



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL

**ESTUDOS DE PROPRIEDADES CRÍTICAS EM SISTEMAS
COMPLEXOS: MÉTODO DE PROCURA AUTOMÁTICA EM
SISTEMAS TIPO ISING E PERCOLAÇÃO DE LONGO ALCANCE**

UMBERTO LAINO FULCO

Tese apresentada ao
Departamento de Física Teórica e
Experimental da Universidade
Federal do Rio Grande do Norte
como requisito parcial à obtenção
do grau de Doutor em Física.

Natal, Março de 2000

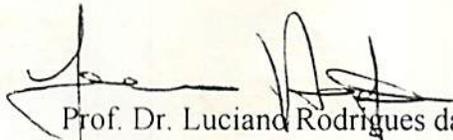


MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Campus Universitário, 59078-970 Natal-RN - Tel (084 215-3791)

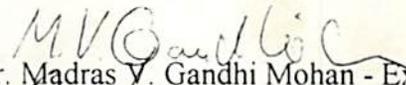
DECLARAÇÃO

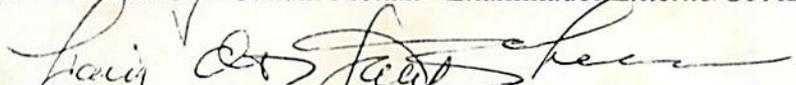
Declaramos, para todos os fins, que o aluno **UMBERTO LAINO FULCO** defendeu sua Tese de Doutorado intitulada "**Estudo de propriedades críticas em sistemas complexos: método de procura automática em sistemas tipo Ising e percolação de longo alcance**", em 24 de março de 2000, no Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, tendo obtido conceito "**.....A**".

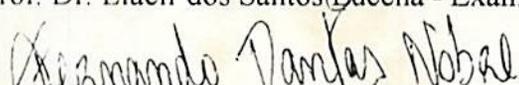
Natal, 24 de março de 2000.


Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva - Orientador/UFRN

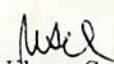

Prof. Dr. Paulo Murilo Castro de Oliveira - Examinador Externo/UFF


Prof. Dr. Madras V. Gandhi Mohan - Examinador Externo/UFAL


Prof. Dr. Liacir dos Santos Lucena - Examinador Interno/UFRN


Prof. Dr. Fernando Dantas Nobre - Examinador Interno/UFRN

VISTO


Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida
Coordenador do PPGF

Agradecimentos

Ao Prof. Luciano Rodrigues da Silva, por ter me orientado tanto na parte acadêmica quanto no decorrer deste trabalho, como também, por ter me ajudado a vencer as dificuldades que se apresentaram ao longo destes anos. Meus sinceros agradecimentos.

Às Profs. Fernando D. Nobre, Liacir dos S. Lucena, por suas contribuições e discussões seguras e imprescindíveis durante a minha formação acadêmica.

Às Profs. Eudonilson L. de Albuquerque, Ezequiel S. de Souza, Francisco A. da Costa, José A. Lima, Nilson S. de Almeida e Paulo Fulco pela paciência e compreensão que tiveram comigo, os quais foram imprescindíveis para a minha formação.

A todos os Professores do DFTE/UFRN, que contribuíram para minha formação.

A Raimundo S. Junior, pelas horas de conversa, discussões, apoio e incentivo que sempre me ajudou a contribuir para o meu êxito.

A todos os colegas do curso de Física. Em particular a Ana Lucia, Antonio Barili, Dany Hélio, Hélio Régio, Jailson Alcaniz, João Medeiros, Manoel Vasconcelos, Marcilio Freire, Samuel Junior, Selma Rozane e Vamberto. Momentos que compartilhamos.

A todos os funcionários do DFTE/UFRN. Em particular a Maria, Jucira, Lindalva, D. R. Paula, José Maria e Carlos.

Às meus pais Biagio Fulco e Elaila Laine, à minha mãe Amélia Naga, a minha irmã Mirella Fulco, a minha noiva Vanessa Pereira e Mitchelson, por terem me sustentado e ajudado nas horas difíceis da minha vida. Sem eles não conseguiria chegar até aqui até o fim.

A CAPES, pelo apoio financeiro.

A meu Deus, pela força espiritual que em todos os momentos eu recebi, e que me foram de insuperável ajuda.

Resumo

Através da nova técnica de Busca Automática de parâmetros de ordem e propriedades críticas, estudamos vários sistemas físicos conhecidos, com o intuito de testar a eficiência desta técnica, a fim de aplicá-la para sistemas complexos em geral.

O Método de Busca Automática (MBA) é desenvolvido em combinação com o Método de Simulação de Monte Carlo e este por sua vez se utiliza de uma determinada dinâmica para fazer o sistema evoluir com o tempo. Nos problemas que tratamos, utilizamos as dinâmicas de Metropolis e de Glauber, que produzem resultados essencialmente equivalentes.

Fazemos uma breve revisão das transições de fase e fenômenos críticos. Descrevemos o MBA e comentamos alguns trabalhos onde a aplicação deste método já obteve sucesso.

Aplicamos o MBA para o modelo de Ising ferromagnético. Calculamos as fronteiras críticas e o expoente β da magnetização em várias redes geométricas e várias dimensões espaciais.

Aplicamos também o MBA para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada com diluição de sítios. Calculamos as fronteiras críticas, o expoente β e o expoente γ da susceptibilidade. O MBA calcula simultaneamente os expoentes β e γ . Verificamos que a classe de universalidade do sistema não é alterada quando se introduz diluição.

Estudamos o problema da percolação de ligações de longo alcance na cadeia linear diluída. Discutimos questões de extensividade e não extensividade inerentes à sistemas com interações de longo alcance.

Finalmente, apresentamos nossas conclusões e possíveis extensões deste trabalho.

Abstract

The new technique for automatic search of the order parameters and critical properties is applied to several well-know physical systems, testing the efficiency of such a procedure, in order to apply it for complex systems in general.

The automatic-search method is combined with Monte Carlo simulations, which makes use of a given dynamical rule for the time evolution of the system. In the problems investigated, the Metropolis and Glauber dynamics produced essentially equivalent results.

We present a brief introduction to critical phenomena and phase transitions. We describe the automatic-search method and discuss some previous works, where the method has been applied successfully.

We apply the method for the ferromagnetic Ising model, computing the critical frontiers and the magnetization exponent β for several geometric lattices.

We also apply the method for the site-diluted ferromagnetic Ising model on a square lattice, computing its critical frontier, as well as the magnetization exponent β and the susceptibility exponent γ . We verify that the universality class of the system remains unchanged when the site dilution is introduced.

We study the problem of long-range bond percolation in a diluted linear chain and discuss the non-extensivity questions inherent to long-range-interaction systems.

Finally, we present our conclusions and possible extensions of this work.

Sumário

Introdução	1
1 Simulação Computacional em Modelos Tipo Ising	14
1.1 Introdução	14
1.2 Modelo de Ising	24
1.3 Implementação do método de Monte Carlo para o modelo de Ising	26
1.4 As Dinâmicas de Metropolis e Glauber	28
1.4.1 A Dinâmica de Metropolis	28
1.4.2 A Dinâmica de Glauber	29
2 Método Eficiente de Procura Automática de Propriedades Críticas	34
2.1 Introdução	34
2.2 Método e Aplicações	41
2.2.1 Resultados e Discussões sobre o Cálculo das Temperaturas Críticas do Modelo de Ising	45
2.2.2 Resultados e Discussões do Expoente da Magnetização (β)	49
3 Busca Eficiente de Grandezas Críticas no Ferromagneto de Ising na Rede Quadrada com Diluição de Sítios	59
3.1 Introdução	59
3.2 Modelo e Formalismo	62
3.2.1 Resultados e Discussões	63
4 Percolação de Ligações de Longo Alcance em uma Cadeia Linear	

Diluída	79
4.1 Introdução	79
4.2 Percolação de Ligações de Longo-Alcance	82
4.3 Resultados e Discussões	85
5 Conclusões e Extensões	92
5.1 Conclusões	92
5.2 Extensões	94
6 Bibliografia	96

Introdução

A maior parte da física existente até a primeira metade do século *XX* é a chamada física clássica, em que as leis de conservação, descritas por equações diferenciais lineares, ligadas às invariâncias espaço-temporais, são da maior importância para descrever os movimentos de um sistema dinâmico ao longo do tempo. Constituem essas leis de conservação as regras que permitem prever o comportamento do sistema no futuro uma vez conhecido o seu estado inicial. Faz parte dessa física a Mecânica Newtoniana e o Eletromagnetismo de Maxwell, constituindo-se o que se chama Física Clássica. Entretanto essas leis fundamentais da Física Clássica não mais explicavam as experiências que surgiram depois da descoberta do mundo atômico. Por exemplo a radiação do corpo negro (Max Planck, 1900), efeito fotoelétrico (Einstein, 1905), átomo de Bohr (1913), etc. Desse modo surgiu a necessidade de uma teoria mais abrangente, surgindo daí a Mecânica Quântica. Nesta nova teoria não era possível ter ao mesmo tempo posição e velocidade simultaneamente com precisão ilimitada (princípio da incerteza), terminando assim a era do enciclopedismo (uma vez conhecidas as condições iniciais de um sistema se conheceria seu passado e seu futuro, portanto a história de qualquer sistema). No século *XIX* Maxwell comentou sobre as limitações da visão Laplaciana e mostrou a existência de sistemas que, mesmo com poucas partículas e descritos por equações determinísticas, exigiam uma descrição probabilística, em função de apresentarem grande sensibilidade à variação das condições iniciais. Poincaré elaborou um longo trabalho sobre esses tipos de sistemas e de alguma maneira previu a existência do caos ^{1,2}: uma pequena variação nas condições iniciais, produz uma enorme variação no comportamento futuro do sistema.

No final do século passado, outro problema crucial para os físicos estava relacionado

em 1916 ⁴.

Os trabalhos de Planck, Einstein, Bohr, Schrödinger, de Broglie, Heisenberg, Dirac, etc, para a Mecânica Quântica e de Einstein para a Relatividade constituem os pilares da física até o século *XX*.

O estudo de sistemas de muitas partículas é provavelmente a área de pesquisa mais ativa da física moderna fora do domínio da física de altas energias. Como exemplo podemos citar os sistemas biológicos, sólidos, líquidos, plasmas, etc. Embora em princípio possamos escrever as equações de movimento para qualquer um destes sistemas, a complexidade da solução é muito grande. Nem mesmos os computadores atuais poderiam lidar com tantas informações. Devido a isto, poucos sistemas com muitos corpos são resolvidos exatamente ⁵. Isso exigiu dos cientistas a formulação de métodos aproximados para tratar tais sistemas. Entre esse métodos aproximativos podemos citar, Dinâmica Molecular (uma aproximação é feita tomando-se uma pequena parte do sistema), Funções de Green, Matriz de Transferência, Hartree Fock, etc.

Sistemas macroscópicos (envolvendo a temperatura) começaram a ser investigados de um ponto de vista fenomenológico nos últimos séculos. As leis descobertas formaram a disciplina da Termodinâmica. Na segunda metade do século *XIX* a teoria da constituição atômica da matéria ganhou aceitação e sistemas macroscópicos começaram a ser analisados de um ponto de vista microscópico, como sistemas constituídos de muitos átomos ou moléculas. O desenvolvimento da Mecânica Quântica depois de 1926 proporcionou uma adequada teoria para a descrição de átomos e moléculas e assim abriu o caminho para uma análise de tais sistemas na base de conceitos microscópicos.

A ciência que trata o sistema de muitos corpos a partir de uma visão microscópica é a Mecânica Estatística (ME). Os valores médios obtidos a partir da ME são os observáveis físicos de interesse e devem ser comparados aos resultados da Termodinâmica e da experiência. O que se ganha com a ME é que podemos ter acesso a informações do sistema ao longo de todo o domínio de temperaturas e a obtenção das funções respostas, as quais proporcionam, por exemplo, a determinação das transições de fases. Além disto a teoria permite fazer previsões, mesmo para regiões que ainda estejam inacessíveis às experiências. Esta teoria é fascinante em virtude de relacionar dois esquemas distin-

tos da realidade física: a *descrição microscópica*, que se baseia nas teorias fundamentais (*Mecânica Clássica. Mecânica Quântica...*), as quais regem a evolução temporal dos constituintes microscópicos, que podem ser da mais variada natureza (fótons, partículas elementares, átomos, moléculas,...) e a *descrição macroscópica (termodinâmica)*, que estuda as propriedades globais mensuráveis do objeto físico, tais como sua forma, tamanho, composição química, temperatura, cor, densidade, etc. Portanto o papel da ME é, a partir da visão microscópica (mais completa) encontrar as grandezas observáveis da natureza (visão macroscópica).

