



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

Jorge Gustavo Bandeira dos Santos

Criticalidade do modelo de Ising tridimensional:
Um estudo dinâmico

Recife - PE

2015

JORGE GUSTAVO BANDEIRA DOS SANTOS

CRITICALIDADE DO MODELO DE ISING TRIDIMENSIONAL:
UM ESTUDO DINÂMICO

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.

Orientador: Prof. Dr. ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA

Recife - PE

2015

JORGE GUSTAVO BANDEIRA DOS SANTOS

CRITICALIDADE DO MODELO DE ISING TRIDIMENSIONAL:
UM ESTUDO DINÂMICO

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.

BANCA EXAMINADORA

PROF. DR. ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA
UFRPE

PROF. DR. ANTÔNIO RODRIGUES DE CASTRO ROMAGUERA
UFRPE

PROF. DR. ANDRÉ LUIS DA MOTA VILELA
UPE

Recife - PE

2015

Agradecimentos

Gostaria de agradecer à minha querida mãe, dona Edna Bandeira, e à minha extraordinária avó, dona Severina, pelos ensinamentos.

Agradeço ao meu orientador, o professor Aduino, pela paciência quase infinita.

Agradeço à Mikelly Fernanda, por estar ao meu lado nos momentos mais difíceis do mestrado.

Agradeço ao casal mais jovem que conheço, tia Lú e tio Miguel, que possuem grande participação em minha formação pessoal.

Agradeço as amigas do Departamento de Física, sempre presentes nos bons e difíceis momentos: Thiago de Camaragibe, Danilo de Moreno, Carlos (negão), Erval, Luciano Novinho, Mizael "Miserê", Augusto "O praça", Augusto de Natal, Daniel de Triunfo, Ivelton de Garanhuns, Chico e Zé.

Agradeço aos amigos da gloriosa sexta-feira: Fíbia Mendes, Flávio Fernando, Alexandre Corrêa(Preá), Rodrigo Bahia, Deyvson, Rafael(Capachão) e Durval.

Agradeço aos professores do DF, em especial ao professores Pedro Hugo e Ailton Macêdo, pelo estímulo à minha formação.

Agradeço também a CAPES, que deu suporte material para a realização deste trabalho.

*Dedico, à minha avó, Dona Severina Gomes,
à minha mãe, Edna Bandeira e ao meu ir-
mão, Mário Bandeira.*

Resumo

Neste trabalho investigamos a criticalidade do modelo de Ising tridimensional com interações entre primeiros vizinhos. Em nossas simulações computacionais consideramos que os spins estão distribuídos numa rede cúbica simples de lado L e parâmetro de rede a , de maneira que o número de spins na rede é $N = (L/a)^3$. Empregamos condições de contorno periódicas para descrever o limite volumétrico, na qual os efeitos de fronteira e de tamanho finito são eliminados. Investigamos o comportamento crítico do sistema através da técnica de relaxação dinâmica em tempos curtos onde o sistema evolui segundo a dinâmica de Metropolis. Além disso, as propriedades do sistema são calculadas antes que o mesmo atinja um estado de equilíbrio. Aqui, consideramos apenas a evolução a partir de um estado completamente ordenado, ou seja, a densidade de magnetização do sistema no instante inicial é unitária. Calculamos a magnetização (M), o fator de estrutura (S_k), o comprimento de correlação dependente do tempo (ξ), a flutuação do parâmetro de ordem (Δm) e o segundo cumulante de Binder (U_2). O valor do inverso da temperatura crítica, K_c , foi estimado utilizando um método que explora o comportamento de escala da derivada do logaritmo do parâmetro de ordem com respeito ao logaritmo do tempo $\psi(t, \varepsilon)$, onde ε mede a distância ao ponto crítico. A grandeza $\psi(t, \varepsilon)$ fornece, além do valor de K_c , estimativas para os expoentes críticos ν , γ e β . A técnica de colapso de dados é utilizada com o propósito de se obter uma maior precisão nos valores dos parâmetros críticos obtidos. Os resultados encontrados neste trabalho para o parâmetro crítico $K_c = 0,22166(3)$ e para os expoentes críticos $\nu = 0,6495(3)$, $\gamma = 1,2884(5)$ e $\beta = 0,3222(3)$, foram comparados com outros disponíveis na literatura especializada recente, para sistemas que estão na mesma classe de universalidade que o modelo de Ising tridimensional, no qual encontramos concordância até a quinta casa decimal através de uma técnica que possui baixa exigência computacional.

Palavra-Chave: modelo de Ising, dinâmica de Metropolis, magnetização.

Abstract

In this work we investigate the criticality of the three-dimensional Ising model with interactions between first neighbors. In our computational simulations we consider that the spins are distributed in a simple cubic lattice of side L , and lattice parameter a , so the number of spins in the lattice is $N = (L/a)^3$. We employ periodical conditions of contour to describe the volumetric limit, in which the border and finite-size effects are eliminated. We investigate the critical behavior of the system through the dynamic relaxation technique in short terms where the system evolves according to the Metropolis dynamic. Furthermore, the system properties are calculated before it reaches a state of equilibrium. Here, we consider only evolution from a completely ordered state, that is, the magnetization density of the system at the initial time is unitary. We calculate the magnetization (M), the structure factor (S_k), the time-dependent correlation length (ξ), the fluctuation of the order parameter (Δm) and the second cumulate of Binder (U_2). The value of the inverse of the critical temperature, K_c , was estimated using a method that explores the scale behavior of the derivative logarithm of the order parameter with respect to the logarithm of time $\psi(t; \varepsilon)$, where ε measures the distance to the critical point. The quantity $\psi(t; \varepsilon)$ gives, besides the value of K_c , estimates for the critical exponents ν , γ and β . The technique of data collapse is used for the purpose of obtaining greater accuracy in the values of the critical parameters obtained. The results found in this work for the critical parameter $K_c = 0,22166(3)$ and for the critical exponents $\nu = 0,6495(3)$, $\gamma = 1,2884(5)$ and $\beta = 0,3222(3)$, were compared with others available in the recent specialized literature, for systems that are in the same class as the universality of the three-dimensional Ising model, in which we find concordance until the fifth decimal place through a technique that has a low computational requirement.

Key words: Ising model, Metropolis dynamics, magnetization.

Lista de Figuras

2.1	Gráfico da magnetização em função do campo magnético para um material ferromagnético. O sistema encontra-se na fase ordenada ($T < T_c$). O gráfico indica uma mudança abrupta e descontínua da magnetização em $B = 0$, e o sistema atinge um estado estacionário com uma magnetização espontânea $\pm M_0$	9
2.2	Comportamento da magnetização em função do campo magnético. O sistema encontra-se na temperatura crítica $T = T_c$. O gráfico indica uma mudança contínua da magnetização em $B = 0$. Neste ponto, a derivada da função $M(B)$ tende a ∞ . A magnetização espontânea do sistema cai para zero.	10
2.3	Comportamento da magnetização em função do campo magnético. É possível perceber que para valores de temperatura superiores à crítica ($T > T_c$), $M(B)$ sempre será contínua em $B = 0$	11
2.4	Magnetização espontânea como função da temperatura. Iniciando na fase ordenada $T < T_c$, a magnetização espontânea possui valor $M_0 \neq 0$. Para $T \geq T_c$, a magnetização é identicamente nula.	11
4.1	Magnetização média em função do tempo para vários valores de K . As curvas indicam o comportamento do parâmetro de ordem do modelo de Ising para tempos curtos e mostram que a magnetização média decai para uma constante aproximadamente independente do tamanho do sistema caso a temperatura seja menor ou maior do que a temperatura crítica.	29

- 4.2 Logaritmo da magnetização média em função do logaritmo do tempo para vários valores de K . A partir das curvas indicadas pode-se inferir que $0,2215 < K_c < 0,2218$. Os dados foram suavizados através da técnica de regularização de Tikhonov. 30
- 4.3 Gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo para diferentes valores de K . As curvas indicam que para $K = 0,2216$ e $K = 0,2217$, $\Psi(\tau, \varepsilon)$ possui comportamento aproximadamente linear. 32
- 4.4 Gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo como uma função de K . Cada curva resulta de um corte vertical na figura 4.3 no valor correspondente a $\ln(t)$. O retângulo tracejado indica a região crítica. 33
- 4.5 Ampliação do gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo como uma função de K . Cada cruzamento é uma estimativa para K_c e para $\beta/\nu z$ 34
- 4.6 Estimativa para o valor de β_c em função da relação dos tempos $\omega = t_j/t_i$, com $j = 1, 2, \dots, i - 1$ e t_i o tempo correspondente a i -ésima curva. Para cada conjunto de dados aplicamos uma regressão linear, assim determinamos várias estimativas para K_c 34
- 4.7 Estimativa para o valor de β_c em função da relação dos tempos $\omega = t_j/t_i$, com $j = 1, 2, \dots, i - 1$ e t_i o tempo correspondente a i -ésima curva. Para cada conjunto de dados aplicamos uma regressão linear, assim determinamos várias estimativas para $\beta/\nu z$ 35
- 4.8 O erro médio (E) é mostrado como uma função do valor arbitrado a $1/\nu z$ para diferentes valores de K . O mínimo global, representado pela curva vermelha, indica a melhor estimativa para $1/\nu z$ e K_c 36
- 4.9 Nova representação da figura 4.4 com reescalonamento. A figura indica o colapso completo em uma única curva para valores de $K_c = 0,2216702$ e $1/\nu z = 0,751$, obtidos anteriormente pela minimização da figura de mérito 4.8. 37

- 4.10 Magnetização em função do tempo em uma escala logarítmica dupla para $K_c = 0,2216702$. A curva indica um comportamento linear, desta forma determinamos o expoente $\beta/\nu z$ através da inclinação da reta. A linha é um ajuste linear dos dados. 38
- 4.11 Fator de estrutura (S_k) e flutuação do parâmetro de ordem (Δm) em uma escala logarítmica dupla para $K_c = 0,2216702$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $\gamma/\nu z$. A linha é um ajuste linear dos dados. 38
- 4.12 Comprimento de correlação dependente do tempo numa escala logarítmica dupla em $k_c = 0,221667$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $3/2z$. A linha é um ajuste linear dos dados. 39
- 4.13 Cumulante de segunda ordem numa escala logarítmica dupla para $k_c = 0,221667$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $3/z$. A linha é um ajuste linear dos dados. 39

Lista de Tabelas

2.1	Classificação de três tipos de materiais em termos de suas propriedades magnéticas, susceptibilidade magnética e permeabilidade magnética.	5
2.2	Classificação de alguns materiais paramagnéticos em termos da susceptibilidade magnética	5
2.3	Classificação de alguns materiais diamagnéticos em termos da susceptibilidade magnética.	6
2.4	Alguns materiais ferromagnéticos e suas respectivas temperaturas de Curie .	7
4.1	Comparação dos resultados dos expoentes críticos do modelo de Ising tridimensional obtidos no presente trabalho com aqueles obtidos em outras referências. As numerações entre parênteses são os erros estimados.	40

Sumário

1	Introdução	1
2	Fundamentos	3
2.1	Magnetização em materiais	3
2.2	Classificação dos materiais magnéticos	4
2.3	Transições de fases e fenômenos críticos	7
2.4	Expoentes críticos	12
2.5	Leis de escala	14
3	Modelo e ferramentas numéricas	16
3.1	Modelo de Ising	16
3.2	Diferenciação numérica dos dados	18
3.3	Colapso de dados	19
3.4	Dinâmica crítica em tempos curtos	20
4	Resultados	25
4.1	A Simulação	25
4.2	Algoritmo de Metropolis	27
4.3	Comportamento das grandezas calculadas	29
4.3.1	Magnetização média	29
4.3.2	Magnetização média na escala logarítmica	30
4.3.3	Derivada da magnetização média na escala logarítmica	31
4.3.4	Colapso dos dados	35
4.4	Determinação dos expoentes críticos	37
5	Conclusões	42

Capítulo 1

Introdução

As transições de fases e os fenômenos críticos têm sido objeto de grande interesse entre os físicos teóricos, experimentais e computacionais no estudo de fenômenos em diversas áreas da ciência [1–3]. Para isso, eles utilizam o poder da Mecânica Estatística, que possibilita o estudo de sistemas com elevado número de graus de liberdade, os chamados sistemas complexos [4]. O interesse adquirido pelos pesquisadores teóricos se dá pelo grande progresso que o uso dos computadores tem proporcionado às simulações numéricas, possibilitando uma investigação mais cuidadosa de modelos e teorias [5,6].

Em uma ampla variedade de transições de fases os sistemas são submetidos a uma quebra de simetria, fato que marca as transições de fases como um dos fenômenos mais fascinantes já observado. Um dos fatos mais curiosos, em transições de fases, é que diferentes tipos de sistemas, quando analisados em seu estado crítico, exibem o mesmo conjunto de informações em comum. A exemplo dos sistemas magnéticos que apresentam transições de fases de segunda ordem e mostram propriedades críticas que são equivalentes a uma transição líquido-gás [7–9].

Neste trabalho é realizado um estudo de *alta precisão* da criticalidade do modelo de Ising tridimensional, no qual ocorre uma transição de fases contínua. A escolha do modelo foi motivada pelo fato do mesmo ter sido amplamente investigado através de diferentes técnicas e, apesar de não existir uma solução exata para o mesmo, seus parâmetros são conhecidos com boa precisão [10,11].

Um dos objetivos deste trabalho é analisar a criticalidade do modelo de Ising tridimensional utilizando um método, recentemente proposto [12], para obtenção do valor crítico do parâmetro que induz a transição de fases. O método explora o comportamento

dinâmico do sistema em tempos curtos [13] e, também, fornece estimativas para os expoentes críticos. Por outro lado, testaremos a eficiência do método ao mesmo tempo em que verificamos se ele atinge a mesma precisão dos resultados das simulações Monte Carlo de equilíbrio.

No capítulo 2, fazemos uma breve introdução sobre o magnetismo em materiais e logo após classificamos os materiais em termos de suas propriedades magnéticas. Aproveitamos para digressar um pouco sobre transições de fases e fenômenos críticos, onde introduzimos os principais expoentes críticos.

