de frustração. Resultados são apresentados para vários valores da dimensão de corte D_c . <i>SAF</i> indica um ordenamento superantiferromagnético, <i>P</i> uma fase paramagnética e <i>AF</i> o estado de Néel.	60
A.1	Rede Quadrada, cada sítio representa um tensor. O número de ligações entre um tensor e os vizinhos determina a ordem do tensor. Para a rede quadrada cada sítio possui quatro vizinhos mais próximos, há duas ligações horizontais e las duas verticais, temos outras duas ligações em las diagonais. Cada ligação é um índice do tensor T. Os índices são rotulados como $x, x', y, y', z, z', w, w'$	64
A.2	Os sítios da rede quadrada são representados por bolas pretas. A rede quadrada é dividida em blocos de spins, cada bloco encontra-se dentro do quadrado verde. As bolas à direita são os tensores renormalizados.	65
A.3	Bloco de spins com quatro sítios. Cada sítio possui quatro ligações com os primeiro e dous com os segundo vizinhos.	66

Lista de Tabelas

2.1	Sistema de equações com os valores possíveis de σ_i e σ_{i+2}	18
3.1	Estimativas de T_c para diferentes dimensões de corte D_c e o valor exatamente conhecido para ele parâmetro de frustração $R = 0$	51
3.2	Temos os valores obtidos para a temperatura crítica θ de transição para o parâmetro de frustração $R = 0$, junto com ele valor exato para ele modelo de Ising.	61
3.3	Temos diferentes parâmetros de frustração para o método usado no artigo [1] e cada valor é comparado em relação à Representação Tensorial na rede dual com dimensão de corte $D_c = 16$	61

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho estudamos o comportamento de uma generalização do modelo de Ising que inclui, além da interação entre primeiros vizinhos, uma interação entre os segundos vizinhos de uma rede quadrada. Como as interações são todas antiferromagnéticas, a rede quadrada torna-se frustrada e o estado fundamental do sistema depende da razão, R , entre a constante de acoplamento de segundos vizinhos e o acoplamento entre primeiros vizinhos. Este sistema é analisado através da aplicação da técnica de Grupo de Renormalização na Representação de rede de Tensores. Nosso principal objetivo é obter o diagrama de fases do sistema no plano temperatura $\times R$.

Vamos fazer uma revisão das diferentes teorias que precisamos para podermos desenvolver de forma satisfatória este trabalho. Faremos uma introdução, que acreditamos didática, sobre o *modelo de Ising*, *transições de fase* e o *grupo de renormalização no espaço real*.

Descreveremos duas formas de representar a função de partição de um modelo de spins como uma rede de tensores. A saber, a representação na rede original e uma outra representação na rede dual. Discutiremos, através de um exemplo, as vantagens e desvantagens de uma ou outra representação. Por fim, aplicaremos a técnica *Tensor Renormalization Group* ao nosso sistema de interesse e discutimos como encontrar os valores críticos dos parâmetros.

1.1 Transições de Fase e Fenômenos Críticos

Uma substância ordinária pode se apresentar em diferentes estados de agregação tais quais sólido, líquido e gasoso. Por exemplo, a água é líquida à temperatura ambiente e à pressão atmosférica, mas esfriada até 273,15 K, mantendo-se a pressão constante, torna-se gelo que corresponde ao estado sólido; Aquecida até 373,15 K ela se transforma em vapor. Em cada uma dessas temperaturas, o material sofre uma mudança abrupta nas suas propriedades termodinâmicas. Fenômenos desta natureza ocorrem em praticamente todos os materiais em diferentes circunstâncias e são conhecidos como transições de fases. Os diferentes estados entre os quais as transições ocorrem são chamadas fases termodinâmicas [2]. As mesmas transições de fases podem ser observadas variando a pressão para temperatura constante. Existem muitos outros tipos de transição de fases, não apenas solidificação ou vaporização. Por exemplo, a altas pressões e/ou baixas temperaturas, o gelo sofre várias outras transições entre diferentes fases sólidas, caracterizadas por diferentes estruturas cristalinas.

Um sistema pode também ser heterogêneo, isto é, exibir simultaneamente duas ou mais fases termodinâmicas. Nesse caso, se o sistema estiver em equilíbrio, estamos diante de uma coexistência de fases. No caso de um fluido, coma a água líquida, seu estado termodinâmico pode ser caracterizado pela pressão, P , e por sua temperatura, T . Assim, cada estado está associado a um ponto em um diagrama $P \times T$ como se mostra na figura 1.1. Um ponto (P, T) sobre uma linha neste diagrama indica uma transição de fases. Se modificarmos a pressão veremos que a temperatura de transição muda, fazendo com que o ponto considerado se mova sobre a linha de transição $P = P(T)$, que separa a fase líquida da fase gasosa. Temos uma curva similar para a transição sólido-líquido e, em geral, uma linha para cada transição diferente. O conjunto de hipersuperfícies no espaço de configurações termodinâmicas ou alguns de seus cortes define o que é conhecido como **diagramas de fases**.

No diagrama da figura 1.1, a linha de coexistência líquido-gás termina em ponto denominado ponto crítico. Este é um ponto extremamente peculiar. Nele não há coexistência de fases e o comportamento do sistema é *sui generis*. Nos referimos ao comportamento exibido pelo sistema na vizinhança do ponto crítico como fenômenos críticos.

Formalmente, todas propriedades macroscópicas podem ser deduzidas da **energia livre**

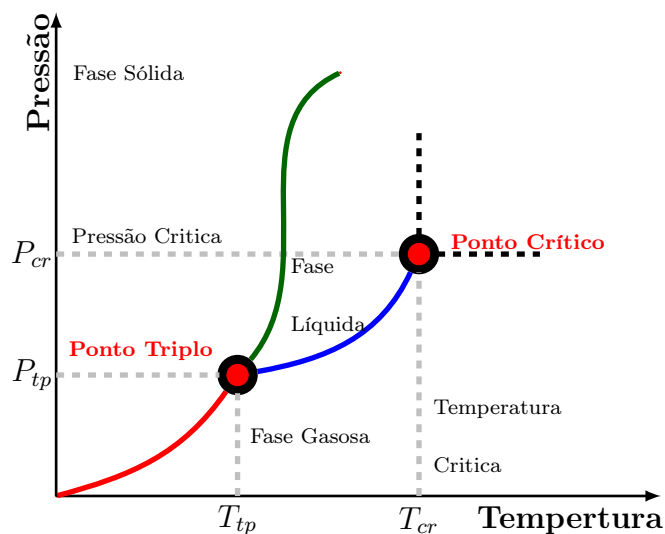


Figura 1.1: Diagrama de fases simplificado da água. As linhas indicam onde ocorrem a transição entre os estados da substância. Em destaque, o ponto triplo onde ocorre a coexistência das três fases e o ponto crítico.

ou da **função de partição** [3, 1]. Transições de fases podem ser classificadas como sendo contínuas ou descontínuas, conforme as primeiras derivadas da energia livre sejam contínuas ou descontínuas, respectivamente.

Sejam $F(T, V, N)$ e $G(T, P, N)$ as energias livres de **Helmholtz** e **Gibbs**, respectivamente, escritas como funções de suas variáveis naturais. A entropia S é dada por

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

O volume (equação de estado) é obtido através de

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

Enquanto que a magnetização de um sistema magnético é dada por

$$M = -\left. \frac{\partial F(T, H, N)}{\partial H} \right|_{T, N}. \quad (1.3)$$

Nas expressões acima N é o número de partículas e H é um campo magnético aplicado. Assim, vemos que uma transição de fases descontínua é acompanhada de um salto descontínuo

da entropia, que está associado ao calor latente, e de uma variação descontínua do volume ou da magnetização, no caso de sistemas magnéticos.

Vários sistemas com elementos dos metais de transição apresentam uma magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica T_c chamada de temperatura de **Curie**. Os elementos mais comuns são **Fe**, **Co** e **Ni**. Em alguns desses compostos a magnetização tem sua origem no alinhamento dos spins.

Um material típico é o ferro cuja temperatura de Curie é $T_c = 1043$ K. Para $T > T_c$, o material é paramagnético, isto é, na ausência de um campo magnético externo, ele tem magnetização nula como se mostra na figura 1.2, enquanto que na presença de um campo fraco possui uma magnetização proporcional à intensidade do campo.

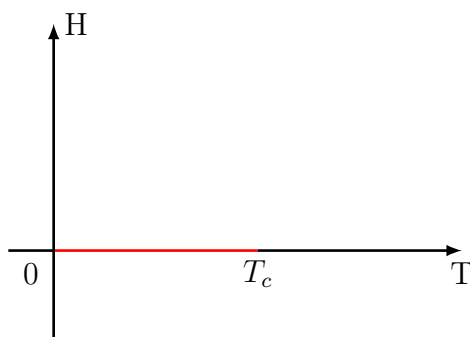


Figura 1.2: O semi-plano, que mostra o corte através da qual M é descontínua. Em outras posições M é uma função analítica de T e H .

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

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H, T). \quad (1.4)$$

O comportamento típico da magnetização espontânea é ilustrado na figura 1.3. 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 os *ferromagnetos isotrópicos*. Em outros materiais, a magnetização espontânea tende a se alinhar preferencialmente na

direção de alguma eixo particular associado à estrutura cristalina; Estes são conhecidos como *ferromagnetos uniaxiais*.

Parâmetro de Ordem é uma função termodinâmica que assume valores diferentes em cada fase e, portanto, pode ser usado para distinguir cada uma das possíveis fases de um material.

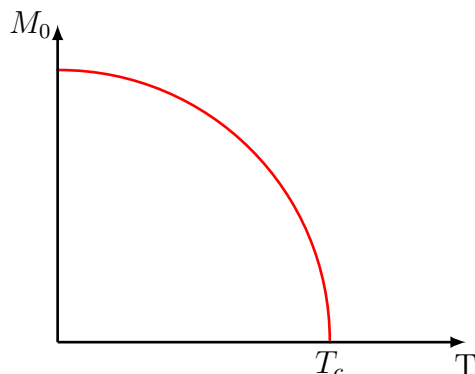


Figura 1.3: Magnetização espontânea como função da temperatura.

1.2 Fenômenos Críticos

Nas últimas décadas, o estudo dos fenômenos críticos se concentrou cada vez mais nos valores de um conjunto de índices chamados expoentes críticos que descrevem o comportamento próximo do ponto crítico de certas grandezas de interesse. Estes expoentes são determinantes para descrever, qualitativamente, o comportamento crítico de um dado sistema e representam a não-analiticidade de algumas funções termodinâmicas [4].

Fenômenos críticos não são de modo algum limitado ao parâmetro de ordem. Por exemplo, as funções resposta calor específico a campo constante e a suscetibilidade isotérmica ambas tornam-se infinitas no ponto crítico. Nas proximidades do ponto crítico, diferentes sistemas podem comportar-se de modo semelhante, por exemplo, a transição líquido/gás e a transição ferromagnética/paramagnética. O comportamento em torno do ponto crítico é bem descrito por leis de potências. A leis de potências características desses sistemas são definidas por um conjunto de *expoentes críticos*. Quando o comportamento crítico de dois

ou mais sistemas são descritos pelo mesmo conjunto de expoentes críticos, dizemos que elas pertencem à mesma classe de universalidade. Nesta seção definiremos os expoentes críticos geralmente utilizados.

A classe de universalidade 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.

Considerando o exemplo do ferromagneto simples na presença de um campo magnético H , no qual ocorre uma transição em $H \rightarrow 0$, a magnetização possui um valor finito $M = M_0$, e além disso, são válidas as seguintes condições:

$$M(T, H \rightarrow 0^+) \sim \begin{cases} 0, & \text{se } T > T_c \\ |t|^\beta, & \text{se } T < T_c \end{cases} \quad (1.5)$$

onde a temperatura reduzida é definida como $t = (T - T_c)/T_c$. Assim o comportamento singular do parâmetro de ordem é caracterizado pelo expoente crítico β . Por exemplo, o conceito de universalidade emerge do fato de que o valor de β parecer ser o mesmo para todos os sistemas magnéticos com a mesma simetria, independente de detalhes microscópicos.

Consideremos agora outras quantidades físicas. Próximo de T_c , tanto acima quanto abaixo desse valor, o calor específico apresenta uma fraca divergência

$$C_\pm = \frac{\partial E}{\partial T} \sim |t|^{-\alpha_\pm} \quad (1.6)$$

onde introduzimos a notação conveniente $t = (T - T_c)/T_c$. É comum também fazer a distinção entre os expoentes críticos acima α_+ e abaixo α_- de T_c , embora os valores sejam iguais dentro da resolução experimental, para simetria Ising.

A dependência da magnetização com o campo magnético aplicado exatamente em $T = T_c$ também define um expoente crítico

$$M(H, T = T_c) \sim H^{1/\delta}. \quad (1.7)$$

De maneira geral, a suscetibilidade de um sistema é a resposta de seu parâmetro de

ordem a uma variação de seu campo conjugado. A divergência da suscetibilidade é caracterizado por um outro expoente crítico γ

$$\chi_{\pm}(T, H \rightarrow 0^+) = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0^+} \sim |t|^{-\gamma_{\pm}} \quad (1.8)$$

Em princípio, dois expoentes γ_+ e γ_- são necessários para descrever as divergências de cada um dos dois lados da transição de fase. Porém, em muitos casos, a mesma singularidade governa ambos os lados.

Capítulo 2

Método e Modelo

2.1 O modelo de Ising

Uma transição de fases ocorre quando uma pequena variação em um parâmetro externo, como temperatura ou pressão, causa uma mudança qualitativa de larga escala no estado de um sistema. O estudo teórico de transições de fases faz uso de modelos idealizados para descrever certas características de sistemas reais, como o modelo de Ising.

O modelo de Ising é um exemplo de uma descrição idealizada de um determinado sistema físico. Este modelo foi inventado por Lenz [5] com propósito de explicar o ferromagnetismo, isto é, o aparecimento de uma *magnetização espontânea* em alguns materiais para temperaturas suficientemente baixas.

Seu nome é uma homenagem a Ernst Ising, que na primeira metade da década de 1920 desenvolveu sua tese de doutorado sob a orientação de Lenz [6]. O esforço de Ernst Ising resultou no primeiro trabalho científico sobre este modelo. Ising foi capaz de obter uma solução analítica na versão unidimensional do modelo. O resultado foi algo decepcionante, pois o modelo não apresentou uma magnetização espontânea [5]. Não obstante, a ideia original do Lenz mostrou-se excepcionalmente rica e rende frutos até hoje, quase cem anos depois [7, 8].

De um ponto de vista mais geral, o propósito do modelo de Ising é explicar como interações de curto alcance entre os constituintes microscópicos de um material leva ao

aparecimento de um comportamento correlacionado de longo alcance entre tais partículas [9].

2.2 Redes de Spins Interagentes

Para definir o modelo de Ising iniciamos com uma rede, que consideraremos um conjunto finito de pontos (sítios ou vértices) regularmente espaçados embebidos no espaço de dimensão $d = 1, 2, 3, \dots, D$. Em uma dimensão, a rede é simplesmente uma cadeia de pontos sobre uma linha, ver figura 2.1, que podemos enumerar de 1 a N .

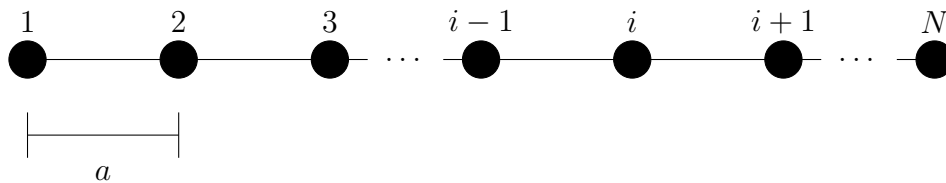


Figura 2.1: Rede unidimensional com N sítios espaçados uniformemente. A interação ocorre entre os vizinhos mais próximos

Em qualquer dimensão, N denotará sempre o número de sítios da rede. Para a dimensão $d = 2$, a rede será formada por quadrados justapostos como na figura 2.2.

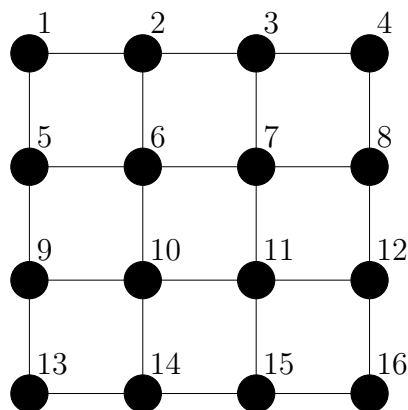


Figura 2.2: Rede em duas dimensões com 16 sítios nos vértices de quadrados. As interações ocorrem entre os vizinhos mais próximos

Em três dimensões, teremos uma rede cuja unidade geradora são cubos, como podemos ver da figura 2.3. Tal rede é denominada de rede cúbica simples. Para uma dimensão

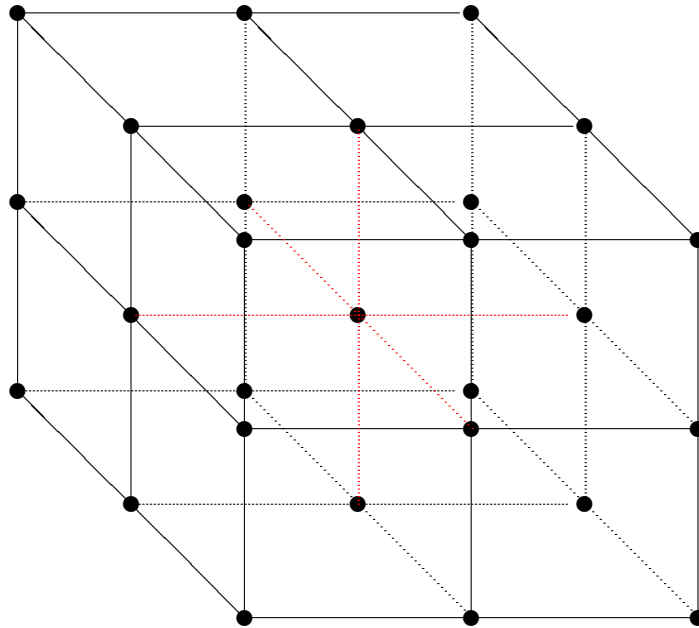


Figura 2.3: rede cúbica com os sítios igualmente espaçados nos vértices dos cubos

qualquer $d > 3$, não é possível fazer um desenho da rede. Porém, podemos defini-la pela translação de sua unidade básica (célula unitária) como nos exemplos anteriores [3, 10]. Nas figuras das redes, cada seguimento entre os sítios é chamado de uma **Ligação**. Os sítios conectados por uma ligação são chamados de vizinhos mais próximos ou primeiros vizinhos. Para as redes aqui consideradas, se excluirmos os sítios nas “fronteiras”, cada sítio de uma rede d -dimensional tem $2d$ primeiros vizinhos.

O fato do número de primeiros vizinhos de um sítio na fronteira ser diferente do número de vizinhos de um sítio no interior da rede, quebra a simetria de translação da rede. Uma forma de restaurar a simetria é a adoção de uma condição de contorno periódica da rede, ou seja, introduzimos ligações extras conectando os sítios nas fronteiras de lados opostos. Isto corresponde a transformar a cadeia em um anel, conforme a figura 2.4, ou a rede quadrada em um toro.

Vamos agora associar a cada sítio, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, da rede, uma variável σ_i . As variáveis σ_i , por definição, só podem assumir dois valores, $\sigma_i = \pm 1$. Ou seja, cada sítio da rede pode estar apenas em um de dois possíveis estados. Quando atribuímos valores $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N)$ para cada um dos sítios da rede, dizemos que o sistema se encontra em um particular *microestado* ou em uma dada *configuração*.

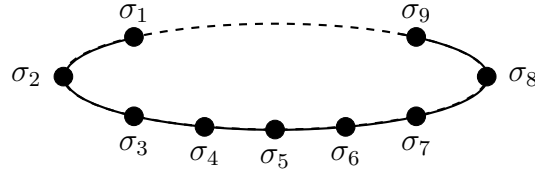


Figura 2.4: Rede unidimensional em forma de anel, devido às condições de contorno periódicas, os sítios de fronteira (1 e 9) se interligam formando um anel, a distribuição das ligações torna-se uniforme.

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

O próximo passo para a definição do modelo é estabelecer o *hamiltoniano* do sistema. O hamiltoniano é a energia total do sistema, e é uma função da configuração em que este se encontra. Além disso, o hamiltoniano governa a dinâmica do sistema. Para o modelo de Ising, assumimos que há interação apenas entre pares de átomos que são primeiros vizinhos. Podemos ainda considerar a presença de um campo magnético externo atuando sobre o material, nestas circunstâncias, a energia de cada configuração $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N)$ é dada por

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

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

Nesta dissertação, estudamos uma versão generalizada do modelo de Ising. Consideraremos uma rede quadrada na qual a cada sítio, i , associamos uma variável de Ising $\sigma_i = \pm 1$. Não incluiremos a ação de um campo magnético externo. Porém, além das interações entre primeiros vizinhos usuais, levaremos em consideração também a interação entre segundos vizinhos. Além disso, ambas as interações são antiferromagnéticas. Ou seja, favorecem o alinhamento antiparalelo dos pares de spins interagentes. Como será discutido mais adiante, a interação entre segundos vizinhos introduz uma *frustração* geométrica, ou melhor, o estado fundamental do sistema torna-se não trivial [1].