O esquema geral da ME consiste em encontrar as interações relevantes (microscópicas) entre os constituintes (átomos, moléculas, etc) do sistema e a partir destas interações calcular o Hamiltoniano do mesmo (há sistemas não Hamiltonianos, dissipativos, e neste caso outros métodos da ME devem ser empregados). Uma vez conhecido o Hamiltoniano o formalismo permite, analítica ou aproximadamente calcular todas as grandezas físicas de interesse.

A ME tem sido aplicada com considerável sucesso ao estudo da matéria em qualquer estado físico, qualquer fase da substância, qualquer intervalo de temperatura, podendo os sistemas serem simples ou compostos de vários componentes, etc.

Os principais trabalhos que iniciaram a teoria da ME residem nas tentativas iniciais de fundamentar a lei da teoria cinética dos gases ⁶, com os trabalhos de Bernoulli (1738), Herapath (1821), Joule (1851) e Krönig (1856). Em 1859 Clausius introduziu o conceito de caminho livre médio e assim tornou-se o primeiro a analisar o fenômeno de transporte. Em 1857 Clausius criou a lei dos gases ideais.

Uma base teórica sólida para a ME foi estabelecida com os notáveis trabalhos de Maxwell (1860) de onde derivou a famosa lei da distribuição das velocidades moleculares, de Boltzmann (1872 e 1876) que realizou entre vários trabalhos, o da hipótese ergódica, a equação de transporte, o célebre teorema H, onde os sistemas físicos apresentam tendência natural a permanecer no estado de equilíbrio, e o de Gibbs (1902) que transformou a teoria dos Ensembles em uma ferramenta eficiente para os teóricos e que diretamente influenciou a formulação atual da ME de equilíbrio, para finalmente, se consolidar com as aplicações da radiação de corpo negro por Planck (1900), dos cálculos de calores específicos para

sólidos por Einstein e Debye, do estudo do magnetismo por Langevin, Curie e Weiss e outros.

Antigamente quando se estudava um sistema, às vezes nas equações que o descreviam apareciam termos não lineares. Quando isto ocorria, ou se achava que o modelo não era bom, ou se abandonava por dificuldades matemáticas. A Física tratada era sobretudo a física linear, ou seja a Física das equações diferenciais lineares. A ciência de então só permitia abordar problemas simples. Hoje sabemos que o mundo linear é apenas uma pequena fração da natureza. Com a introdução dos computadores de alto desempenho criou-se uma nova área de pesquisas. Antes a ciência era conhecida como teórica e experimental. Agora o cientista pode fazer ciência simulando os sistemas no computador. É a Física Computacional. Esta área gerou novas idéias, novos problemas e novos conceitos. Sem a ajuda dos computadores, dificilmente áreas como Caos, Fractais ^{7,8}, Autômatos Celulares ⁹, Difusão Anômala (vãos de Lévy ^{10,11}), Modelos de Crescimento, etc, apresentariam o desenvolvimento que encontramos nos dias de hoje. Esses novos conceitos extrapolam o domínio da Física e são aplicados também à Economia, Biologia, Neurologia, Meteorologia, Geofísica, entre outros, pondo fim à divisão entre as várias ciências, não existindo mais um problema de um campo científico específico. A diferença agora é a técnica empregada. Isto gerou um novo campo de pesquisas que é conhecido como *sistemas complexos*.

Não existe uma definição precisa do que seja um sistema complexo. Existem características típicas de um sistema complexo. Grande parte desses sistemas são formados por vários componentes simples quando isolados, porém apresentando comportamento coletivo extremamente complicado. Eles apresentam alto grau de não linearidade, não extensividade ^{12,13}, isto é, o comportamento do todo é bastante diverso do comportamento das partes. Esta propriedade impede que o problema seja tratado por partes. A não linearidade também se manifesta nas funções respostas (exemplo, calor específico, susceptibilidade, etc, de um sistema magnético). O sistema responde de uma maneira altamente não linear a qualquer estímulo externo, por exemplo um campo magnético. Um exemplo é um sistema que apresenta transição de fase a uma dada temperatura. Próximo à transição, o efeito cooperativo gera ordem de longo alcance. Devemos considerar amostras do sis-

tema da ordem de grandeza do comprimento de correlação, que diverge na temperatura de transição. Outro exemplo fora do campo da física é a sociedade. Quando pretendemos entender como funciona uma sociedade, não podemos estudar a atitude de um só indivíduo, ou de um grupo, mas de um conjunto mais amplo. A complexidade surge do efeito coletivo, cooperativo, de um grande número de componentes interagindo. Ao analisar um sistema complexo de uma maneira geral impõe-se uma visão *holística*, em que para compreender o todo tem-se que estudar o todo. Ao mesmo tempo, surpreendentemente, em sistemas complexos muitas vezes as informações do todo podem ser encontradas em todas as partes. Por exemplo, o código genético de uma pessoa pode estar contido em vários lugares, até no fio de cabelo.

O estudo dos sistemas complexos mostra que para vários sistemas certas grandezas não apresentam uma escala típica. Ao contrário, os fenômenos podem ser observados em todas as escalas. Se perguntamos qual o tamanho de uma maré, temos uma noção clara da resposta, no entanto se queremos saber o tamanho de um terremoto a resposta não é tão clara assim. Consideremos o exemplo da pilha de areia ^{14,15} (ver figura 1). Neste problema, à medida que soltamos a areia na pilha, acontecem avalanches. À medida que acontecem avalanches, a inclinação da pilha varia desde um valor mínimo (estado sub-crítico), onde existem apenas pequenas avalanches, até um valor máximo (estado super-crítico). Nesse estado existem as grandes avalanches, o sistema se encontra no estado meta-estável, onde qualquer pequena perturbação resulta numa avalanche de grandes proporções. Um pequeno *grito* pode ocasionar uma avalanche de grande intensidade. Os alpinistas sabem disto. Um pequeno boato pode derrubar a bolsa de um país, um pequeno estímulo pode levar a um infarto, um pequeno acúmulo extra de energia pode levar a um grande terremoto, etc. O estado crítico (intermediário) caracteriza-se pelo fato de poderem ser observadas avalanches de todos os tamanhos. A distribuição de tamanhos das avalanches neste caso obedece a uma *lei de potência*, isto quer dizer que quando o sistema se encontra neste estado é impossível prever o tamanho da próxima avalanche. Qualquer outro sistema que seja descrito por lei de potência apresenta comportamento semelhante.

Alguns sistemas complexos apresentam a característica descrita acima: procura

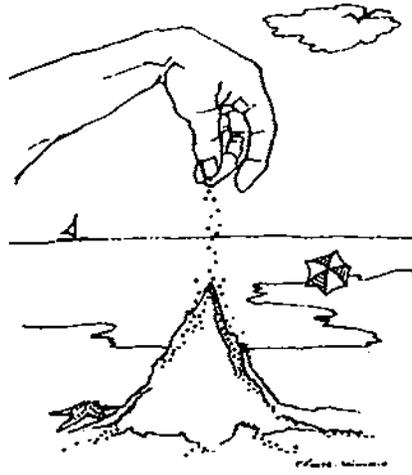


Figura 1: Exemplo da pilha de areia ¹⁴. À medida que derramamos areia, acontecem avalanches de todos os tamanhos.

espontânea do ponto crítico. Esta propriedade é conhecida como criticalidade auto organizada (self-organized criticality, SOC) descoberta e proposta por Per Bak, Thang e Wiesenfeld ^{16,17}. Esta teoria tem como objetivo estudar alguns problemas da natureza fora do equilíbrio, que estão sempre relaxando e apresentam irregularidades em alguma propriedade com o decorrer do tempo. O modelo da pilha de areia é considerado como paradigma neste assunto. Aqui as irregularidades são as avalanches que ocorrem ao longo do tempo. Na economia podemos ter as flutuações da bolsa. Em regiões sísmicas, os sismos e os terremotos são estas irregularidades. Podemos pensar também nos batimentos do coração (cardiogramas), impulsos do sistema nervoso (encefalogramas), torneira gotejante, etc. Nesta teoria o sistema está sempre evoluindo *espontaneamente* na busca do ponto crítico. No caso da pilha de areia, quando o sistema se encontra na região sub-crítica ou supercrítica, a tendência natural é se dirigir (relaxar) para a região crítica, onde temos o comportamento tipo lei de potência.

É comum nos dias de hoje a determinação de leis de potências (ausência de escala típica) em fenômenos físicos diversos. Anteriormente, eram bastante conhecidas as teorias que explicavam a evolução temporal de sistemas que relaxavam segundo lei exponencial (escala típica). Podemos citar a lei de esfriamento dos corpos, a radioatividade natural,

etc. Em todos estes problemas existe uma escala natural. Na radioatividade, por exemplo, temos como escala a vida média dos elementos. A teoria SOC permitiu mostrar que existem sistemas onde isto não ocorre, ou seja não existe uma escala típica. Se acreditamos que a teoria SOC seja um modelo razoável para explicar os sismos, seria impossível prever o tamanho do próximo terremoto, da próxima avalanche, ou o “crash” da bolsa. Em geral, o espectro gerado pelos parâmetros que caracterizam a evolução deste tipo de sistema são figuras fractais (ausência de escala típica). Por esta razão, muitas vezes efetua-se o processo inverso: analisa-se este espectro de um determinado sistema (em regime de relaxação) e se este espectro é um fractal, considera-se candidato a ser explicado pela teoria SOC.

Vemos assim que sistemas complexos podem ser vistos em toda parte: sistemas caóticos, os fractais, as avalanches na neve e de pedras, terremotos, economia, genética, batidas do coração, sistema nervoso, automatos celulares, etc.

Podemos dizer que a área dos sistemas complexos constitui o que há de mais recente na Mecânica Estatística. Hoje é comum os físicos trabalharem e assessorarem o pessoal da bolsa de valores, com meteorologistas na previsão de tempo, com sismólogos no estudo dos terremotos, com médicos, biólogos, etc.

Fala-se que o próximo século será chamado “século da água”. Este precioso líquido está cada vez mais escasso (água potável) no planeta. Estas novas técnicas são de suma importância neste estudo.

A Mecânica Estatística dos Sistemas Complexos é uma disciplina que se encontra em grande evidência no mundo científico. Agora discutiremos um exemplo simples de Sistema Complexo: a percolação ¹⁸. O início dessa teoria data de uma publicação de 1957 de Broadbent e Hammersley ¹⁹, que se inspiraram na máscara feita de grãos de carbono que os mineiros tinham que utilizar nas minas de carvão na Inglaterra para evitar a contaminação com os gases venenosos. A máscara possuía grãos (obstáculos) e poros arranjados aleatoriamente. No problema de percolação temos o fluxo de *algo* através de um meio desordenado (fluxo de gás através dos poros no caso da máscara). O aumento da concentração de obstáculos dificulta a passagem da informação em estudo. Com poucos obstáculos, o fluxo atravessa de um lado a outro do sistema; dizemos que o

sistema percola, caso contrário isto não ocorre. Existe um valor crítico da concentração de obstáculos que separa as fases percolante e não percolante. Temos portanto uma transição de fase. Alguns exemplos de percolação: fluxo de informações em uma rede telefônica, fluxo de água através do café ou através de uma barragem, tráfego através de um mapa hidrográfico, fogo na floresta, etc.