O capítulo 3 faz referência aos métodos utilizados nesta investigação, onde apresenta-se o Hamiltoniano do modelo de Ising, o método de derivação numérica que dá suporte a análise proposta, a técnica de colapso de dados utilizada na obtenção dos expoentes a partir de leis de escala e o método de análise aplicado em dinâmica de tempos curtos, onde é apresentada uma lei de escala generalizada obtida por Janssen e colaboradores [14] para descrever o comportamento da magnetização.

O capítulo 4 é destinado a apresentação do método computacional para a realização da simulação bem como à investigação e análise dos resultados e discussões do modelo na rede tridimensional, partindo de um estado inicial completamente ordenado, no qual é investigada, em diagramas, as séries temporais dos observáveis de interesse, que são obtidas tirando-se as médias, sobre as diferentes realizações da dinâmica.

No capítulo 5 são feitas as considerações finais.

Capítulo 2

Fundamentos

2.1 Magnetização em materiais

As propriedades magnéticas dos materiais têm sua origem na estrutura eletrônica dos átomos. Do ponto de vista clássico, um campo magnético interno é gerado pela translação dos elétrons em torno do núcleo positivo ou pelo momento angular intrínseco dos elétrons. Assim, a origem dos momentos magnéticos está associada ao momento angular orbital do elétron e ao momento angular do spin do elétron [15]. Enfatizamos, no entanto, que o magnetismo é uma propriedade cuja natureza é de origem quântica, e está relacionada com o comportamento dos elétrons no material. Em particular, não existe um análogo clássico ao momento angular de spin do elétron.

Alguns materiais apresentam a capacidade de atração e repulsão entre eles, isto pode estar relacionado às propriedades magnéticas. As propriedades básicas observadas em materiais magnéticos podem ser explicadas pela existência de dipolos magnéticos [16].

Os campos magnéticos internos gerados pelos movimentos eletrônicos são similares aos campos produzidos por espiras de corrente [17], que possui momento magnético m . Se um material é submetido a um campo magnético externo B , seus momentos magnéticos dipolares tendem a se alinhar com o campo externo, de tal forma que o momento magnético líquido não seja nulo. Os momentos magnéticos atômicos individuais do material contribuem para a sua resposta ao campo magnético. Descreve-se um material magnetizado por sua magnetização M , que é definida como a soma de todos os momentos magnéticos elementares, por unidade de volume. Se há N átomos em um dado volume

Δv e o k – éximo átomo tem um momento de dipolo m_k , temos que:

$$M = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{\Delta v}, \quad (2.1)$$

onde $N = v/\Delta v$. Um meio para o qual M não é zero é dito magnetizado.

2.2 Classificação dos materiais magnéticos

Em geral, podemos usar dois parâmetros importantes para classificar os materiais em termos de suas propriedades magnéticas ou de seu comportamento magnético, a *susceptibilidade magnética* χ_m e a *permeabilidade magnética* μ_r . A susceptibilidade magnética do meio pode ser vista como a medida de quão suscetível (ou sensível) o material é na presença de um campo magnético. A permeabilidade magnética mensura o campo magnético no interior de um material devido ao campo magnetizante \vec{H} pré-existente na região onde o material é colocado, bem como à magnetização por este induzida no material em relação ao próprio campo magnetizante \vec{H} em questão. Ao colocar o material no local considerado, no interior deste material verifica-se a presença de um campo magnético \vec{B} , cujo valor deve-se tanto ao campo magnetizante quanto à magnetização induzida no material em resposta a este último. A permeabilidade do meio é a razão entre a permeabilidade de um determinado material e a permeabilidade do espaço livre, sendo chamada de *permeabilidade relativa do material* [18].

Dizemos que um material é *não magnético* se $\chi_m = 0$ ou $\mu_r = 1$. Caso contrário, o material é dito magnético. Espaço livre, ar e materiais com $\chi_m = 0$ ou $\mu_r \approx 1$ são considerados não magnéticos. Há uma grande variedade de materiais magnéticos e, portanto, ordenamentos magnéticos. O comportamento magnético de um material formado por uma dada substância depende da origem microscópica de sua magnetização e das interações entre seus constituintes microscópicos. A tabela 2.1 ilustra 3 tipos possíveis de ordenamentos magnéticos.

Os materiais paramagnéticos são aqueles cujos átomos possuem momentos de dipolo magnético permanentes. Na ausência de um campo magnético externo, os momentos de dipolo possuem orientação espacial aleatória e, portanto, a magnetização resultante é nula. Quando um campo magnético externo é aplicado ao material, os dipolos tendem a alinhar-se com o campo externo, caracterizando uma magnetização resultante diferente

Tabela 2.1: Classificação de três tipos de materiais em termos de suas propriedades magnéticas, susceptibilidade magnética e permeabilidade magnética.

Material	χ_m	μ_r
Paramagnético	$\chi_m > 0$	$\mu_r \gtrsim 1$
Diamagnético	$\chi_m < 0$	$\mu_r \lesssim 1$
Ferromagnético	$\chi_m \gg 0$	$\mu_r \gg 1$

de zero, cuja orientação média é ao longo do campo aplicado. Neste momento, o campo magnético resultante dentro do material possui duas componentes: o campo externo aplicado e o campo induzido proveniente da orientação ordenada dos dipolos. A agitação térmica dos átomos tende a perturbar a orientação dos dipolos, com isso, podemos dizer que a magnetização do sistema diminui quando ocorre aumento da entropia (desordem). A magnetização alcança o estado completamente ordenado (magnetização máxima), quando todos os dipolos ficam alinhados com o campo magnético externo. Quando o campo externo é removido da amostra paramagnética, a agitação térmica faz com que os momentos de dipolo magnético tenham novamente direções aleatórias. As forças magnéticas entre os átomos são tão fracas que não conseguem manter o alinhamento dos dipolos. Os materiais paramagnéticos apresentam valores reduzidos e positivos de susceptibilidade magnética, observe a tabela 2.2.

Tabela 2.2: Classificação de alguns materiais paramagnéticos em termos da susceptibilidade magnética

Material	χ_m
Oxigênio	$1,9 \cdot 10^{-6}$
Sódio	$8,5 \cdot 10^{-6}$
Titânio	$1,8 \cdot 10^{-6}$
Alumínio	$2,1 \cdot 10^{-5}$
Platina	$2,4 \cdot 10^{-4}$
Nióbio	$2,37 \cdot 10^{-4}$

Os materiais diamagnéticos são caracterizados pelo fato dos átomos não produzirem um momento magnético resultante. Os momentos magnéticos dos elétrons no

interior de cada um dos átomos se anulam, de modo que o momento magnético resultante do sistema é zero. Nessas circunstâncias, quando aplicamos um campo magnético externo, de acordo com a *lei de Lenz* [19], as correntes induzidas são tais que se opõem ao crescimento do fluxo aplicado. Assim, os momentos magnéticos induzidos nos átomos terão sentido oposto ao campo externo aplicado, apresentando valores reduzidos e negativos de susceptibilidade magnética, observe a tabela 2.3. São substâncias diamagnéticas: o bismuto, o cobre, a prata, o chumbo, etc.

Tabela 2.3: Classificação de alguns materiais diamagnéticos em termos da susceptibilidade magnética.

Material	χ_m
Bismuto	$-16,6 \cdot 10^{-5}$
Mercúrio	$-2,9 \cdot 10^{-5}$
Cobre	$-1 \cdot 10^{-5}$
Prata	$-2,6 \cdot 10^{-5}$
Chumbo	$-1,8 \cdot 10^{-5}$
Água	$-0,91 \cdot 10^{-5}$

Os efeitos ferromagnéticos assim como os paramagnéticos ocorrem em materiais cujos átomos possuam momentos de dipolo magnéticos resultantes. A diferença entre tais efeitos está associada ao fato de que nos materiais ferromagnéticos existe uma forte interação entre os momentos magnéticos atômicos de átomos vizinhos. Esta interação, cuja origem é quântica, é capaz de manter os momentos magnéticos alinhados mesmo com a remoção do campo magnético externo.

Quando a temperatura aumenta, o movimento térmico compete com a tendência ferromagnética de alinhamento dos dipolos. Quando a temperatura sobe além de certo valor, chamado de temperatura de *Curie*, há uma transição de fases de segunda ordem e o sistema não pode mais manter uma magnetização espontânea, embora ainda responda paramagneticamente à um campo externo. Na tabela 2.4, encontram-se alguns materiais ferromagnéticos e suas respectivas temperaturas de Curie. Abaixo da temperatura de Curie e na ausência de um campo externo, há uma quebra espontânea de simetria e com isso formam-se domínios aleatórios. Em materiais magnéticos, como o ferro e o

Tabela 2.4: Alguns materiais ferromagnéticos e suas respectivas temperaturas de Curie .

Material	Temperatura de Curie(K)
Cromel	436
Níquel	627
Ferro	1043
Gadolíneo	289

ação, os dipolos magnéticos associados aos átomos se alinham formando regiões que apresentam magnetismo espontâneo. Essas regiões são chamadas de domínios. O campo magnético resultante devido ao campo aplicado e ao campo induzido, devido à reorientação dos domínios, pode chegar a 10^3 ou 10^4 vezes o valor do campo aplicado. Tanto a permeabilidade magnética quanto a susceptibilidade magnética de um material ferromagnético apresentam valores altos e positivos de susceptibilidade magnética.

2.3 Transições de fases e fenômenos críticos

Na condição de equilíbrio, sistemas constituídos por um número grande de partículas apresentam-se na natureza em diversas fases termodinâmicas. Exemplos familiares são as fases sólida, líquida e gasosa das diversas substâncias. Mas, sabemos que existem outros exemplos e vamos citar alguns:

- Vários metais apresentam uma fase supercondutora a baixas temperaturas, em que o composto conduz corrente elétrica sem dissipação de energia;
- Compostos podem assumir a fase magnética de vidros de spin, em que os spins se congelam em direções aleatórias.

Vamos relembrar brevemente alguns fatos genéricos sobre as transições de fases:

1. Transições de fases podem ser induzidas por vários parâmetros - temperatura, pressão, composição química, etc. Se o parâmetro de indução é a temperatura, por exemplo, a fase de altas temperaturas é mais desordenada que a fase de baixas temperaturas.

2. A desordem do sistema está associada a entropia, portanto, transições de fases implicam numa mudança na entropia do sistema, que pode ser descontínua ou contínua.

- Descontínua \rightarrow Neste caso, a transição de fases é acompanhada por um salto descontínuo da entropia, que é o *calor latente* ($Q_L = T\Delta S$), e de uma variação descontínua da magnetização, no caso de sistemas magnéticos. Todas as outras grandezas termodinâmicas envolvidas (energia interna, entropia, entalpia, volume, etc.) também são descontínuas na transição.
- Contínua \rightarrow A energia livre e suas primeiras derivadas são contínuas, enquanto que suas segundas derivadas apresentam algum tipo de singularidade.

Para a nossa discussão sobre transições de fases, uma definição adequada e nada formal seria: uma transição de fases é uma mudança abrupta e singular das propriedades macroscópicas de um sistema de muitas partículas, como função dos parâmetros de controle. As transições de fases podem ser de primeira ou de segunda ordem. Quando o parâmetro de ordem do sistema vai a zero descontinuamente, se diz que a transição é de primeira ordem. Caso contrário, quando o parâmetro de ordem vai a zero continuamente, a transição é de segunda ordem ou de ordem superior. Próximo a uma transição de fases de segunda ordem, sistemas microscopicamente distintos apresentam comportamentos similares, em contraste com as transições de fases de primeira ordem. Tal comportamento é chamado de universal e é característico de sistemas na criticalidade. Comportamento universal aqui quer dizer que sistemas muito diferentes se comportam da mesma maneira na região próxima a uma transição de fases contínua (desde que algumas características fundamentais como a dimensionalidade e o número de componentes do parâmetro de ordem sejam as mesmas).

Para se ter uma idéia qualitativa do que é um fenômeno crítico, vamos considerar um ferromagneto simples, uma barra de ferro, na temperatura T . Definimos a temperatura crítica T_c tal que, para $T < T_c$ o sistema encontra-se na fase ordenada e, caso contrário, na fase desordenada. Inicialmente o sistema encontra-se na fase ordenada e a barra de ferro está submetida a um forte campo magnético externo B , paralelo ao seu eixo. A barra será quase totalmente magnetizada e, em unidades apropriadas, podemos dizer que o módulo da sua magnetização M , também conhecida como parâmetro de ordem, será $+1$. O campo magnético é então desligado subitamente, fazendo com que o sistema relaxe em direção

ao estado estacionário. A magnetização diminui e atinge um valor diferente de zero, conhecido como magnetização espontânea M_0 . Invertendo o sentido do campo magnético e mantendo a orientação da barra de ferro, a magnetização sofrerá uma inversão, de modo que M deve ser uma função ímpar de B . Segue-se que $M(B)$ deve possuir um gráfico do tipo mostrado na figura 2.1.

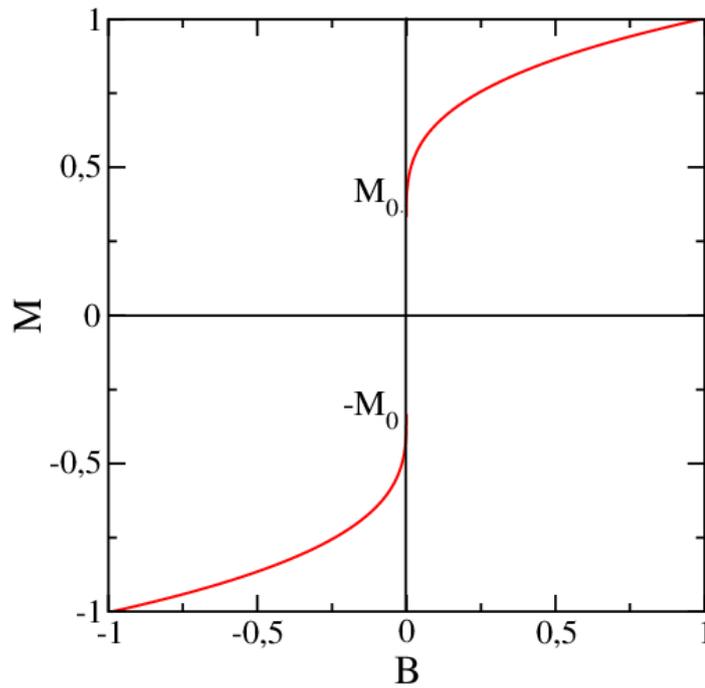


Figura 2.1: Gráfico da magnetização em função do campo magnético para um material ferromagnético. O sistema encontra-se na fase ordenada ($T < T_c$). O gráfico indica uma mudança abrupta e descontínua da magnetização em $B = 0$, e o sistema atinge um estado estacionário com uma magnetização espontânea $\pm M_0$.