O hamiltoniano do sistema é

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (2.2)$$

onde $J_1 < 0$ e $J_2 < 0$ são as constantes de acoplamento entre os primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Note que a primeira soma na equação (2.2) corre sobre todos os pares de primeiros vizinhos e a segunda soma corre sobre todos os pares de segundos vizinhos.

De fato, o estado fundamental do hamiltoniano (2.2) é conhecido. A saber, quando o valor do parâmetro de frustração $R = J_2/|J_1| > -1/2$ a configuração de menor energia corresponde ao estado de 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 [11]. Ver figura 2.5. O ponto crítico separando estas duas fases encontra-se em $R = -1/2$ no qual a temperatura crítica é suprimida para zero.

2.3 Fatoração de Matrizes

Em álgebra linear, uma importante operação consiste na fatoração de uma matriz \mathbf{A} como um produto de duas ou mais matrizes. Existem vários tipos de fatoração como, por exemplo, **fatoração LU** [12, pp. 142], **fatoração QR** [12, pp. 405], **fatoração Cholesky**

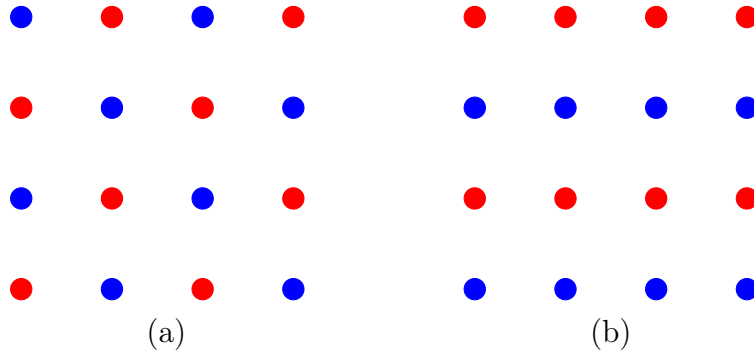


Figura 2.5: Ordenamento **antiferromagnético** de Néel (a) e a ordem **superantiferromagnética** (b).

[12] e **decomposição em valores singulares** [12, pp. 471] (Singular Values Decomposition), abreviado como SVD, entre outras. Aqui, estamos particularmente interessados na SVD de uma matriz.

2.4 Decomposição em Valores Singulares (SVD)

Uma decomposição de valor singular fornece uma maneira conveniente de quebrar uma matriz, que talvez contenha alguns dados nos quais estamos interessados, em peças mais simples e significativas.

Seja M é uma matriz $m \times n$. Os valores singulares de M são as raízes quadradas dos autovalores da $M^T M$ e denotados por $\sigma_1, \dots, \sigma_n$. É uma convenção ordenar os valores singulares de modo que $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$ [13, 14, 15, 16]. Formalmente, a decomposição em valores singulares é uma fatoração na forma

$$M = U\Sigma V^\dagger \quad (2.3)$$

onde

$$\begin{cases} U_{m \times m} & \text{unitária} & UU^T = U^T U = I \\ V_{n \times n} & \text{unitária} & VV^T = V^T V = I \\ \Sigma_{m \times n} & \text{diagonal} & \Sigma_{i,j} = 0, i \neq j \text{ e } \Sigma_{i,i} = \sigma_i \end{cases}$$

As colunas de U incluídas em uma decomposição deste tipo são chamadas de vetores singulares esquerdos de M , e as colunas de V são chamadas de vetores singulares direitos de

M , as entradas diagonais de Σ são necessariamente os valores singulares de M . Como dito acima, os valores singulares de M são

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

onde λ_i são os autovalores de $M^T M$.

Explicitamente, a SVD permite escrever

$$M_{m \times n} = U_{m \times m} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \end{pmatrix} V_{n \times n}^\dagger \quad (2.4)$$

A decomposição em valores singulares as matrizes U , Σ e V^\dagger satisfazem as seguintes condições:

- $V = [v_1, v_2, \dots, v_n]$ diagonaliza ortogonalmente $M^T M$.
- Os elementos da diagonal de Σ são $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1}, \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sigma_n = \sqrt{\lambda_n}$, sendo $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, os autovalores de $M^T M$ associados aos vetores coluna de V e ordenados de tal modo que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$.
- $u_i = Mv_i/\sigma_i$, com $i = 1, 2, \dots, n$.

2.5 Frustração magnética

A frustração magnética é gerada pelo conflito em minimizar a interação de troca associada a diferentes pares de spin. Esse conflito pode resultar da geometria da rede ou devido à competição entre as interações [17]. Tomemos os exemplos das redes triangular e quadrada em duas dimensões como na figura 2.6.

A parte *a* da figura 2.6 mostra uma célula unitária de uma rede triangular com seus spins interagindo antiferromagneticamente, $j_1 < 0$. Para minimizar sua energia, cada par de spin tende a se alinhar em sentidos opostos como ilustrado pelas setas pretas da figura. Note que o terceiro spin, representado pela seta vermelha, não consegue satisfazer simultaneamente

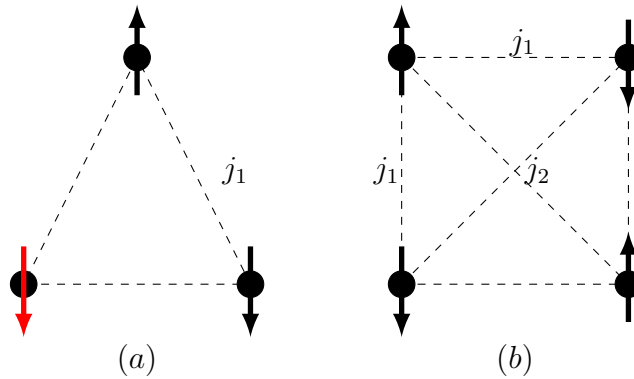


Figura 2.6: Células unitárias da rede triangular e quadrada.

uma orientação antiferromagnética com os dois outros spins. A este fato, nos referimos como 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, 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 dos spins a interação entre ele e seu segundo vizinho passa a ser satisfeita a custa da frustração da interação com seus primeiros vizinhos. Este segundo caso ilustra a frustração devido a competição entre as interações. A configuração de mínima energia depende da intensidade relativa das interações.

Nos antiferromagnetos frustrados surgem padrões ordenados complexos devido a impossibilidade dos spins se orientarem antiparalelamente a seus vizinhos ou por o arranjo geométrico não permitir ou devidos às interações competitivas entre os spins. Note que a figura 2.6-b corresponde ao sistema que estudamos nesta dissertação.

2.6 Grupo de Renormalização

A técnica de Grupo de Renormalização [18], utilizada para o entendimento de transições de fase, foi apresentada em 1971 por **Kenneth Wilson** [19], que recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1982 por esta contribuição. O método de Wilson é muito geral e tem

ampla aplicabilidade, pode ir muito além do campo de transições de fase [20]. O método é sistemático e funciona muito bem para calcular grandezas que caracterizam os sistemas críticos, como expoentes críticos e equações de estado [21]. Essa abordagem foi aplicada em problemas envolvendo fenômenos críticos, incluindo as leis de escala entre expoentes críticos e universalidade [19], como também tornou-se uma técnica largamente utilizada em física da matéria condensada e foi posteriormente vista em muitas aplicações em outros ramos da física, tais como sistemas dinâmicos e caos, fractais, e sistemas desordenados. Dentro desta área de investigação como são as transições de fase, no entanto, a teoria pode ser vista como uma extensão e implementação de ideias fenomenológicas sugeridas por **Leo Kadanoff** na década de 1960 [22].

2.6.1 Análise de grupo de renormalização do modelo de Ising

A teoria de grupo de renormalização pode parecer muito abstrata, porém uma aplicação da técnica pode esclarecer e mostrar como se dá a operacionalização da mesma. Portanto, vamos ilustrar a técnica com o modelo de Ising unidimensional na ausência de campo magnético externo. Ainda que este modelo não exiba transição de fase, vários aspectos da técnica de grupo de renormalização podem ser enfatizados.

Na ausência do campo magnético, $\mathbf{H} = 0$, o hamiltoniano (2.1), torna-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.5)$$

A função de partição do sistema é escrita

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\sigma} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} \quad (2.6)$$

A soma corre sobre todas as configurações σ do sistema. Fazendo $K = \beta J$, com $\beta = 1/k_B T$, e explicitando a soma na equação (2.5), a função da partição torna-se

$$Z = \sum_{\sigma} e^{K(\dots + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \dots + \sigma_{i-1} \sigma_i + \sigma_i \sigma_{i+1} + \dots)} \quad (2.7)$$

Observe a primeira linha da figura 2.7

A primeira ideia na técnica de grupo de renormalização é remover do problema uma fração finita de graus de liberdade [23]. Por exemplo, somando sobre um subconjunto dos

graus de liberdade. Os termos da soma no argumento da exponencial em (2.7) podem ser rearranjados de forma que os sítios pares apareçam uma única vez em algum dos factores.

De forma que a exponencial pode ser factorada na seguinte forma

$$Z = \sum_{\sigma} \{ e^{[K\sigma_2(\sigma_1+\sigma_3)]} e^{[K\sigma_4(\sigma_3+\sigma_5)]} e^{[K\sigma_6(\sigma_5+\sigma_7)]} \dots \} \quad (2.8)$$

Agora somando sobre os índices pares, temos

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \dots} \{ (e^{[K(\sigma_1+\sigma_3)]} + e^{[-K(\sigma_1+\sigma_3)]}) (e^{[K(\sigma_3+\sigma_5)]} + e^{[-K(\sigma_3+\sigma_5)]}) \dots \} \quad (2.9)$$

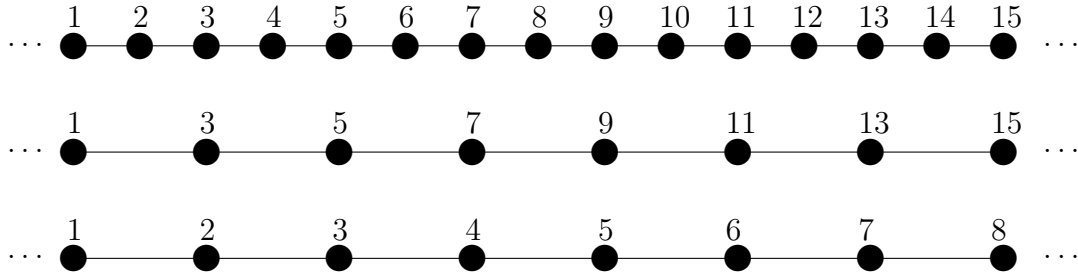


Figura 2.7: Rede unidimensional de sítios. Os sítios da rede original, e seus respectivos rótulos, são mostrados na linha superior. Na linha intermediária, a rede resultante da soma parcial sobre os sítios pares. A distância entre os vizinhos é o dobro da distância entre os vizinhos da rede original. Esta rede pode ser rotulada da mesma maneira que a rede original foi rotulada, como pode ser visto na terceira linha. A terceira linha é idêntica a primeira. Apenas a escala, distância entre os sítios vizinhos, foi alterada. O processo pode ser iterado somando sobre os sítios pares da nova rede “renormalizada”.

A segunda ideia importante na técnica é organizar o resultado da soma parcial da função de partição de forma que este tenha a mesma estrutura da função de partição original [23]. Porém, a nova função de partição corresponderá a um modelo de Ising com $N/2$ sítios e, possivelmente, uma constante de acoplamento diferente K' . Se este procedimento é factível, é possível repetir o processo indefinidamente. A cada iteração, o número de graus de liberdade do sistema é reduzido à metade. Essencialmente, obteríamos uma relação de recorrência que permite calcular Z'_N a partir de um outro sistema com uma outra constante de acoplamento.

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

$$e^{K(\sigma_i+\sigma_{i+2})} + e^{-K(\sigma_i+\sigma_{i+2})} = f(K)e^{K'(\sigma_i\sigma_{i+2})} \quad (2.10)$$

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

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots} f(K) e^{K'(\sigma_1 \sigma_3)} f(K) e^{K'(\sigma_3 \sigma_5)} \dots \quad (2.11)$$

a qual pode ser reescrita

$$Z = f(K)^{N/2} \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots} e^{K'(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_5 + \sigma_5 \sigma_7 + \dots)} \quad (2.12)$$

compare a equação (2.7) e figura 2.7 e note que a equação 2.12 pode ser escrita como

$$Z(K, N) = f(K)^{N/2} Z(K', N/2) \quad (2.13)$$

essa é a relação de recorrência desejada. Esta transformação é chamada de *Transformação de Kadanoff*. Para determinar K' e $f(K)$ usamos equação (2.10) para construir um sistema de equações com os valores possíveis de σ_i e σ_{i+2} , ver tabela 2.1.

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

Tabela 2.1: Sistema de equações com os valores possíveis de σ_i e σ_{i+2} .

σ_i	σ_{i+2}	$\sigma_i + \sigma_{i+2}$	$\sigma_i \sigma_{i+2}$
-1	-1	-2	1
-1	+1	0	-1
+1	+1	+2	1
+1	-1	0	-1

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K) e^{K'} \quad (2.14)$$

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

$$2 = f(K) e^{-K'} \quad (2.15)$$

ou

$$f(K) = 2e^{K'} \quad (2.16)$$

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

$$K' = \frac{1}{2} \ln \cosh(2K) \quad (2.17)$$

e

$$f(K) = 2\sqrt{\cosh(2K)} \quad (2.18)$$

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

$$Ng(K) = \ln Z_N. \quad (2.19)$$

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

$$\ln Z(K, N) = \frac{N}{2} \ln f(K) + \ln Z(K', N/2) \quad (2.20)$$

temos que

$$Ng(K) = \frac{N}{2} \ln f(K) + \frac{N}{2} g(K') \quad (2.21)$$

ou

$$g(K) = \frac{1}{2} \ln f(K) + \frac{1}{2} g(K') \quad (2.22)$$

ou ainda

$$g(K') = 2g(K) - \ln \left(2\sqrt{\cosh(2K)} \right) \quad (2.23)$$

As equações (2.17,2.18) e (2.23) são chamadas de equações de grupo de renormalização. Se a função de partição é conhecida para um valor K' , pode-se gerar a energia livre para outros valores dessa recursão ou “renormalização”. Com a renormalização obtida a partir das equações (2.17) e (2.23) a nova constante de acoplamento, K' , calculada a partir da equação (2.18) é sempre menor que K .

As inversas das equações (2.17) e (2.23) formam um conjunto alternativo de equações, são elas

$$K = \frac{1}{2} \ln \left(e^{2K'} \pm \sqrt{e^{4K'} - 1} \right) \quad (2.24)$$

e

$$g(K) = \frac{1}{2}g(K') + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2}K' \quad (2.25)$$

Começando as iterações com a equação (2.24), a cada iteração o valor de K aumenta e tende ao infinito. Por outro lado a utilização de forma iterativa das equações (2.17) e (2.18), reduz sucessivamente o valor de K' até zero. Quando $K = 0$ ou infinito, dizemos que os pontos fixos da transformação foram atingidos [23].

Vemos que a equação (2.17) só possui dois pontos fixos e ambos estáveis. Isso nos diz que temos um fluxo constante entre zero e ∞ , razão pela qual não é possível encontrar uma transição de fases para o modelo de Ising em uma dimensão.

Vamos agora analisar brevemente um sistema que apresenta uma transição de fase. Consideremos, então o modelo de Ising em uma rede quadrada sem campo magnético externo. Um pedaço da rede é mostrada na figura 2.8, na qual se rotulam alguns sítios. Note que esta rede pode ser exibida como duas sub-redes, de tal forma que cada sub-rede tem seus primeiros vizinhos apenas na outra sub-rede. Por exemplo, os sítios rotulados por 5 e 6 na figura 2.8 (a) pertence a uma sub-rede, enquanto que seus vizinhos, de rótulos 1, 2, 3 e 4 pertencem à outra sub-rede. Esta situação é igual ao caso unidimensional, onde cada sítio par tem vizinhos ímpares e vice-versa. Dessa forma é possível escolher um subconjunto de sítios da rede quadrada e realizar uma soma parcial da função da função partição do sistema, de maneira completamente análogo ao caso em uma dimensão, e fazer a redução de graus de liberdade à metade. Como mostrado na figura 2.8, depois de fazer a soma sobre os graus de liberdade de uma das sub-redes, a rede resultante é uma rede quadrada rotacionada 45° e o parâmetro de rede é $\sqrt{2}$ vezes o da rede original. A rede “Renormalizada” é vista no figura 2.8(b).

Seja (a) a sub-rede que contém os sítios 5 e 6, conforme a figura 2.8, e (b) a sub-rede contendo os demais sítios. A função de partição pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{\dots[K\sigma_5(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)]+[K\sigma_6(\sigma_2+\sigma_7+\sigma_8+\sigma_3)]\dots} \quad (2.26)$$

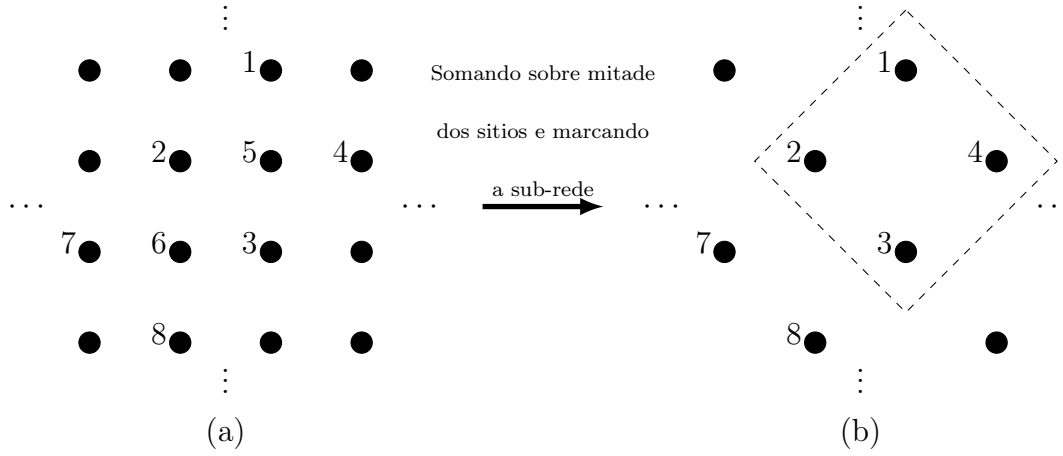


Figura 2.8: Dizimação da metade dos spins em uma rede quadrada. Onde estão os sítios que mostram uma sub-rede marcada por um quadrado tracejado, a sub-rede é girada 45° em relação à rede original

Executando as somas sobre os spins da sub-rede 1, obtemos

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \dots \{e^{[K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)]} + e^{[-K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)]}\} \times \{e^{[K(\sigma_2+\sigma_7+\sigma_8+\sigma_3)]} + e^{[-K(\sigma_2+\sigma_7+\sigma_8+\sigma_3)]}\} \dots \quad (2.27)$$

Similar ao caso unidimensional, deseja-se agora encontrar uma transformação de **Kandanoff**, que transforma a função de partição do sistema com N spins em uma função de partição de um sistema de $N/2$ spins. Um processo similar ao anterior, sugere que temos que escrever o hamiltoniano renormalizado com iterações apenas entre os primeiros vizinhos. Isto corresponderia a escrever o primeiro termo entre chaves da equação (2.27) da forma

$$f(K)e^{[K'(\sigma_1\sigma_2+\sigma_1\sigma_4+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_4)]} \quad (2.28)$$

A fase subsequente seria determinar uma expressão para o acoplamento de K' exigindo que a expressão acima seja igual ao correspondente termo da equação (2.27) para todos os possíveis valores das variáveis de spins do bloco considerado. As possibilidades de arrumação

dos valores das variáveis são

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = \pm 1, \\
 \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1, \\
 \sigma_1 = \sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1, \\
 \sigma_1 = -\sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 = \pm 1.
 \end{aligned}
 \tag{2.29}$$

Note porém que a soma, $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4$ na equação (2.27), pode assumir um dos cinco possíveis valores $\{-4, -2, 0, 2, 4\}$. Enquanto que, a soma dos produtos na $\sigma_1\sigma_2 + \sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4$ na equação (2.28) só pode assumir três possíveis valores $\{-4, 0, 4\}$. Mas a suposição acima tem sistemas de equações diferentes que não tem um mapa que leve $f(K)$ e $K'(K)$, mesmo com uma introdução de uma função que depende de K como foi feito no caso unidimensional. Uma possibilidade é introduzir novos termos de acoplamento entre os spins do bloco. Por exemplo, introduzir no hamiltoniano renormalizado um termo

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

para a interação entre os segundos vizinhos e um outro de iteração de quatro spins,

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

Maiores detalhes pode ser visto na referencia [23, pag 143-149].