Vamos estudar a percolação através de um exemplo simples; consideremos uma grade como na Fig. 2(a) (rede quadrada). Imaginemos que cada sítio desta rede pode estar ativo (\bullet) com probabilidade p ou inativo (\cdot) com probabilidade $1-p$ (ver Fig. 2(b)). Desta maneira a rede apresenta uma concentração p de sítios ativos (ocupados). Definimos como aglomerado (cluster) um grupo de sítios vizinhos (primeiros vizinhos) conectados (esses aglomerados estão mostrados na Fig. 2(c)). A teoria da percolação estuda a evolução

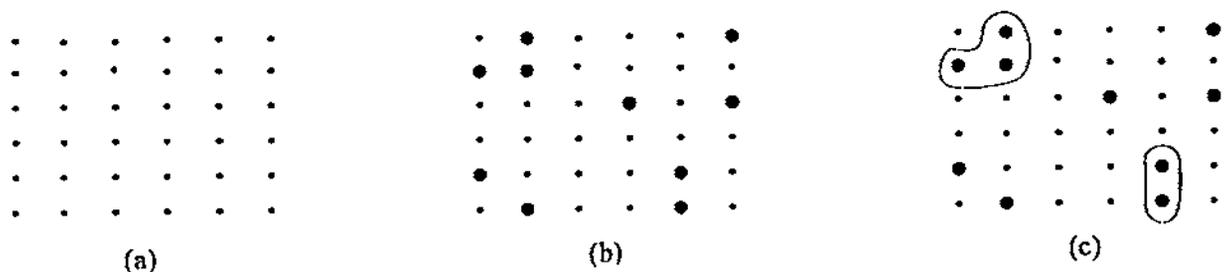


Figura 2: Formação de aglomerados. (a) Grade quadrada; (b) alguns sítios são ocupados aleatoriamente para uma determinada concentração; (c) Os aglomerados formados em (b) são indicados.

dos aglomerados à medida que p aumenta. Os aglomerados vão se conectando uns aos outros e se tornando cada vez maiores. Existe uma concentração crítica p_C onde surge um aglomerado que permite atravessar, de vizinho em vizinho, de um lado ao outro da rede. Este aglomerado é chamado de aglomerado infinito. Na prática, tratamos com sistemas de tamanho L finito, mas o resultado que desejamos é o limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. O resultado $L \rightarrow \infty$ é obtido trabalhando com redes cada vez maiores e verificando se os resultados convergem. Caso não converjam, o limite termodinâmico é obtido por extrapolação ou argumentos de escala (finite-size scaling).

No problema da percolação desejamos calcular principalmente o valor crítico p_C e o

expoente crítico ν associado ao comprimento de correlação (tamanho médio dos aglomerados finitos) que diverge na transição. Não existe solução analítica para este problema. Utilizamos o método de Monte Carlo para calcular estas grandezas.

Poderíamos perguntar, onde se encontra a complexidade no problema da percolação? Próximo à transição de fase ($p \sim p_c$), o sistema é altamente não linear, porque basta sofrer uma pequena perturbação (ligeiro aumento da concentração) que os vários aglomerados finitos, na maioria, se juntam para formar um aglomerado cada vez maior. Na transição de fase ($p = p_c$) temos o aglomerado infinito.

No nosso trabalho estudamos as transições de fases em alguns sistemas específicos. Existem vários modelos padrão que explicam o fenômeno da transição de fase; entre eles podemos citar o modelo de Ising ²⁰ (constituído por variáveis binárias distribuídas nos sítios de uma rede com interações entre estes sítios), que apesar de simples, apresenta uma rica variedade de fenômenos e realizações experimentais ²¹. O modelo de Ising para $D = 1$ foi resolvido exatamente por Ising ²⁰ em 1925, que não encontrou transição de fase. Para $D = 2$ o modelo foi resolvido exatamente por Onsager ²² em 1944, o qual mostrou a existência da transição. Para o caso $D = 3$ o sistema apresenta transição de fase; até hoje não existe solução exata.

Como vemos, mesmo para um modelo simples como o de Ising, não existe solução analítica para o caso tridimensional. Desta maneira, a maioria dos resultados existentes para os vários sistemas tratados na física, são obtidos por métodos aproximados. Entre estes métodos podemos citar:

1 Teoria do Campo Médio, que transforma o problema de muitos corpos no problema de um corpo. Uma partícula é vista como imersa no campo efetivo gerado pelas demais;

2 O método das Funções de Green (Zubarev);

3 O Grupo de Renormalização ^{23,24};

4 As simulações numéricas.

Dentre as simulações numéricas vamos destacar *O Método de Monte Carlo* ²⁵ que é o que usamos nesta tese.

Tradicionalmente se calcula fronteiras críticas fazendo sintonia de parâmetros (parâmetros relevantes do sistema). A varredura dos parâmetros permite o cálculo do

diagrama de fase. Um novo método. Método de Busca Automática (MBA) ²⁶⁻²⁸, inspirado em SOC calcula o diagrama de fase de uma forma automática.

Nosso estudo visa testar a eficiência deste novo método empregado para calcular os pontos e os expoentes críticos. Este método faz o sistema se dirigir espontaneamente para o ponto crítico. Para isso, tratamos sistemas magnéticos do tipo Ising ferromagnético em várias redes bidimensionais (quadrada, hexagonal, triangular) e cúbica, com sistemas puros e diluídos. O objetivo desta tese é testar a eficiência do MBA em várias transições de fase, algumas já estudadas por outros métodos, para consolidar este método como uma poderosa ferramenta no estudo de propriedades críticas de sistemas complexos em geral. Nós utilizamos esta nova técnica para discutir os expoentes críticos do modelo de Ising diluído. Existe bastante controvérsia sobre a existência de "crossover" entre o sistema puro e o caso diluído.

Nós também tratamos neste trabalho o problema da percolação de longo alcance na cadeia linear diluída.

Esta tese está organizada como segue:

No capítulo 1 efetuaremos um breve resumo dos vários modelos e métodos que existem hoje na Mecânica Estatística; concentraremos maior ênfase no modelo de Ising ferromagnético. Realizaremos também uma explanação mais detalhada sobre o método de Monte Carlo e das várias dinâmicas, em particular, as dinâmicas de Glauber e Metropolis, utilizadas nesse trabalho.

No capítulo 2 apresentaremos um breve estudo sobre transições de fase e fenômenos críticos. Em seguida, apresentamos o MBA onde o parâmetro de ajuste que dirige o sistema para o ponto crítico é a magnetização. Aplicamos tal procedimento para um sistema de Ising ferromagnético nas redes quadrada e cúbica, utilizando tanto a dinâmica de Glauber como a de Metropolis; obtemos resultados razoáveis mesmo se considerarmos redes pequenas, comparados com os conhecidos na literatura, levando a uma economia considerável de tempo computacional. Calculamos o expoente crítico da magnetização para as redes quadrada, triangular e hexagonal e para a rede cúbica, com valores satisfatórios.

No capítulo 3 aplicamos o método, utilizando agora a susceptibilidade como parâmetro

de ajuste em um sistema de Ising diluído, onde inicialmente efetuamos uma breve motivação para estudar esses sistemas e quais as suas dificuldades. Também conseguimos encontrar resultados muito bons, considerando que as redes utilizadas são bastante pequenas.

No capítulo 4 apresentaremos uma breve introdução ao problema da percolação por ligações de longo alcance. Apresentaremos um estudo baseado em uma simulação de Monte Carlo para uma cadeia linear diluída. As probabilidades de ocupação das ligações são dadas por $p_{ij} = p/r_{ij}^\alpha$ ($0 \leq p \leq 1; \alpha \geq 0$), onde $r_{ij} = 1, 2, \dots$ é a distância entre sítios presentes. Para $\alpha \rightarrow \infty$ e $\alpha = 0$, encontramos respectivamente, os casos específicos de primeiros vizinhos e campo médio.

No último capítulo apresentamos nossas conclusões e algumas possíveis extensões deste trabalho.

Capítulo 1

Simulação Computacional em Modelos Tipo Ising

1.1 Introdução

A Mecânica Estatística (ME), como já dissemos anteriormente, tornou-se uma das teorias da física de mais sucesso hoje em dia; através de modelos simples, ela tem conseguido descrever, razoavelmente bem, uma grande diversidade de fenômenos em muitas áreas do conhecimento. Entre os sistemas mais interessantes abordados pela ME vamos destacar os que exibem fenômenos críticos ²⁹. Os sistemas que discutimos nesta tese pertencem a tal categoria. O estudo das transições de fase, descrito por modelos simples em redes geométricas, tem sido o tópico de intensa averiguação por mais da metade deste século. Tais modelos simples tentam de alguma maneira captar as propriedades relevantes dos sistemas em estudo. Embora simples de definir, esses modelos não são usualmente fáceis de resolver exatamente ⁵; muitos deles são estudados através de métodos aproximados e técnicas numéricas ^{30,31}. As técnicas de simulação computacional e análise de dados bem como o uso de computadores cada dia mais potentes, tem se mostrado uma ferramenta poderosa na solução de problemas em física, tendo superado em muitos casos, resultados de expansões em série, expansão- ϵ ³²⁻³⁴, Grupo de Renormalização Monte Carlo ³⁵⁻³⁷ e

outros métodos aproximativos.

Sistemas físicos em geral não são isolados, ou seja, trocam energia com o meio ambiente. Tais sistemas são usualmente pequenos em comparação ao seu meio. Supomos que qualquer mudança na energia do sistema, não tem um efeito significativo na temperatura do meio. Dizemos que o meio atua como um reservatório de calor ou banho térmico a uma temperatura absoluta fixa T . Se um sistema macroscópico menor é colocado em contato com um banho térmico, o sistema alcança o equilíbrio térmico trocando energia com o banho até o sistema atingir a temperatura desse banho.

Durante a evolução, os estados formam uma sequência Markoviana (ver Markoviana mais adiante) aleatória gerada de acordo com uma regra dinâmica na qual tem como atração os pontos fixos na distribuição de probabilidade canônica de Boltzmann-Gibbs. Os estados α no equilíbrio térmico ocorrem de acordo com a seguinte distribuição

$$p_\alpha = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_\alpha), \quad (1.1)$$

que é a chamada distribuição de probabilidade de Boltzmann-Gibbs. E_α é a energia das possíveis configurações microscópicas (microestados) de um sistema, onde o conjunto de microestados pode ser contínuo ou discreto dependendo do sistema. β é igual a $1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura absoluta e Z é a função de partição dada por

$$Z = \sum_\alpha \exp(-\beta E_\alpha). \quad (1.2)$$

O valor médio de uma dada quantidade Q , a uma dada temperatura T é obtido a partir dos microestados α e é dado por

$$\langle Q \rangle_p = \sum_{\alpha=1}^A Q_\alpha p_\alpha, \quad (1.3)$$

onde $\langle Q \rangle_p$ é o valor médio da quantidade Q com respeito à distribuição p , A é o número total de configurações. O ensemble compatível com esta informação é o ensemble canônico.

Como já é sabido a teoria de campo médio reproduz a transição entre a fase ferromagnética e a paramagnética do modelo de Ising e outros modelos (às vezes ela prevê transição onde não existe). A aproximação de campo médio fornece, em geral, resultados qualitativamente razoáveis para a temperatura de transição, porém para o caso dos expoentes críticos os resultados não são bons. Mesmo assim esse método continua sendo útil no sentido que é simples e pelo fato que pode apresentar uma primeira visão dos fenômenos críticos do sistema em consideração. Isso leva a necessidade de propor outros métodos adequados para obter resultados mais confiáveis. O método de Monte Carlo é um exemplo desses métodos.

Devido ao aparecimento dos computadores de alto desempenho, a simulação computacional³⁸ representa, no momento, uma poderosa ferramenta para estudar sistemas físicos em geral. Entre todos os tipos de simulação numérica, o método Monte Carlo é provavelmente a técnica mais usada, sendo aplicada em uma grande variedade de problemas.

O método de Monte Carlo (MC)^{25,39-41} é um conjunto de algoritmos numéricos, que faz uso de variáveis aleatórias, para escolher amostras representativas do total das configurações do sistema em equilíbrio. O sistema original é representado por um outro de tamanho L com condições de contorno apropriadas. Espera-se que os resultados melhorem com o aumento de L . A nossa meta, no método de MC, é simular como um sistema de spins interage com o meio ambiente, para a partir daí, construirmos a amostra representativa dos estados do sistema e por conseguinte calcular as grandezas observáveis que nos interessam. Consideraremos o caso particular de uma coleção de spins de Ising, (o método MC pode ser aplicado a sistemas muito mais complicados como por exemplo, sistemas frustrados, modelo de Heisenberg, modelos XY e outros). Antes de descrever como funciona o MC, vejamos primeiramente algumas das características gerais de um processo Markoviano.