Podemos considerar que a barra de ferro passou por uma transição de fases em $B = 0$, mudando subitamente de uma magnetização negativa para uma positiva. Em um experimento real esta descontinuidade desaparece e o fenômeno de histerese ocorre [9]. Ainda considerando a barra de ferro na temperatura $T < T_c$, vamos supor que a temperatura T seja aumentada ligeiramente. Verifica-se que o gráfico da magnetização em função do campo magnético é semelhante ao gráfico anterior, porém, com a magnetização espontânea M'_0 assumindo um valor menor que o anterior, M_0 .

Finalmente, se T é aumentado para a temperatura crítica T_c (o ponto Curie), a magnetização espontânea cai para zero e o gráfico da magnetização em função do campo magnético torna-se uma função contínua com inclinação infinita em $B = 0$, como mostra

a figura 2.2.

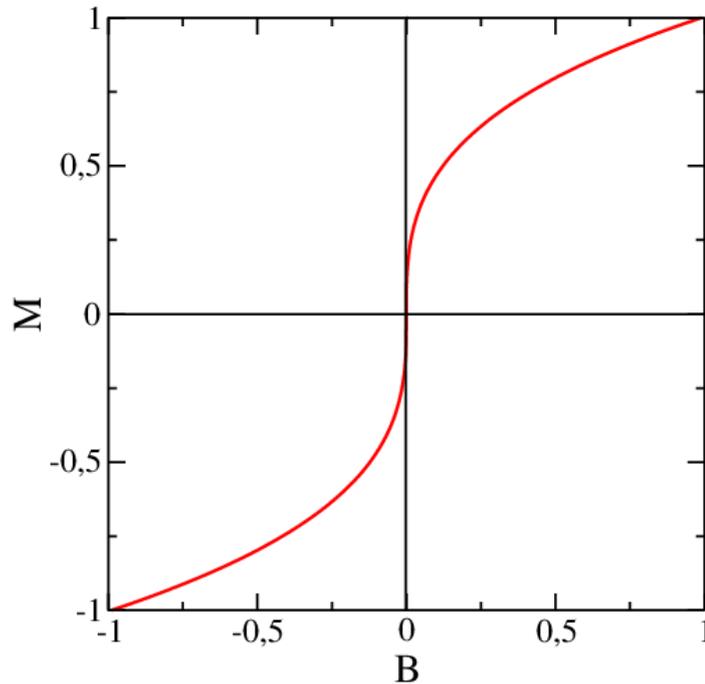


Figura 2.2: Comportamento da magnetização em função do campo magnético. O sistema encontra-se na temperatura crítica $T = T_c$. O gráfico indica uma mudança contínua da magnetização em $B = 0$. Neste ponto, a derivada da função $M(B)$ tende a ∞ . A magnetização espontânea do sistema cai para zero.

Exatamente na temperatura crítica (T_c), o parâmetro de ordem assim como outras funções termodinâmicas do sistema apresentam alguma singularidade. A natureza destas singularidades é um dos problemas fundamentais no estudo das transições de fases. Considerando ainda o exemplo da barra, se a temperatura T voltar a subir $M(B)$ continuará sendo uma função contínua e se tornará analítica em $B = 0$, como indica a figura 2.3. Essas observações podem ser convenientemente resumidas em um gráfico da magnetização em função da temperatura, como mostra a figura 2.4. A magnetização espontânea é uma função de T e pode ser definida como

$$M_0(T) = \lim_{B \rightarrow 0^+} M(B, T), \quad (2.2)$$

o limite deve ser tomado através de valores positivos de B .

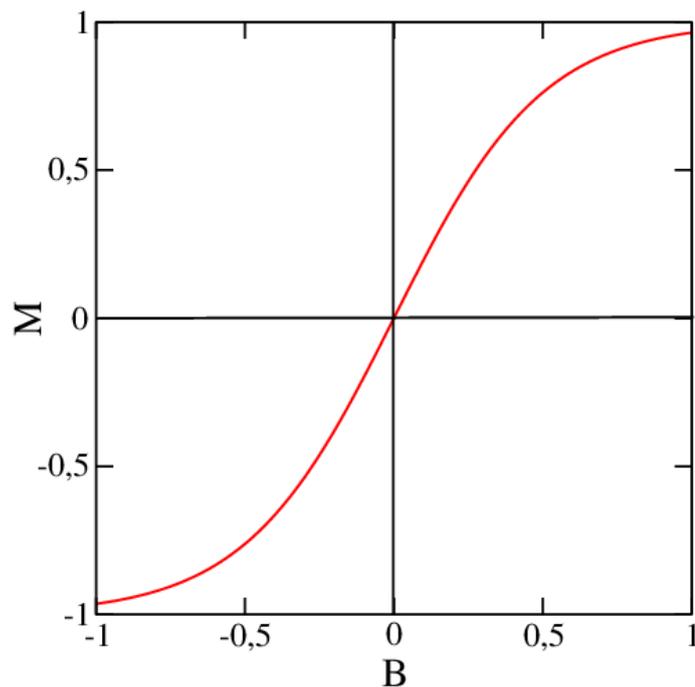


Figura 2.3: Comportamento da magnetização em função do campo magnético. É possível perceber que para valores de temperatura superiores à crítica ($T > T_c$), $M(B)$ sempre será contínua em $B = 0$.

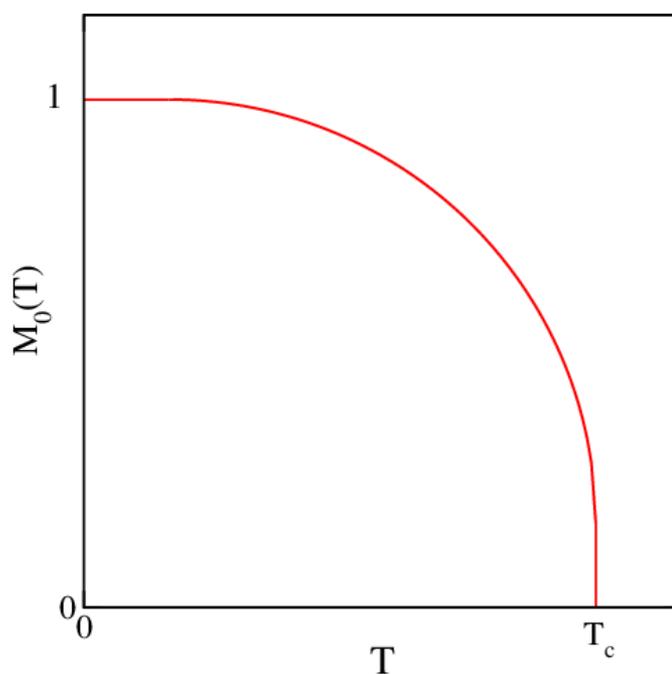


Figura 2.4: Magnetização espontânea como função da temperatura. Iniciando na fase ordenada $T < T_c$, a magnetização espontânea possui valor $M_0 \neq 0$. Para $T \geq T_c$, a magnetização é idênticamente nula.

Enquanto que a temperatura vai se aproximando de T_c , com T assumindo valores estritamente menores que T_c (ver figura 2.4), a magnetização espontânea vai diminuindo até que se anula exatamente em T_c . É possível notar que o parâmetro de ordem M possui uma singularidade no ponto $(T_c, 0)$, fato que caracteriza um fenômeno crítico. Fenômenos críticos não são de modo algum limitados ao parâmetro de ordem. Por exemplo, as funções resposta calor específico a campo constante e a susceptibilidade isotérmica divergem no ponto crítico. O comportamento dessas funções no entorno do ponto crítico assume uma dependência característica que constitui uma assinatura do comportamento crítico do sistema. De fato, a forma funcional são leis de potências da distância ao ponto crítico nas quais os expoentes são chamados de expoentes críticos, que serão apresentados a seguir [20].

2.4 Expoentes críticos

O comportamento singular das funções termodinâmicas de um sistema, nas proximidades do ponto crítico, é caracterizado por um conjunto de expoentes críticos. Estes expoentes são leis de potência simples com expoentes não-inteiros, que descrevem a não-analiticidade de funções termodinâmicas [21]. A medida que o sistema se aproxima do ponto crítico, várias funções termodinâmicas podem divergir, ir a zero ou até mesmo permanecer finitas. Vamos considerar o exemplo da seção 2.3, ferromagneto na presença de um campo magnético, no qual uma transição de fases de segunda ordem ocorre em $B = 0$. O comportamento crítico das funções mais conhecidas é dado por:

1. Magnetização:

$$M \sim (T_c - T)^\beta, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T \lesssim T_c. \quad (2.3)$$

$$M \sim B^{1/\delta}, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T = T_c. \quad (2.4)$$

onde o sinal (\sim) deve ser lido como “vai com a temperatura ou com o campo da seguinte forma”.

2. Susceptibilidade:

$$\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma'}, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T \lesssim T_c. \quad (2.5)$$

$$\chi \sim (T - T_c)^\gamma, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T \gtrsim T_c. \quad (2.6)$$

3. Comprimento de correlação:

$$\xi \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\nu'}, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T \lesssim T_c. \quad (2.7)$$

$$\xi \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\nu}, \quad \text{para } B \rightarrow 0 \text{ e } T \gtrsim T_c. \quad (2.8)$$

4. Calor específico:

$$C \sim (T_c - T)^{-\alpha}, \quad \text{para } T \lesssim T_c. \quad (2.9)$$

$$C \sim (T - T_c)^\alpha, \quad \text{para } T \gtrsim T_c. \quad (2.10)$$

Podemos dizer que um parâmetro ε associado a uma função termodinâmica $f(\varepsilon)$, onde $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$, é uma medida da distância entre um ponto de temperatura T e o ponto crítico. Quando a temperatura T está na vizinhança da temperatura crítica, geralmente, utiliza-se a expressão $|\varepsilon| \rightarrow 0$, que significa que estamos nas proximidades do ponto crítico.

Os índices $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ e δ , que aparecem nas leis de potência, descritas anteriormente, são conhecidos como expoentes críticos. Esses expoentes são:

1. independentes do campo magnético B e da temperatura T .
2. positivos por definição.
3. responsáveis pela caracterização do sistema quando o mesmo se aproxima do ponto crítico.

Um fato interessante é que vários sistemas apresentam uma grande similaridade de comportamento quando se aproximam de seus pontos críticos. Dizemos, portanto, que tais sistemas apresentam o mesmo comportamento crítico e pertencem à mesma classe de universalidade. Em geral, uma classe de universalidade é definida pela dimensionalidade espacial em que o sistema é tratado, das simetrias do seu parâmetro de ordem e do alcance das interações microscópicas do sistema.

2.5 Leis de escala

Distribuições gaussianas são, supostamente, a norma da natureza, cuja larga aplicabilidade resulta do teorema do limite central: em qualquer caso onde um grande número de eventos aleatórios independentes contribuem para um determinado resultado, este seguirá a distribuição normal. Quando um dado fenômeno é analisado, é possível obter informações sobre o mesmo resolvendo algum tipo de equação diferencial, onde as funções possuam escala característica. Em geral, podemos expressar essas funções em termos de exponenciais, em que aparece um parâmetro que determina a escala do problema. Porém, nem tudo na natureza segue uma curva normal. Eventos não-gaussianos podem ainda apresentar um tipo de regularidade na forma de leis de potência. E estas são incompatíveis com a noção de que a média representa a escala característica [22].

Os sistemas com escala representam quase tudo na natureza, porém, existem os sistemas que não possuem escala característica. Os sistemas com escala são descritos por leis de potência, que são soluções de equações funcionais da forma

$$f(\lambda x) = \lambda^p f(x) \quad (2.11)$$

Na física dos fenômenos críticos, a expressão 2.11 é conhecida como *hipótese de escala* ou de *homogeneidade*. Esta forma a base da teoria de grupo de renormalização [23]. A hipótese de escala para funções termodinâmicas é feita sob a forma de uma declaração sobre um determinado potencial termodinâmico, geralmente escolhido para ser o potencial de Gibbs por spin $g(B, \varepsilon)$, que é escrito como a soma de uma parte regular $g_0(B, \varepsilon)$ com uma parte singular $g_s(B, \varepsilon)$, uma função homogênea generalizada. É na parte singular que as peculiaridades da criticalidade ocorrem [8].

Uma das formas da hipótese é a afirmação de que a função termodinâmica é assintótica próximo ao ponto crítico, existindo dois números a_B e a_T (escalas de potência de campo e temperatura) tal que para todo λ positivo, o potencial de Gibbs por spin $g_s(B, \varepsilon)$ obedece a equação funcional [22]:

$$g_s(\lambda^{a_H} B, \lambda^{a_T} \varepsilon) = \lambda g_s(B, \varepsilon) \quad (2.12)$$

A hipótese de escala foi desenvolvida de forma independente por vários pesquisadores, incluindo Widom, Domb, Hunter, Kadanoff, Patashinskii, Pokrovskii e Fisher. A hipótese de escala possui duas categorias de previsões [24], sendo que ambas foram muito bem veri-

ficadas por uma riqueza de dados experimentais em diversos sistemas. A primeira categoria é um conjunto de relações, chamadas de leis de escala, que servem para relacionar os vários expoentes do ponto crítico.

A segunda categoria é uma espécie de colapso de dados, que talvez seja melhor explicado em termos do nosso simples exemplo de um ferromagneto uniaxial. Podemos escrever a equação de estado como uma relação funcional da forma:

$$M = M(B, \varepsilon), \quad (2.13)$$

onde lembramos ao leitor que a magnetização M é o parâmetro de ordem e B o campo magnético externo. Como $M(B, \varepsilon)$ é uma função de duas variáveis, ela pode ser representada graficamente em função de ε , para uma sequência de valores de B . A hipótese de escalonamento prevê que todas as curvas desta família devem colapsar em uma única curva fornecida por um gráfico de M escalonado versus ε escalonado.