Para nosso objetivo, é suficiente observar que esta proliferação do novo acoplamento é regra geral na aplicação da técnica de grupo de renormalização à sistemas não triviais. Além disso, não existe um método sistemático para escrever uma relação de recorrência entre as funções de partição do sistema com N spins e aquela com N' spins. Finalmente, após de algumas considerações [23, pag 147-149], a relação de recorrência entre o acoplamento original e o renormalizado é

$$K' = \frac{3}{8} \ln \cosh(4K). \tag{2.30}$$

Não obstante as várias aproximações envolvidas na obtenção do mapeamento (2.30), este apresenta um ponto fixo instável que indica a ocorrência de uma transição de fases. Fazendo $K' = K = K_c$ em (2.30), obtemos $K_c = 0,50698$. Este valor é próximo do valor exato $K_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2 \approx 0,44069$.

A aplicação da técnica de grupo de renormalização para o caso unidimensional, mostra que o grupo de renormalização tem uma solução impecável e bem próxima da solução exata. Para o caso não trivial bidimensional, a solução não é tão elegante quanto o caso unidimensional. Porém, dado a simplicidade da técnica, a concordância quantitativa com a solução exata é surpreendente. Neste trabalho de dissertação aplicamos uma técnica de grupo de renormalização na representação de rede de tensores que obtêm resultados semelhantes ou superiores aos obtidos pela técnica de grupo de renormalização no espaço real. A técnica aqui usada mantém a elegância observada no exemplo unidimensional para qualquer dimensão espacial. Na abordagem por rede de tensores, há a necessidade de fatorar matrizes, manipular tensores e seus respectivos índices. Vamos observar que a ligação entre os tensores ocorre quando os índices comuns de tensores vizinhos são contraídos. Na parte que diz respeito à fatoração de matrizes, dentro das diferentes possibilidades, aquelas usadas neste trabalho para contrair uma rede de tensores é a decomposição de valores singulares ou SVD (*singular Value Decomposition*).

2.7 Grupo de renormalização na representação de rede de tensores

A técnica de grupo de renormalização na representação de rede de tensores é um método que é utilizado como uma excelente ferramenta teórica no estudo de sistemas físicos fortemente interagentes. Neste trabalho aplicamos o método no estudo de transições de fases em uma extensão do modelo de Ising, definido numa rede quadrada com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos. Enfatizamos que a introdução das interações entre segundos vizinhos torna o sistema frustrado.

O método para estudar modelos clássicos em duas dimensões foi proposto inicialmente por **Levin** e **Nave**, em 2007 [24]. 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) [25].

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 um sítio pertença a apenas um bloco, e contrair os índices internos ao bloco. A contração dos índices internos resulta em um novo 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.

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

2.7.1 Tensores

Tensores são entidades matemáticas empregadas para descrever propriedades ou atributos de objetos com várias componentes. São muito usados em física e engenharias, por exemplo. Eles são uma generalização de escalares e vetores [26]. O que caracteriza se a grandeza é escalar, vetorial ou tensorial é como ela se transforma sob uma rotação, esse comportamento é caracterizado pelo o que é denominado de “ordem” do tensor. Para grandezas escalares, por exemplo, o tensor é dito de ordem zero, pois grandezas escalares são invariantes por rotação, como por exemplo massa e distância. A ordem (ou classificação) de um tensor é definida pelo número de índices necessários para descrevê-lo, no caso dos escalares, que são números reais ou complexos, o tensor possui ordem zero. Dada uma base de referência, um tensor pode ser representado como um arranjo multidimensional de valores numéricos ou funções e sua ordem será a dimensionalidade do arranjo necessário para representa-lo, ou equivalentemente, o número de índices necessários para identificar um dos componentes desse arranjo. Vale ressaltar que não é qualquer tipo de arranjo numérico que corresponde a um tensor. As componentes de um tensor satisfazem certas propriedades sob

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

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

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 [27]

$$A'_{ij} = \sum_{k,l} \frac{\partial x'_i}{\partial x_k} \frac{\partial x'_j}{\partial x_l} A_{kl} \quad (2.32)$$

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

Nem todo tensor obedece uma transformação da forma (2.32). Nesses casos, distinguimos o tipo do tensor pela localização de seus índices. Por exemplo,

$$T_j^i = \sum_{k,l} \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} T_l^k \quad (2.33)$$

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

$$T'_{ij} = \sum_k \sum_j A_{ik} A_{jl} T_{kl}. \quad (2.34)$$

A transformação acima pode ser escrita como

$$T' = ATA^{-1} \quad (2.35)$$

Tendo em conta que A é unitária. Tais transformação são denominadas transformações de similaridade. Em relação à simetria temos tensores simétricos ou anti-simétricos, dependendo da relação entre os índices, por exemplo se

$$T_{lm}^{ijk} = T_{lm}^{kji} \quad (2.36)$$

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

$$T_{lm}^{ijk} = -T_{lm}^{kji} \quad (2.37)$$

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 [26]. Tensores de mesma ordem e tipo podem ser somados ou subtraídos, resultado em um outro tensor de mesma ordem e tipo

$$S_{ij}^k = A_{ij}^k + B_{ij}^k \quad (2.38)$$

e

$$D_{ij}^k = A_{ij}^k - B_{ij}^k \quad (2.39)$$

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

$$T_{ijk} = U_{ij}W_k \quad (2.40)$$

$$T^{ijkl} = U^{ij}W^{kl} \quad (2.41)$$

e

$$T_{ij}^{kl} = U_{ij}W^{kl} \quad (2.42)$$

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

$$T_j^l = \sum_i T_{ij}^{il} \quad (2.43)$$

contraindo novamente, o tensor de ordem zero é obtido,

$$T = T_j^j = \sum_i T_{ij}^{ij} \quad (2.44)$$

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} .

2.7.2 Representação diagramática de tensores

Como veremos na subseção 2.7.4 a função de partição de um modelo de spins numa rede qualquer pode ser escrita como um produto tensorial entre tensores associados aos graus de liberdade dos spins. O produto de elementos de tensores. De forma que uma soma é efetuada sobre todos os valores dos índices comuns entre os tensores. Somar sobre um dado índice é chamado de contração do índices. 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.

Uma forma conveniente de se lidar com tensores e redes de tensores é empregar uma notação diagramática das equações [28]. Na figura 2.9 apresentamos os diagramas que representam um escalar, um vetor, uma matriz e um tensor de terceira ordem. Nestes diagramas tensores são representados por formas geométricas (bolas, triângulos, quadrados, \dots) e índices são representados por linhas que saem dessas formas as quais denominamos pernas. Logo, uma rede de tensores é um conjunto de formas geométricas interconectadas por linhas resultantes da conexão das pernas associadas ao índice comum a dois tensores.

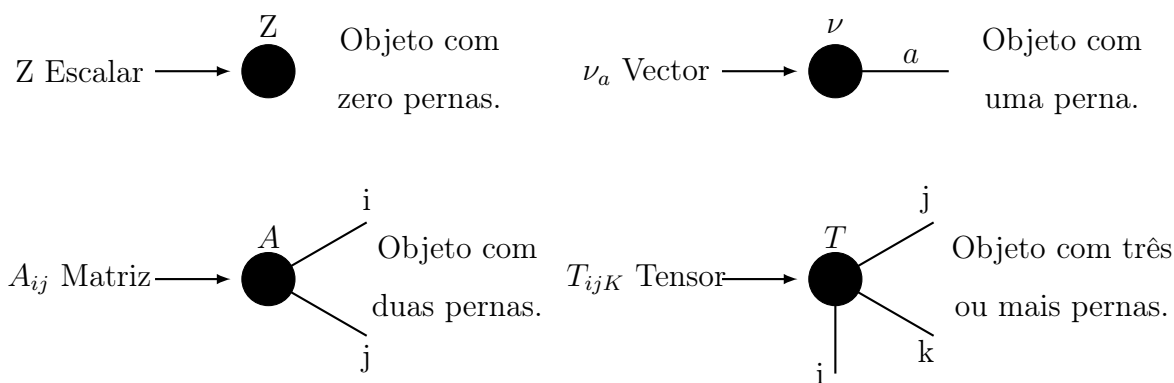


Figura 2.9: Representação diagramática de um escalar, um vetor, uma matriz e um tensor com três índices. Observe que o número de pernas no diagrama está associado ao número de índices (ordem) do tensor.

A contração de um particular índice em uma rede de tensor pode levar ao agrupamento

de dois ou mais índices, ver o exemplo da figura 2.10. 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 .

Como um exemplo vamos representar um produto matricial nesta notação diagramática. Lembre-se que cada elemento da matriz produto envolve a soma sobre um índice comum às duas matrizes a serem multiplicadas, ou seja, a uma contração de índice. A figura 2.11 mostra o produto de duas matrizes A e B , que resulta na matriz C , tanto em forma de equações quanto a correspondente representação diagramática.

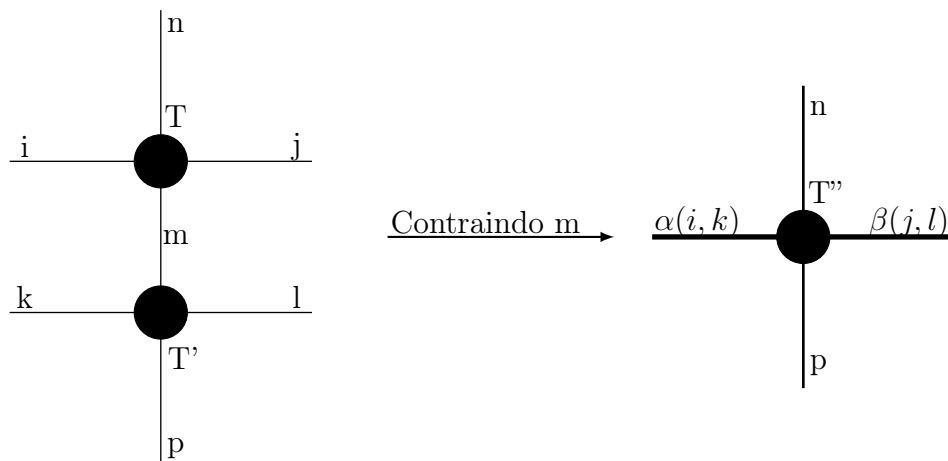


Figura 2.10: A contração do índice m do diagrama da esquerda leva ao agrupamento dos índices i e k bem como j e l . A direita, a representação diagramática da contração.

De maneira geral, o agrupamento de dois índices, como na figura 2.12, produz um outro índice que se assume valores no conjunto formado pelo produto direto dos conjuntos nos quais os índices originais assumem valores. A notação $\beta(j, k)$ indica qualquer relação biunívoca que associa o par de índices originais (j, k) ao resultante β .

A figura 2.13 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.

$$\sum_j T_{ij} T_{jl} = T_{il} \quad (2.45)$$

Pernas livres correspondem a índices que não serão contraídos, ver figura 2.14. Decorre daí que a contração de uma rede de tensores pode resultar em um outro tensor quando restar

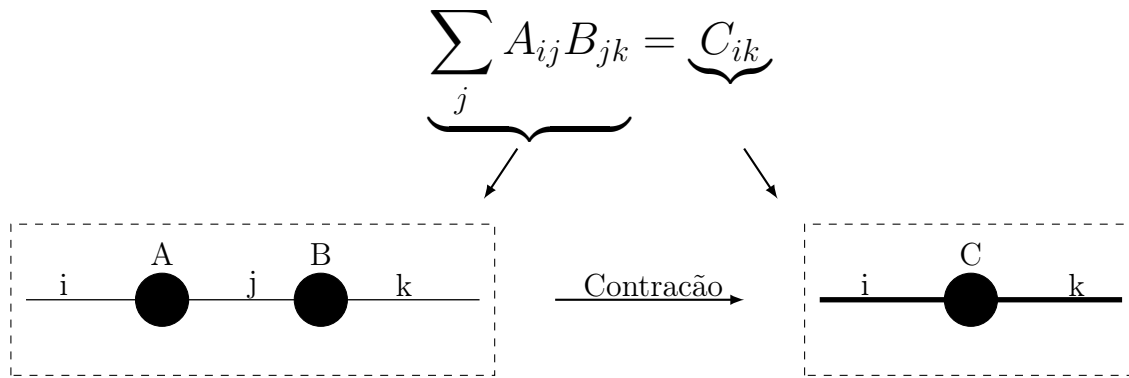


Figura 2.11: Representação diagramática do produto usual de duas matrizes. Os elementos das matrizes são denotados por A_{ij} e $B_{j,k}$, os índices i e k são livres em quanto j é contraído.

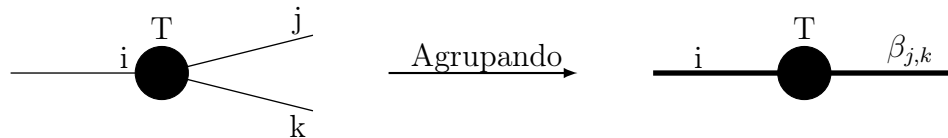


Figura 2.12: Representação diagramática de uma operação de agrupamento de dois índices. Um tensor de terceira ordem, T_{ij} , tem as pernas j e k agrupadas. A pernas resultante do agrupamento é representada de forma mais espessa e rotulada pelo índice combinado $\beta_{j,k}$.

pernas livres ou um escalar, caso contrário.

2.7.3 Fatoração de Matrizes: Descomposição em valores singulares

Um exemplo de uma Descomposição em valores singulares (**SVD**) de sua abreviatura em inglês, será mostrado agora. Para o exemplo uma matriz M quadrada e simétrica foi escolhida. A forma da matriz está associada aos termos da função de partição de um modelo de Ising. Seja, então, uma matriz M dada por

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

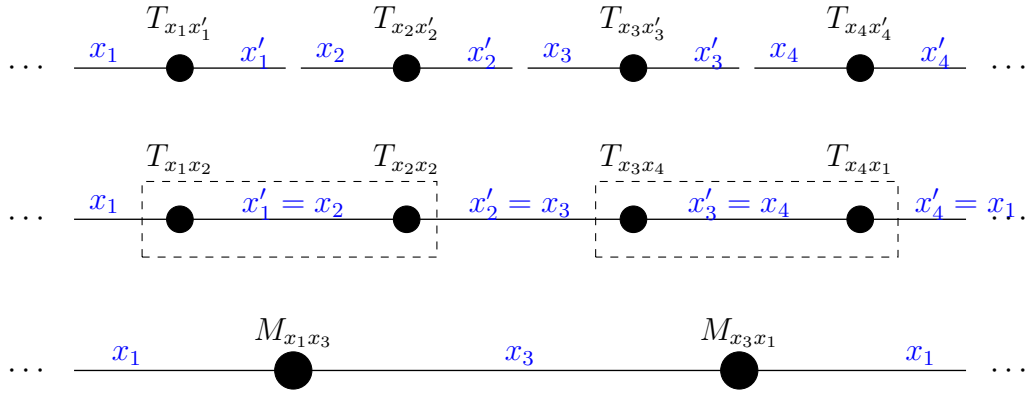


Figura 2.13: Produto entre dois tensores em uma rede unidimensional. Na primeira fileira os tensores são representados individualmente, cada perna indica um índice do tensor. Na segunda fileira observe-se que a cada par de tensores dentro do retângulo tracejado as pernas são ligadas, formando um índice comum. O tensor M é resultado da contração dos índices comum entre dois tensores dentro do retângulo tracejado.

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

$$M^T M = \begin{pmatrix} e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} & 2 \\ 2 & e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

os autovalores são

$$\lambda_{\pm} = 2 [\cosh(\beta J) \pm 1],$$

e os valores singulares de M são

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_+} = \sqrt{2[\cosh(\beta J) + 1]} = 2 \cosh(\beta J) \quad (2.48)$$

e

$$\sigma_2 = \sqrt{\lambda_-} = \sqrt{2[\cosh(\beta J) - 1]} = 2 \sinh(\beta J) \quad (2.49)$$

Os valores singulares compõe a diagonal da matriz Σ , portanto

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

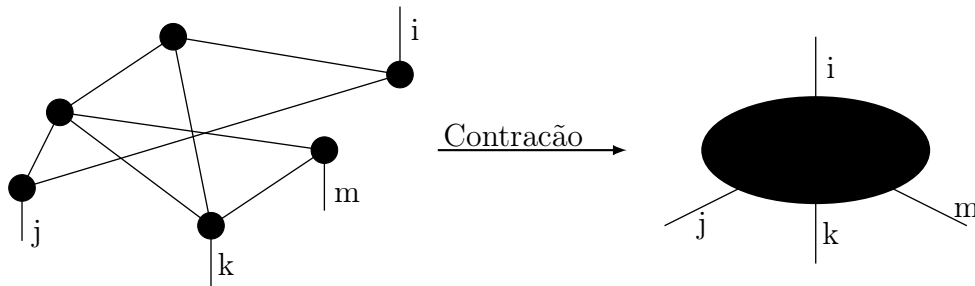


Figura 2.14: Diagrama de uma rede de tensores com várias ligações entre os tensores e quatro índices livres. Todos os índices comuns entre os tensores são contraídos, os índices livres são pernas que não serão contraídas. O resultado da contração é um tensor de quarta ordem de índices i, j, k e m .

Temos que os autovetores de $M^T M$ são v_1 e v_2 associados à σ_1 e σ_2 , respectivamente. Temos portanto,

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

e

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

resultando em

$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

Os autovetores da matriz U são dados por

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} M v_i. \quad (2.54)$$

De maneira que a matriz U é

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

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

Quando representamos a função de partição por uma rede de tensores, precisamos lidar com a decomposição de objetos com mais de dois índices. Para tal existe 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. O que difere a SVD da HOSVD é que a HOSVD é utilizada na decomposição de tensores, em quanto a SVD é utilizada na decomposição de matrizes. Na seção 2.7.2 foi apresentada a representação diagramática dos tensores. No trabalho aqui desenvolvido os tensores serão contraído em grupos de quatro em quatro, ou seja, a cada bloco de quatro sítios na rede original associamos um único sítio na rede renormalizada através da contração das pernas internas ao bloco. Portanto para uma rede original com N sítios, a cada renormalização o número de partículas será reduzido para $N/4$. As contrações ocorrem tanto na horizontal como na vertical conforme a figura 2.15 e podemos escrever o tensor resultante como

$$M_{xx'yy'} = \sum_{ijkl} T_{x_1 i y_1 j} T_{i x' j y'_1} T_{x_2 k y_2 l} T_{k x'_2 l y'_2}. \quad (2.56)$$

A rede “renormalizada” é uma rede quadrada com $N/4$ spins e a função de partição tem

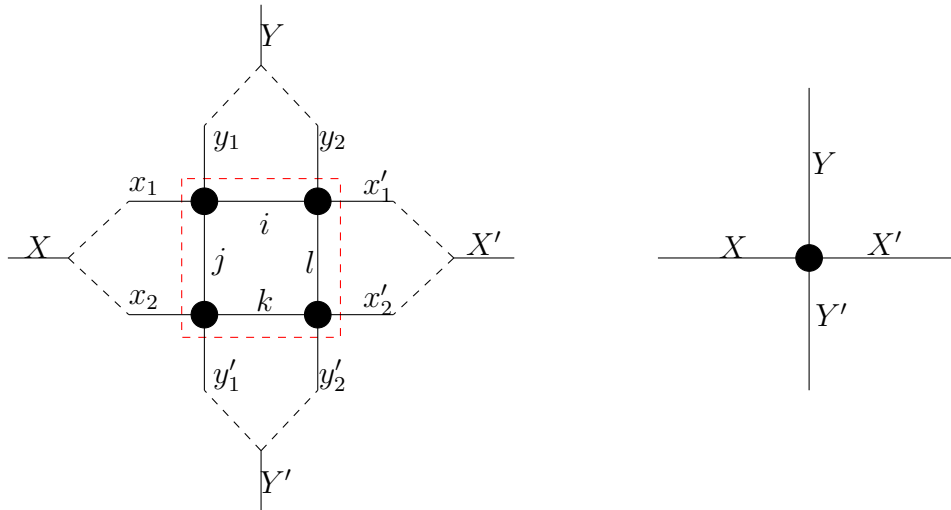


Figura 2.15: Representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dois eixos x e y .

a mesma estrutura que a da rede original. Em princípio o procedimento pode ser iterado para este mapeamento exato. O problema reside na dimensão dos índices dos tensores na nova rede. No caso de variáveis de Ising a dimensão dos índices cresce da forma 2^n onde n é o número de etapas de renormalização. Isto torna o procedimento impraticável. A ideia do grupo de renormalização na representação de tensores é truncar o número de estados

no tensor resultante da contração do bloco sem perder informações sobre o comportamento crítico do sistema. Uma forma de realizar o truncamento é através de uma HOSVD. Assim, ao novo tensor que foi resultado da contração, aplicamos uma HOSVD decompondo o tensor da seguinte forma [29]

$$M_{xx'yy'} = \sum S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'j}^R U_{yk}^U U_{y'l}^D \quad (2.57)$$

Os U 's que aparecem na equação (2.57) são matrizes unitárias e S é o tensor núcleo de $M^{(n)}$. Como as contração ocorrem nas duas direções, teremos ligações duplas na vertical e na horizontal conforme a figura 2.16(b).