Um processo Markoviano é um método para gerar aleatoriamente uma nova configuração de um sistema a partir da configuração atual. Neste processo dada uma

sequência de estados, cada estado depende apenas do estado atual do sistema, sem necessidade do conhecimento dos estados anteriores (processo sem memória). Podemos expressar esta regra na forma de um conjunto de probabilidades: para cada possível par de estados α e α' , existe uma probabilidade associada, $P(\alpha \rightarrow \alpha')$, que se o sistema está no estado α então no próximo passo estará no estado α' . Esta probabilidade satisfaz a regra da soma, a qual expressa o fato que o sistema é não dissipativo e portanto não cria nem destrói estados, ou seja

$$\sum_{\alpha'} P(\alpha \rightarrow \alpha') = 1. \quad (1.4)$$

Estamos interessados em produzir uma cadeia Markoviana (uma sequência de estados gerados por um processo Markoviano), onde a frequência de ocorrência de cada estado α é proporcional à probabilidade de Boltzmann-Gibbs associada p_α . Para que a probabilidade de transição ocorra é preciso satisfazer às duas condições seguintes:

(i) **Acessibilidade:** a partir de um dado estado inicial o sistema pode evoluir para qualquer outra configuração, aplicando a regra de evolução um número suficientemente grande de vezes (ergodicidade ⁴²).

(ii) **Microreversibilidade ou Balanceamento Detalhado:** esta condição é expressa pela seguinte equação

$$p_\alpha P(\alpha \rightarrow \alpha') = p_{\alpha'} P(\alpha' \rightarrow \alpha). \quad (1.5)$$

Podemos encontrar vários conjuntos de probabilidades de transições, que obedecem às regras acima para qualquer distribuição de Boltzmann-Gibbs $\{p_\alpha\}$. Podemos escolher por exemplo

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') \propto \exp(\beta(E_\alpha - E_{\alpha'})/2). \quad (1.6)$$

As soluções (dinâmicas) que satisfazem as condições acima, podem ser igualmente satisfatórias para o cálculo das quantidades médias termodinâmicas no equilíbrio termodinâmico, embora atinjam o equilíbrio através de rotas e tempos distintos. É bom lembrar que resultados diferentes podem ocorrer para propriedades de não equilíbrio. Existem muitos destes conjuntos que não satisfazem as condições mostradas anteriormente, logo não poderão ser utilizados para representar os estados na distribuição de Gibbs p_α . Escolhas diferentes nesses conjuntos de probabilidades levam às diferentes definições existentes para a dinâmica empregada no método de Monte Carlo ^{24,25}.

Várias dinâmicas são conhecidas, por exemplo Glauber, Metropolis, Banho Térmico, Kawasaki e outras. Cada dinâmica atualiza o sistema à sua maneira. Quando comparamos as dinâmicas, vemos vantagens e desvantagens na escolha de uma delas. Dependendo da propriedade que estamos interessados nos decidimos por uma ou outra escolha. Neste trabalho utilizamos duas delas, as que são mais usadas na literatura: a de Metropolis ⁴³ e a de Glauber ⁴⁴(detalharemos mais adiante essas duas dinâmicas). Essas dinâmicas satisfazem os critérios de acessibilidade e balanceamento já descritos.

Suponha que escolhemos P de modo que satisfaça as condições (i), (ii) e a de normalização descrita na equação 1.4. A partir dessas condições acontecem duas coisas: a primeira é que se cada configuração α aparece no passo n de uma cadeia Markoviana com probabilidade $W(\alpha, n)$ igual a sua probabilidade de Gibbs $\{p_\alpha\}$,

$$W(\alpha, n) = p_\alpha, \tag{1.7}$$

então esta igualdade permanecerá no passo $n + 1$.

A segunda é que o desvio entre a probabilidade atual de ocorrência e a distribuição de Boltzmann-Gibbs diminui ao longo do curso da cadeia Markoviana.

O que foi dito é que a cadeia de estados gerados pela aplicação das distribuições nos conjuntos de probabilidades tende a ser visitada segundo a distribuição característica do

equilíbrio termodinâmico, e uma vez atingido este equilíbrio, o sistema continua a efetuar transições entre os seus microestados sem no entanto sair espontaneamente dessa condição.

Antes de aplicarmos o método de MC, fazemos duas aproximações no sistema: a primeira é representá-lo por outro sistema de tamanho finito, factível ao computador disponível; a segunda é representar o sistema, quando definido num meio contínuo, por um outro definido num meio discreto. Por exemplo, se estamos tratando com um fluido, tomamos um certo elemento de volume do fluido e associamos a este elemento um determinado valor da variável que define o sistema, sua densidade por exemplo (equivalaria a substituírmos equações diferenciais por equações de diferenças finitas). Se o sistema já é definido num meio discreto, a utilização do método de MC é aplicado em essência. O uso mais comum do MC é quando o sistema é definido em redes geométricas. Isto é o que faremos nesta tese.

O estado do sistema é caracterizado pelo conjunto de valores das variáveis (em geral também discretas), digamos S , $((S_1, S_2, S_3, \dots, S_N)$, definidas no sítios da rede $(1, 2, 3, \dots, N)$ em consideração. O sistema evolui com o tempo segundo uma certa dinâmica até atingir um conjunto de estados possíveis compatíveis com seus parâmetros relevantes: temperatura, campo externo, etc. Este conjunto de estados constitui uma bacia atratora. Quando o sistema entra nesta bacia não sai mais, aí dizemos que atingiu o equilíbrio. Cada estado do sistema define os valores das grandezas globais. Por exemplo, se estamos lidando com spins magnéticos, a magnetização do sistema é a soma de todos os spins da rede. Um observável é o valor médio destas grandezas. Há duas maneiras de se fazer a média destas grandezas, ou se parte de uma certa configuração (estado relaxado) e se deixa o sistema evoluir por um longo tempo para que visite todos os estados acessíveis (ergodicidade), ou se faz a média de ensembles. É possível também fazer as duas coisas simultaneamente.

Como já dissemos o método MC é aplicado a redes de tamanho finito (por limites computacionais). O limite termodinâmico é obtido trabalhando com redes de vários tamanhos e analisando-se a convergência ou se descobrindo como as grandezas se escalam com o tamanho (finite-size scaling).

O número de estados acessíveis ao sistema cresce exponencialmente com o tamanho da

rede. Cada estado α acessível do sistema está presente com probabilidade proporcional a $\exp(-\beta E_\alpha)$, onde E_α é a energia do estado. Imaginemos que se tomando aleatoriamente uma fração dos estados acessíveis para um dado L , estamos escolhendo uma amostra representativa de todos os estados do sistema. Com isto em vez de lidar com um número *enorme* de configurações, trabalhamos com uma quantidade reduzida que é muito mais factível. Com isto esperamos obter as mesmas médias que teríamos se usássemos a totalidade dos estados (que é demasiadamente grande!). Isto é a *essência* do método de Monte Carlo.

Para implementar o método de MC fixamos os parâmetros temperatura, campos externos, tamanho, etc e partimos de um estado inicial qualquer. Deixamos o sistema relaxar até atingir o equilíbrio (grandezas termodinâmicas estabilizadas). No equilíbrio o sistema fica evoluindo dentro da bacia dos estados acessíveis. Cada repetição deste procedimento (realização) leva o sistema a um estado final *qualquer* dentro da bacia atratora (detalhes adiante). O número total de realizações corresponde à fração dos estados acessíveis com a qual se realiza as médias correspondentes aos observáveis. Na prática podemos fazer (para cada realização) uma média temporal, após o sistema ter relaxado e ficar passeando dentro da bacia *fixa*. Depois fazemos a média sobre todas as realizações.

Gostaríamos de salientar que, em geral, para se conseguir bons resultados com o método de MC, mesmo tratando com sistemas reduzidos, um grande esforço computacional é necessário. Consideremos, por exemplo, o modelo de Ising em duas dimensões numa rede quadrada. Iniciamos resolvendo um sistema 3×3 , contendo nove sítios ao todo. Assim como cada spin pode tomar duas configurações, existem $A = 2^9 = 512$ possíveis configurações para o sistema. O cálculo das energias neste caso é feito em frações de segundo. A figura 1.1 mostra o resultado do cálculo da energia e do calor específico deste sistema em função da temperatura. O resultado exato para a quantidade correspondente a um sistema infinito é mostrado na figura para ser comparado, e dá para ver que os resultados são bons tanto para baixa como para alta temperatura, já na região onde ocorre a transição de fase os resultados dos exemplos em relação ao valor exato são ruins, ocorrendo grandes discrepâncias. Desse modo, fica difícil extrair propriedades físicas nessa região, como por exemplo, expoentes críticos.

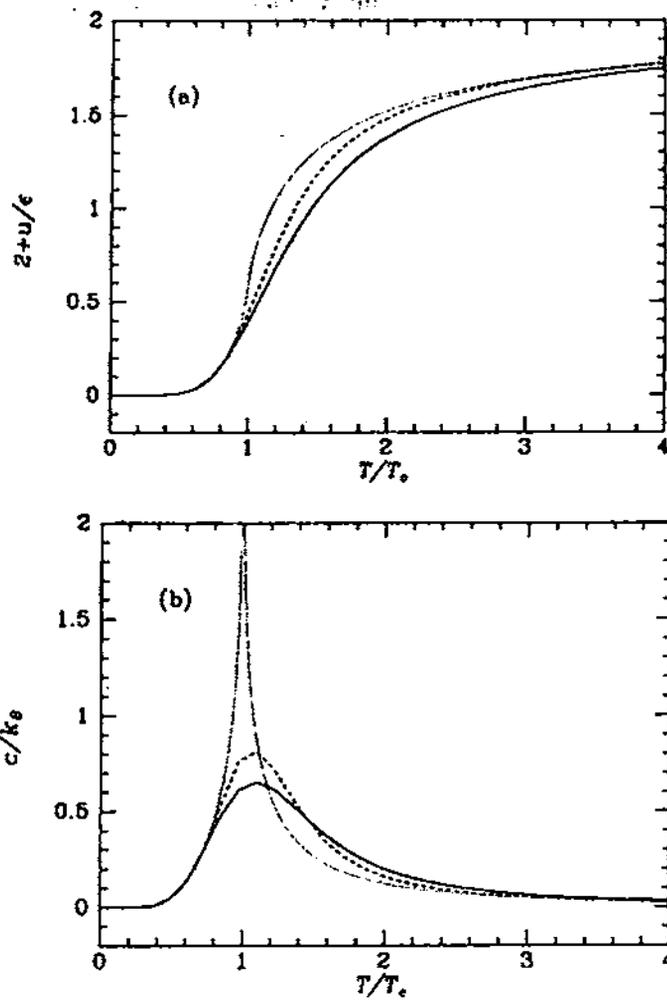


Figura 1.1: (a) Energia interna em função da constante de acoplamento (ϵ) e (b) Calor específico em função da temperatura para redes 3×3 (curva cheia), 4×4 (curva tracejada) e $\infty \times \infty$ (curva pontilhada) em um sistema tipo Ising. Utilizando condições de contorno periódicas para as redes finitas. Para redes finitas tanto o calor específico (c) como a inclinação de $u(T)$ são finitos em $T = T_C$ ²⁴.

Vamos supor agora que o tamanho da rede seja 10×10 . Assim teremos 100 sítios. O número de estados possíveis é $A = 2^{100} \approx 1.3 \times 10^{30}$. Um computador que seja capaz de operar 10^9 em pontos por segundo gastará cerca de 10^{21} segundos para operar esta informação, 1000 vezes a idade do universo. Um tempo infinito!

Para obtermos melhores aproximações na região crítica precisamos aumentar o tamanho da rede, para que os efeitos de tamanho finito e das bordas diminuam. O problema é que quando aumentamos a rede o número de configurações (A) calculado para o sistema, cresce exponencialmente com seu tamanho. Concluímos que fica *inviável* fazer qualquer cálculo que envolva todas as configurações possíveis. A partir dessa dificuldade podemos desenvolver métodos, os quais estimam propriedades termodinâmicas mediante a escolha de pequenos subconjuntos de todas as configurações. Isto é conseguido através do método MC e suas extensões que comentaremos a seguir.