As previsões da hipótese de escala são suportadas por uma ampla gama de trabalhos experimentais e também por vários cálculos em sistemas modelo, tal como modelos de spins na rede [25].

Capítulo 3

Modelo e ferramentas numéricas

3.1 Modelo de Ising

O modelo conhecido como modelo de Ising foi proposto por Wilhelm Lenz, em 1920, com o objetivo de estudar fenômenos magnéticos em materiais. Este modelo foi resolvido por seu estudante de doutorado, Ernst Ising, em 1925, para o caso unidimensional, o qual chegou à conclusão que o modelo não exibe transição de fases em temperatura finita. No entanto, resultados de campo médio sugeriam a possibilidade de existir pelo menos uma transição de fases em dimensões superiores. Posteriormente, em 1944, o químico norueguês Lars Onsager [26] encontrou uma solução analítica para o modelo bidimensional sem campo magnético, provando que o mesmo apresentava transição de fases de segunda ordem. Várias técnicas aproximadas fornecem resultados que permitem obter o diagrama de fases do modelo.

É bem conhecido que certos materiais magnéticos, como o ferro, possuem uma magnetização permanente que desaparece quando o material é aquecido a temperaturas maiores do que a temperatura de Curie. Dizemos que, em baixas temperaturas, o sistema está numa fase termodinâmica ordenada e, em altas temperaturas, numa fase desordenada [27]. A descrição mais simples de tal fenômeno é dada pelo modelo de Ising. Como sabemos, o estado de um átomo magnético é caracterizado pela direção do momento de dipolo magnético. No modelo de Ising, o momento de dipolo magnético se encontra na direção positiva do eixo z . Assim, o momento de dipolo μ_i do i -ésimo átomo é dado por

$$\mu_i = \gamma\sigma_i, \tag{3.1}$$

onde γ é uma constante e a variável σ_i toma os valores ± 1 caso o momento de dipolo

aponte na direção positiva do eixo z e -1 caso contrário. Considerando dois átomos i e j vizinhos, os dipolos podem estar em quatro possíveis estados $(++)$, $(--)$, $(+-)$ e $(-+)$.

A energia desses dois átomos é dada por $-J\sigma_i\sigma_j$, onde $J > 0$ é uma constante que representa a interação entre os dipolos magnéticos. A configuração do sistema fica completamente especificada por $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$, ou seja, pela especificação do estado de cada um dos dipolos do sistema. A energia total correspondente a esta configuração é dada por:

$$H(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.2)$$

onde a soma se estende sobre os pares de átomos vizinhos.

Se o sistema estiver sujeito a um campo externo na direção z , a energia terá um termo adicional devido à interação dos dipolos com o campo, como mostra a equação 3.3:

$$H(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \kappa \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (3.3)$$

onde κ é uma constante proporcional ao campo e N é o número de átomos na presença do campo magnético.

Em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura absoluta T , a probabilidade $P(\sigma)$ de encontrar o sistema na configuração σ é dada por:

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp \{-\beta H(\sigma)\}, \quad (3.4)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann e

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \{-\beta H(\sigma)\} \quad (3.5)$$

é a função de partição do sistema. O símbolo $\{\sigma\}$ indica que a soma se estende sobre todas as 2^N configurações.

3.2 Diferenciação numérica dos dados

É muito comum em investigações científicas a medição de observáveis que exigem o cálculo de derivadas a partir de dados experimentais. A diferenciação numérica direta é, em geral, não aconselhável, pois, o ruído dos dados é amplificado, gerando resultados não confiáveis. A base do método de análise dos observáveis, para este trabalho, exige o cálculo de derivadas. Para evitar a amplificação dos ruídos, em vez de aplicar uma técnica clássica de diferenciação numérica, empregamos um método que se baseia na resolução de uma equação integral de *primeiro tipo* [28]. As equações funcionais, em que as funções desconhecidas aparecem sob o sinal de integral, denominam-se equações integrais. Se a equação integral possui apenas uma função desconhecida e a mesma é do 1º grau, a equação integral é chamada de *linear*. Uma equação integral linear denomina-se de primeiro tipo, se possui a forma:

$$\varphi(x) = \int_a^b \kappa(x, \xi)u(\xi)d\xi, \quad (3.6)$$

onde $\varphi(x)$ e $\kappa(x, \xi)$ são funções contínuas dadas e $u(\xi)$ é a função desconhecida.

A grande vantagem apresentada pelo método utilizado neste trabalho [29], é que o mesmo não impõe suposições sobre a forma funcional dos dados e que existem vários métodos confiáveis para resolver numericamente este tipo de equação integral.

Um método numérico estável para resolver uma equação integral de primeiro tipo é através do processo de *regularização de Tikhonov*. Este procedimento evita a amplificação dos ruídos presentes nos dados. Por outro lado, o método de regularização Tikhonov contém um parâmetro de regulação interno, responsável pelo equilíbrio entre a manutenção das características essenciais dos dados e o controle da amplificação do ruído. Em resumo, um pequeno valor do parâmetro de regularização favorece a precisão do ajuste enquanto que um grande impõe a suavização da função de ajuste.

Neste trabalho utilizamos o chamado *critério de Morozov* para selecionar o valor apropriado do parâmetro de regularização [30]. O critério de Morozov consiste em escolher o parâmetro de regularização de tal maneira, que a média das diferenças entre os valores medidos e os dados estimados são da mesma ordem de grandeza, em comparação com o desvio padrão dos dados brutos. Às vezes, usamos a validação cruzada generalizada [31,32], uma técnica para avaliar a capacidade de generalização de um modelo, a partir de um conjunto de dados. Esta técnica é amplamente empregada em problemas onde o objetivo da modelagem é a predição. Veja a referência [28] para uma introdução às

técnicas de suavização de dados, via regularização de Tikhonov.

3.3 Colapso de dados

O colapso de dados [33] é uma técnica utilizada para estabelecer uma escala a partir da observação de curvas em determinadas regiões e também para extrair expoentes associados em diversos problemas que possuam características auto-similares [4]. Para muitos sistemas simples, as diversas curvas podem convergir em uma única curva [24].

No campo das simulações numéricas, este método tem sido utilizado para analisar e extrair expoentes em diversos problemas [13]. Desta maneira, é essencial ter uma medida adequada para que se possa ter uma confiabilidade no colapso. Em alguns problemas, são esperadas leis de potências puras, em outros os expoentes são conhecidos aproximadamente, porém, o colapso de dados é passível de correções em termos do escalonamento. Nessas situações, existem métodos conhecidos para extrair os expoentes ou para adicionar os termos de correções [33].

A técnica de colapso de dados consiste em analisar a quantidade $m(t, L)$ em função de uma variável de escala $w(t, L)$. A escala considerada pode ser do tipo:

$$m(t, L) = L^d f(t/L^c), \quad (3.7)$$

com $w = t/L^c$. A grandeza $m(t, L)$ obedece uma relação de escala que depende da natureza do problema a ser considerado, podendo assumir valores de observáveis como: magnetização, calor específico, tamanho do sistema ou pode inclusive assumir formas gerais. De acordo com a descrição do problema os parâmetros L e t podem representar qualquer variável de controle ou evolução do sistema, respectivamente. Para sistemas de tamanho muito grande, ou seja, número de componentes do sistema indo para o infinito, L e t representariam parâmetros termodinâmicos. Sendo L um observável da escala de comprimento, o expoente d seria um tipo de dimensão da grandeza $m(t, L)$ e o expoente c a dimensão da variável t , observe a equação 3.7.

Em geral, é regra para sistemas dominados por flutuações que os expoentes d e c assumam valores difíceis de ser obtidos, ao contrário de uma análise dimensional. Tendo os expoentes quanto a função $f(t/L^c)$ definem o comportamento do sistema. Dessa forma, duas variáveis que são independentes uma da outra combinam em uma escala para dar

origem a uma nova variável e isso leva a uma simplificação na descrição do fenômeno. Esse fato reforça ainda mais a importância da hipótese de escala.

Na referência [33], é proposta uma medida que pode ser utilizada para qualificar o colapso dos dados. Essa medida utiliza um princípio de minimização, para uma busca dos expoentes exatos ou mais precisos.

Se a função $f(t/L^c)$ em (3.7) é conhecida, a soma dos resíduos é dada por

$$E_r = \frac{1}{\eta} \sum |L^{-d}m - f(t/L^c)| \quad (3.8)$$

neste caso a soma é superior a todos os pontos dados e é mínima para a escolha correta dos expoentes (d, c) . Na ausência de qualquer erro, estatístico ou sistemático, o valor mínimo é igual a zero.

Na maioria dos casos, a função $f(t/L^c)$ não é conhecida, mas é, em geral, uma função analítica. O método sugere que se faça uma interpolação de $f(t/L^c)$. Colocando em ordem os valores dos dados, de modo que m_{ij} e t_{ij} representem o i -ésimo valor de t para o j -ésimo valor da variável L . O erro residual é definido como:

$$E_r = \left[\frac{1}{\eta} \sum_p \sum_{j \neq p} \sum_{i, N_p} |L_j^{-d}m_{i,j} - \epsilon_p(L_j^{-c}t_{ij})|^q \right]^{1/q} \quad (3.9)$$

onde $\epsilon_p(L_j^{-c}t_{ij})$ é a interpolação da função $f(t/L^c)$ para os valores do conjunto de dados p e η é o número de pares. Na expressão do erro residual, q tem caráter geral, embora neste trabalho tenha sido utilizado o valor $q = 1$.

3.4 Dinâmica crítica em tempos curtos

Em geral, nos sistemas hamiltonianos que exibem transições de fases, muitos parâmetros são envolvidos no processo. Porém, o conceito de universalidade, introduzido por Kadanoff em 1966, sugere que o comportamento crítico de sistemas hamiltonianos não dependa necessariamente de todos os parâmetros do hamiltoniano. Kadanoff mostrou em seus trabalhos que o comportamento de escala do sistema, nas proximidades do ponto crítico, pode ser explicado através da seguinte consideração: as interações resultantes que exibem o comportamento do sistema não serão alteradas se os graus de liberdade forem agrupados e tomados como uma só entidade, do ponto de vista matemático. Desta forma,

os detalhes das interações microscópicas seriam desprezados, em função das grandes flutuações observadas no ponto crítico. A descrição qualitativa do sistema não sofreria alteração enquanto fosse reduzido o número de graus de liberdade. Mais tarde, as ideias de Kadanoff tornaram-se a base para a construção do *grupo de renormalização* [23]. O grupo de renormalização, consiste em um conjunto de operações matemáticas que permitem a investigação sistemática de sistemas físicos, observados a partir de diferentes escalas. O grupo de renormalização está intimamente relacionado com a *invariância de escala*, simetrias na qual um sistema parece o mesmo em todas as escalas, a chamada auto-similaridade. A maneira com que a escala varia pode ser imaginada como se o sistema fosse investigado a partir de várias lentes de aumento. A medida que mudamos as lentes o sistema preserva suas características/propriedades, a exemplo das estruturas fractais que preservam as suas características geométricas [34].

Até pouco tempo, o comportamento universal só era observado em sistemas que já tinham atingido o estado estacionário, ou seja, que já obedeciam a distribuição de Boltzmann no equilíbrio [7, 8, 35]. Por esse fato, os expoentes críticos eram obtidos, numericamente, a partir de configurações de equilíbrio. Uma das grandes dificuldades encontradas é o fato de que os sistemas em estudo, nas proximidades do ponto crítico, são fortemente correlacionados. Este fato implica grandes esforços para obter configurações decorrelacionadas, afim de medir os observáveis termodinâmicos desejados. Esses fatos motivaram o interesse nos trabalhos de Huse [36] e Janssen [14]. Esses trabalhos revelaram um comportamento universal bem antes do sistema atingir o equilíbrio.

Além de aumentar o conhecimento fundamental dos fenômenos críticos, a investigação do comportamento universal da dinâmica de tempos curtos também tornou possível novos modos de determinar todos os expoentes estáticos e dinâmicos [13]. Os expoentes críticos podem ser determinados através do comportamento de lei de potência dos observáveis no início da evolução temporal ou por análise de escala de tamanho finito. Por exemplo, a simulação de Monte Carlo de dinâmicas críticas em tempo curtos é a análise das séries temporais de um pequeno conjunto de observáveis quando os parâmetros de controle são definidos pelos seus valores no ponto de transição. Os observáveis são tipicamente o parâmetro de ordem e alguns dos seus momentos ou cumulantes [13]. A análise requer que a configuração inicial seja cuidadosamente controlada. Caracterizando as configurações iniciais podemos ter, no caso de sistemas magnéticos, o caso ordenado e o

desordenado.

Em uma grande variedade de Hamiltonianos e sistemas dinâmicos, verifica-se que a evolução no tempo dos observáveis no ponto crítico segue uma lei de potência logo após um tempo inicial “microscópico”. Este fato importante sugere que a abordagem de curta duração pode ser utilizada para identificar os valores dos parâmetros críticos de controle. Mais importante ainda, os expoentes universais da transição podem ser diretamente relacionados com os expoentes da lei de potência observadas durante a evolução dinâmica. A obtenção dos expoentes universais junto com os parâmetros críticos de controle é um dos principais objetivos da técnica de análise de tempos curtos.

É possível descrever uma experiência de dinâmica crítica em tempos curtos a partir de uma configuração completamente ordenada. Inicialmente um estado inicial é escolhido, de tal modo que o sistema apresente uma magnetização inicial unitária. Suponhamos que uma simulação de Monte Carlo é iniciada muito perto do ponto crítico. Em seguida, o sistema evolui durante um tempo que é curto em relação ao tempo necessário para o mesmo atingir o estado estacionário. Graças a criticidade que domina o problema, podemos prever a forma de $M(t)$ neste experimento através de um método muito útil no estudo das transições de fases e mensurar expoentes críticos estáticos e dinâmicos. A teoria formal que apoia estas considerações foi originalmente desenvolvido pela Janssen e colaboradores [14, 36], utilizando técnicas de teoria de campo. Em resumo, a teoria fornece uma maneira de analisar o comportamento universal do sistema bem antes do mesmo atingir o estado estacionário. Para descrever o comportamento da magnetização próximo ao ponto crítico, assumimos a seguinte relação de escala:

$$\langle M(t) \rangle \sim t^{-\beta/\nu z} \mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon), \quad (3.10)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica médias sobre as diferentes realizações da dinâmica; β , ν e z são os expoentes críticos usuais [37, 38]; t é o tempo, ε é a distância ao ponto crítico e $\mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon)$ é uma função de escala.