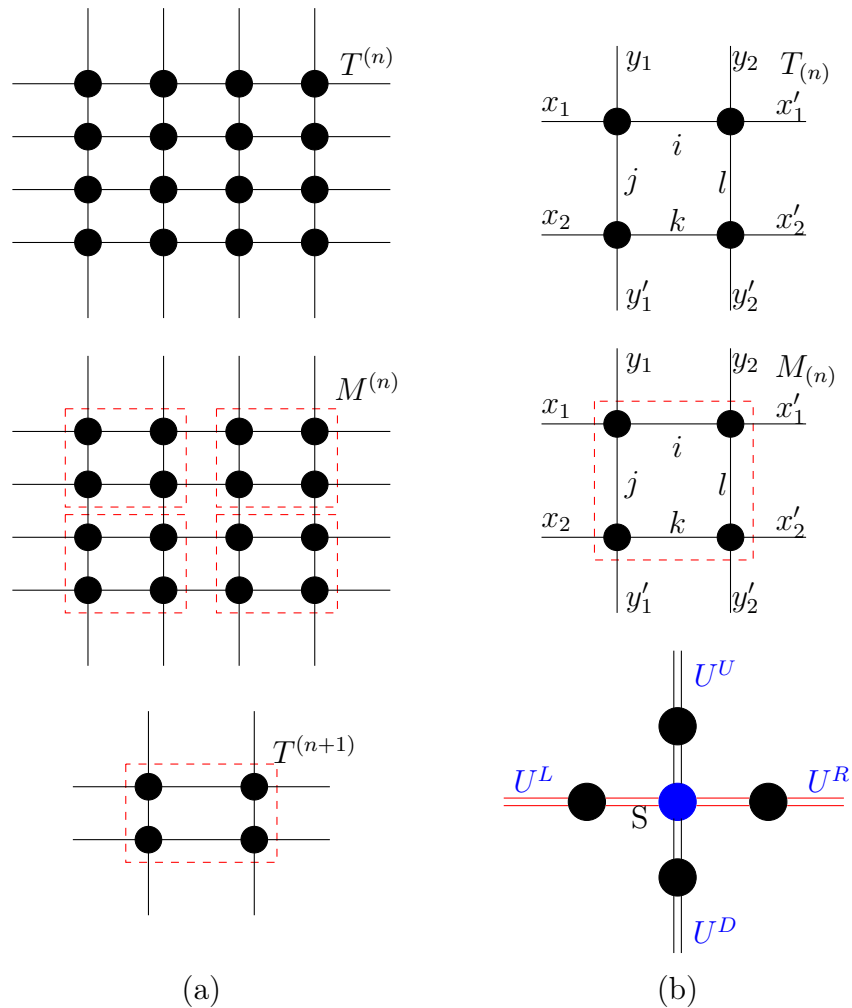


Figura 2.16: Em (a) é representado a contração de uma rede quadrada de tensores ao longo dois eixos x e y . Em (b) temos os passos da contração e a renormalização de quatro estados.

Para trabalhar com a equação (2.57), algumas propriedades devem ser observadas para

qualquer índice j .

1. Ortogonalidade

$$\langle S :, j, :, : | S :, j', :, : \rangle = 0, j \neq j' \quad (2.58)$$

2. Pseudodiagonal

$$|S :, j, :, :| \geq |S :, j', :, :|, j < j' \quad (2.59)$$

onde $\langle S :, j, :, : | S :, j', :, : \rangle$ são o produto interno de dois tensores e $|S :, j, :, :|$ é a norma [29].

Para determinar o tensor T^{n+1} após uma contração, basta determinar as quatro matrizes unitárias da equação (2.57). Para isso devemos reformatar o tensor $M_{xx'yy'}$ como uma matriz. Tal “matrização” de um tensor é obtida tomando-se um dos índices do tensor como o índice da linha da matriz, e agrupando-se os demais índices do tensor para tornar-se o índice de coluna da matriz. Como exemplo

$$M_{xx'yy'} = M'_{(x)(x'yy')}, \quad (2.60)$$

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

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

$$M' M'^T = U^L \Sigma^L (U^L)^T, \quad (2.61)$$

onde a matriz diagonal, Σ , representa os autovalores de MM^T , e também é verdade que

$$|S_i, :, :, :|^2 = \Sigma_i^L. \quad (2.62)$$

2.7.4 Representação por Rede de Tensores

A 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 transferência no caso unidimensional. Todos os modelos estatísticos com interações de curto alcance, como o modelo Ising, podem ser expressos como modelos de rede de tensores. Existem duas abordagens para representar a função de partição de um modelo estatístico clássico em uma forma de rede de tensores — a representação na rede original e a representação numa rede dual à original.

- **Representação na rede dual:** Esse tipo de transformação é particularmente útil se o número de coordenação da **rede dual** for menor que o número de coordenação 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 célula unitária 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.
- **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 coordenação da rede se houver apenas interações entre os sítios que sejam primeiros vizinhos [30].

Vamos então, a título de exemplo, considerar o hamiltoniano (2.1) sem campo magnético, que é escrito da seguinte forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.63)$$

A função de partição de este sistema é

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (2.64)$$

ou seja

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} \quad (2.65)$$

Representação Tensorial na rede dual

Na figura 2.17 temos uma rede quadrada, onde a cada um de seus sítios está associada uma variável de Ising $\sigma_i = \pm 1$ que interagem entre si de acordo com o hamiltoniano (2.63). A função de partição deste sistema é dada pela equação (2.65). Queremos representar esta função de partição na rede dual (a qual também é uma rede quadrada). Na parte esquerda,

os sítios da rede original são mostrados em preto e o ponto vermelho representa um ponto na rede dual que codifica os estados associados aos sítios (da rede original) em seu entorno. Na parte direita rotulamos os quatro sítios da rede original por σ_i , σ_j , σ_k e σ_l . Nesta mesma figura, indicamos também as variáveis associadas às ligações entre os sítios σ_{ij} , σ_{jk} , σ_{kl} , σ_{li} .

A função de partição (2.65) pode ser reescrita como

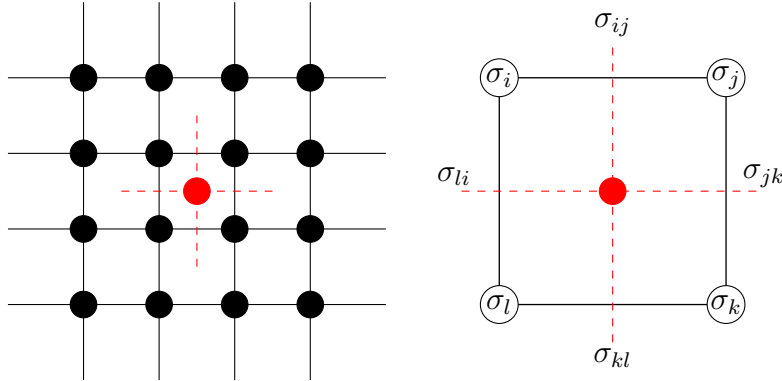


Figura 2.17: Uma célula unitária de uma rede quadrada e suas variáveis duais correspondentes.

$$Z = Tr e^{-\beta\mathcal{H}} = Tr \prod_{\square ijkl} e^{\beta J(\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_l + \sigma_l\sigma_i)/2} \quad (2.66)$$

onde Tr indica uma soma sobre todas as configurações de spin e o produto é tomado sobre todas as plaquetas de quatro spins como o destacado na figura 2.17. O fator $1/2$ é introduzido no expoente acima porque cada ligação é compartilhada por dois quadrados. Associamos agora a um par de spins interagentes, à cada ligação da rede, uma variável definida por

$$\sigma_{ij} = \sigma_i\sigma_j. \quad (2.67)$$

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

$$Z = Tr \prod_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_{ij} - \sigma_i\sigma_j) \prod_{\square ijkl} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}. \quad (2.68)$$

Em cada quadrado, o produto das quatro variáveis das arestas é igual a um

$$\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li} = \sigma_i\sigma_j\sigma_j\sigma_k\sigma_k\sigma_l\sigma_l\sigma_i = 1. \quad (2.69)$$

Este vínculo é satisfeito em cada quadrado, independentemente das variáveis de spins originais. Assim, a função delta de N componentes de (2.68) pode ser integrada. A função de partição torna-se então

$$Z = Tr_{\sigma} \prod_{\square ijkl} \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}. \quad (2.70)$$

Agora, vamos rotular os sítios da rede dual (em vermelho na figura 2.17) pelo índice p e associar a cada ligação da rede original uma ligação na rede dual que é perpendicular àquela da rede original. Com esta associação, podemos escrever

$$Z = Tr \prod_p T_{x_p y_p x'_p y'_p}, \quad (2.71)$$

$$T_{x_p y_p x'_p y'_p} = \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2}.$$

onde o traço agora é tomado sobre os índices (pernas) do tensor associado aos sítios da rede dual. Além disso,

$$x_p = \frac{3 - \sigma_{li}}{2} \quad (2.72)$$

com relações análogas para as demais pernas. Ver figura 2.18.

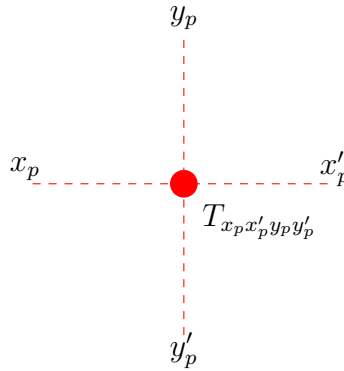


Figura 2.18: O sitio central representa T_{x_p, x'_p, y_p, y'_p} e cada perna terá um rótulo, faz a representação diagramática da contração.

Representação da rede Tensor na rede original

A função de partição (2.65) pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i, j \rangle} W(\sigma_i \sigma_j) \quad (2.73)$$

onde

$$W(\sigma_i, \sigma_j) = e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} \quad (2.74)$$

define uma matriz cujos índices de linha e coluna são σ_i e σ_j , respectivamente. Como os valores de σ_i e σ_j são ± 1 , a seguinte convenção,

$$W(1, 1) \longrightarrow W_{11},$$

$$W(1, -1) \longrightarrow W_{12},$$

$$W(-1, 1) \longrightarrow W_{21},$$

$$W(-1, -1) \longrightarrow W_{22},$$

permite escrever os elementos da matriz W na forma

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

A partir da equação (2.74), substituindo os valores de σ_i e σ_j , a matriz W para o modelo de Ising é

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

A matriz W é real e simétrica. Isto decorre da simetria do hamiltoniano (2.1) e fica evidente a partir da equação (2.74). Matriz simétrica possui autovalores reais e como veremos mais para a frente seus autovalores são positivos. Assim a matriz W é simétrica e positiva definida. Agora decompomos W em valores singulares conforme a seção 2.4,

$$W(\sigma_i, \sigma_j) = \sum_l U(\sigma_i, l) \Sigma_l V(\sigma_j, l) \quad (2.77)$$

e definido

$$Q_a(\sigma, l) = U(\sigma, l) |\Sigma_l|^{1/2} \quad (2.78)$$

e

$$Q_b(\sigma, l) = V(\sigma, l) |\Sigma_l|^{1/2} \quad (2.79)$$

expressamos a matriz W da seguinte forma

$$W = Q_a Q_b^T \quad (2.80)$$

Agrupando todos os elementos das matrizes Q 's que se conectam ao sítio i um tensor local pode ser definido somando-se sobre os estados σ_i [30],

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

a ordem do tensor é igual ao número de ligações de cada sítio da rede. Ou seja, depende da rede como na figura 2.19. A dimensão dos índices dos tensores é igual número de estados do sítios. Logo, para um modelo de Ising, é igual a dois. A representação da função de partição por uma rede de tensores

$$Z = Tr \prod_i T_{x_i, y_i, z_i, \dots}, \quad (2.82)$$

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

Na figura 2.19, observa-se duas redes, em (a) uma rede “favo de mel” com uma estrutura hexagonal formada por 6 sítios e cada sitio tem três primeiros vizinhos e em (b) uma rede quadrada. Os respectivos tensores das redes “favo de mel” e quadrada são escritos da seguinte forma

$$T_{xyz} = \sum_{\sigma_i} Q(\sigma_i, x)Q(\sigma_i, y)Q(\sigma_i, z) \quad (2.83)$$

e

$$T_{xx'yy'} = \sum_{\sigma_i} Q(\sigma_i, x)Q(\sigma_i, x')Q(\sigma_i, y)Q(\sigma_i, y'). \quad (2.84)$$

Conforme o exemplo da SVD na seção 2.4, para a matriz W positiva e simétrica, da equação (2.74), as matrizes unitárias U e V são iguais, portanto as equações (2.78) e (2.79) são iguais, ou seja, $Q_a = Q_b = Q$. Os valores singulares de $W^T W$, σ_1 e σ_2 , formarão a matriz diagonal

$$\lambda = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

com os elementos da matriz Q sendo determinados por

$$Q_{11} = U_{11}|\lambda_1|^{1/2} \quad (2.86a)$$

$$Q_{12} = U_{12}|\lambda_2|^{1/2} \quad (2.86b)$$

$$Q_{21} = U_{21}|\lambda_1|^{1/2} \quad (2.86c)$$

$$Q_{22} = U_{22}|\lambda_2|^{1/2} \quad (2.86d)$$

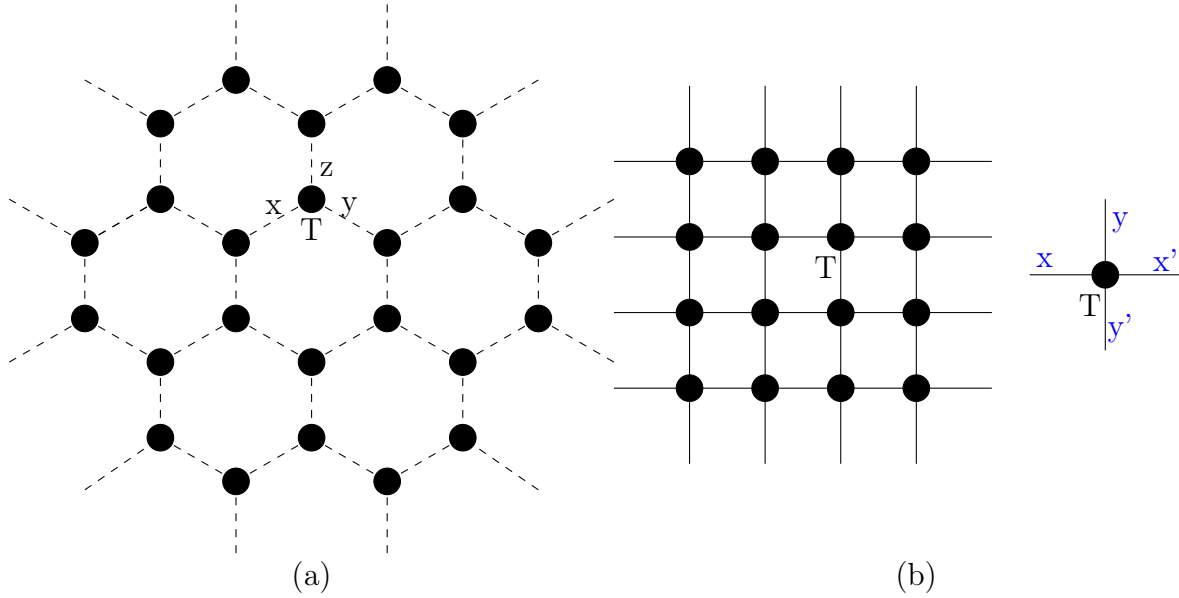


Figura 2.19: Em (a) uma rede “favo de mel” onde o tensor T é de terceira ordem, T_{xyz} . Em (b) é representada uma rede quadrada onde o tensor T é de quarta ordem $T_{xx'yy'}$.

como

$$U = V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

temos a matriz

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J)} & \sqrt{\sinh(\beta J)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J)} & -\sqrt{\sinh(\beta J)} \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

Nota após a revisão das redes duais e originais, decidiu-se trabalhar com a rede dual, pois na tentativa de implementar a rede original em Octave, surgiram alguns problemas com os subíndices que foram gerados em cada contração, devido à interação entre Segundo vizinhos, o desenvolvimento desta rede pode ser visto no apêndice A

2.7.5 Cadeia linear de Ising e rede de tensores

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

Com o hamiltoniano (2.1), os elementos da matriz W podem ser determinados da seguinte forma [30],

$$W(\sigma_i \sigma_j) = \exp\left[\beta J \sigma_i \sigma_j + \frac{\beta H}{2} (\sigma_i + \sigma_j)\right] \quad (2.89)$$

Conforme a convenção da equação (2.90), escrever a matriz W na presença do campo externo resulta em

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

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

$$W^T W = \begin{pmatrix} e^{2\beta J + 2\beta H} + e^{-2\beta J} & e^{-\beta H} + e^{\beta H} \\ e^{-\beta H} + e^{\beta H} & e^{2\beta J - 2\beta H} + e^{-2\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

os autovalores são,

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta H) \pm e^{\beta J} \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}} \quad (2.92)$$

Para facilitar o desenvolvimento, a matriz Q será escrita como

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ a & -b \end{pmatrix}. \quad (2.93)$$

Como a matriz W da equação (2.90) é simétrica, e com as equações (2.77) e (2.81), os tensores para uma dimensão são

$$T_{xx'}^i = \sum_{\sigma_i} Q_{\sigma_i x} Q_{\sigma_i x'} \quad (2.94)$$

e com a convenção anteriormente adotada

$$T_{xx'}^i = Q_{1x} Q_{1x'} + Q_{1x} Q_{1x'} \quad (2.95)$$

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

Elemento T_{11} :

$$\begin{cases} T_{11} = Q_{11} Q_{11} + Q_{21} Q_{21} \\ T_{11} = a^2 + a^2 \\ T_{11} = 2a^2 \end{cases} \quad (2.96)$$

Elemento T_{12} :

$$\begin{cases} T_{12} = Q_{11}Q_{12} + Q_{21}Q_{22} \\ T_{12} = ab + a(-b) \\ T_{12} = 0 \end{cases} \quad (2.97)$$

Elemento T_{21} :

$$\begin{cases} T_{21} = Q_{12}Q_{11} + Q_{22}Q_{21} \\ T_{21} = ba + (-b)a \\ T_{21} = 0 \end{cases} \quad (2.98)$$

Elemento T_{22} :

$$\begin{cases} T_{22} = Q_{12}Q_{12} + Q_{22}Q_{22} \\ T_{22} = b^2 + (-b)(-b) \\ T_{22} = 2b^2 \end{cases} \quad (2.99)$$

Temos a matriz T ;

$$T = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

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

$$M = \begin{pmatrix} T_{11}^2 & 0 \\ 0 & T_{22}^2 \end{pmatrix} \quad (2.101)$$

a função de partição na representação de uma rede tensorial conforme a equação (2.82)

$$Z = Tr \prod_{ij}^N T_{ij}^{(i)}, \quad (2.102)$$

onde para o produto de N tensores,

$$Z = \sum_{ij} (T_{ij})^N, \quad (2.103)$$

resulta

$$Z = Tr \begin{pmatrix} T_{11}^N & 0 \\ 0 & T_{22}^N \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

$$Z = T_{11}^N + T_{22}^N \quad (2.105)$$

ou seja

$$Z = T_{11}^N \left[1 + \left(\frac{T_{22}}{T_{11}} \right)^N \right] \quad (2.106)$$

como $T_{11} > T_{22}$, no limite $N \rightarrow \infty$

$$Z = T_{11}^N. \quad (2.107)$$

Conhecendo a função de partição em termo dos tensores da rede a energia livre é por partícula torna-se

$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z = -k_B T \ln T_{11}. \quad (2.108)$$

2.8 Antiferromagneto de Ising frustrado na rede quadrada

Como vimos anteriormente, o primeiro passo para a aplicação do grupo de renormalização na representação de rede de tensores é escrever a função de partição do sistema como a contração de uma rede na qual a cada sítio está associado um tensor translacionalmente invariante [31].

Assim vamos escrever a função de partição para o hamiltoniano 2.2, como uma rede de tensores, reescrito abaixo por conveniência.

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (2.109)$$

lembrando que a primeira soma corre sobre todos os pares de primeiros vizinhos e a segunda sobre todos os pares de segundos vizinhos.