Numa permanente busca para otimizar sua eficiência, o método de Monte Carlo tem sido frequentemente melhorado sempre relacionando os esforços computacionais com a qualidade dos resultados. A técnica do histograma ⁴⁵ tem sido combinada com o método de Monte Carlo, consistindo numa significativa otimização da análise de dados: a informação sobre a probabilidade de equilíbrio associada com um dado conjunto de parâmetros externos pode ser usada para estimar médias termodinâmicas nos valores vizinhos aos parâmetros externos ⁴⁶⁻⁴⁸. O que pretendemos sempre é calcular o $\langle Q \rangle_p$ como função de T , mas para isso precisamos repetir o procedimento (no caso de Monte Carlo) várias vezes para cada temperatura diferente. Para economizar tempo de computação uma estratégia foi utilizada, onde consiste em retirar a dependência da temperatura das equações 1.1 e 1.2. Só existe dependência da temperatura na exponencial do peso de Boltzmann e p_α , para um certo valor de T , ele guarda num histograma o valor para cada energia, durante o processo Markoviano de estados simulados. O que o método do histograma faz é deduzir uma nova distribuição $P_{\alpha'}$ correspondendo a um novo valor da temperatura (T'), sem precisar executar o procedimento computacional, simplesmente resubmetendo nas equações 1.1 e 1.2 esse novo valor.

Método de MC usado para simular spins, tal como o modelo de Ising e suas generalizações (Potts, XY e Heisenberg), divide-se em duas classes: algoritmo de atualização

local e de “clusters”. Algoritmos com regras de atualização local, exemplo Metropolis, são eficientes para simular estes sistemas de spins na região não crítica. Próximo de uma transição de fase de segunda ordem, o tempo de relaxação aumenta muito rapidamente com o tamanho do sistema. Este fenômeno é conhecido como amortecimento crítico (critical slowing down (CSD)) que é de crucial importância quando levamos em conta o tempo de simulação computacional na transição de fase. Quando aumentamos o tamanho da rede, aumentamos cada vez mais o tempo de relaxação. É necessário portanto fazer uma análise entre os dois fatores (efeito de tamanho finito e o amortecimento crítico) para saber qual o mais predominante. Este tipo de comportamento (CSD) não acontece para todo tipo de transição de fase, por exemplo, autômatos celulares não apresentam CSD.

Embora o tempo necessário para atualizar todo o sistema seja proporcional ao tamanho do mesmo, a informação contida na configuração é também proporcional ao tamanho do sistema. O tempo de correlação (o tempo necessário para gerar uma configuração estatisticamente independente, τ), diverge como $\tau \sim \xi^z$, onde ξ é o comprimento de correlação e z é chamado de expoente crítico dinâmico. Para sistemas finitos usados em simulação computacional a correlação não diverge, mas aumenta com o tamanho do sistema da seguinte maneira $\tau \sim L^z$, onde L é a dimensão linear do sistema. Visto que z é geralmente da ordem de 2.0 ou > 2 ⁴⁹⁻⁵³ e o tempo de simulação deve ser muito maior que τ para ter valores confiáveis, isto representa uma limitação, pois mesmo os melhores computadores disponíveis não conseguem simular redes em tempos tão grandes.

O algoritmo de “cluster” ou Swendsen-Wang (SW)⁵⁴⁻⁵⁶, introduziu dentro do método de MC original uma regra baseada no mapeamento entre o modelo de Potts e um problema de percolação^{57,58}.

Descrevemos o algoritmo de SW, considerando o modelo de Potts definido pela distribuição de probabilidade

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp(K \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1)), \quad (1.8)$$

onde $K = J/k_B T$, J é a constante de acoplamento $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$ o somatório percorre todos os pares de vizinhos mais próximos e Z é a função de partição.

O Monte Carlo de SW consiste em dois passos: O primeiro passo transforma uma configuração de Potts em uma configuração de ligações; o segundo executa a transformação inversa.

Passo 1: cria uma ligação, $n_{ij} = 1$, entre os sítios vizinhos i e j , estocasticamente, com probabilidade $p = 1 - e^{-K}$, se $\sigma_i = \sigma_j$. Caso contrário $n_{ij} = 0$.

Passo 2: identifica os aglomerados como conjuntos de sítios conectados por uma ligação. Dois sítios estarão no mesmo aglomerado se existir uma ligação entre eles. A cada aglomerado é atribuído um novo valor efetivo σ' escolhido com igual probabilidade entre os valores de 1 a q . A variável de Potts σ' substitui o valor do aglomerado que existia antes.

O algoritmo é altamente ergódico, todos os estados podem ser alcançados de qualquer outro estado com probabilidade diferente de zero.

O uso do algoritmo de “cluster”, na qual todas as variáveis dinâmicas no aglomerado definido anteriormente são atualizados de uma só vez, tem diminuído consideravelmente o tempo de relaxação próximo do ponto crítico.

O algoritmo de Maclita et al.⁵⁶, conhecido como algoritmo de “invaded cluster” (IC), correlaciona um tipo modificado de percolação (usado para definir os aglomerados) com configurações de variáveis dinâmicas. A dinâmica de IC baseada na formulação de aglomerados de Kastelein-Fortuin e Coniglio-Klein (KF-CK) do modelo de Ising^{58,59}, tem sido mostrada mais eficiente que a dinâmica de SW⁵⁴, equilibrando o sistema na temperatura crítica. A dinâmica IC tem a vantagem que o valor da temperatura crítica não precisa, a priori, ser conhecido. De fato a dinâmica IC por si só dirige o sistema para a região crítica à semelhança do método SOC. O algoritmo IC faz cálculos em cima dos ensembles IC em vez do ensemble canônico. Embora se acredite que os dois ensembles sejam equivalentes no limite de volume infinito, as propriedades de escala de tamanho finito dos ensembles IC não são ainda bem conhecidas. Depois da identificação dos aglomerados, cada aglomerado é atualizado com probabilidade 1/2 (como no algoritmo de SW⁵⁴), levando o sistema para uma nova configuração, do qual novos aglomerados são definidos.

O algoritmo de Swendsen-Wang é muito parecido com o algoritmo de Wolf⁵⁵ exceto que em cada passo do algoritmo todos os aglomerados definidos pela ligações ocupadas

são identificados. Todos os sítios de cada aglomerado tem o mesmo valor de spin. Os valores dos spins de cada aglomerado são determinados aleatoriamente.

A relação entre o algoritmo de SW e o algoritmo IC é análoga à relação entre percolação ordinária e percolação por invasão. Na percolação ordinária¹⁸, as ligações são independentemente ocupadas com probabilidade p formando conexões de sítios aglomerados. Na percolação por invasão⁶⁰⁻⁶³, as ligações são aleatoriamente ordenadas e sucessivamente ocupadas até que uma condição de finalização seja alcançada (convencionalmente percolação por invasão é formulada como um processo de crescimento que é lançado um número limitado de sítios sementes, por exemplo um simples sítio).

Nas próximas seções estudaremos com mais detalhes o modelo de Ising e o método de MC.

1.2 Modelo de Ising

Magnetismo é um fenômeno inerentemente quântico. Niels Bohr, um dos criadores da Mecânica Quântica, fez contribuições para o campo do magnetismo. Ele mostrou que um sistema clássico nunca pode exibir ferromagnetismo. Os ingredientes chave na teoria do magnetismo são, o spin e o momento magnético associado. Materiais ferromagnéticos, tais como ferro e níquel, exibem uma magnetização espontânea (sem a presença de um campo magnético aplicado). Esta magnetização diferente de zero nestes materiais, ocorre apenas se a temperatura é menor que uma temperatura bem definida, sendo ela conhecida como temperatura de Curie ou temperatura crítica T_C . Para temperaturas $T > T_C$, a magnetização se anula. Desse modo T_C separa a fase desordenada ($T > T_C$) da fase ferromagnética ($T < T_C$).

O modelo mais popular capaz de exibir uma transição de fase é o Modelo de Ising. Ele foi inventado por W. Lenz em 1920 e proposto para Ising, seu aluno de doutorado, como um modelo simples de um ferromagneto. E. Ising resolveu o modelo, que hoje leva seu nome em 1925, para o caso $D = 1$ (onde definimos D como dimensão espacial) não encontrando transição de fase. Em 1944 Onsager resolveu o modelo (sem campo) para

$D = 2$, em uma rede quadrada. Onsager mostrou que neste caso há transição de fase. Apesar de décadas de intenso esforço, este modelo ainda não foi resolvido exatamente para o caso $D = 3$. O caso $D = 2$ numa rede quadrada na presença de campo ²⁴ também não foi resolvido exatamente. Para esses casos existem soluções numéricas.

Consideremos o modelo de um ferromagneto mostrado esquematicamente (figura 1.2) na rede quadrada. Associado a cada ponto da rede colocamos um spin que pode apontar ao longo da direção $-z$ ou $+z$, isto é, pode estar apontado para baixo ou para cima respectivamente. Desse modo, o i -ésimo spin no sistema pode ter apenas dois possíveis valores, $S_i = \pm 1$.

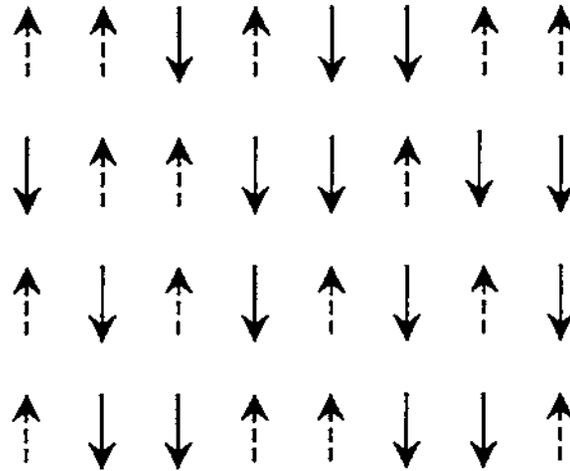


Figura 1.2: Esquema de um modelo de spin para um ferromagneto ⁶⁴. Para o caso dos spins apontando para cima (↑) $S_i = 1$ e o caso dos spins apontando para baixo (↓) $S_i = -1$.

As propriedades macroscópicas de um sistema são determinadas pelo conjunto de microestados acessíveis. Por isso, é necessário conhecer a dependência da energia nas configurações de spins. A energia total E do modelo de Ising é dada por

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1.9)$$

onde H é proporcional a um campo magnético externo uniforme. A primeira soma é sobre

todos os pares de vizinhos mais próximos. A constante de troca (exchange) J é a medida da intensidade da interação entre os spins (ver figura 1.3). A segunda soma representa a energia de interação do momento magnético dos spins com um campo magnético externo.

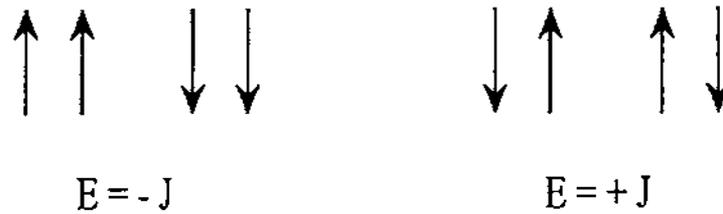


Figura 1.3: Energia de interação entre 2 spins vizinhos mais próximos na ausência de um campo magnético externo ⁶⁵.

Se $J > 0$, *sistema ferromagnético*, então os estados de mais baixa energia são: $\uparrow\uparrow$ e $\downarrow\downarrow$. Reciprocamente se $J < 0$, *sistema antiferromagnético*, os estados de menor energia são $\uparrow\downarrow$ e $\downarrow\uparrow$.

É interessante termos a energia do sistema para todos as possíveis configurações de spins (equivale termos todos os E_α para cada α calculado a partir de 1.9), estando esse sistema em equilíbrio com o meio externo (banho térmico), pois a partir dessas configurações podemos calcular qualquer quantidade física desejada. Cada um destes estados representa uma configuração particular dos spins, a qual se refere a um microestado do sistema.

Se tivermos uma rede com N spins de Ising, como cada spin pode apresenta dois estados, existem 2^N diferentes possíveis microestados para o sistema. Para N muito grande então temos um número muito elevado de microestados. Para uma dada temperatura os estados acessíveis correspondem a uma pequena fração destes microestados, a qual continua sendo ainda muito grande. Desse modo fica difícil resolver o problema analiticamente.

Do ponto de vista microscópico, a interação do sistema com o reservatório de calor permite a transição de um microestado para outro. Individualmente os spins mudam de $+1$ para -1 ou vice versa, ganhando ou perdendo energia para o meio.