O comportamento da magnetização média mostra-se mais evidente quando os dados são traçados em uma escala logarítmica dupla, no qual $\ln \langle M(t) \rangle$ é traçado em função de $\tau = \ln(t)$. Lembramos que aplicando o logaritmo natural na Lei de Escala 3.10, obtemos o comportamento da magnetização média na escala logarítmica:

$$\ln \langle M(t) \rangle = -\frac{\beta}{\nu z} \ln(t) + \ln \mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon) \quad (3.11)$$

No ponto crítico, a derivada da magnetização média na escala logarítmica é nula. Esta última característica sugere que seja introduzida a seguinte grandeza

$$\Psi(\tau, \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \tau} \ln \langle M(t) \rangle, \quad (3.12)$$

que é a derivada do logaritmo da magnetização média em função do logaritmo do tempo ($\tau = \ln(t)$). Derivando a equação 3.11 em relação ao logaritmo do tempo, obtemos o comportamento de $\Psi(\tau, \varepsilon)$, como podemos observar abaixo:

$$\begin{aligned} \Psi(\tau, \varepsilon) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left[-\frac{\beta}{\nu z} \ln(t) \right] + \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\ln \mathcal{F}(\overbrace{t^{1/\nu z} \varepsilon}^x) \right], \\ \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + \frac{1}{\mathcal{F}(x)} \frac{\partial \mathcal{F}(x)}{\partial \tau}, \\ \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + \frac{1}{\mathcal{F}(x)} \frac{d\mathcal{F}(x)}{dx} \frac{dx}{d\tau}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

O termo $t^{1/\nu z}$ pode ser reescrito em termos do logaritmo do tempo (τ):

$$\begin{aligned} A &= t^{1/\nu z}, \\ \ln(A) &= \frac{1}{\nu z} \overbrace{\ln(t)}^{\tau}, \\ e^{\tau/\nu z} &= A, \\ e^{\tau/\nu z} &= t^{1/\nu z}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Desta forma, temos:

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{d}{d\tau} (e^{\tau/\nu z}) = \frac{1}{\nu z} x \quad (3.15)$$

Assim, a equação 3.15 pode ser adicionada a equação 3.13:

$$\begin{aligned} \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + x \left[\frac{1}{\mathcal{F}(x)} \frac{d\mathcal{F}(x)}{dx} \frac{1}{\nu z} \right] \\ \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + x \tilde{\Psi}(x). \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $x = t^{1/\nu z} \varepsilon = e^{\tau/\nu z} \varepsilon$ é uma variável de escala e $\tilde{\Psi}(t^{1/\nu z} \varepsilon)$ é uma função de escala universal.

No ponto crítico, outras quantidades também apresentam um comportamento de escala [13]. Em particular, tanto o fator de estrutura como a flutuação do parâmetro de ordem escalam como segue:

$$S_k(t) \sim \Delta M(t) \sim t^{\gamma/\nu z}, \quad (3.17)$$

onde γ é o expoente crítico da susceptibilidade.

O expoente crítico dinâmico z é avaliado a partir da relação abaixo:

$$\xi(t) \sim t^{-3/2z}, \quad (3.18)$$

ou

$$U_2(t) \sim t^{3/z}. \quad (3.19)$$

Além disso, o comportamento da derivada da magnetização em função do tempo numa escala dupla logarítmica é dado por:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln M(t, \varepsilon) \right|_{\varepsilon=0} \sim t^{1/\nu z} \quad (3.20)$$

Capítulo 4

Resultados

4.1 A Simulação

As simulações tiveram o objetivo de analisar o caráter crítico de uma rede de spins com interação entre primeiros vizinhos, que interagem segundo o modelo de Ising tridimensional. As simulações foram realizadas em uma rede cúbica simples de lado $L = 1024$ e parâmetro de rede $a = 1$, totalizando $N = L^3$ spins. Em nossas simulações utilizamos as unidades de processamento gráfico (GPUs). Estes dispositivos permitem a realização de simulações de modo paralelo em grande escala. Nossa implementação é baseada na plataforma de computação paralela CUDA [39] desenvolvido pela *NVIDIA Corporation*. A maioria de nossas simulações foram realizadas em uma GPU com cerca de 1,3 gigabytes de memória de acesso aleatório. Isto significa que poderíamos simular até 8 redes, cada uma com $1024 \times 1024 \times 1024$ spins, simultaneamente com o mesmo valor de temperatura levando cerca de 5 minutos de computação para gerar uma série temporal com 1000 passos de Monte Carlo (*Monte Carlo Steps, MCS*). Um passo de Monte Carlo no nosso modelo é definido como N tentativas de inversão de spin.

Inicializamos o sistema numa configuração totalmente ordenada, onde todos os spins apontam na mesma direção. Portanto, em $t = 0$, fizemos $\sigma_i = 1$ para todo i . Assim a densidade de magnetização do sistema em $t = 0$ é unitária. O modelo estudado possui apenas um parâmetro de controle, a temperatura. Para cada valor de temperatura o sistema evolui a partir de um estado completamente ordenado de acordo com o Algoritmo de Metropolis e em uma janela de tempo entre 100 e 1100 MCS. Utilizamos um número de passos inferior ao necessário para que o sistema atingisse o estado estacionário. O número

de passos necessário para que o sistema atinja o estado estacionário é chamado de *tempo de relaxação*.

Para cada valor de temperatura repetimos o processo a partir da criação de uma nova rede, de maneira a simular o procedimento de realizar as mesmas medições em novas amostras. Foram realizadas simulações com 32 amostras e tomadas as médias dos observáveis desejados, afim de se obter as séries temporais das quantidades de interesse. As grandezas físicas calculadas diretamente das simulações estão indicadas a seguir:

1. Magnetização

$$\langle M(t) \rangle = \frac{1}{L^3} \left\langle \left(\sum_i \sigma_i \right) \right\rangle. \quad (4.1)$$

2. Segundo Momento da Magnetização

$$\langle M^2(t) \rangle = \frac{1}{L^3} \left\langle \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right\rangle \quad (4.2)$$

3. Fator de Estrutura

$$\langle S_k(t) \rangle = \frac{1}{L^3} \left\langle \sum_{i,x} \sigma_i \sigma_{i+x} \cos(kx) \right\rangle \quad (4.3)$$

onde $k = 2\pi/L$.

4. Comprimento de Correlação Dependente do Tempo

$$\langle \xi(t) \rangle = \frac{1}{k} \sqrt{\left(\frac{M^{(2)}}{S_k} - 1 \right)}. \quad (4.4)$$

5. Flutuação do Parâmetro de Ordem

$$\Delta M(t) = \frac{1}{L^3} \left\langle \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right\rangle - \frac{1}{L^3} \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle^2 \quad (4.5)$$

6. Cumulante de Segunda Ordem

$$U_2(t) = \frac{M^{(2)}}{\langle M \rangle^2} - 1. \quad (4.6)$$

Como a maioria de nossas análises foram feitas em uma escala logarítmica, optamos por fazer medições uniformemente espaçados nesta escala.

4.2 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis é o mais utilizado para simulação de sistemas físicos dentre os algoritmos do método Monte Carlo. Seu princípio de funcionamento é simples: observar como uma possível mudança na configuração do sistema implicaria na sua energia e, através de certa aleatoriedade, definir se essa mudança será feita ou não. Lembramos que o objetivo é realizar uma caminhada aleatória no espaço de configurações, de tal forma que a probabilidade de uma dada configuração, $\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N)$, ser visitada seja proporcional ao *peso estatístico* da mesma. Desta forma apenas configurações que contribuam significativamente para as médias termodinâmicas serão geradas [40].

A partir da escolha do parâmetro de controle que no nosso caso é a temperatura, e do tamanho do sistema (N), o procedimento se inicia com a geração da rede no computador. Os elementos da nossa rede são as variáveis de spin. Como citado anteriormente, fizemos com que inicialmente $\sigma_i = 1$ para todo elemento da rede. Aguardamos o número de passos de Monte Carlo atingir a marca de 100 MCS, e após esse tempo, registramos os valores dos observáveis de interesse em intervalos de tempo uniformemente espaçados numa escala logarítmica até ser atingida a marca de 1100 MCS, estando o sistema fora do estado estacionário.

Em termos do sistema de spins que estamos considerando, podemos sistematizar a dinâmica da seguinte maneira:

1. Geramos uma rede cúbica de tamanho N de forma que todos os elementos sejam unitários.
2. Escolhemos um spin ao acaso através de um sorteio e promovemos uma inversão em sua orientação.
3. Calculamos a diferença de energia (ΔE) associada à inversão da orientação do spin.
4. Se a diferença de energia entre as configurações antes e após a troca for menor ou igual a zero, aceitamos a mudança. Caso contrário, sorteamos um número aleatório r igualmente distribuído no intervalo $[0, 1]$ e calculamos $p = \exp\{-\beta\Delta E\}$.
5. Se $r \leq p$, então a mudança de orientação é aceita. Caso contrário, a configuração permanecerá a mesma e seguimos para o próximo passo.

6. Repetimos N vezes os passos 2, 3, 4 e 5.
7. Registramos o valor das médias das grandezas físicas relevantes na janela de tempo de 100 à 1100 MCS em intervalos de tempo uniformemente espaçados numa escala logarítmica.
8. Repetimos os passos 2 a 7 até obtermos 32 amostras.
9. Calculamos as médias das grandezas físicas desejadas em cada amostra.

4.3 Comportamento das grandezas calculadas

4.3.1 Magnetização média

Analisamos o comportamento da magnetização da rede para um conjunto de valores de *inverso de temperatura* (K) em função do tempo. Por uma questão de conveniência, trabalhamos com valores de inverso de temperatura. O procedimento adotado seguiu os critérios da Dinâmica de Tempos Curtos. Mantivemos fixo o tamanho da rede, o parâmetro de rede e o número de spins, e variamos linearmente o valor de K no intervalo de interesse $[0,2211; 0,2220]$. Os nossos resultados para uma rede de tamanho $1024 \times 1024 \times 1024$ e diversos valores de K são mostrados na figura 4.1.

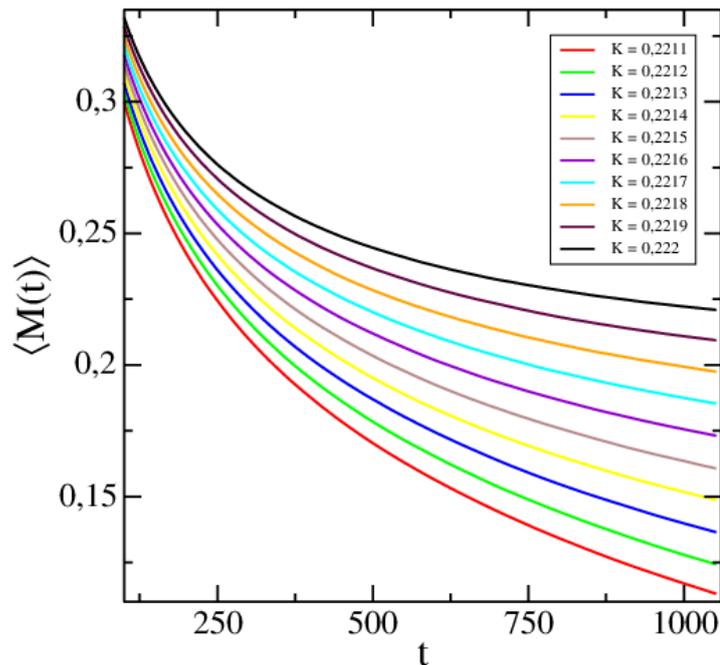


Figura 4.1: Magnetização média em função do tempo para vários valores de K . As curvas indicam o comportamento do parâmetro de ordem do modelo de Ising para tempos curtos e mostram que a magnetização média decai para uma constante aproximadamente independente do tamanho do sistema caso a temperatura seja menor ou maior do que a temperatura crítica.

As curvas indicam que a magnetização média decai para uma constante aproximadamente independente do tamanho do sistema caso a temperatura seja menor que a temperatura crítica ($K > K_c$). Caso contrário, ($K < K_c$), a magnetização média decai para um valor da ordem de $1/N$. A magnetização é peça chave na análise proposta neste

trabalho, uma vez que fornece as condições necessárias para que possamos sintonizar o sistema no parâmetro crítico de controle. Lembramos que a relaxação é exponencial para uma temperatura não muito próximo da crítica, e ela se transforma em uma lei de potência quando a temperatura aproxima-se da crítica de acordo com o seguinte Lei de Escala:

$$\langle M(t) \rangle = t^{-\beta/\nu z} \mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon).$$

4.3.2 Magnetização média na escala logarítmica

O comportamento da magnetização média mostra-se mais evidente quando os dados são traçados em uma escala logarítmica dupla, no qual $\ln\langle M(t) \rangle$ é traçado em função de $\tau = \ln(t)$. Na figura 4.2, construímos um gráfico para ilustrar tal comportamento.