A função de partição é dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{\sigma\})} = \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{\sigma\})} \quad (2.110)$$

Substituindo o hamiltoniano (2.109), temos

$$Z = \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{\beta J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k}. \quad (2.111)$$

Agora, dividindo a rede em blocos de quatro sítios, como anteriormente. Podemos escrever a equação (2.111) em termos de um produtório nas plaquetas indicadas na figura 2.20. Assim

$$Z = \text{Tr}_{\{\sigma\}} \prod_{\square_{ijkl}} e^{\beta J_1 [\sigma_i \sigma_l + \sigma_j \sigma_k + \sigma_i \sigma_j + \sigma_l \sigma_k + R(\sigma_i \sigma_k + \sigma_j \sigma_l)]/2}, \quad (2.112)$$

com $R = 2J_2/J_1$. Dessa forma, podemos escrever

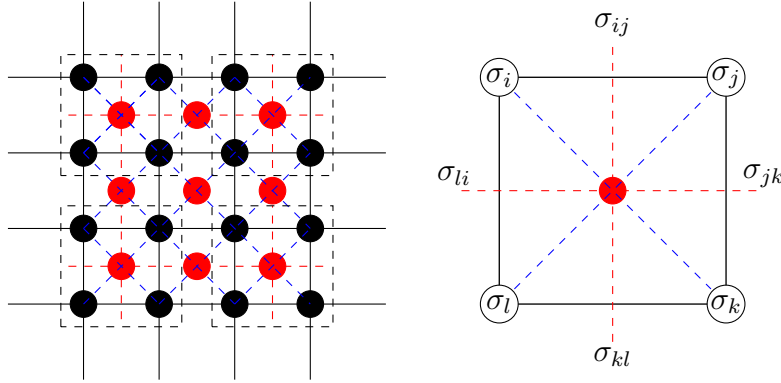


Figura 2.20: Uma célula unitária de uma rede quadrada e suas variáveis duais correspondentes apenas ao contorno.

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i}, \quad (2.113)$$

com o tensor T dado por

$$T_{x_i x'_i y_i y'_i} = e^{\beta J_1 [\sigma_i \sigma_l + \sigma_j \sigma_k + \sigma_i \sigma_j + \sigma_l \sigma_k + R(\sigma_i \sigma_k + \sigma_j \sigma_l)]/2} \quad (2.114)$$

onde $x_i = (3 - \sigma_l \sigma_i)/2, \dots$ e o traço indica a contração da rede de tensores.

É também possível representar esta função de partição na rede original. Porém, como mostrado no apêndice A, tal representação é inconveniente devido à coordenação da rede de tensores ser igual a 8.

No próximo capítulo, apresentaremos os resultados da contração da rede de tensores correspondente à função de partição (2.113) através do *Tensor Renormalization Group* (TRG), obtendo a termodinâmica do sistema assim como o diagrama de fases no plano temperatura \times razão entre os acoplamentos.

Capítulo 3

Resultados

3.1 Grandezas termodinâmicas

Na secção 2.8 mostramos como representar a função de partição do hamiltoniano (2.2) como uma rede de tensores translacionalmente invariante. Assim, a função de partição é dada por

$$Z = \text{Tr} \prod_{i=1}^N T_{x_i y_i x_i' y_i'}, \quad (3.1)$$

onde N é o número de sítios (número de graus de liberdade do sistema) da rede e T é dado por (2.114) cujos índices tem dimensão igual a 2. Por conveniência, impomos que $T_{1111} = 1$, de forma que a função de partição torna-se

$$Z = s_0^N \text{Tr} \prod_{i=1}^N T_{x_i y_i x_i' y_i'}, \quad (3.2)$$

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

Como descrito anteriormente, a rede quadrada é dividida em blocos de quatro sítios, com cada sítio pertencendo a um único bloco. Recorde figura 2.16.

A primeira etapa do processo de renormalização consiste em substituir os tensores do

bloco por outro, resultante da contração dos índices internos ao bloco em um novo tensor

$$T'_{XX'YY'} = \sum_{ijkl} T_{x_1iy_1j} T_{ix'jy'_1} T_{x_2ky_2l} T_{kx'_2ly'_2}, \quad (3.3)$$

onde $X = X(x_1, x_2)$, $Y = Y(y_1, y_2)$, $X' = X'(x'_1, x'_2)$ e $Y' = Y'(y'_1, y'_2)$. Observe a figura 3.1.

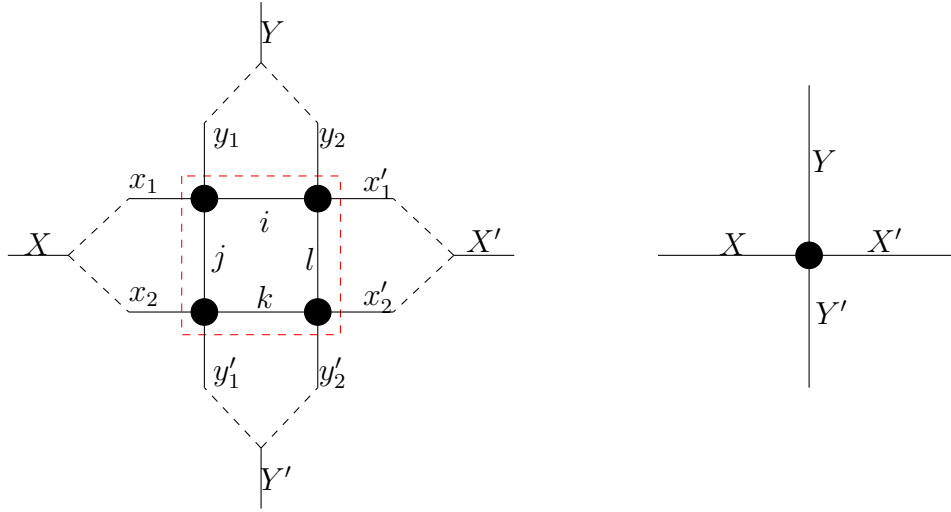


Figura 3.1: Representação diagramática da contração de um bloco de tensores na rede quadrada ao longo dos eixos x e y .

Essa transformação define um mapeamento exato entre a função de partição de N partículas para a função de partição de $N/4$ partículas em termos do tensor T'

$$Z = s_0^N \text{Tr} \prod_i^{N/4} T'_{X_i X'_i Y_i Y'_i}. \quad (3.4)$$

Observe que o produtório agora contém apenas $N/4$ termos. Porém, como os índices originais x_1 e x_2 , por exemplo, 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 iteração do processo de transformação de bloco, os elementos de tensor são normalizados. Ou seja, fazemos $s_1 = T'_{1111}$ e, em seguida, $T'_{1111} \rightarrow 1$, de forma que a função de partição do sistema torna-se

$$Z = s_0^N s_1^{N/4} \text{Tr} \prod_i^{N/4} T'_{X_i X'_i Y_i Y'_i}. \quad (3.5)$$

Após essa transformação o número de sítios é reduzido para $N/4$, porém o número de estados de cada sítio (número de elementos do tensor) passa de 2^4 para 4^4 estados. O processo pode ser iterado, em princípio, levando $T' \rightarrow T''$ e assim por diante. Denotando o tensor original T por $T^{(0)}$, T' por $T^{(1)}$, \dots , $T^{(n)}$ \dots

Note que o número de estados cresce como 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

$$Z = s_0^N s_1^{N/4} s_2^{N/16} \text{Tr} \prod_{i=1}^{N/16} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(2)}. \quad (3.6)$$

Na iteração de ordem n , podemos escrever

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

A única aproximação contida na equação (3.7) consiste no truncamento do número de estados mantidos no processo de renormalização.

A energia livre do sistema é $F = -(k_B T) \ln Z$ ou $-\beta F = \ln Z$, com $\beta = 1/k_B T$ e T a temperatura do sistema. Note que a forma de Z na equação (3.7) 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 (3.7), temos

$$f = -\frac{1}{N} \left[N \log s_0 + \frac{N}{4} \log s_1 + \dots + \frac{N}{2^{2n}} \log s_n + \log \left(\text{Tr} \prod_i^{N/2^{2n}} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(n)} \right) \right]. \quad (3.8)$$

A equação (3.8) pode ser reescrita como

$$f = -\log s_0 - \frac{1}{4} \log s_1 - \dots - \frac{1}{2^{2n}} \log s_n - \frac{1}{N} \log (Z^n). \quad (3.9)$$

onde

$$Z^{(n)} = \text{Tr} \prod_i^{N/2^{2n}} T_{X_i X'_i Y_i Y'_i}^{(n)}. \quad (3.10)$$

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

A partir da energia livre podemos fazer o cálculo da energia interna

$$u = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{f}{T} \right] \quad (3.11)$$

e depois do calor específico

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} u = -2T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{f}{T} \right] - T^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[\frac{f}{T} \right] \quad (3.12)$$

3.2 Renormalização

Como vimos na secção anterior 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 dos índices “renormalizados”. Os resultados obtidos para as funções termodinâmicas dependem de D_c , que é fixado no início do procedimento. Para alguns casos, fizemos um estudo sistemático da dependência dos resultados com a dimensão de corte D_c .

Aqui fizemos uso da HOSVD (High Order Singular Value Decomposition) para renormalizar os tensores com $D_c = 12, 16, 20$ e 24 . A manipulação dos tensores, como contração, normalização, diagonalização de matrizes e demais operações da álgebra linear, foi realizada através de um código desenvolvido em **Octave** [32], ver também apêndice B. Note que o número de estados mantidos para $D_c = 24$ é igual a 331776.

Em linhas gerais, o procedimento consiste em especificar uma temperatura T , um valor para o parâmetro de frustração R , um valor para dimensão de corte D_c e o critério de parada. O programa retorna uma lista com os valores dos fatores de escala s_0, s_1, \dots, s_C . Onde C é o número de etapas transformação de grupo de renormalização (RG) aplicadas.

A experiência mostra que após um certo número de transformações o tensor $T^{(n)}$ converge para um ponto fixo. Isso se reflete na convergência do fator de escala, s_C , que se torna

invariante pela transformação de RG, para um valor constante. Este fato implica que a série 3.9 é convergente e a energia livre por partícula é calculada por

$$f(T, R) = - \sum_{n=0}^C \frac{\log s_n}{4^n} - \frac{\log s_C}{3 \times 4^C}. \quad (3.13)$$

O número de termos da série depende de T e R , crescendo à medida que este ponto se aproxima das fronteiras de fases.

Tendo em vista que C é finito, qualquer singularidade na energia livre (3.13) estará contida no fator de escala s_C . De fato, como pode ser visto na figura 3.2, onde traçamos o fator de escala em função da temperatura para o modelo de Ising não-frustrado ($R = 0$), s_C exibe uma singularidade em torno do valor da temperatura crítica conhecida exatamente [10]. Podemos observar também que, na escala desta figura, os resultados são praticamente independentes da dimensão de corte.

Este resultado mostra que o comportamento do fator de escala indica a localização da transição de fases do sistema. Percebe-se ainda que longe da região crítica, para altas e baixas temperaturas, o fator de escala tende à valores constantes, capturando os pontos fixos triviais do modelo (pontos fixos estáveis na linguagem de grupo de renormalização no espaço real).

Na figura 3.3 mostramos o comportamento do fator de escala numa região em torno da temperatura crítica, exata

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,26918531421. \quad (3.14)$$

Nesta escala é possível observar o comportamento de s_C para as diferentes dimensões de corte. Na tabela 3.1 apresentamos nossas estimativas para a temperatura crítica a partir de diferentes valores da dimensão de corte. Vemos que as estimativas estão bem próximas do valor exato. Note que os valores para outros parâmetros de frustração também estão incluídos, que serão mostrados graficamente abaixo. Note também que a convergência não é o uniforme com o aumento de D_c .

A energia interna e calor específico são obtidos através da primeira e da segunda derivada da energia livre, conforme equações (3.11) e (3.12), respectivamente. As derivadas foram obtidas numericamente e o código empregado encontra-se no apêndice B.2. A energia interna

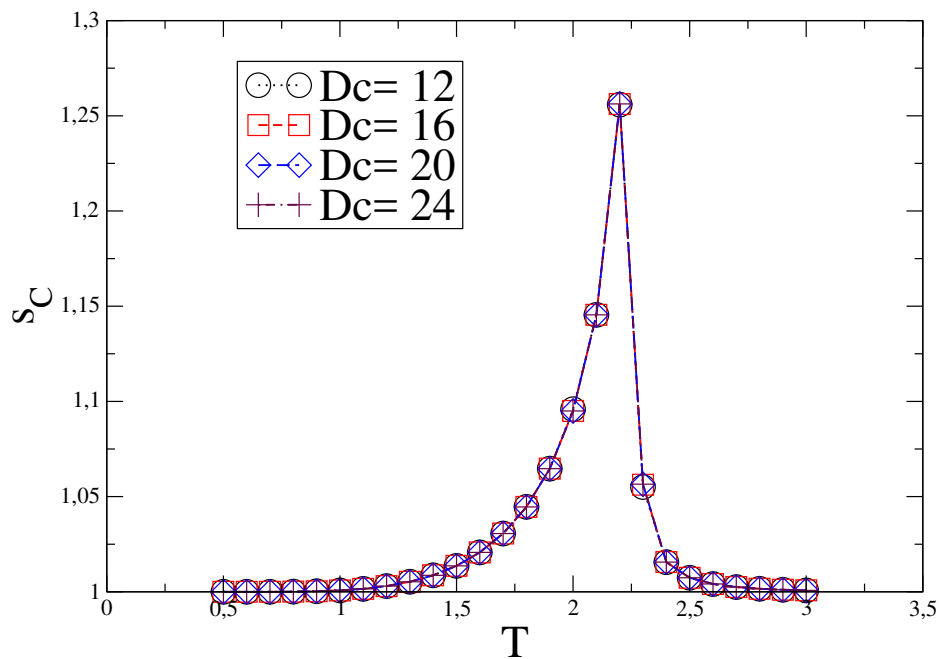


Figura 3.2: Fator de escala s_C em função da temperatura para modelo de Ising não-frustrado e vários valores da dimensão de corte D_c . O salto na curva indica a localização da transição de fases.

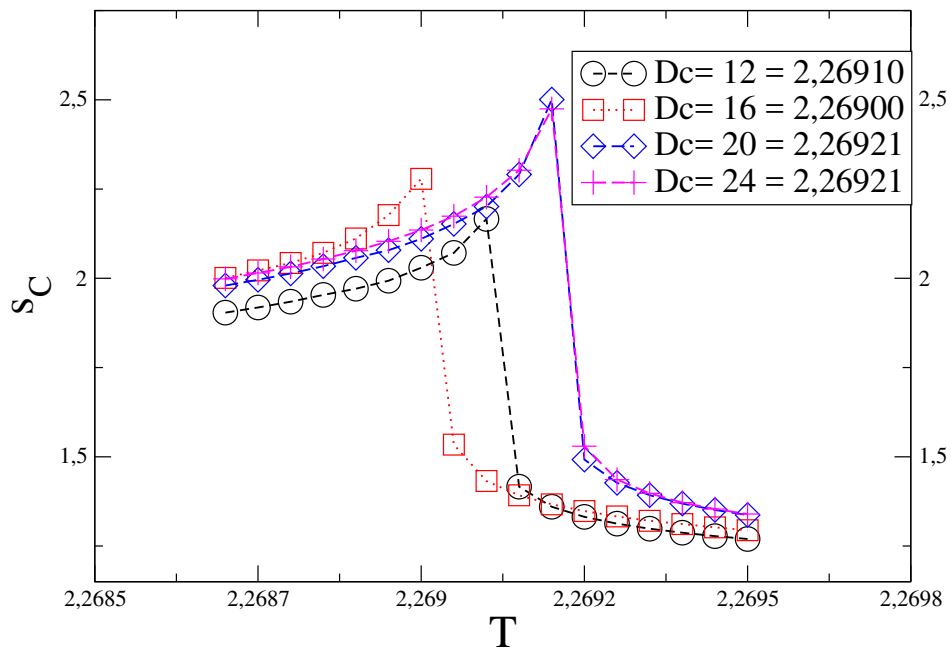


Figura 3.3: Comportamento do fator de escala para o modelo de Ising ($R = 0$) na região crítica.

Tabela 3.1: Estimativas de T_c para diferentes dimensões de corte D_c e o valor exatamente conhecido para ele parâmetro de frustração $R = 0$.

R		0	-0,1	-0,2	-0,3	-0,6	-0,7	-0,9
Ising	Teórico	2,26918	-	-	-	-	-	-
Método da rede dual	Dc 12	2,26910	1,5765	1,59599	1,47319	1,29982	1,27124	1,76601
	Dc 16	2,26900	1,62625	1,64929	1,47879	1,3351	1,39003	1,53061
	Dc 20	2,26921	1,6269	1,65249	1,48008	1,35978	1,49616	1,78596
	Dc 24	2,26921	1,62821	1,62272	2,2662	1,38201	1,51013	2,57537

para o caso em que o parâmetro de frustração é zero pode ser visto na figura 3.4. Podemos observar uma ótima concordância dentro da escala utilizada para dimensões de corte acima de 12. Esse resultado serve para um teste do código numérico do apêndice B.2 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 . Note que o comportamento da energia com a temperatura apresenta um ponto de inflexão próxima à temperatura crítica do modelo de Ising na rede quadrada.

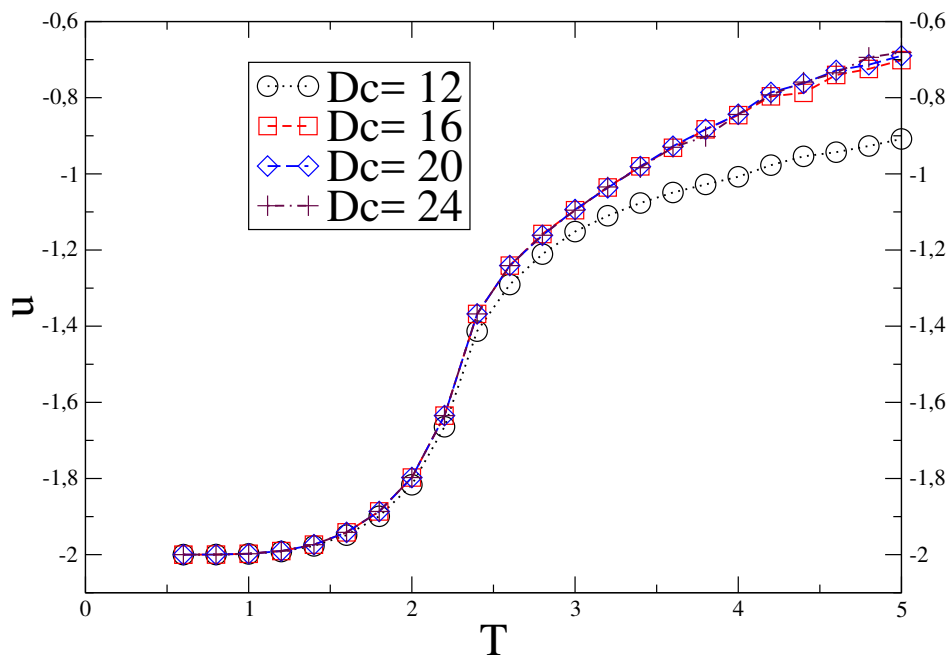


Figura 3.4: Energia Interna do Modelo de Ising ($R = 0$) em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c .

Na figura 3.5, mostramos os resultados para o calor específico para o caso $R = 0$. Podemos ver, uma concordância dentro da escala utilizada. O comportamento geral é típico do calor específico de um sistema que sofre uma transição de fases. É possível observar uma singularidade na temperatura crítica. É curioso que, para temperaturas maiores que a crítica, a uma certa dispersão dos resultados obtidos para diferentes dimensões de corte D_c .

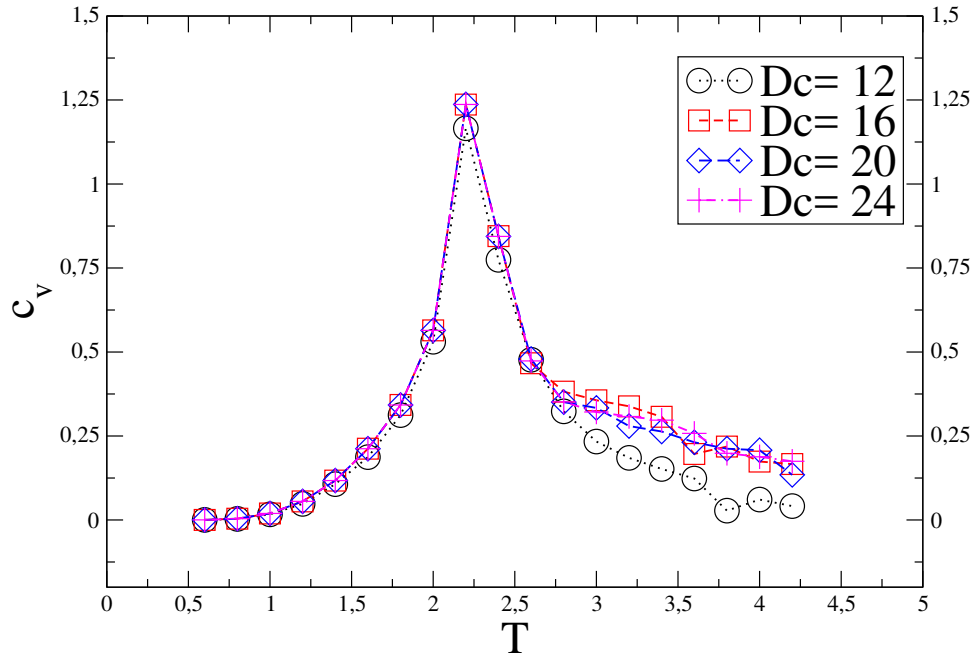


Figura 3.5: Calor Específico do modelo de Ising em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c .

Os resultados apresentados até aqui, foram para o caso do modelo de Ising com interações apenas entre primeiros vizinhos uma vez que assumimos um valor nulo para o parâmetro de frustração.