Uma quantidade macroscópica que temos interesse é o momento magnético total (magnetização), que é efetivamente a média sobre todos os microestados que o sistema total visita durante o curso de uma medida. Quantidades macroscópicas são calculadas pela equação (1.3). O momento magnético de um microestado M_α é a soma dos valores de S_j para todos os spins naquele particular estado. A magnetização será então dada por

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} p_{\alpha} \quad (1.10)$$

onde $M_{\alpha} = \sum S_j$ e p_{α} é dado pela equação (1.1).

A seguir explicitamos os passos na aplicação do método de MC para o modelo de Ising.

1.3 Implementação do método de Monte Carlo para o modelo de Ising

Vamos agora enumerar as etapas gerais utilizadas pelo método de Monte Carlo. Inicialmente preparamos o sistema (tamanho, condição inicial, condições de contorno, etc), depois relaxamos e posteriormente, calculamos as médias termodinâmicas.

Consideremos um exemplo simples, o modelo de Ising $D = 3$ (ver equação (1.9)), já tratado anteriormente.

Primeiramente vamos especificar o tipo e tamanho da rede e a condição de contorno que utilizamos. Suponhamos que temos uma rede cúbica de comprimento L . Trabalhamos com condição de contorno periódica. A *condição de contorno periódica* ilustrada na Fig. 1.4 é um tipo de condição que minimiza os efeitos de tamanho finito. No modelo de Ising original cada spin só interage com os seus primeiros vizinhos. Agora supomos que os spins das bordas estão interagindo com os spins das bordas opostas a rede, como está indicado pela linhas pontilhadas na figura 1.4. Todos os spins agora têm quatro vizinhos mais próximos, o que de alguma maneira os torna todos equivalentes. Esta parece ser a razão

pela qual o efeito de tamanho finito são mais atenuados nesta condição de contorno. Ao longo do nosso trabalho utilizamos esse tipo de condição. Vamos também considerar um número infinitamente grande de cópias do sistema a volume V e número de partículas N , fixos. Consideremos uma das cópias e especifiquemos a condição inicial por exemplo, todos os spins serão inicializados apontando para cima (ordenamento ferromagnético). Esta condição inicial pode ser usada em todas as realizações (cópias). Agora aplicamos a seguinte receita:

1. Selecionamos um sítio i da rede no qual o spin S_i é escolhido para uma possível modificação nos seus estados ($S_i \rightarrow -S_i$).

2. Calculamos a variação da energia ΔE associada com essa possível modificação do spin.

3. Calculamos a probabilidade de transição, que depende da dinâmica utilizada.

4. Sorteamos um número aleatório (distribuição uniforme) $0 \leq x_i(t) \leq 1$.

5. Comparamos a probabilidade de transição com o número aleatório x_i .

6. Repetimos os passos (1) até (5) para todos os spins da rede. Isso é denominado de um passo de Monte Carlo.

7. Repetimos esta receita inúmeras vezes até que o sistema atinja o equilíbrio, para então calcularmos as médias desejadas.

8. Voltamos ao passo 1 para uma nova realização (cada vez temos uma trajetória distinta, pois temos uma sequência de números aleatórios diferentes, o que configura uma nova realização, mesmo partindo de uma idêntica condição inicial).

9. Fazemos a média das realizações.

A seguir descrevemos as dinâmicas de Metropolis e de Glauber.

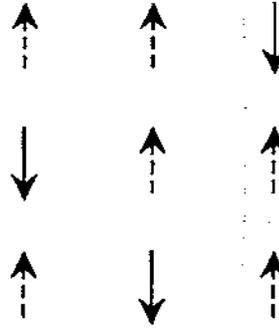


Figura 1.4: Modelo de Ising com condição de contorno periódica. Os spins que estão conectados pelas linhas pontilhadas ao redor da rede são considerados primeiros vizinhos e contribuem para o cálculo da energia do sistema.

1.4 As Dinâmicas de Metropolis e Glauber

1.4.1 A Dinâmica de Metropolis

O algoritmo de Metropolis foi elaborado por Metropolis *et al.* em 1953⁴³ para simulação em dinâmica molecular (historicamente a primeira dinâmica a ser formulada). Ele é o mais usado em processos Markovianos para sistemas de spins e o mais rápido quando comparado com as outras dinâmicas, pois tem poucas instruções.

O algoritmo estabelece que se a energia do sistema passa de E_α para $E_{\alpha'}$ (consequentemente ocorre uma mudança na configuração passando de α para α') e se $E_{\alpha'} < E_\alpha$ a nova configuração é automaticamente aceita; se, contudo, $E_{\alpha'} > E_\alpha$ a nova configuração é aceita com probabilidade $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_\alpha)}$, ou seja:

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} A^{-1} & \text{se } E_{\alpha'} < E_{\alpha} \\ A^{-1} e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})} & \text{se } E_{\alpha'} > E_{\alpha} \end{cases} \quad (1.11)$$

para aqueles estados α' que podem ser atingidos a partir de α e zero caso contrário. A é uma constante de normalização.

A implementação do algoritmo estabelece que o spin será mudado quando comparamos o número aleatório (x_i) com a probabilidade de transição da seguinte maneira:

$$x_i(t) \leq p = \min[1, e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}]. \quad (1.12)$$

A falta de simetria neste algoritmo é visível, mas é simples mostrar que mesmo não apresentando simetria, satisfaz à microreversibilidade. O critério de acessibilidade é satisfeito se os novos estados são escolhidos de tal maneira que a nova configuração α' possa em princípio ter sido obtida de α em um número de passos finito.

1.4.2 A Dinâmica de Glauber

A dinâmica de Glauber é uma variante da de Metropolis e atualiza seus spins da seguinte maneira. Inicialmente definimos uma probabilidade associada ao sítio i dada por

$$p_i(t) = [1 + \exp(-2h_i(t))]^{-1}, \quad (1.13)$$

onde h_i é o campo local atuando no sítio i , no instante t , e é dado por

$$h_i(t) = K \sum_j \sigma_j(t) + \beta H \quad (1.14)$$

onde $K = J/k_B T_n$.

Agora comparamos $x_i(t)$ (o número aleatório) com $p_i(t)$ através da seguinte regra.

Para $\sigma_i(t) = -1$ temos,

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_i(t) \leq p_i(t) \\ -1 & \text{se } x_i(t) > p_i(t) \end{cases} \quad (1.15)$$

enquanto que para $\sigma_i(t) = 1$ temos,

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} -1 & \text{se } x_i(t) \leq 1 - p_i(t) \\ 1 & \text{se } x_i(t) > 1 - p_i(t) \end{cases} \quad (1.16)$$

Uma característica dessas duas dinâmicas é que elas atualizam os spins um por vez, ao contrário de outras que já mencionamos, que atualizam aglomerados de spins. As dinâmicas de atualizações individuais fazem com que as configurações vizinhas na cadeia Markoviana, não difiram muito uma da outra, trazendo fatores positivos e negativos. O ponto negativo é que são necessários maiores tempos de termalização para atingir o equilíbrio, e obtermos as médias estatísticas desejadas, (ver referência ⁶⁶, para saber com mais detalhes como calcular esse tempo de termalização).

No próximo capítulo inicialmente faremos um resumo sobre transições de fase e depois apresentaremos o nosso método de Busca automática (MBA), mostrando os resultados das propriedades críticas calculados a partir do modelo de Ising ferromagnético.

Capítulo 2

Método Eficiente de Procura

Automática de Propriedades Críticas

2.1 Introdução

Neste capítulo analisaremos um novo método numérico que pode ser aplicado em sistemas que apresentam transições de fase. Antes de descrever o método, faremos uma breve descrição da teoria das transições de fase.

Transições de fase pertencem a uma importante classe de fenômenos físicos com enormes aplicações teóricas e práticas. Dentro da Mecânica Estatística, a área que envolve os fenômenos críticos é uma das mais fascinantes e, por isso, tenha atraído um grande número de pesquisadores que têm contribuído para o seu desenvolvimento, colocando-a como um dos ramos mais ativos da física moderna. A existência de ordem magnética em materiais do tipo ferro foi o que primeiro chamou atenção para o tema do magnetismo. Com o entendimento da teoria fundamental do magnetismo estes materiais agora formam o que é provavelmente o mais importante teste da teoria das transições de fase desde que foi possível obter um modelo Hamiltoniano simples e realístico para descrever os sistemas

magnéticos. Por exemplo, o modelo teórico mais estudado o qual exibe uma transição de fase é o modelo de Ising.

Teoricamente a transição de fase ocorre quando existe uma singularidade na sua energia livre ou em uma de suas derivadas. A transição basicamente caracteriza-se por uma mudança global entre estados físicos de equilíbrio bem definidos do sistema. Isto ocorre à medida que variamos seus parâmetros externos, como por exemplo temperatura, pressão, campo magnético ou campo elétrico. As transições líquido-gás, condutor normal-supercondutor, paramagnética-ferromagnética são exemplos comuns.

O diagrama de fase típico de um fluido ⁶⁷ é mostrado na Fig. 2.1. Variando a temperatura e a pressão, a água pode se encontrar no estado sólido, líquido ou gasoso. As fronteiras que separam as fases para cada tipo de fluido são bem definidas. Ao atravessar a fronteira a transição pode ocorrer com a presença de calor latente (transição de primeira ordem). Quando isto não ocorre temos a chamada transição contínua ou de segunda ordem. Não existe um ponto terminal na curva sólido-líquido. No diagrama da Fig. 2.1 somente no ponto C ($T = T_c$ (temperatura crítica) e $p = p_c$ (pressão crítica)) temos transição de segunda ordem. A transição em qualquer outro lugar do diagrama é acompanhada de calor latente e portanto é de primeira ordem (só para linhas à esquerda de T_c).

Um comportamento análogo ao dos fluidos ocorre em transições de fase de ferromagnetos. O diagrama de fase de um ferromagneto simples é mostrado na Fig. 2.2. Análogo à transição líquido-gás, existe uma linha de transição de primeira ordem, terminando em um ponto crítico a uma temperatura $T = T_c$. Todas as transições mostradas na Fig. 2.2 ocorrem a um campo magnético nulo ($H = 0$). O parâmetro de ordem associado a esta transição é a magnetização. Para $T < T_c$, ao passarmos de um estado com magnetização negativa ($H < 0$) para outro com magnetização positiva ($H > 0$), o parâmetro de ordem apresenta um salto (passa de magnetização negativa para positiva) o que configura uma transição de primeira ordem. Para $T \geq T_c$ podemos passar continuamente entre estes dois estados.

Dentre os estudos pioneiros em transições de fases ²⁹, podemos destacar as teorias clássicas de van der Waals (fluidos), Weiss (ferromagnetismo), Ornstein-Zernike

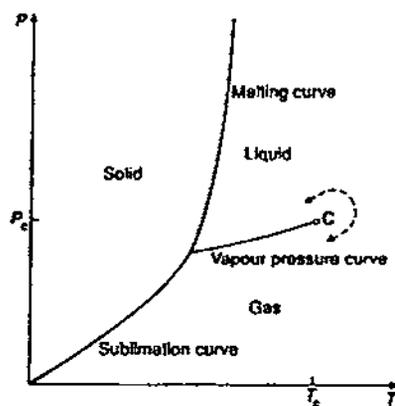


Figura 2.1: Diagrama de fase típico de um fluido ⁶⁷, mostrando as fases líquida, gasosa e sólida. Todas as transições de fases são de primeira ordem, exceto no ponto crítico C . Além do ponto C ($T > T_c$), pode-se passar continuamente de líquido para gás.

(opalescência crítica e função de correlação), Langevin (paramagnetismo), etc. Estas teorias simples explicam os aspectos gerais (qualitativos) das transições. Algumas destas teorias clássicas tinham em comum o fato de não considerarem as flutuações das entidades microscópicas dos sistemas em questão, essenciais para explicar o comportamento cooperativo destes sistemas. Por esta razão as equações de estados obtidas, falham em prever o comportamento perto do ponto crítico observado experimentalmente.