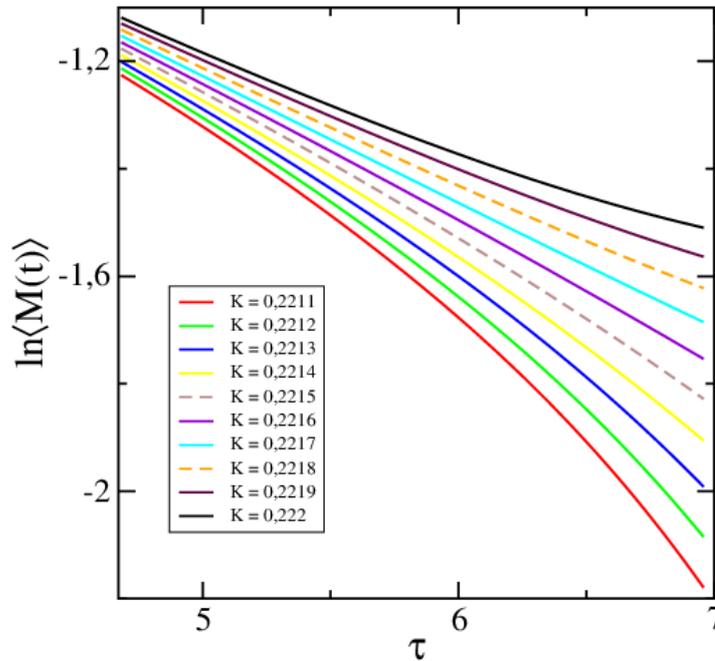


Figura 4.2: Logarítmo da magnetização média em função do logarítmo do tempo para vários valores de K . A partir das curvas indicadas pode-se inferir que $0,2215 < K_c < 0,2218$. Os dados foram suavizados através da técnica de regularização de Tikhonov.

Observando a figura 4.2, percebemos que o logarítmo da magnetização média possui três possíveis comportamentos característicos:

1. $\ln\langle M(t) \rangle$ parece tender a uma constante, para $K \geq 0,2218$, já que nessa região as curvas possuem concavidades voltadas para cima.

2. $\ln\langle M(t) \rangle$ parece tender a $-\infty$, para $K \leq 0,2215$, já que nessa região as curvas possuem concavidade voltada para baixo.
3. $\ln\langle M(t) \rangle$ é praticamente linear entre $0,2215 < K < 0,2218$.

Na figura 4.2 não é possível perceber qual curva representa a melhor lei de potência, mas, é evidente que a transição ordem-desordem ocorre em algum ponto entre $K = 0,2215$ e $K = 0,2218$, já que neste intervalo as curvas se aproximam de retas.

Lembramos que o comportamento da magnetização média na escala logarítmica pode ser representado por:

$$\ln\langle M(t) \rangle = -\frac{\beta}{\nu z} \ln(t) + \ln \mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon) \quad (4.7)$$

4.3.3 Derivada da magnetização média na escala logarítmica

Observamos na figura 4.2 que $\ln\langle M(t) \rangle$ possui concavidade voltada para cima quando $K > 0,2218$, e concavidade voltada para baixo quando $K < 0,2215$. Esta última característica sugere que seja introduzida a seguinte grandeza

$$\Psi(\tau, \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \tau} \ln\langle M(t) \rangle, \quad (4.8)$$

que é a derivada do logaritmo da magnetização média em função do logaritmo do tempo ($\tau = \ln(t)$).

Lembramos também que ao derivar o logaritmo da magnetização média em função do logaritmo do tempo, obtemos:

$$\begin{aligned} \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + x \left[\frac{1}{\mathcal{F}(x)} \frac{d\mathcal{F}(x)}{dx} \frac{1}{\nu z} \right] \\ \Psi(\tau, \varepsilon) &= -\frac{\beta}{\nu z} + x \tilde{\Psi}(x). \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde $x = t^{1/\nu z} \varepsilon = e^{\tau/\nu z} \varepsilon$ é uma variável de escala e $\tilde{\Psi}(t^{1/\nu z} \varepsilon)$ é uma função de escala universal.

As derivadas foram obtidas numericamente a partir da técnica de regularização de Tikhonov. A técnica além de permitir o cálculo de derivadas de maneira eficiente, também minimiza os possíveis ruídos dos dados, tornando possível a construção de curvas com comportamentos suaves.

Na figura 4.3 é possível observar o comportamento das derivadas das curvas indicadas na figura 4.2.

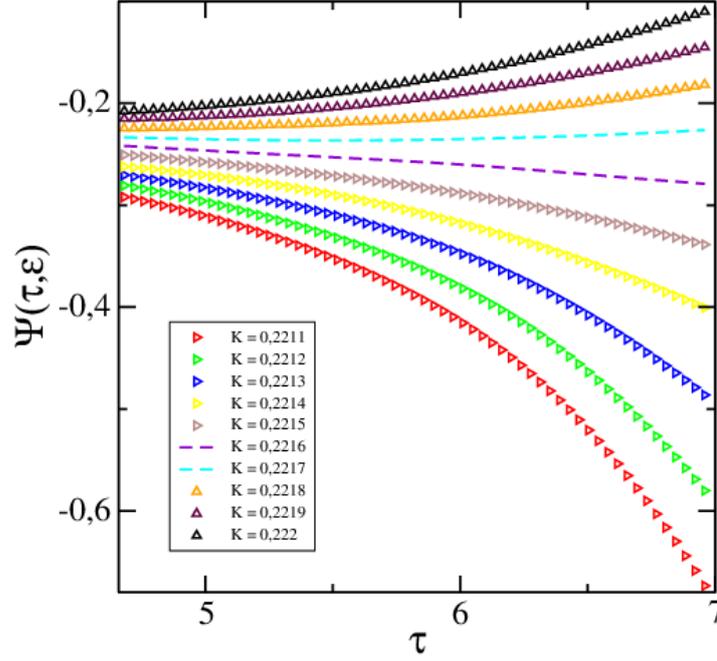


Figura 4.3: Gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo para diferentes valores de K . As curvas indicam que para $K = 0,2216$ e $K = 0,2217$, $\Psi(\tau, \varepsilon)$ possui comportamento aproximadamente linear.

A figura 4.3 ilustra o comportamento de $\Psi(\tau, \varepsilon)$ à medida que τ cresce. Para valores de $K \geq 0,2217$, $\Psi(\tau, \varepsilon)$ tende a zero. Enquanto que para valores de $K \leq 0,2216$, $\Psi(\tau, \varepsilon)$ tende a $-\infty$. Por outro lado, é possível perceber que o ponto crítico está associado a um valor de K crítico, no qual $\Psi(\tau, \varepsilon)$ é independente do tempo, ou seja, $\Psi(\tau, \varepsilon = 0) = -\beta/\nu z$, de acordo com a equação 4.9. Com o objetivo de obter uma estimativa mais precisa da localização do ponto crítico, traçamos a derivada do logaritmo da magnetização média em função de K para um conjunto selecionado de valores de $\ln(t)$. Na figura 4.4 é possível observar o comportamento de $\Psi(\tau, \varepsilon)$ à medida que K cresce.

Através da figura 4.4 é possível perceber que todas as curvas possuem aparentemente um ponto de interseção comum $(K_c, -\beta/\nu z)$, no qual $\Psi(\tau, \varepsilon)$ é independente do tempo. Embora não seja aparente na escala da figura, diferentes pares de curvas cruzam-se em pontos ligeiramente distintos, com isso foi possível perceber uma tendência pequena e bastante sistemática na distribuição dos pontos de cruzamento. Destacamos o aparente ponto de interseção com um retângulo tracejado, ver figura 4.4, e em seguida, construímos um novo gráfico indicando a ampliação da região destacada pelo retângulo, ver figura 4.5.

A partir da figura 4.5 é possível notar rapidamente que cada cruzamento fornece

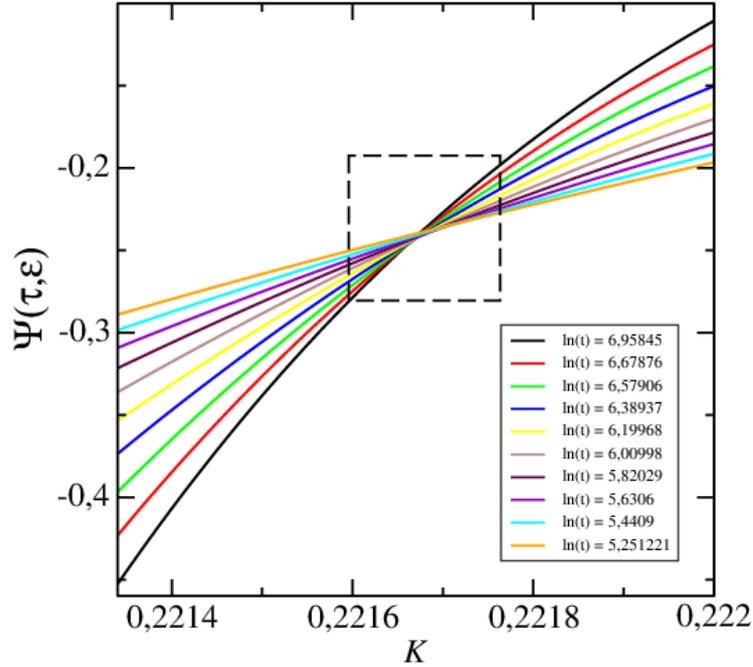


Figura 4.4: Gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo como uma função de K . Cada curva resulta de um corte vertical na figura 4.3 no valor correspondente a $\ln(t)$. O retângulo tracejado indica a região crítica.

uma estimativa para K_c e conseqüentemente uma estimativa para $\beta/\nu z$, de acordo com a equação 4.9.

Note, ainda, a tendência para o cruzamento entre as curvas se deslocar para a direita à medida que $\tau = \ln(t)$ diminui. Como existem vários cruzamentos e conseqüentemente várias estimativas para K_c e $\beta/\nu z$, mostramos como as estimativas para K_c e $\beta/\nu z$ dependem da relação entre os tempos $\omega = t_j/t_i$, com $j = 1, 2, \dots, i-1$ e t_i o tempo correspondente a i -ésima curva. Desta forma, estimamos $K_c = 0,22166(3)$ e $\beta/\nu z = 0,243(4)$ a partir da extrapolação linear dos dados referentes as curvas das figuras 4.6 e 4.7. Os erros foram calculados a partir do espalhamento dos pontos de interseção em torno dos valores médios.

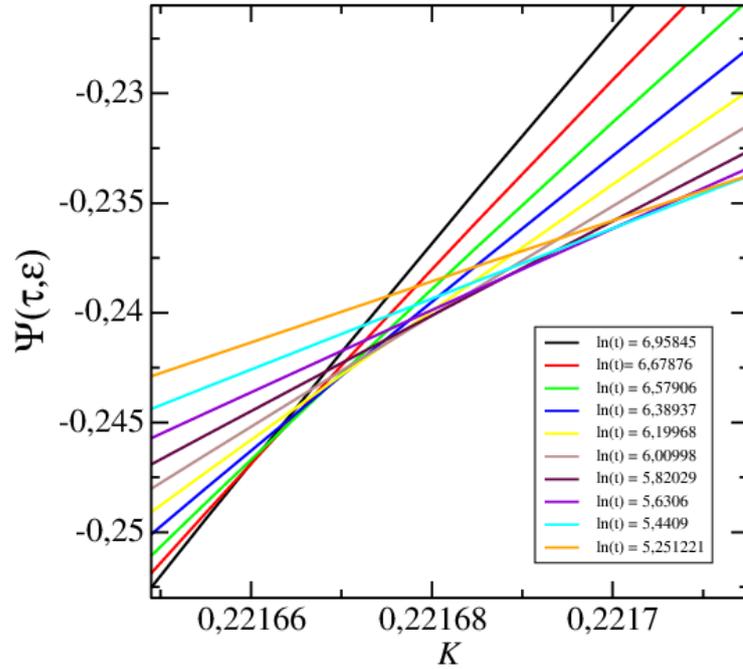


Figura 4.5: Ampliação do gráfico da derivada do logaritmo da magnetização em relação ao logaritmo do tempo como uma função de K . Cada cruzamento é uma estimativa para K_c e para $\beta/\nu z$.

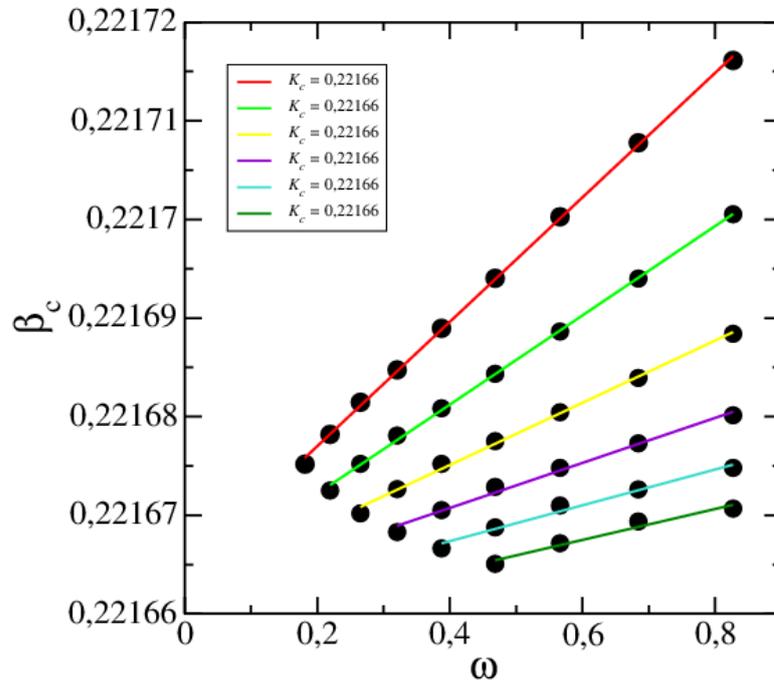


Figura 4.6: Estimativa para o valor de β_c em função da relação dos tempos $\omega = t_j/t_i$, com $j = 1, 2, \dots, i - 1$ e t_i o tempo correspondente a i -ésima curva. Para cada conjunto de dados aplicamos uma regressão linear, assim determinamos várias estimativas para K_c .