Vamos agora olhar o comportamento do sistema no caso da rede quadrada frustrada. Vamos, portanto, estudar 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 $R < -1/2$ e o caso $R > -1/2$.

Para $R \in (-1/2, 0]$ a temperatura de transição, $T_C(R)$, em função do parâmetro de frustração deve crescer a partir de zero até o valor 2,26918.

Na figura 3.6, mostramos o comportamento do fator de escala em função da temperatura para $R = -0.1$. Note que $s_C(R = -0.1)$ apresenta uma singularidade em $T \approx 1,94$, indicando uma transição de fases em torno desta temperatura. Nesse caso, a transição é de um ordenamento de Néel para uma fase paramagnética. nós também calculamos a energia interna contra a temperatura e o calor específico contra a temperatura para dois parâmetros de frustração $R = -0,1$ e $R = -0,9$ como visto nos gráficos de energia interna 3.7, 3.14 e no calor específico 3.8, 3.15 respectivamente.

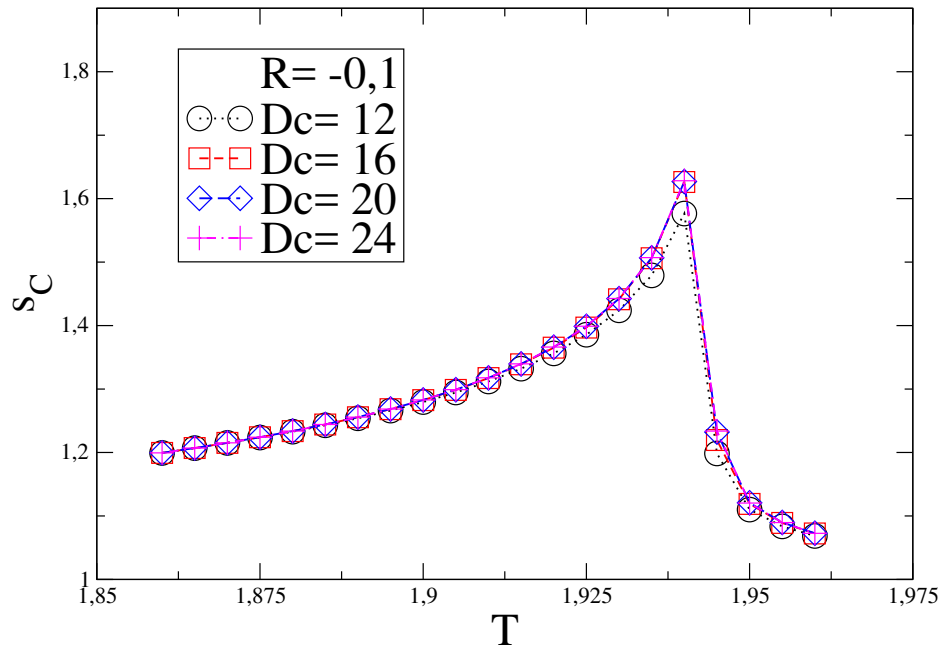


Figura 3.6: Fator de escala em função da temperatura para $R = -0,1$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

Comportamento similar se observa para $R = -0,2$ e $R = -0,3$ como pode ser visto nas figuras 3.9 e 3.10, respectivamente. Note que, como seria esperado, a temperatura de transição diminui à medida que $R \rightarrow -1/2$ pela direita. Note em particular, o aumento acentuado de $s_C(R = -0.3)$ para $D_c = 24$ em comparação às outras dimensões de corte. Ver figura 3.10.

Analisemos agora como $T_C(R)$ se comporta para $R < -1/2$. Nas figuras 3.11, 3.12 e 3.13 mostramos o fator de escala em função da temperatura para $R = -0,6; -0,7$ e $-0,9$, respectivamente. Também observamos um comportamento singular de $s_C(T, R)$ em

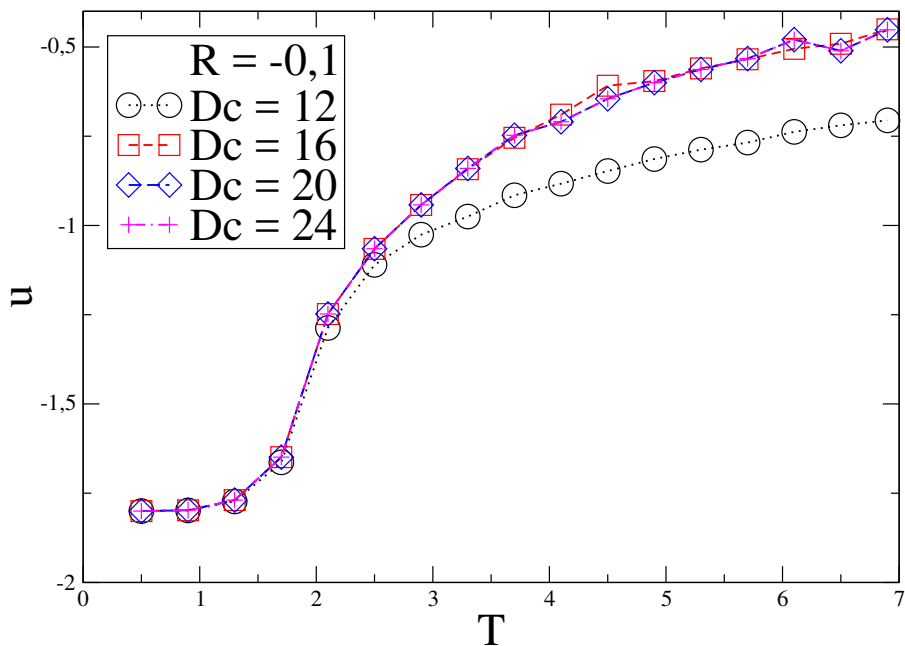


Figura 3.7: Energia Interna em função da temperatura para ($R = -0,1$) vários valores da dimensão de corte D_c .

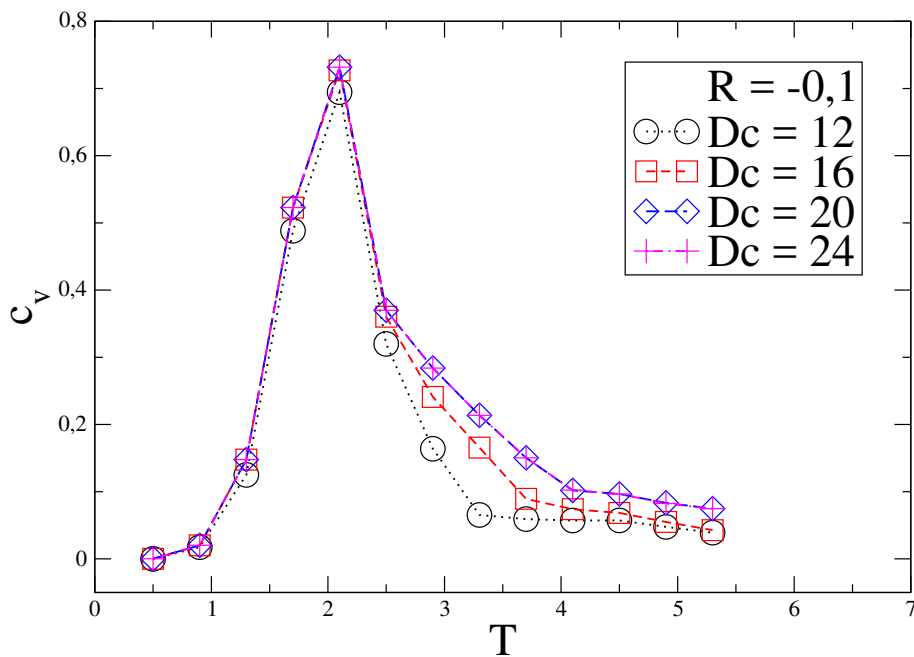


Figura 3.8: Calor Específico do parâmetro de frustração $R = -0,1$ em função da temperatura para vários valores da dimensão de corte D_c .

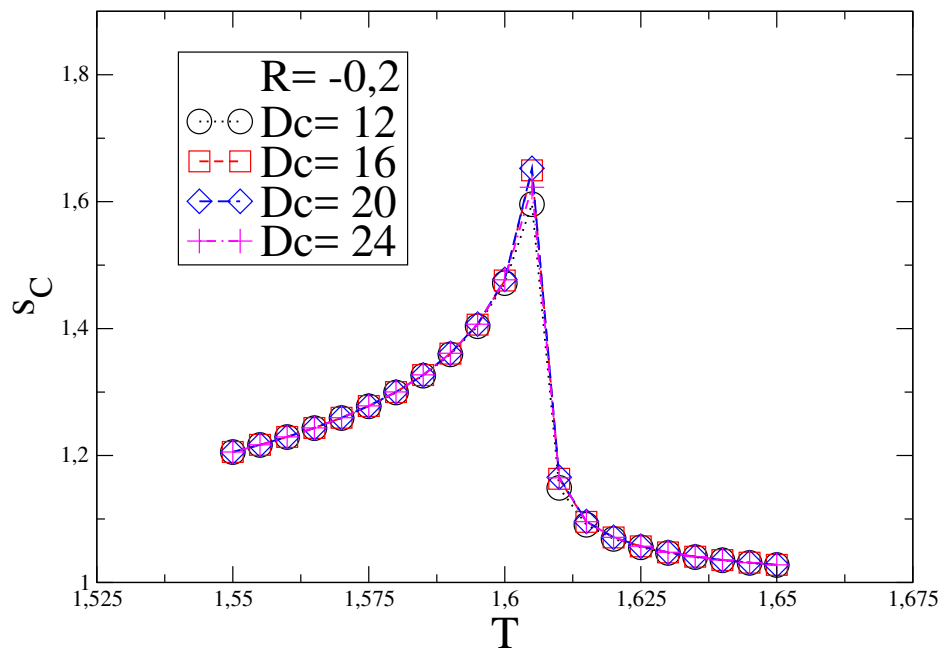


Figura 3.9: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,2$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

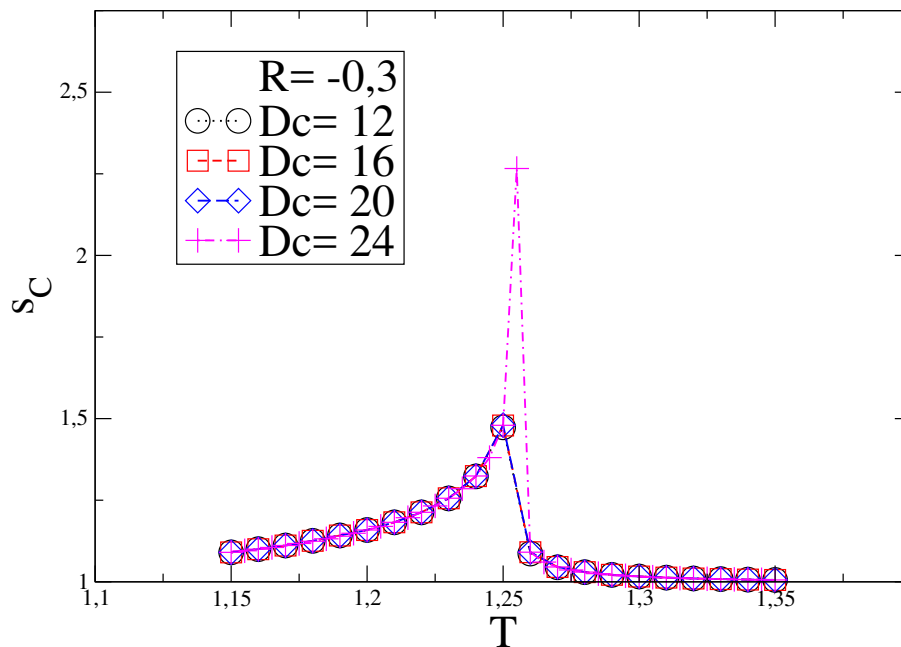


Figura 3.10: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,3$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

torno de uma certa temperatura para R fixo. Esta singularidade sinaliza a transição de fases. Aqui, com $R < -1/2$, a transição é do estado superantiferromagnético para o estado paramagnético. Note que, nesse caso, a temperatura de transição aumenta à medida que R se torna mais negativo.

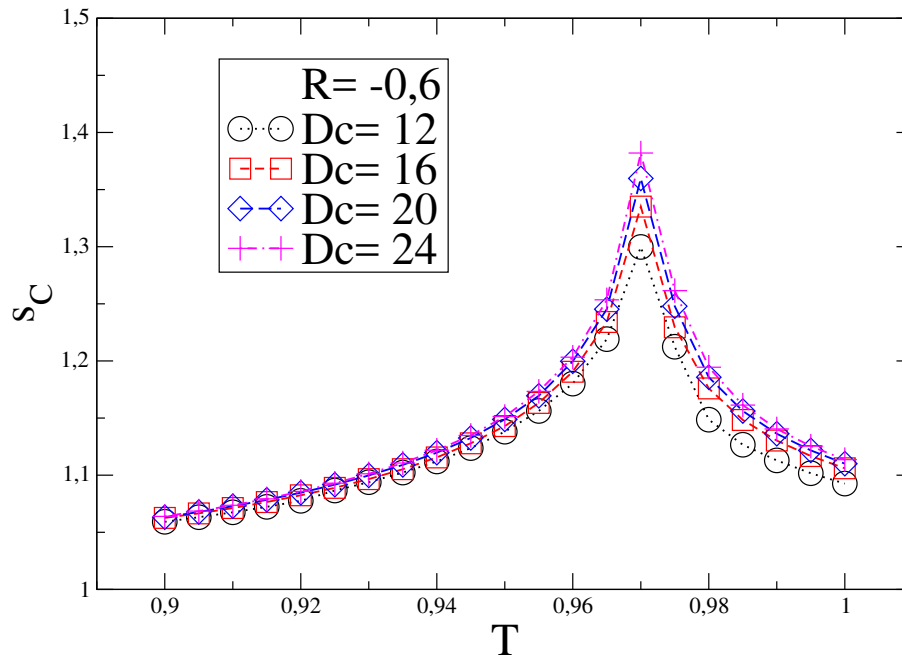


Figura 3.11: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,6$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

Na figura 3.16 mostramos o comportamento do fator de escala, s_C , em função da temperatura para vários valores do parâmetro de frustração R . Podemos observar que, para valores maiores que $R = -1/2$, quanto maior o valor, maior a temperatura crítica; Enquanto que para valores menores $R = -1/2$, quanto menor o respeito de R , maior será a sua temperatura crítica.

Desta forma, podemos fazer gráfico da temperatura contra o parâmetro de frustração, como pode ver no gráfico 3.17.

Embora o procedimento ilustrado acima seja adequado para se determinar a temperatura de transição, ele não é o mais eficiente. Estamos interessados em determinar o ponto, no plano $T \times R$, no qual o fator de escala apresenta um máximo ou uma descontinuidade. Esse ponto pode ser localizado através de um algoritmo tipo bisseção que economiza tempo com-

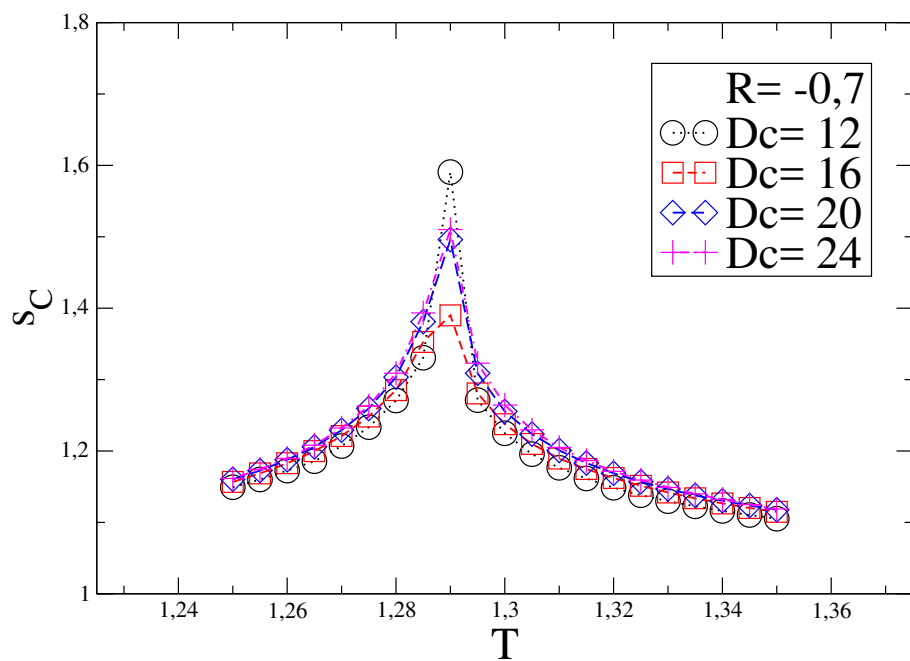


Figura 3.12: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,7$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

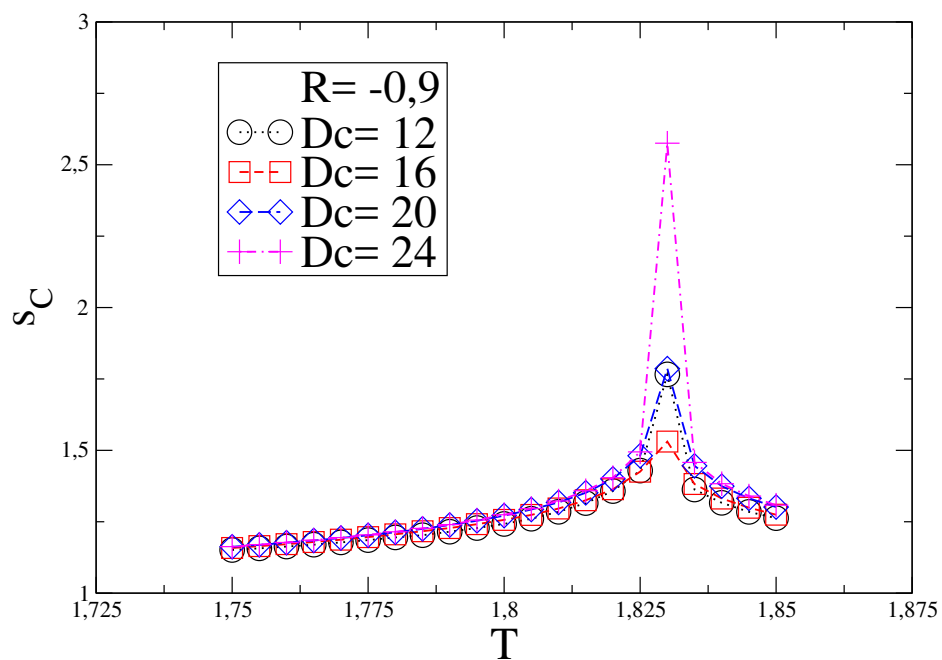


Figura 3.13: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

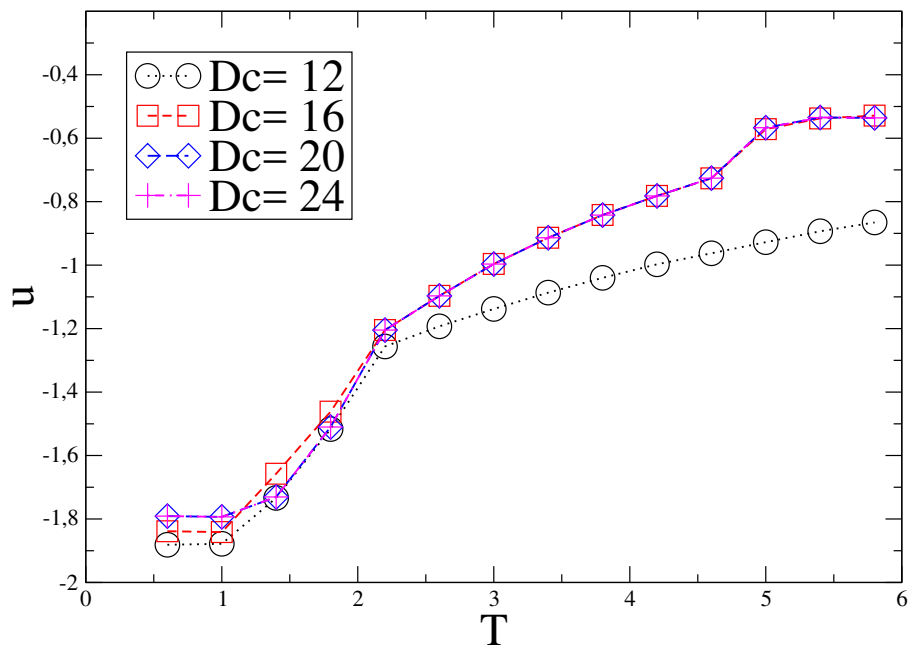


Figura 3.14: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

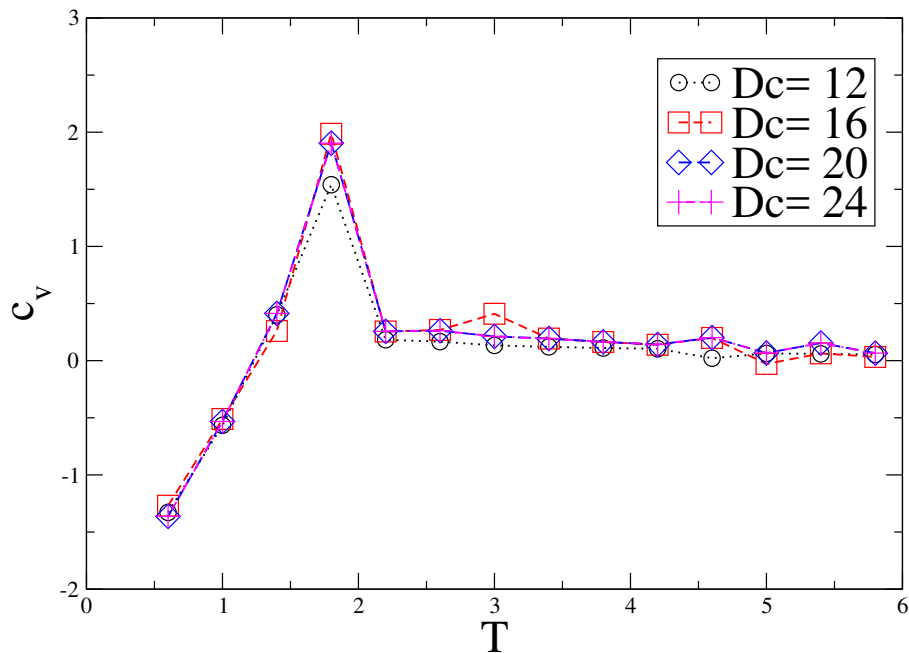


Figura 3.15: Fator de escala em função da temperatura para valor de $R = -0,9$ e vários valores da dimensão de corte D_c .