Algumas grandezas termodinâmicas apresentam divergência no ponto crítico. São as chamadas funções respostas. Como exemplo podemos citar o calor específico, a susceptibilidade e a compressibilidade isotérmica. Por esta razão, de uma forma inversa, podemos localizar transições de fase, experimentalmente ou teoricamente, de sistemas desconhecidos, construindo os diagramas dessas grandezas em função dos correspondentes parâmetros intensivos relevantes: pressão, temperatura, campo externo, etc. Desta maneira, torna-se muito importante para o estudo da teoria dos fenômenos críticos o entendimento mais cuidadoso da forma destas divergências e o comportamento singular de outras funções termodinâmicas na região crítica. São os expoentes críticos que caracterizam essas divergências, indicando o tipo de singularidade dessas grandezas na vizinhança da mudança de fase. Em geral, definimos o expoente crítico λ associado a uma função $F(t)$ que diverge

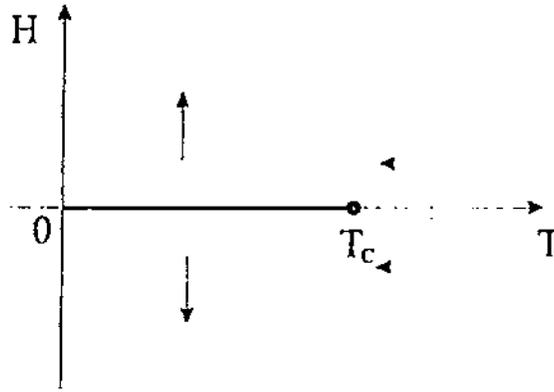


Figura 2.2: Diagrama de fase de um ferromagneto simples ⁶⁷. A linha de primeira ordem a campo zero termina no ponto crítico a temperatura $T = T_c$.

para algum valor especial de t por

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln |t|}. \quad (2.1)$$

No nosso caso $t = (T - T_c)/T_c$. Se o limite ($t \rightarrow 0$) existir, é mais usual escrever

$$F(t) \sim |t|^\lambda. \quad (2.2)$$

Sabe-se que os expoentes críticos dependem da dimensionalidade do sistema (espacial), do parâmetro de ordem e do alcance das interações que caracterizam o sistema físico. Na Tabela 1 apresentamos as definições para os expoentes críticos mais comuns em sistemas magnéticos.

Aqui estamos supondo que os expoentes críticos associados às diversas grandezas termodinâmicas são os mesmos, quando $T \rightarrow T_c^+$ por cima ($T > T_c$), ou $T \rightarrow T_c^-$ por baixo ($T < T_c$). (Esta hipótese só foi devidamente comprovada após o surgimento da teoria do grupo de renormalização ⁶⁷).

Tabela 1

Calor específico a campo nulo	$C_H \sim t ^{-\alpha}$
Magnetização a campo nulo	$M \sim (-t)^\beta$
Susceptibilidade isotérmica a campo nulo	$\chi_T \sim t ^{-\gamma}$
Isoterma crítica ($t = 0$)	$H \sim M ^\delta \text{sgn}(M)$
Comprimento de correlação	$\xi \sim t ^{-\nu}$
Função de correlação de pares em T_c	$G(r) \sim 1/r^{D-2+\eta}$

Tabela 1: Definições dos expoentes críticos mais comumente usados para os sistemas magnéticos

Os valores dos expoentes α' , α , β' , γ' , γ , δ , ν' , ν e η são dados na Tabela 2²⁹ para alguns fluidos e sistemas magnéticos, para alguns modelos teóricos artificiais, suficientemente simples, mas absolutamente não triviais, que podem ser resolvidos exatamente, ou pelo menos com uma boa aproximação. Suas definições estão mostrados na Tabela 1²⁹. Embora os resultados obtidos para os expoentes críticos não reproduzam exatamente os dados experimentais, eles são importantes na indicação dos aspectos relevantes de um sistema real que apresente fenômeno crítico. Além disso, os resultados exatos nos dão uma referência para testar teorias mais gerais, inclusive de métodos aproximados. Um dos principais resultados desse desenvolvimento mostrou que os expoentes críticos obtidos de soluções exatas não concordam com os valores clássicos como mostra a Tabela 2. Apesar do fato que a temperatura crítica calculada a partir de experimentos, varia substancialmente de material para material, nota-se uma similaridade entre os valores experimentais para cada expoente crítico (na mesma dimensão espacial).

A partir de argumentos termodinâmicos pode-se demonstrar que os expoentes críticos obedecem a certas desigualdades entre elas a de Rushbrooke⁶⁸, a de Griffiths^{69,70}, a de Buckingham⁷¹, a de Fisher³¹ e a de Josephson^{72,73} citadas abaixo:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke}).$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (\text{Griffiths}),$$

$$D \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \geq (2 - \eta) \quad (\text{Buckingham}),$$

$$(2 - \eta)\nu > \gamma \quad (\text{Fisher}).$$

$$D\nu \geq 2 - \alpha \quad (\text{Josephson}).$$

Tabela 2

System	$T < T_c$			$T = T_c$		$T > T_c$			
	α'	β	ν	ν'	δ	ν	α	γ	ν
<i>Fluids</i>									
CO ₂	~0.1	0.34	~1.0	—	4.2	—	~0.1	1.35	—
Xe	<0.2	0.35	~1.2	0.57	4.4	—	—	1.3	—
<i>Magnets</i>									
Ni	$\alpha'_2 = -0.3$	0.42	—	—	4.22	—	0	1.35	—
EuS	$\alpha'_2 = -0.15$	0.33	—	—	—	—	0.05	—	—
CrBr ₃	—	0.368	—	—	4.3	—	—	1.215	—
<i>Soluble Models</i>									
classical	0 (disc)	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	3	0	0 (disc)	1	$\frac{1}{2}$
Ornstein-Zernike	—	—	—	—	5	0	$\alpha_s = -1$	2	1
d = 3 spherical model	—	$\frac{1}{2}$	—	—	5	0	$\alpha_s = -1$	2	1
d = 1 Ising model	0 (log)	$\frac{1}{2}$	~ $\frac{1}{2}$	1	~15	$\frac{1}{2}$	0 (log)	~ $\frac{1}{2}$	1
<i>Approximations</i>									
d = 3 Ising model (fluid?)	~ $\frac{1}{2}$ or ~ $\frac{1}{4}$	~ $\frac{1}{4}$	~ $\frac{1}{2}$ or ~ $\frac{1}{4}$	—	~5	~0.041	~ $\frac{1}{2}$	~ $\frac{1}{2}$	~0.638
d = 3 Heisenberg model (magnet?)	—	(~0.348?)	—	—	~5	(~0.031)	$\alpha_s \sim -0.1$	~1.4	~0.70

Tabela 2: Valores dos expoentes críticos para vários sistemas teóricos e experimentais ²⁹.

Fazendo uso da hipótese de homogeneidade de Widom pode-se mostrar que estas desigualdades tornam-se igualdades. Portanto, os expoentes críticos não são independentes; na verdade, basta conhecer dois deles para se obter todo o conjunto de expoentes.

Tendo definido os expoentes críticos queremos realçar porque eles são interessantes. Enquanto T_c depende sensivelmente dos detalhes das interações interatômicas, os expoentes críticos dependem apenas de alguns parâmetros fundamentais. Assim conjuntos diversos de sistemas podem apresentar os mesmos expoentes críticos. São as conhecidas classes de universalidade.

O conceito de universalidade foi originado quando Guggenheim ⁷⁴ apresentou em um trabalho experimental a curva de coexistência de oito fluidos diferentes em um gráfico utilizando variáveis reduzidas, T/T_c e ρ/ρ_c . O ajuste de todas as curvas em uma curva universal, requer que o expoente crítico do parâmetro de ordem seja $\beta = 1/3$ (ver Fig. 2.3). Portanto, uma classe de universalidade é caracterizada pelo fato que sistemas diferentes apresentam os mesmos expoentes críticos.

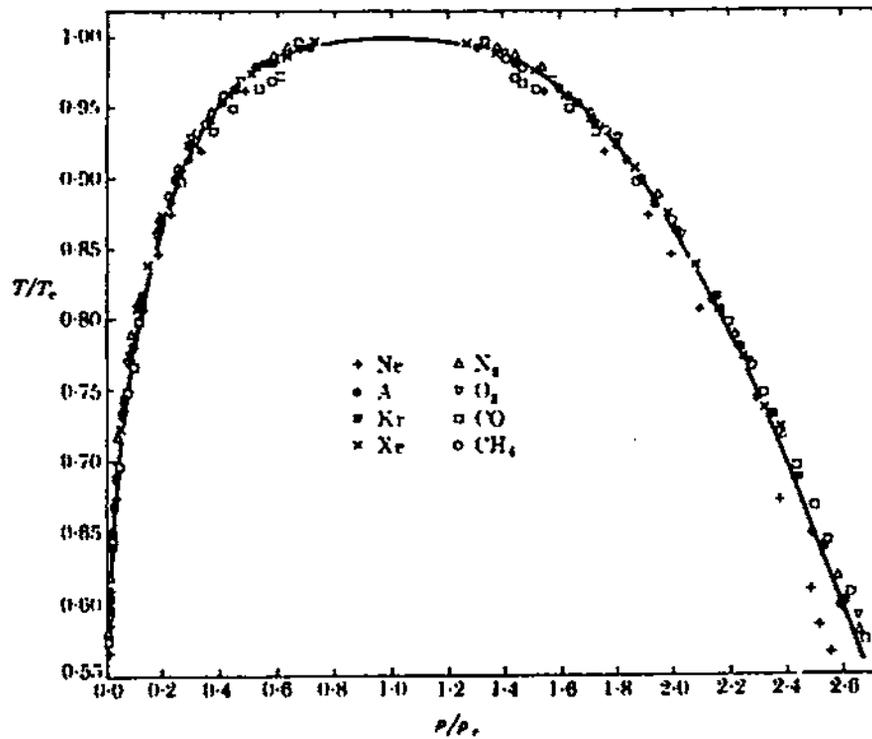


Figura 2.3: Curvas de coexistência ⁶⁷ de oito fluidos diferentes. O ajuste (curva sólida) acontece para $\beta = 1/3$.

2.2 Método e Aplicações

Existem vários métodos numéricos para determinar os pontos críticos em modelos de spin^{39-41,75-77}. Estes modelos, como o modelo de Ising^{ising}, modelo de Potts, modelo de Heisenberg⁷⁸, etc, são importantes porque descrevem uma grande variedade de sistemas naturais, alguns dos quais apresentam características interessantes como transições de fase e fenômenos críticos²⁹. Resolver estes modelos continua sendo um desafio para os físicos. O formalismo padrão da Mecânica Estatística pode ser aplicado para o estudo destes sistemas complexos, mas as soluções exatas são normalmente difíceis de se obter e não há uma garantia de encontrar resultados analíticos para um determinado modelo^{22,79,80}. O método de Monte Carlo (MC) abrange uma classe de algoritmos para calcular valores esperados através de amostragem aleatória no espaço de configurações^{39-41,75} (ou espaço de fase). Frequentemente, o método de MC tem sido melhorado, em uma permanente procura para aumentar a sua eficiência, sempre contrabalançando os esforços computacionais com a precisão dos resultados. As versões originais, faziam as atualizações dos spins localmente, mas recentemente apareceram propostas que fazem atualizações não locais, tão bons quanto os algoritmos baseados na Teoria do Grupo de Renormalização⁸¹⁻⁸⁴. Alguns desses métodos apresentamos no capítulo 1. Mesmo com estes grandes avanços, encontrar os pontos críticos continua sendo um desafio, porque tais métodos requerem que a temperatura seja controlada ou introduzida a “mão” ou através de outros algoritmos⁵⁴⁻⁵⁶.

Uma importante novidade na teoria de fenômenos críticos ocorreu com o surgimento do conceito de criticalidade auto organizada (self-organized criticality (SOC))¹⁶. De acordo com esta teoria o sistema evolui, segundo alguma dinâmica, espontaneamente em direção ao estado crítico, isto é, o estado crítico é um atrator da dinâmica. Desenvolvemos um método que chamamos de o método de busca automática (MBA),^{26-28,85,86} baseado no conceito SOC é utilizado para obter pontos críticos, com sensível redução do tempo computacional obtendo resultados satisfatórios mesmo para redes pequenas. No caso de sistemas Hamiltonianos não há dissipação. O que há em comum com sistemas não Hamil-

tonianos é o fato que mesmo em equilíbrio, o sistema físico interage com sua vizinhança e isto permite ao sistema “passar” (via dinâmica) dentro de uma certa bacia atratora de estados. Isto funciona como se o sistema estivesse sempre querendo dissipar mas não o faz porque os parâmetros externos estão fixos. Testamos o novo método calculando a temperatura crítica e a curva da magnetização no modelo de Ising em duas e três dimensões ($D=2$ e $D=3$) (mostraremos com mais detalhes na seção 2.2.1). Calculamos também o expoente crítico β (detalhes na seção 2.2.2).