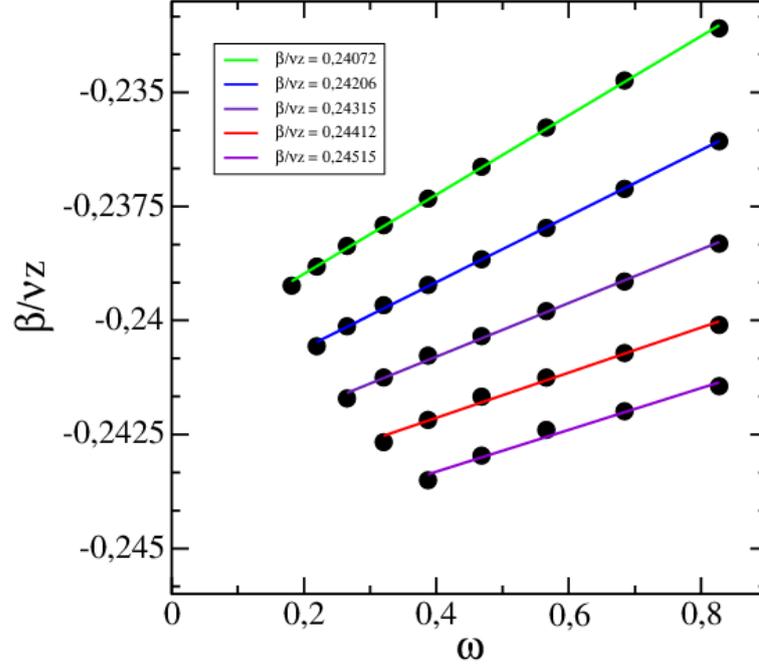


Figura 4.7: Estimativa para o valor de β_c em função da relação dos tempos $\omega = t_j/t_i$, com $j = 1, 2, \dots, i - 1$ e t_i o tempo correspondente a i -ésima curva. Para cada conjunto de dados aplicamos uma regressão linear, assim determinamos várias estimativas para $\beta/\nu z$.

4.3.4 Colapso dos dados

A equação 4.9 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$x\tilde{\Psi}(x) = \frac{\beta}{\nu z} + \Psi(\tau, \varepsilon). \quad (4.10)$$

De acordo com a equação acima, os dados representados pelas curvas da figura 4.4 devem formar uma única curva universal se $\Psi(\tau, \varepsilon)$ for traçado contra a variável de escala x . Isto ocorre apenas quando as melhores estimativas dos parâmetros críticos $1/\nu z$ e K_c são utilizadas na escala. Lembramos que o processo utilizado para obter as melhores estimativas baseia-se numa técnica que analisa a estatística dos resíduos dos dados colapsados (E). Esta estatística mede a qualidade do colapso dos dados, e pode ser escrita como segue:

$$E(1/\nu z, K_c) = \frac{1}{\eta} \sum_p \sum_{i \neq p} \sum_{j, \text{sobre}} |\Psi(\tau_i, \varepsilon_j) - I_p(x_{ij})|, \quad (4.11)$$

que é uma função de valores arbitrados para $1/\nu z$ e K_c .

No plano escalado, as abscissas são dadas por:

$$x_{ij} = t_i^{1/\nu z} \varepsilon,$$

$$\begin{aligned}
 x_{ij} &= t_i^{1/\nu z} (K_c - K_j) / K_j, \\
 x_{ij} &= t_i^{1/\nu z} \varepsilon_j, \\
 x_{ij} &= e^{\tau/\nu z} \varepsilon_j. \text{ (observe a equação 3.14)}
 \end{aligned}$$

que constitui uma função $x_{ij} = x(t_i, \varepsilon_j) = x(\tau_i, \varepsilon_j)$.

Para encontrar os valores dos parâmetros críticos realizamos uma pesquisa na rede em um conjunto de pontos (discretos) dentro do retângulo definido por $0,22165 \leq K_c \leq 0,22168$ e $0,70 \leq 1/\nu z \leq 0,76$. O comportamento da qualidade do colapso para os nossos dados está ilustrado na figura 4.8, na qual marcamos E em função de $1/\nu z$, para K fixo. O mínimo de E é atingido para valores de $K_c = 0,22167$ e $1/\nu z = 0,751$. Com esta

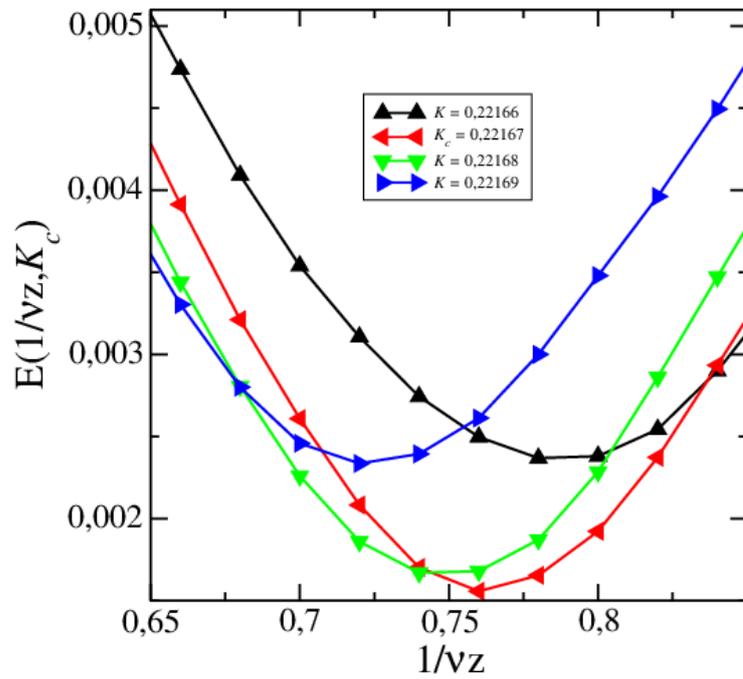


Figura 4.8: O erro médio (E) é mostrado como uma função do valor arbitrado a $1/\nu z$ para diferentes valores de K . O mínimo global, representado pela curva vermelha, indica a melhor estimativa para $1/\nu z$ e K_c .

informação traçamos $\Psi(\tau, \varepsilon)$ em função de $x = e^{\tau/\nu z} \varepsilon$. A figura 4.9 mostra como os dados da figura 4.4 devem formar uma única curva universal. Podemos perceber que os dados colapsam em uma única curva para valores de $K_c = 0,22167$ e $1/\nu z = 0,751$. Tendo uma estimativa para K_c tornamos a realizar simulações para assim obter os expoentes críticos.

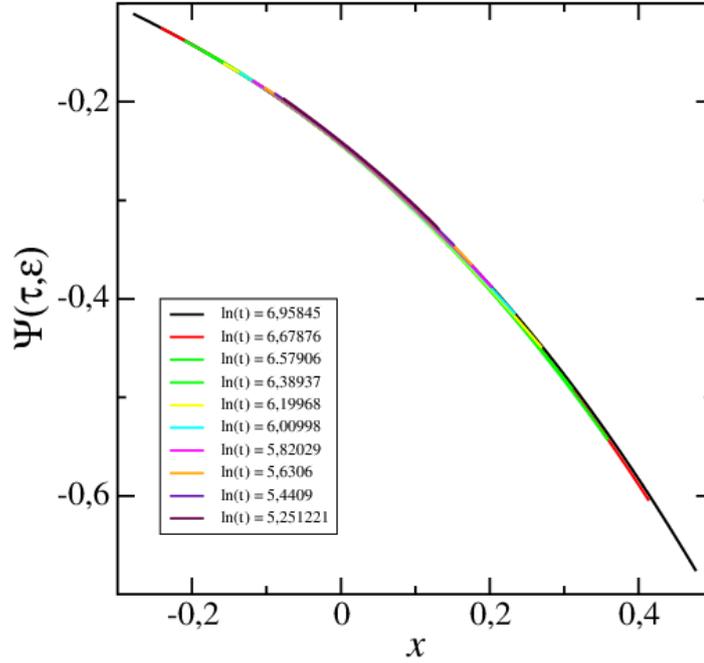


Figura 4.9: Nova representação da figura 4.4 com reescalonamento. A figura indica o colapso completo em uma única curva para valores de $K_c = 0,2216702$ e $1/\nu z = 0,751$, obtidos anteriormente pela minimização da figura de mérito 4.8.

4.4 Determinação dos expoentes críticos

O comportamento do logaritmo da magnetização média em função do logaritmo do tempo na temperatura crítica é representado na figura 4.10. A partir da inclinação da reta determinamos $\beta/\nu z = 0,243$, observe a equação 4.7. Lembramos que o fator de estrutura e a flutuação do parâmetro de ordem escalam da mesma forma, de acordo com a equação 3.17. O comportamento destas grandezas é representado na figura 4.11. A partir da inclinação das retas da figura 4.11 determinamos $\gamma/\nu z = 0,9676(5)$, onde (5) significa o erro estimado. O comportamento do comprimento de correlação dependente do tempo, em uma escala logarítmica dupla, é representado na figura 4.12. A partir desta figura determinamos $3/2z = 0,7316(2)$, observe a equação 3.19. Para finalizar, exibimos na figura 4.13 o comportamento do segundo cumulante de Binder numa escala logarítmica dupla e determinamos o expoente $3/z = 1,465(3)$. Nossa estimativa para o expoente crítico dinâmico foi $z = 2,04778$. Para os expoentes estáticos as estimativas foram $\nu = 0,6495(3)$, $\gamma = 1,2884(5)$ e $\beta = 0,3222(3)$. Observe também que os nossos resultados para os expoentes críticos são compatíveis com a relação de hiper escala $2\beta/\nu z + \gamma/\nu z = 3/z$.

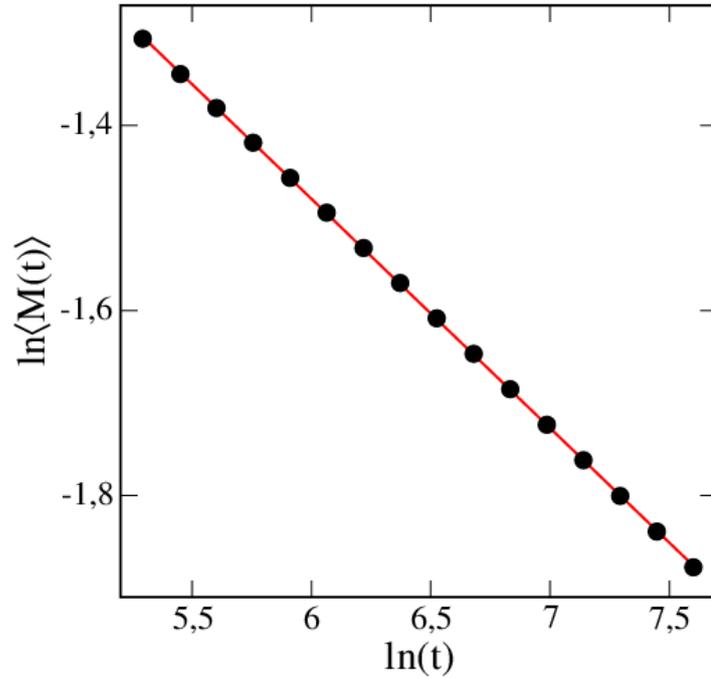


Figura 4.10: Magnetização em função do tempo em uma escala logarítmica dupla para $K_c = 0,2216702$. A curva indica um comportamento linear, desta forma determinamos o expoente $\beta/\nu z$ através da inclinação da reta. A linha é um ajuste linear dos dados.

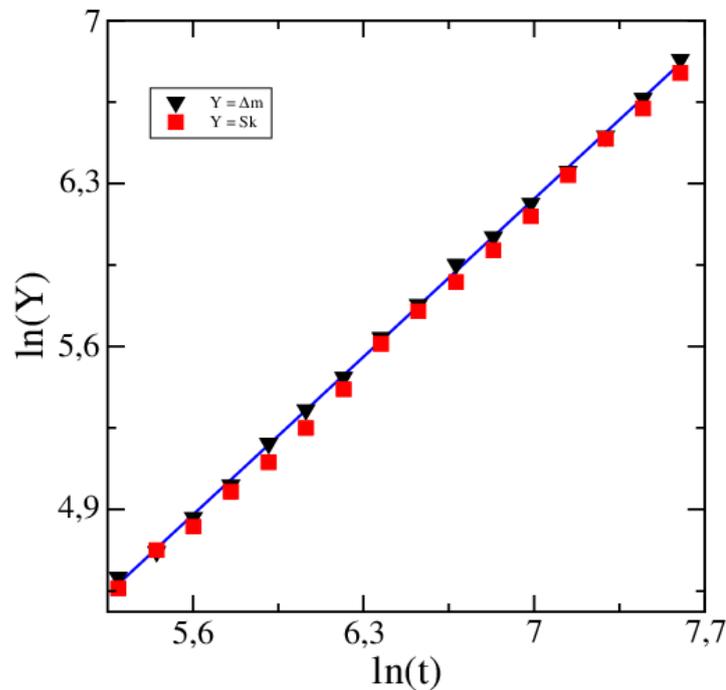


Figura 4.11: Fator de estrutura (S_k) e flutuação do parâmetro de ordem (Δm) em uma escala logarítmica dupla para $K_c = 0,2216702$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $\gamma/\nu z$. A linha é um ajuste linear dos dados.

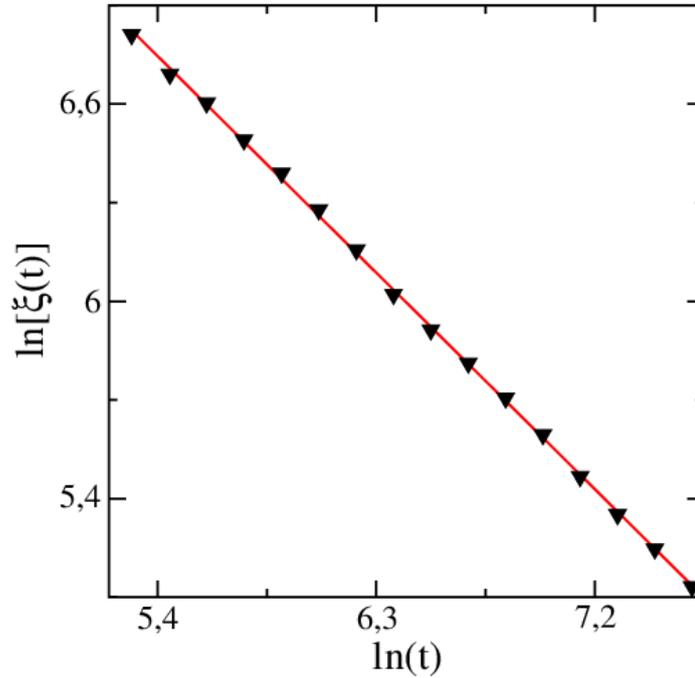


Figura 4.12: Comprimento de correlação dependente do tempo numa escala logarítmica dupla em $k_c = 0,221667$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $3/2z$. A linha é um ajuste linear dos dados.