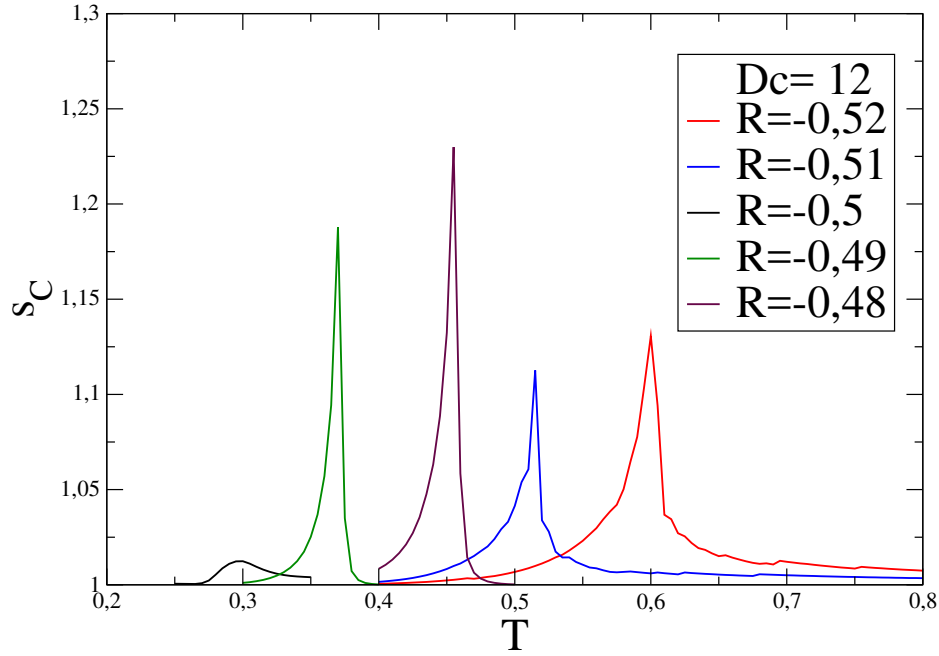


Figura 3.16: Fator de escala em função da temperatura para valores de R em uma dimensão de corte $D_c = 12$.

putacional uma vez que faz muito menos avaliação da grandeza $s_C(T, R)$. Aqui empregamos a estratégia conhecida como *golden search*. Conforme os códigos mostrados no apêndice B.3 e B.6.

Assim, variamos o parâmetro de frustração, R , no intervalo $[-1.25, 0]$ e o programa descrito no apêndice B.3 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 acima descrita, obtivemos os valores para as temperaturas críticas em função de R . O resultado está sumarizado na figura 3.17, onde apresentamos o diagrama de fases do antiferromagneto frustrado na rede quadrada.

Nesta figura, apresentamos a dependência da temperatura crítica em um função do parâmetro de frustração R . A partir desse diagrama, vemos que as diferentes fases fundem-se no ponto $R = J_2/|J_1| = -1/2$. A linha a direita desse ponto separa a fase paramagnética

do fase de Néel, enquanto que a linha a esquerda desse ponto separa fase paramagnética da fase superparamagnética. Note que os resultados para $T_C(R)$ mostram uma dependência fraca com o valor da dimensão de corte D_C .

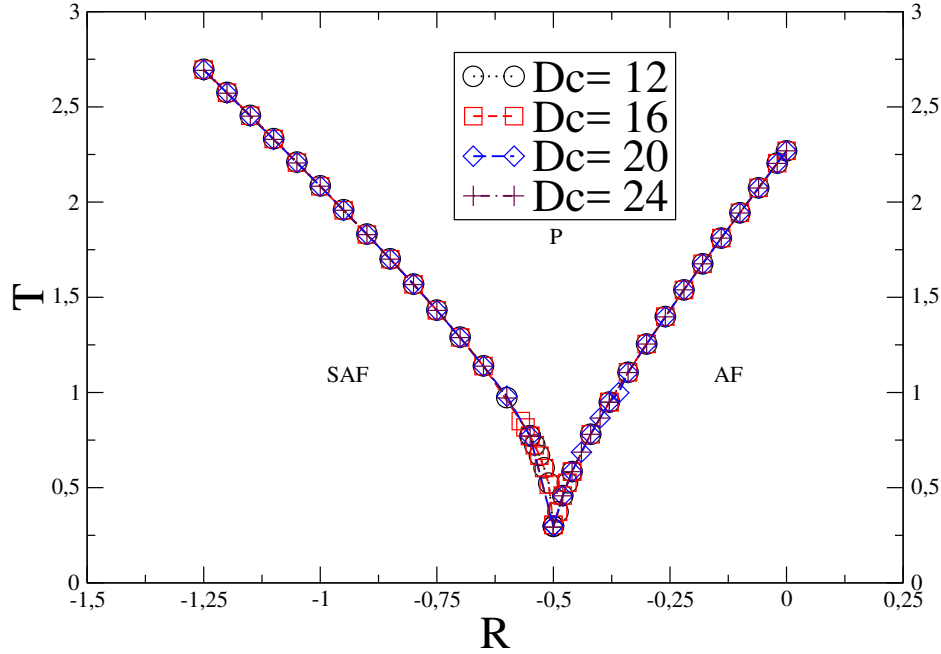


Figura 3.17: Diagrama de fases do modelo de Ising frustrado, no plano temperatura \times parâmetro de frustração. Resultados são apresentados para vários valores da dimensão de corte D_c . *SAF* indica um ordenamento superantiferromagnético, *P* uma fase paramagnética e *AF* o estado de Néel.

Depois de levantar o diagrama de fases procuramos fazer uma comparação com o método usado no artigo [1], utilizando dados para os quais eles tem resultados e fazer uma comparação com o método empregado em nossa dissertação “Representação Tensorial na rede dual”, a continuação mostraremos os valores que eles conseguiram para ele parâmetro de frustração $R = 0$ para cada um de as configurações 2, 4, 6 e 9 spins empregadas junto com ele valor obtido para a dimensão de corte $D_c = 16$ e o valor exato como se pode ver na tabela 3.2, podemos ver que se tem dois nomes para a temperatura T_t e T_c que para efeitos práticos são iguais .

Em la tabela 3.3 observamos os valores de diferentes parâmetros de frustração R para cada uma das configurações e comparamos cada um de isso valores para a dimensão de corte

Tabela 3.2: Temos os valores obtidos para a temperatura crítica T_c de transição para o parâmetro de frustração $R = 0$, junto com o valor exato para o modelo de Ising.

R	$T_t(0)$				$T_c(0)$	Ising
	A. Bobák [1], cluster				Rede Dual	
	2	4	6	9	$D_c = 16$	
0	3,0250	2,9197	2,8759	2,81852	2,26900	2,26918

$D_c = 16$, onde fizemos $T_c = T_t$ para trabalhar apenas a mesma variável

Tabela 3.3: Temos diferentes parâmetros de frustração para o método usado no artigo [1] e cada valor é comparado em relação à Representação Tensorial na rede dual com dimensão de corte $D_c = 16$.

R	$T_t(R)$			$T_t(R)/T_t(0)$	
	A. Bobák [1]		Rede Dual	A. Bobák [1]	Rede Dual
	cluster		$D_c = 16$	cluster	$D_c = 16$
-0,2973	2	1,3720	1,26387	0,45355	0,55701
-0,3070	4	1,3066	1,22881	0,44751	0,54156
-0,3240	6	1,2329	1,16495	0,42870	0,51342
-0,3340	9	1,1894	1,12904	0,42199	0,49759
-1,1098	2	2,7178	2,35387	0,89844	1,03740
-1,0387	4	2,4620	2,17873	0,84323	0,96021
-0,9748	9	2,2565	2,0195	0,80060	0,89003

Conclusão

Nesta dissertação, realizamos um estudo de uma generalização do modelo de Ising numa rede quadrada. No modelo aqui investigado, além das interações usuais entre os primeiros vizinhos há interações também entre 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. De fato, esta é a forma mais simples de introduzir frustração na rede quadrada.

Devido a frustração, o estado fundamental do sistema depende da razão entre a constante de acoplamento entre os pares de segundos vizinhos pelo módulo da constante de acoplamento entre os primeiros vizinhos — o parâmetro de frustração. Assim, para o valor do parâmetro de frustração menor que $-1/2$ o ordenamento consiste numa ordem ferromagnética ao longo das linhas, porém linhas vizinhas estão antiferromagneticamente ordenadas. Por outro lado, para o parâmetro de frustração no intervalo $(-1/2, 0]$ o ordenamento do estado fundamental é o estado de Néel.

O diagrama de fases, no plano temperatura \times parâmetro de frustração, foi obtido através do grupo de renormalização na representação de redes de tensores. Nossos resultados concordam com resultados recentemente publicados na literatura especializada [1]. Porém, aqui nós não calculamos os expoentes críticos nem procuramos identificar a ordem das transições de fases. Tal estudo é necessário e é nossa intenção continuar a investigação nessa direção.

Apêndice A

Tensor

Na figura A.1 esquerda temos uma rede quadrada na qual as linhas pretas representam la ligação entre os primeiros vizinhos as linhas tracejadas vermelha e azul mostram as ligações entre segundos vizinhos, na parte direita se mostra como ficaria depois de fazer as contrações em os dois eixes x e y , isso ficara mais claro na figura A.2, onde cada bloco es representado por um quadrado verde como se pode ver em la parte esquerda, em la parte direita temos ele resultado depois de fazer as contrações.

Em cada sítio da rede associamos um spin, portanto esse bloco formado por quatro sítios é rotulado como *bloco de spins* [33]. de forma geral, uma rede de tensores é equivalente a uma rede de sítios. Os quatro tensores para cada bloco. A ordem do tensor em uma rede de tensores depende do número de ligação com os primeiros e segundos vizinhos. Para uma rede quadrada com N sítios o tensor é de sexta ordem, pois há quatro ligações entre o tensor e os seus primeiros vizinhos e dous ligações entre o tensor e os seus segundos vizinhos. Cada ligação é um índice do tensor. O tensor obtido a partir da contração dos índices comuns entre os tensores internos ao bloco define uma expressão exata para a função de partição, conforme a equação (2.82). a cada renormalização la rede se reduz de $N/4$ o número de tensores, mas a função de partição $Z(N)$, continuará sendo idêntica a função de partição $Z(N/4)$ da nova rede $N/4$. Para uma rede quadrada, conforme la figura A.1, a função de partição é escrita da seguinte forma

$$Z = Tr \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i z_i z'_i w_i w'_i} \quad (\text{A.1})$$

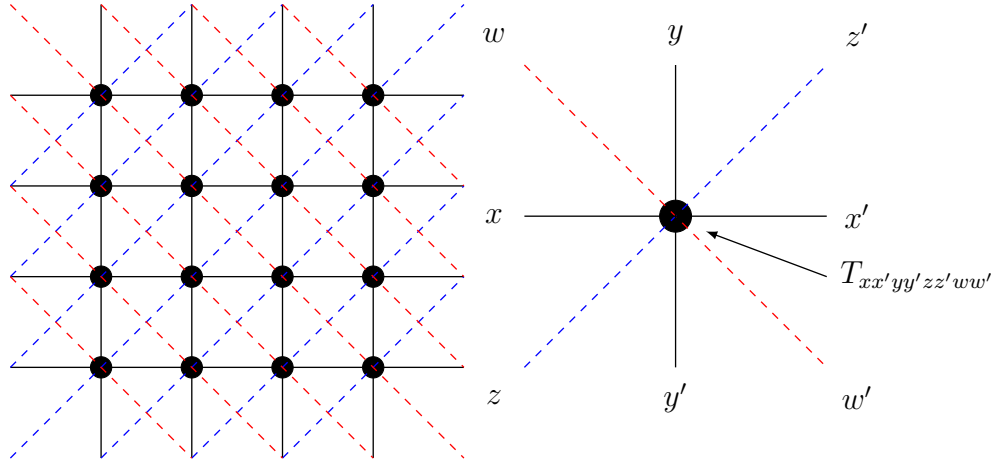


Figura A.1: Rede Quadrada, cada sítio representa um tensor. O número de ligações entre um tensor e os vizinhos determina a ordem do tensor. Para a rede quadrada cada sítio possui quatro vizinhos mais próximos, há duas ligações horizontais e las duas verticais, temos outras duas ligações em las diagonais. Cada ligação é um índice do tensor T . Os índices são rotulados como $x, x', y, y', z, z', w, w'$.

Nós temos que ele hamiltoniano que representa nosso sistema esta dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\sigma) = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k \quad (\text{A.2})$$

fazendo uso de la equação (2.6), temos nossa nova função de partição

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} e^{\beta J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} \sum_{\sigma} e^{\beta J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k} \\ Z &= \sum_{\sigma} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta J_1 \sigma_i \sigma_j} \prod_{\langle i,k \rangle} e^{\beta J_2 \sigma_i \sigma_k} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Rede Tensor na rede original

Nesta figura A.3 pretendemos mostrar a forma em que os índices aumentam com cada contração que se faz em um bloco, vamos tomar X que tem dependência de w, x_1, x_2 e z , ficando da forma $X(w, x_1, x_2, z)$, $X'(z', x'_1, x'_2, w')$, $Y(w, y_1, y_2, z')$, $Y'(z, y'_1, y'_2, w')$, isso ainda sim fazer as contrações com os índices internos com primeiros e segundos vizinhos, os

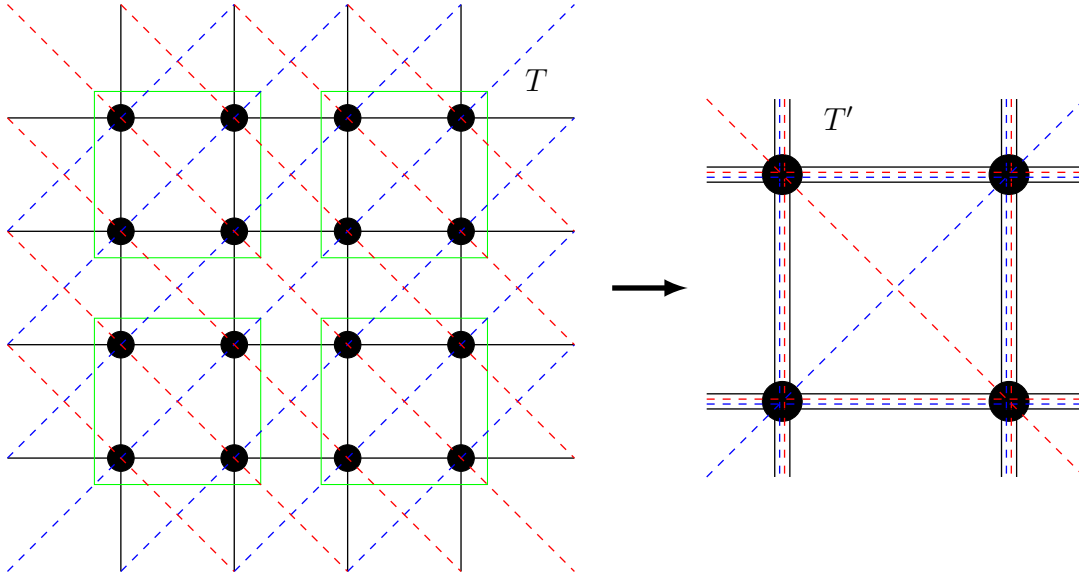


Figura A.2: Os sítios da rede quadrada são representados por bolas pretas. A rede quadrada é dividida em blocos de spins, cada bloco encontra-se dentro do quadrado verde. As bolas à direita são os tensores renormalizados.

primeiros vizinhos esta representados por as linhas solidas e segundos vizinhos com linhas tracejadas.

O traço da função de partição é uma suma sobre todos os índices, igualmente a que se faz em la seção 2.7.4 para calcular la matriz Q equação (2.54), sou que agora temos duas matrizes que são Q e P

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J_1)} & \sqrt{\sinh(\beta J_1)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J_1)} & -\sqrt{\sinh(\beta J_1)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

$$P = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J_2)} & \sqrt{\sinh(\beta J_2)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J_2)} & -\sqrt{\sinh(\beta J_2)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

e regravando la equação (2.50), temos os elementos do tensor local T definidos em cada sítio da rede como

$$T_{xx'yy'zz'ww'} = \sum_{\sigma} Q(\sigma, x)Q(\sigma, x')Q(\sigma, y)Q(\sigma, y')P(\sigma, z)P(\sigma, z')P(\sigma, w)Q(\sigma, w'). \quad (\text{A.6})$$

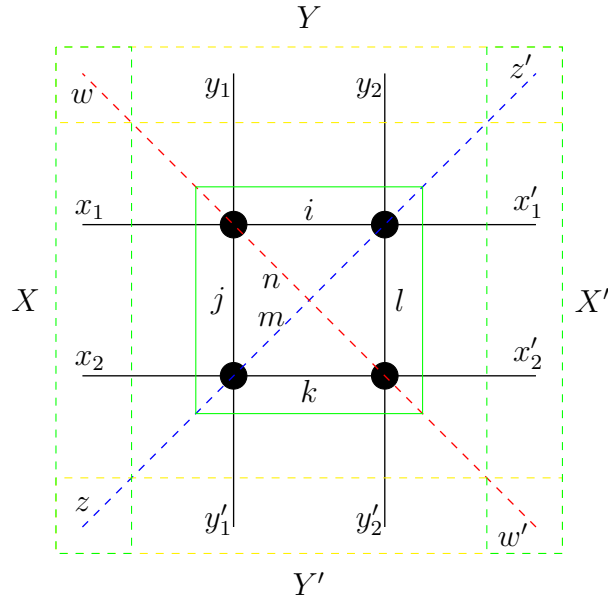


Figura A.3: Bloco de spins com quatro sítios. Cada sítio possui quatro ligações com os primeiro e dois com os segundo vizinhos.

A matrizes Q e P em equações (A.4) e (A.5), com $\beta J_1 = \alpha_1$ e $\beta J_2 = \alpha_2$, torna-se

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\alpha_1)} & \sqrt{\sinh(\alpha_1)} \\ \sqrt{\cosh(\alpha_1)} & -\sqrt{\sinh(\alpha_1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_1 \\ \delta_1 & -\gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$P = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\alpha_2)} & \sqrt{\sinh(\alpha_2)} \\ \sqrt{\cosh(\alpha_2)} & -\sqrt{\sinh(\alpha_2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_2 & \gamma_2 \\ \delta_2 & -\gamma_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

Onde α é o inverso da temperatura, $\alpha = 1/T$. Cada um dos índices pode assumir dois valores, gerando 256 elementos para o tensor inicial. Os índices são rotulados como 0 ou 1, vamos explicitar três desses elementos, que são escritos da seguinte forma

$$\begin{aligned} T_{00000000} &= \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} P_{S0} P_{S0} P_{S0} P_{S0} \Rightarrow T_{00000000} = \sum_S Q_{S0}^4 P_{S0}^4 \\ &\Rightarrow T_{00000000} = Q_{00}^4 P_{00}^4 + Q_{10}^4 P_{10}^4 \end{aligned}$$

que resulta em,

$$T_{00000000} = 2 \cosh^2 \alpha_1 \cosh^2 \alpha_2.$$

$$T_{00000001} = \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} P_{S0} P_{S0} P_{S0} P_{S1} \Rightarrow T_{00000001} = \sum_S Q_{S0}^4 P_{S0}^3 P_{S1}$$

$$\Rightarrow T_{00000001} = Q_{00}^4 P_{00}^3 P_{S1} + Q_{10}^4 P_{10}^3 P_{11}$$

que resulta em,

$$T_{00000001} = 0.$$

$$T_{00000011} = \sum_S Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} Q_{S0} P_{S0} P_{S0} P_{S1} P_{S1} \Rightarrow T_{00000011} = \sum_S Q_{S0}^4 P_{S0}^2 P_{S1}^2$$

$$\Rightarrow T_{00000011} = Q_{00}^4 P_{00}^2 P_{01}^2 + Q_{10}^4 P_{10}^2 P_{11}^2$$

que resulta em,

$$T_{00000011} = 2 \cosh^2 \alpha_1 \cosh \alpha_2 \sinh \alpha_2.$$

Seguindo a mesma regra, calcula-se todos os outros. Uma maneira de encontrar os elementos do tensor não-nulo é,

$$[1 + (-1)^{8-n-m}] \delta_1^n \delta_2^m \gamma_1^{4-n} \gamma_2^{4-m} \quad (\text{A.9})$$

com m e n variando de zero a quatro, onde m e n de la mesma paridade o elemento de tensor é não-nulo, si m e n são de paridade distintas o elemento de tensor é nulo. resultando em 13 valores diferentes entre si que compõem ele tensor. Considerando primeiro elemento do tensor como um fator de escala, ou seja,

$$\alpha_0 = T_{00000000} \quad (\text{A.10})$$

podemos normalizar todos os outros, de modo que $T_{00000000} = 1$.