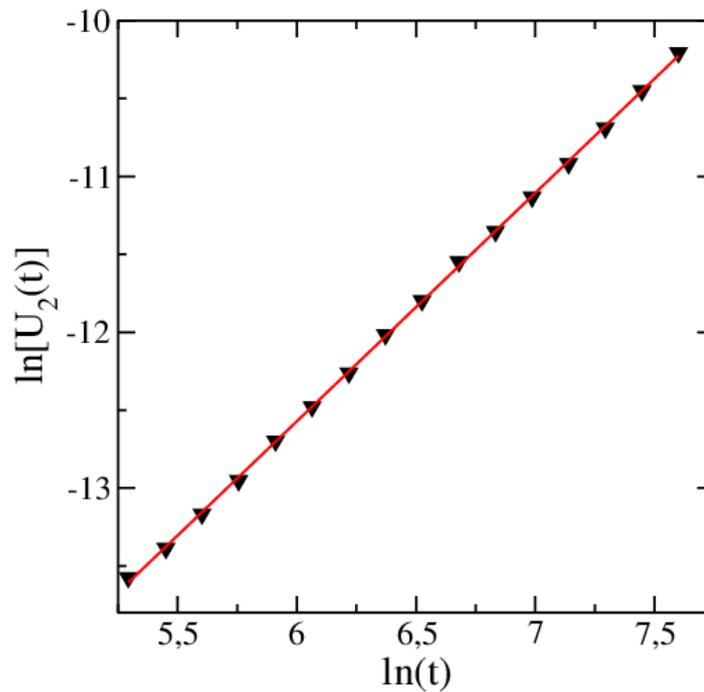


Figura 4.13: Cumulante de segunda ordem numa escala logarítmica dupla para $k_c = 0,221667$. A partir da inclinação da curva determinamos o expoente $3/z$. A linha é um ajuste linear dos dados.

É interessante comparar nossas estimativas com outras disponíveis na literatura. A Tabela 4.1 mostra a estimativa do parâmetro crítico (K_c) e as estimativas dos expoentes críticos ν , γ e β obtidas neste trabalho juntamente com as estimativas obtidas em outras referências.

Tabela 4.1: Comparação dos resultados dos expoentes críticos do modelo de Ising tridimensional obtidos no presente trabalho com aqueles obtidos em outras referências. As numerações entre parênteses são os erros estimados.

Ref.	Ano	ν	γ	β	K_c
[41]	1999	0,6294(5)	1,2353(11)	0,3265(3)	0.22165456(15)
[42]	1999	0,6298(2)	1,2365(11)	0,32645	—
[43]	1999	0,6296(3) [44]	1,2367(15)	0,32605	—
[45]	1999	0,63032(56)	1,2372(13)	0,32688	0.22165459(10)
[46]	2003	0,63020(12)	1,2372(4)	0,3267	—
[47]	2010	0,63002(10)	1,23718(10)	0,32644	—
Nosso trabalho	2015	0,6495(3)	1,2884(5)	0,3222(3)	0,22166(3)

Todas as referências tratam de estudos de modelos com a mesma classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional ou do próprio modelo de Ising tridimensional.

Na referência [41], foram utilizadas técnicas de *escalamento com tamanho finito* com o objetivo de obter resultados precisos de propriedades críticas do modelo de Ising e do modelo de percolação de sítios em três dimensões.

Na referência [42], foi proposto um método para obter um hamiltoniano melhorado para a classe de universalidade de Ising em três dimensões. O hamiltoniano melhorado suprimiu as principais correções de escala e foi obtido por modelos de ajuste com duas constantes de acoplamento. Foram estudados três modelos diferentes: o modelo de Ising com interação entre primeiros vizinhos e interação entre segundos vizinhos, o modelo spin-1 com estados $0, \pm 1$ e interação entre primeiros vizinhos e a teoria ϕ^4 na rede (hamiltoniano de Landau-Ginzburg).

Na referência [43], foi apresentado um estudo via simulação Monte Carlo do modelo ϕ^4 de uma componente numa rede cúbica simples. As correções de escala mais importantes foram estudadas utilizando o método de escala com tamanho finito. As correções para o expoente de escala com alta precisão foram calculadas e o valor do acoplamento no qual

as correções mais relevantes de escala desaparecem foram determinadas. Utilizando estes resultados, foram obtidas estimativas para os expoentes críticos que são mais precisos do que aqueles obtidos com métodos de campo teórico.

Na referência [46], investigou-se vários modelos de rede tridimensional que se acreditava estar na classe de universalidade de Ising via simulação Monte Carlo e escalonamento com tamanho finito. Estes modelos incluem o modelo de *Spin-1/2* com interação entre primeiros vizinhos numa rede cúbica e numa rede com estrutura de diamante. Para a rede cúbica simples, foram incluímos modelos com interações de terceiros vizinhos de força variável. Análises separadas dos dados numéricos confirmam o comportamento crítico semelhante a Ising desses sistemas.

Na referência [47], foi realizado um estudo do modelo de *Spin-1/2* e do modelo *Blume-Capel* numa rede cúbica simples.

De acordo com a tabela anterior, notamos que os expoentes críticos obtidos neste trabalho possuem alta precisão e diferem dos valores obtidos nas referências citadas na segunda e na terceira casa decimal. Para o valor do parâmetro crítico, a precisão está na quinta casa decimal e de acordo com os valores obtidos em outras referências.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho estudamos o comportamento crítico do modelo de Ising em uma rede cúbica simples, através de simulações Monte Carlo de tempos curtos. Empregamos uma nova técnica, recentemente proposta [12], que explora o comportamento de escala da derivada do logaritmo do parâmetro de ordem em relação ao logaritmo do tempo ($\Psi(\tau, \varepsilon)$). Esta técnica permite obter os parâmetros críticos do sistema de forma sistemática e precisa. Além disso, os observáveis físicos são calculados durante a relaxação para o equilíbrio, tempos curtos. Assim, não temos que lidar com o “amortecimento crítico”, ou seja, os longos tempos de relaxação para o equilíbrio induzidos pela divergência do comprimento de correlação na criticalidade. Nós mostramos que ($\Psi(\tau, \varepsilon)$) fornece uma localização precisa do ponto crítico. Verificamos que com o escalonamento dos dados podemos extrair os expoentes críticos associados. Para tal escalonamento, utilizamos uma medida para quantificar a qualidade do colapso dos dados. Ao minimizar esta medida, fomos capazes de obter outras estimativas para um subconjunto de expoentes críticos que caracterizam a criticalidade do sistema.

Nesta dissertação, nos propusemos a obter uma estimativa para o parâmetro crítico, K_c , com alta precisão. E o valor crítico do inverso da temperatura resultou em $K_c = 0,22166(3)$. Consideramos que este objetivo foi alcançado com sucesso. O valor obtido para K_c possui precisão na quinta casa decimal e concorda com resultados recentes publicado na literatura especializada. Embora K_c não seja uma grandeza universal, seu conhecimento preciso constitui-se no primeiro passo para se obter os *expoentes críticos*, estes sim universais.

Nossos resultados para os expoentes críticos estáticos $\nu = 0,6495(3)$, $\gamma = 1,2884(5)$

e $\beta = 0,3222(3)$ e o expoente dinâmico $z = 2,047(2)$ possuem precisão comparável às mais sofisticadas técnicas empregadas no estudo de fenômenos críticos [47].

O procedimento de análise de dados, a partir da dinâmica crítica de tempos curtos, empregado neste trabalho é muito geral e pode ser utilizado para investigar o comportamento crítico de sistemas estatísticos mais complexos.

Referências Bibliográficas

- [1] Rodrick Wallace. Dynamic statistical models of biological cognition: insights from communications theory. *Connection Science*, 26(4):415–439, 2014.
- [2] Y-Y Chen, Y-Z Jiang, X-W Guan, and Qi Zhou. Critical behaviours of contact near phase transitions. *Nature communications*, 5, 2014.
- [3] Za. Mohamed, E. Tka, J. Dhahri, and E.K. Hlil. Short-range ferromagnetic order in $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.16}\text{Ca}_{0.17}\text{MnO}_3$ perovskite manganite. *Journal of Alloys and Compounds*, 619(0):520 – 526, 2015.
- [4] Herch Moyses Nussenzveig and Jacob Palis Júnior. *Complexidade e caos*. Editora UFRJ/COPEA, 1999.
- [5] A Asad and B Zheng. Non-equilibrium critical dynamics of the two-dimensional xy model with hamiltonian equations of motion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(33):9957, 2007.
- [6] J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper. Critical behavior of the two-dimensional random-bond Potts model: A short-time dynamic approach. *Phys. Rev. E*, 70:056134, Nov 2004.
- [7] Linda E Reichl and Ilya Prigogine. *A modern course in statistical physics*, volume 186. University of Texas press Austin, 1980.
- [8] Sílvio Roberto Salinas. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. Editora Edusp, 2005.
- [9] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [10] RH Dong, B Zheng, and NJ Zhou. Hamiltonian equation of motion and depinning phase transition in two-dimensional magnets. *arXiv preprint arXiv:1209.0513*, 2012.

- [11] B. Zheng, M. Schulz, and S. Trimper. Deterministic Equations of Motion and Dynamic Critical Phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1891–1894, Mar 1999.
- [12] L. C. de Souza e A. J. F. de Souza K. P. do Nascimento. Short-time monte carlo simulation of the majority-vote model on cubic lattices. 2015.
- [13] E V Albano, M A Bab, G Baglietto, R A Borzi, T S Grigera, E S Loscar, D E Rodriguez, M L Rubio Puzzo, and G P Saracco. Study of phase transitions from short-time non-equilibrium behaviour. *Reports on Progress in Physics*, 74(2):026501, 2011.
- [14] H.K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 73(4):539–549.
- [15] Matthew N.O. Sadiku. *Elementos de Eletromagnetismo* . Bookman, 2012.
- [16] D.J. Griffiths. *Eletrodinâmica* . Pearson Education.
- [17] Milford F.J. Christy R.W. Reitz, J.R. *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*. Editora Campus, 1982.
- [18] Kleber Daum. Machado. *Teoria do Eletromagnetismo, vol.2*. Editora UEPG, 2004.
- [19] Anita. Macedo. *Eletromagnetismo*. Editora Guanabara.
- [20] H. E. Stanley. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, Oxford University Press, 1971.
- [21] B Zheng. Monte carlo simulations and numerical solutions of short-time critical dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 283(1):80–85, 2000.
- [22] Iram Gleria, Raul Matsushita, and Sergio Da Silva. Complex systems, criticality, and power laws. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 26(2):99–108, 2004.
- [23] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. Newman. *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. Oxford University Press, Inc., 1992.

- [24] H. Eugene Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S358–S366, Mar 1999.
- [25] L. F. D. A. Silva, U.L Fulco, and F.D Nobre. The two-dimensional site-diluted ising model: a short-time-dynamics approach. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(34):346005, 2009.
- [26] Lars Onsager. Crystal statistics. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:1117, 1944.
- [27] Tânia Tomé; Mário José de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade. 1 ed.*, volume 1. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2001.
- [28] J.J. Stickel. Data smoothing and numerical differentiation by a regularization method. *Computers and Chemical Engineering*, 34(467), 2010.
- [29] A. S. Lubansky, Y. Leong Yeow, Yee-Kwong Leong, S. Ranil Wickramasinghe, and Binbing Han. A general method of computing the derivative of experimental data. *AIChE journal*, 52(1):323–332, 2006.
- [30] M. Hanke H. W. Engl and A. Neubauer. Regularization of inverse problems, mathematics and its applications. 34(467), 1996.
- [31] M. Heath G. H. Golub and G. Wahba. Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter. *Technometrics*, 21, 1979.
- [32] P. C. Hansen G. H. Golub and D. P. O’Leary. Tikhonov regularization and total least squares. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 21:185, 1999.
- [33] Somendra M Bhattacharjee and Flavio Seno. A measure of data collapse for scaling. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(33):6375, 2001.
- [34] Benoit B Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*, volume 173. Macmillan, 1983.
- [35] Sílvio R Dahmen. Boltzmann’s work in physics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 28(3):281–295, 2006.
- [36] David A Huse. Remanent magnetization decay at the spin-glass critical point: A new dynamic critical exponent for nonequilibrium autocorrelations. *Physical Review B*, 40(1):304, 1989.

- [37] H. Eugene Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, 71(2):S358, 1999.
- [38] John Cardy. *Scaling and renormalization in statistical physics*, volume 5. Cambridge University Press, 1996.
- [39] CUDA Nvidia. Programming guide, 2008.
- [40] Adauto José Ferreira de Souza. *Grupo de Renormalização por Simulação Computacional: Abordagem para Fenômenos Críticos*. PhD thesis, Universidade Federal de Pernambuco. Departamento de Física, 1993.
- [41] V. Martín-Mayor A. Muñoz Sudupe G. Parisi H.G. Ballesteros, L.A. Fernández and J.J. Ruiz-Lorenzo. Scaling corrections: site percolation and ising model in three dimensions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32, 1999.
- [42] M. Hasenbusch, K. Pinn, and S. Vinti. Critical exponents of the three-dimensional ising universality class from finite-size scaling with standard and improved actions. *Phys. Rev. B*, 59:11471–11483, 1999.
- [43] M. Hasenbusch. A monte carlo study of leading order scaling corrections of phi 4 theory on a three-dimensional lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32, 1999.
- [44] A. Pelissetto and E. Vicari. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, 368(6):549 – 727, 2002.
- [45] Henk W. J. Blote, Lev. N. Shchur, and Andrei L. Talapov. The cluster processor: New results. *International Journal of Modern Physics C*, 10(06):1137–1148, 1999.
- [46] D. Youjin and Henk W. J. Blöte. Simultaneous analysis of several models in the three-dimensional ising universality class. *Phys. Rev. E*, 68:036125, Sep 2003.
- [47] Martin Hasenbusch. Finite size scaling study of lattice models in the three-dimensional ising universality class. *Phys. Rev. B*, 82:174433, Nov 2010.