Percebe-se que inicialmente há seis valores distintos entre todos os elementos del tensor, $\{0, 1, \tanh \alpha_2 \tanh \alpha_1, \tanh^2 \alpha_2 \sqrt{\tanh \alpha_1}, \tanh^2 \alpha_1 \sqrt{\tanh \alpha_2}, \tanh^2 \alpha_1 \tanh^2 \alpha_2\}$. Após o cálculo dos novos de tensor haverá cento e vinte e oito elementos nulos, impomos novamente que o primeiro elemento do tensor seja igual a 1, atreves de uma normalização e com essa imposição temos um novo fator de escala, ou seja, a cada renormalização temos

$$\alpha_1 = T'_{00000000} \quad (\text{A.11})$$

onde $T'_{00000000}$ é o primeiro elemento do tensor renormalizado.

A figura A.3 mostra um bloco de quatro spins da rede original e suas respectivas pernas. A primeira etapa do processo de renormalização consiste em substituir os tensores do bloco por outro, resultante da contração dos índices internos ao bloco. A soma sobre todos os estados resulta em um tensor de oitavo ordem $T'_{XX'YY'ZZ'WW'}$, onde cada índice assume, agora, oito valores [33],

$$T'_{X(x_1,x_2)X'(x'_1,x'_2)Y(y_1,y_2)Y'(y'_1,y'_2)} = \sum_{i,k,j,l,m,n} T_{x_1iy_1j} T'_{ix'_1y_2l} T_{x_2kjy'_1} T_{kx'_2ly'_2} T_{zmn} T_{mz'nw'} \quad (\text{A.12})$$

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

$$Z = \alpha_0^N \text{Tr} \prod_i^{N/4} T'_{XX'YY'} \quad (\text{A.13})$$

O fator α_0 aparece devido à normalização. Observe, ainda, que o reprodutório agora contém apenas $N/4$ termos, porém o número de estados de cada sítio passa de 2 para 16 estados. A cada transformação o número de iterações. Ou seja, o número de sítios é reduzido de $1/4$. Enquanto que o número de estados cresce como 2^{2n} , onde n é o número de iterações. Ou seja, o número de estados em cada sítio se prolifera exponencialmente tornando o procedimento impraticável. Uma forma de impedir o crescimento de limites do número de estados é através de uma “renormalização” do tensor associado ao bloco. Tal renormalização pode ser realizada do número de estados do tensor associado ao bloco.

Escolhendo a representação, $X(0,0) = 1$, $X(1,1) = 2$, $X(1,0) = 3$, $X(0,1) = 4$ [33], para os índices do tensor do bloco e denotado por M em uma iteração, a HOSVD envolve a diagonalização da matriz G .

$$G_{XX'YY'ZZ'WW'} = \sum T'_{x_ix'_iy_iz'_iy_iw_iw'_i} \quad (\text{A.14})$$

O próximo passo é obter a matriz G que deve ser formada a partir das iterações, onde a matriz G é 16×16 , quando passamos de 2 a 16 estados após a contração, o tensor inicial acaba por ser 256 valores, ao tentar calcular isso, temos $2^{20} = 1048576$ termos, portanto, nossos recursos computacionais são curtos, por isso, vamos usar os recursos de um programa como Octave, para poder fazer os cálculos de forma numérica. Ainda assim tem probabilidade de não conseguir chegar os resultados por causa da complexidade que gerar ele aumento crescente dois subíndices.

Apêndice B

Codigos Octave

B.1 Calculo Diagrama de Fase

```
1     for Dc=16:4:20
2         Ratio=0.0;
3         Temp = 2.2687:0.00005:2.2695;
4         DriveTRG(Temp, Ratio ,Dc);
5     end
```

B.2 Calculo Energia e Calor Especifico

```
1     Ratio=0.0;
2     h=0.4;
3     for Dc = 12:4:20 %Dc=8;
4         c = num2str(Dc);
5         Ra = num2str(Ratio);
6         C = '_Dc=';
7         name='Ratio=';
8         ext='.dat';
9         names= datestr(now);
10        oldFolder = cd('Deriv');
11        fid = fopen(strcat(name,Ra,C,c,'_',names,ext),'w');
12        cd(oldFolder);
13        for Temp=0.6:0.8:10
14            [f_prime_x0,f_second_x0] = dfridr(Temp, Ratio ,h,Dc);
15            fprintf(fid, '%g_%g_%g\n',Temp,f_prime_x0,f_second_x0);
16        end
```

```
17     fclose(fid);
18     end
```

B.3 Calculo Ponto Máximo do Diagrama de Fase

```
1     for x =1:1:2;
2         names= datestr(now);
3         ext='.dat';
4         Dc=20;
5         a=0.0;
6         b=3.0;
7         c = num2str(Dc);
8         aa = num2str(a);
9         bb = num2str(b);
10        oldFolder = cd('Maximo');
11        [fid , texto]=fopen(strcat('Dc=',c,'_', 'Rango_=' , aa, '—',bb,'_',names , ext), 'w');
12        cd(oldFolder);
13        switch x
14            case 1
15                for Ratio=-0.5:0.05:0.0
16                    p = gss(a,b,Ratio,Dc);
17                    fprintf(fid, '%g_%g\n', Ratio, p);
18                end
19                fclose(fid);
20            case 2
21                for Ratio=-1.25:0.051:-0.5
22                    p = gss(a,b,Ratio,Dc);
23                    fprintf(fid, '%g_%g\n', Ratio, p);
24                end
25                fclose(fid);
26        end
27    end
```

B.4 dfridr

```
1     function [f_prime_x0,f_second_x0] = dfridr(Temp,Ratio,h,Dc)
2     CON = 1.4;
3     CON2 = CON*CON;
4     BIG = 1.0e30;
5     NTAB = 10;
```

```
6     SAFE = 2.0;
7     a = zeros(NTAB,NTAB);
8     b = zeros(NTAB,NTAB);
9     hh=h;
10    [n,s,t] = trg(Temp,Ratio,Dc);
11    g = log(s(1));
12    f = 0.25;
13    for j=2:n
14        g = g + f*log(s(j));
15        f = 0.25*f;
16    end
17    [n,s,t] = trg(Temp+hh,Ratio,Dc);
18    gp = log(s(1));
19    f = 0.25;
20    for j=2:n
21        gp = gp + f*log(s(j));
22        f = 0.25*f;
23    end
24    [n,s,t] = trg(Temp-hh,Ratio,Dc);
25    gm = log(s(1));
26    f = 0.25;
27    for j=2:n
28        gm = gm + f*log(s(j));
29        f = 0.25*f;
30    end
31    a(1,1)=(gp-gm)/(2.0*hh);
32    b(1,1)=(gp-2.0*g+gm)/hh/hh;
33    err=BIG;
34    r = 0;
35    for i=2:NTAB
36        hh = hh/CON;
37        [n,s,t] = trg(Temp,Ratio,Dc);
38        g = log(s(1));
39        f = 0.25;
40        for j=2:n
41            g = g + f*log(s(j));
42            f = 0.25*f;
43        end
44        [n,s,t] = trg(Temp+hh,Ratio,Dc);
45        gp = log(s(1));
46        f = 0.25;
47        for j=2:n
48            gp = gp + f*log(s(j));
49            f = 0.25*f;
50        end
51        [n,s,t] = trg(Temp-hh,Ratio,Dc);
```



```

52     gm = log(s(1));
53     f = 0.25;
54     for j=2:n
55         gm = gm + f*log(s(j));
56         f = 0.25*f;
57     end
58     a(1,i)=(gp-gm)/(2.0*hh);
59     b(1,i)=(gp-2.0*g+gm)/hh/hh;
60     fac=CON2;
61     for j=2:i
62         a(j,i)=(a(j-1,i)*fac-a(j-1,i-1))/(fac-1.0);
63         b(j,i)=(b(j-1,i)*fac-b(j-1,i-1))/(fac-1.0);
64         fac=CON2*fac;
65         err1=abs(a(j,i)-a(j-1,i));
66         err2=abs(b(j,i)-b(j-1,i-1));
67         if err1 > err2
68             errt = err1;
69         else
70             errt = err2;
71         end
72         if errt <= err
73             err=errt;
74             f_prime_x0=a(j,i);
75             f_second_x0=b(j,i);
76         end
77         r = r+1;
78     end
79     if abs(a(i,i)-a(i-1,i-1)) >= SAFE*err
80         break
81     end
82 end
83 f_second_x0 = 2.0*Temp*f_prime_x0+Temp*Temp*f_second_x0;
84 f_prime_x0=Temp*Temp*f_prime_x0;

```

B.5 DriveTRG

```

1     % Driver script to execute the TRG method.
2     function DriveTRG(Temp,Ratio,Dc)
3     p = size(Temp);
4     q = size(Ratio);
5     c = num2str(Dc);
6     Ra = num2str(Ratio);
7     Te = num2str(Temp);

```

```

8      C = '_Dc=';
9      nam='Temp=';
10     name='Ratio=';
11     ext='.dat';
12     names= datestr(now);
13     if (p(2) > q(2))
14         oldFolder = cd('Temp');
15         fid = fopen(strcat(name,Ra,C,c,'_',names,ext),'w');
16         cd(oldFolder);
17         for i=1:p(2)
18             [n,s,t] = trg(Temp(i),Ratio,Dc);
19             g = log(s(1));
20             f = 0.25;
21             for j=2:n
22                 g = g + f*log(s(j));
23                 f = 0.25*f;
24             end
25             fprintf(fid, '%g_%g_%g\n',Temp(i),g,s(n));
26         end
27     else
28         oldFolder = cd('Ratio');
29         [fid, texto]=fopen(strcat(nam,Te,C,c,'_',names,ext),'w');
30         cd(oldFolder);
31         for i=1:q(2)
32             [n,s,t] = trg(Temp,Ratio(i),Dc);
33             g = log(s(1));
34             f = 0.25;
35             for j=2:n
36                 g = g + f*log(s(j));
37                 f = 0.25*f;
38             end
39             fprintf(fid, '%g_%g_%g\n',Ratio(i),g,s(n));
40         end
41         fclose(fid);
42     end

```

B.6 GSS

```

1      % Golden search for the critical parameters.
2      function p = gss(a,b,Ratio,Dc)
3      gr = 0.5+0.5*sqrt(5.0);
4      c = b - (b - a) / gr;
5      d = a + (b - a) / gr;

```

```

6     r = 0;
7     while (abs(c - d) > 0.001) | (r > 60)
8         [n,s,t] = trg(c,Ratio,Dc);
9         fc = s(n);
10        [n,s,t] = trg(d,Ratio,Dc);
11        fd = s(n);
12        if (fc > fd) b = d;
13            else a = c;
14        end
15        c = b - (b - a) / gr;
16        d = a + (b - a) / gr;
17        r = r+1;
18    end
19    p = 0.5*(b + a);

```

B.7 TGR

```

1     function [n,s,t] = trg(Temp,Ratio,Dc)
2     s = zeros(1000,1);
3     [t,s1,dx,r] = SetTensor(Temp,Ratio,Dc);
4     dy = dx;
5     for n=1:r
6         s(n) = s1(n);
7     end
8     key = 1;
9     while key
10        n = n+1;
11        m = ContractY(t,dx,dy);
12        mx = ModeXX(m,dx,dy);
13        [u,v] = eig(mx);
14        [v,p1] = sort(diag(v),'descend');
15        u = u(:,p1(1:Dc));
16        dx = Dc;
17        t = RenormXX(u,m,dx,dy);
18        [s1,t] = scale(t);
19        s(n) = s1;
20        m = ContractX(t,dx,dy);
21        mx = ModeYY(m,dx,dy);
22        [u,v] = eig(mx);
23        [v,p1] = sort(diag(v),'descend');
24        u = u(:,p1(1:Dc));
25        dy = Dc;
26        t = RenormYY(u,m,dx,dy);

```

```

27     [s1, t] = scale(t);
28         s(n) = s(n)*s1;
29         key = (abs(s(n) - s(n-1)) > 1.0e-5);
30     end

```

B.8 Tensor Inicial

```

1     % Script to set the initial tensor.
2     function [W,s,d,r] = SetTensor(T,R,Dc)
3     W = zeros(2,2,2,2);
4     s = ones(10,1);
5     for i=-1:2:1
6     for j=-1:2:1
7         for k=-1:2:1
8         for l=-1:2:1
9             y = i*j;
10            y1 = l*k;
11            x = i*l;
12            x1 = j*k;
13            a = -0.5*(x+x1+y+y1);
14            b = i*k+j*l;
15            W((3+x)/2,(3+x1)/2,(3+y)/2,(3+y1)/2) = exp((a+R*b)/T);
16        end
17    end
18 end
19 end
20 s1 = max(W(:));
21 W(:) = W(:)/s1;
22 s(1) = s1;
23 r = 1;
24 d = 2;
25 while d*d <= Dc
26     a = reshape(permute(W,[3,1,2,4]),d,d*d*d);
27     b = reshape(W,d*d*d,d);
28     W = b*a;
29     a = permute(reshape(W,d,d,d,d,d),[1,4,3,6,2,5]);
30     a = reshape(a,d*d*d*d,d*d);
31     b = permute(reshape(W,d,d,d,d,d),[1,4,2,5,3,6]);
32     b = reshape(b,d*d,d*d*d*d);
33     W = a*b;
34     W = permute(reshape(W,d*d,d,d,d*d,d),[1,4,2,5,3,6]);
35     W = reshape(W,d*d,d*d,d*d,d*d);
36     s1 = max(W(:));

```

```

37     W(:) = W(:)/s1;
38     d = d*d;
39     r = r+1;
40     s(r) = s1;
41     end

```

B.9 ContractX

```

1     % Script to contract the horizontal bond between two tensors.
2     function M = ContractX(T,x,y)
3     b = reshape(T,x,x*y*y);
4     a = reshape(permute(T,[1,3,4,2]),x*y*y,x);
5     M = reshape(a*b,x,y,y,x,y,y);
6     M = reshape(permute(M,[2,5,3,6,1,4]),y*y,y*y,x,x);

```

B.10 ModeXX

```

1     % Script to set up the matrix associated to mode XX of the HOSVD
2     function a = ModeXX(M,x,y)
3     M = reshape(M,x*x,x*x*y*y);
4     a = M*M';

```

B.11 RenormXX

```

1     % Script to renormalize (cut down) the horizontal legs
2     function Q = RenormXX(u,M,x,y)
3     a = u';
4     Q = zeros(x,x,y,y);
5     for i=1:y
6         for j=1:y
7             Q(:, :, i, j) = a * squeeze(M(:, :, i, j)) * u;
8         end
9     end

```

B.12 ContractY

```
1      % Script to contract the vertical bond between two tensors.
2      function M = ContractY(T,x,y)
3      a = reshape(T,x*x*y,y);
4      b = reshape(permute(T,[3,1,2,4]),y,x*x*y);
5      M = reshape(a*b,x,x,y,x,x,y);
6      M = reshape(permute(M,[1,4,2,5,3,6]),x*x,x*x,y,y);
```

B.13 ModeYY

```
1      % Script to set up the matrix associated to mode YY of the HOSVD
2      function a = ModeYY(M,x,y)
3      M = reshape(M,y*y,y*y*x*x);
4      a = M*M';
```

B.14 RenormYY

```
1      % Script to renormalize (cut down) the horizontal legs
2      function Q = RenormYY(u,m,x,y)
3      a = u';
4      Q = zeros(x,x,y,y);
5      for i=1:x
6          for j=1:x
7              Q(i,j, :, :) = a * squeeze(m(:, :, i, j)) * u;
8          end
9      end
```

Referências Bibliográficas

- [1] 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.
- [2] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Livraria da Física, second edition, 2005.
- [3] L. E. REICHL. *A Modern Course in Statistical Physics*. JOHN WILEY & SONS, INC., second edition, 1998.
- [4] J.M Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford Science Publications, first edition, 1992.
- [5] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, Feb 1925.
- [6] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. ACADEMIC PRESS INC., 2004.
- [7] H. B. Callen. A note on Green functions and the Ising model. *Physics Letters*, 4:161–161, April 1963.
- [8] M. Suzuki. Generalized exact formula for the correlations of the Ising model and other classical systems. *Physics Letters*, 19:267–268, November 1965.
- [9] P. R. Silva and F. C. SÁ Barreto. Internal energy and short-range order in ising models. *physica status solidi (b)*, 114(1):227–233, 1982.
- [10] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.

-
- [11] CHUNGPENG FAN and F. Y. WU. Ising model with second-neighbor interaction. i. some exact results and an approximate solution. *Phys. Rev.*, 179:560–569, Mar 1969.
- [12] David C. Lay. *Álgebra lineal y sus aplicaciones*. PEARSON Education, third edition, 2007.
- [13] Teiji TAKAGI. On an algebraic problem related to an analytic theorem of Carathéodory and Fejér and on an allied theorem of Landau. *Japanese journal of mathematics :transactions and abstracts*, 1:83–93, 1924.
- [14] DAVID S. WATKINS. *Fundamentals of Matrix Computations*. JOHN WILEY & SONS, INC., second edition, 2002.
- [15] Kirk Baker. Singular value decomposition tutorial. [https://datajobs.com/data-science-repo/SVD-Tutorial-\[Kirk-Baker\].pdf](https://datajobs.com/data-science-repo/SVD-Tutorial-[Kirk-Baker].pdf).
- [16] V. KLEMA and A. LAUB. The singular value decomposition: Its computation and some applications. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 25(2):164–176, 1980.
- [17] Ansgar Kalz, Andreas Honecker, and Marion Moliner. Analysis of the phase transition for the Ising model on the frustrated square lattice. *Phys. Rev. B*, 84:174407, Nov 2011.
- [18] W. D. McComb. *Renormalization Methods A Guide for Beginners*. CLARENDON PRESS • OXFORD, 2004.
- [19] Kenneth G. Wilson. Renormalization group and strong interactions. *Phys. Rev. D*, 3:1818–1846, Apr 1971.
- [20] Efi Efrati, Zhe Wang, Amy Kolan, and Leo P. Kadanoff. Real-space renormalization in statistical mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 86:647–667, May 2014.
- [21] Leo P. Kadanoff. Notes on Migdal’s recursion formulas. *Annals of Physics*, 100(1):359–394, 1976.
- [22] L. P. Kadanoff. Scaling laws for Ising models near $T(c)$. *Physics*, 2:263–272, 1966.

- [23] David Chandler. *Introduction to modern statistical mechanics*. Oxford University Press, Inc., 1987.
- [24] Michael Levin and Cody P. Nave. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120601, Sep 2007.
- [25] Ivelton Soares da Silva. Renormalizacao de rede de tensores: Uma abordagem analítica. Master's thesis, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2016.
- [26] Wolfgang Hackbusch. *tensor spaces and numerical tensor calculus*. Springer Heidelberg Dordrecht London New York, 2012.
- [27] GEORGE ARFKEN; HANS J. WEBER. *Física Matemática - Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. Elsevier, 2007.
- [28] Román Orús. Exploring corner transfer matrices and corner tensors for the classical simulation of quantum lattice systems. *Phys. Rev. B*, 85:205117, May 2012.
- [29] Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang. Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition. *Phys. Rev. B*, 86:045139, Jul 2012.
- [30] 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.
- [31] Songbo Jin, Arnab Sen, Wenan Guo, and Anders W. Sandvik. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. *Phys. Rev. B*, 87:144406, Apr 2013.
- [32] John W. Eaton. Archivo situacionista hispano. <https://www.gnu.org/software/octave/doc/interpreter/>, 1996-2017.
- [33] Y. Meurice. Accurate exponents from approximate tensor renormalizations. *Phys. Rev. B*, 87:064422, Feb 2013.