O método (MBA) é baseado numa relação recursiva, que dirige o sistema para o ponto crítico. Consideremos o gráfico esquemático da magnetização versus temperatura de um sistema ferromagnético típico (figura abaixo).

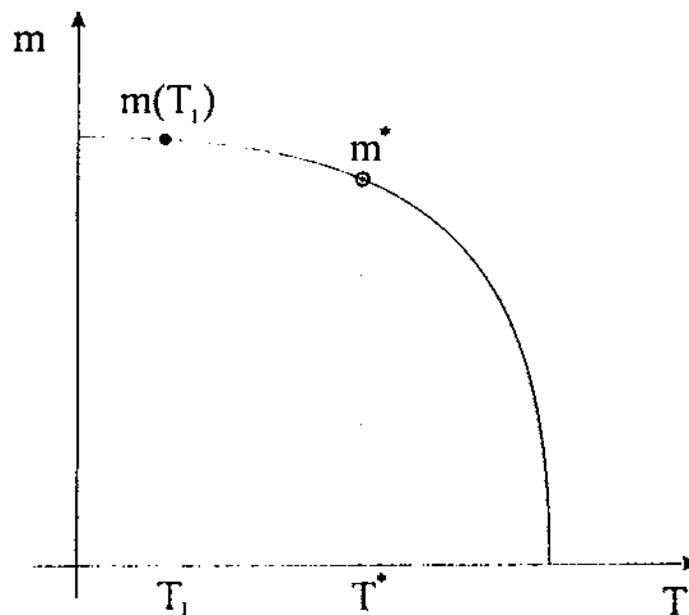


Figura 2.4: Esquema da curva de magnetização.

Suponhamos que queremos calcular o valor T^* correspondente à magnetização m^* . Consideremos a temperatura $T_1 < T^*$ (poderia ser $T_1 > T^*$). Aplicando o método de MC usual podemos calcular a magnetização $m(T_1) > m^*$. A relação recursiva é dada pela seguinte expressão

$$K_{n+1} = K_n - \alpha(m_n - m^*), \quad (2.3)$$

onde $K = J/k_B T$, m é a magnetização por spin (ou seja, $m = N^{-1} \sum_i \langle S_i \rangle$) e α é um parâmetro de controle que comentaremos mais adiante.

A relação (2.3) é iterativa para a constante K e portanto para a temperatura T . Escolhido um dado valor para α , substituímos $m_1(T_1)$ e $K_1 = J/k_B T_1$ na equação (2.3) para obtermos $K_2 (< K_1)$ e portanto $T_2 (> T_1)$. Novamente aplicamos o método de MC para calcularmos $m(T_2)$. Repetimos N vezes este procedimento até que $m(T_N)$ seja menor que m^* (aqui o T^* não representa a temperatura crítica). Isto significa que $T_N > T^*$. A partir deste ponto a relação recursiva (2.3) inverte o sentido de crescimento de K . Agora o K começa a crescer e portanto T a diminuir. Toda vez que $m - m^*$ troca de sinal, a relação de recorrência inverte o sentido de crescimento de T dirigindo o sistema para a temperatura T^* . Em resumo, a temperatura do sistema fica oscilando em torno de T^* como se fosse um oscilador harmônico, α fazendo o papel de constante da mola. A temperatura T^* é calculada após o sistema entrar na bacia atratora. T^* corresponde ao valor médio obtido das oscilações do sistema depois de um longo tempo. Desse modo podemos calcular a curva do parâmetro de ordem versus temperatura.

Para m^* pequeno estamos próximo da transição de fase. Assim este método permite calcular aproximações para grandezas críticas existentes próximas da transição de fase. Este é um dos objetivos desta tese.

Façamos agora algumas considerações sobre o parâmetro α . Se α é muito pequeno o sistema se dirige muito lentamente para a temperatura T^* . Se α é muito grande, o sistema se dirige rapidamente para T^* . Se α é muito grande, o sistema se dirige rapidamente para a temperatura T^* , no entanto permanece com grandes oscilações em torno de T^* , incorrendo em resultados com maiores barras de erro. Portanto existe um compromisso entre o tempo de computação investido e a fidelidade dos resultados.

Descrevemos o MBA usando a magnetização como grandeza termodinâmica. Outras grandezas podem ser utilizadas, a susceptibilidade por exemplo.

Por esta razão podemos escrever a relação de recorrência (2.3) ^{26-28,85,86} em uma forma mais geral,

$$X_{n+1} = X_n - \alpha (Y_n - Y^*), \quad (2.4)$$

que envolve duas variáveis adimensionais (X_n, Y_n) , relacionadas à dois parâmetros relevantes de um dado sistema físico. Abaixo apresentamos a receita geral da implementação MBA no computador. As variáveis (X_n, Y_n) mudarão a cada passo de iteração n , de tal modo que depois de um número suficiente de passos, X_n convergirá para um valor estacionário X^* , compatível com o valor estacionário $Y^* \equiv Y(X^*)$, de Y_n . O estado estacionário desejado (X^*, Y^*) pode ser selecionado previamente por uma escolha apropriada da quantidade Y^* ; a taxa de convergência para o estado estacionário é controlada pelo parâmetro α . O método funciona da seguinte maneira:

(a) Primeiro definimos α e Y^* , as quais controlarão respectivamente, a taxa de convergência e o estado estacionário a ser acessado;

(b) Na primeira iteração, escolhemos o valor inicial X_0 , de tal forma que (X_n, Y_n) variará passo por passo de (X_0, Y_0) para (X^*, Y^*) ;

(c) Uma configuração inicial particular é designada para as variáveis dinâmicas e o sistema é deixado evoluir dinamicamente de acordo com um dada prescrição de MC. Depois que atingiu o equilíbrio (t_0 passos de MC) podemos calcular as médias termodinâmicas (associada com a escolha do X_0) sobre t_1 passos de MC. Para melhorar as estatísticas, este procedimento é repetido em N_s amostras. O valor Y_0 é calculado, e da equação (2.4) obtemos X_1 ;

(d) O passo (c) é agora executado para o parâmetro X_1 , e assim por diante, de tal maneira que obteremos iterativamente, $(X_0, Y_0) \rightarrow (X_1, Y_1) \rightarrow (X_2, Y_2) \dots$;

(e) O processo para quando Y_n e X_n apresentarem pequenas oscilações ao redor do valor Y^* [definido no passo (a)] e X^* (o valor estacionário estimado do parâmetro X), respectivamente;

(f) Depois do regime estacionário ter sido alcançado, podemos considerar um número Δn de oscilações ao redor de (X^*, Y^*) para calcular o parâmetro X^* como uma média dos valores destas oscilações.

O MBA descrito acima foi aplicado com sucesso para a determinação da fronteira crítica no crescimento de polímeros ramificados²⁶, onde $X \equiv b$ (probabilidade de rami-

ficção) e $Y \equiv N$ (número de pontas ativas), e no problema da percolação ²⁷, onde $X \equiv p$ (probabilidade de ocupação associada com os sítios de ligações) e $Y \equiv N$ (número de sítios ou ligações ativas).

Na próxima seção apresentaremos os resultados da aplicação do MBA para o modelo de Ising.

2.2.1 Resultados e Discussões sobre o Cálculo das Temperaturas Críticas do Modelo de Ising

Vamos ilustrar o MBA calculando os pontos críticos do modelo de Ising ferromagnético. A Hamiltoniana de Ising é definida da seguinte maneira

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (J > 0 ; S_i = \pm 1), \quad (2.5)$$

onde a soma $\sum_{\langle ij \rangle}$ é restrita aos pares de spins primeiros vizinhos em uma dada rede geométrica finita de tamanho L de dimensão D (com um número total de spins $N = L^D$).

Para um sistema finito de tamanho linear L , a magnetização por spin é finita no ponto crítico, decrescendo para valores crescentes de L : dessa forma o comprimento de correlação torna-se comparável ao tamanho da rede, isto é, $\xi \sim L$. Se consideramos o comprimento de correlação bem como a magnetização se comportando como lei de potência, resulta $m \sim L^{-\beta/\nu}$ na criticalidade ³⁸. Portanto, a escolha de m^* , para que o sistema dirija em direção ao ponto crítico, deve satisfazer $0 < m^* < L^{-\beta/\nu}$. Se tomarmos m^* fora deste intervalo, o sistema se dirige através de um diferente caminho termodinâmico e nunca convergirá para o ponto crítico, por exemplo, considerando $m^* \sim O(1)$, a relação produzirá uma convergência para uma baixa temperatura, compatível com o valor de m^* ^{28,85,86}. É claro, que os expoentes β e ν são quantidades desconhecidas, a serem determinadas. O método presente, de antemão, fornece uma estimativa aproximada da taxa β/ν , através da observação da convergência da magnetização depois de muitas iterações. Portanto, a

fim de aproximar o ponto crítico, neste presente trabalho escolhemos um valor pequeno para m^* (por exemplo, $m^* = 10^{-2}$).

Considerando várias escolhas decrescentes do valor de α , verificamos que existe um α , abaixo do qual a T^* não se altera dentro de uma dada barra de erro. Nos casos estudados nesse trabalho, tal valor é $\alpha = 10^{-2}$. Para obter dados razoáveis para calcular os expoentes críticos, consideramos um valor menor para α ($\alpha = 10^{-3}$); como já mencionamos, tal escolha não altera a temperatura estacionária (ver Fig. 2.9(a)) (comparado com uma estimativa para $\alpha = 10^{-2}$). Suspeitamos que a independência dos resultados na escolha particular de α , quando α é menor que um certo valor, é uma propriedade geral do método; isto tem sido observado em todas as outras aplicações deste método^{26-28,85-87}.

Aplicamos o método acima para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada de tamanho linear $L = 20, 40, 60$ e 100 e para a rede cúbica com $L = 10$. A cada realização, nossa simulação sempre inicia com uma configuração completamente ordenada (todos os spins apontados para cima) e um tempo $t_0 = N/2$ passos de MC foram descartados antes de iniciarmos o cálculo de médias térmicas. A cada atualização do sistema, a prescrição de MC usada, como mencionada no item (c) acima, faz uma simples atualização nos spins, seguindo as dinâmicas de Glauber⁴⁴ ou Metropolis⁴³, conforme descrito no capítulo 1. Em seguida, calculamos a média termodinâmica para a magnetização por spin, sobre $t_1 = N$ passos de MC. Depois que o estado estacionário é alcançado, deixamos o sistema oscilar por muitos passos de interações; destes dados estimamos o valor médio $K^* = J/k_B T^*$ e suas respectivas barras de erro. Para melhorar as estatísticas, o procedimento como um todo será repetido cerca de $N_s = 200$ amostras (com diferentes sequências de números aleatórios). A magnetização por spin pode ser obtida a partir de seguinte expressão

$$m = \frac{1}{N_s t_1 N} \sum_{\gamma=1}^{N_s} \sum_{t=1}^{t_1} \sum_{i=1}^N S_{i\gamma}(t). \quad (2.6)$$

No momento só estamos interessados na temperatura crítica²⁸. Assim usamos um valor grande de α ($\alpha = 10^{-1}$). Notamos que o MBA encontra bons resultados para os

pontos críticos quando usamos os algoritmos de Metropolis em $D = 2$ e a dinâmica de Glauber em $D = 3$.

Para testar a eficácia do MBA escolhemos o modelo de Ising ferromagnético por causa de sua importância na Física e conseqüentemente, pela vasta literatura sobre este modelo. Notamos que o método facilmente gera a curva da magnetização, como está mostrado para os vários tamanhos do sistema $L = 20$ (Fig. 2.5a), $L = 40$ (Fig. 2.5b), $L = 60$ (Fig. 2.6a) e $L = 100$ (Fig. 2.6b) usando a dinâmica de Glauber. Partindo de qualquer ponto da curva do parâmetro de ordem é possível gerar toda a curva, particularmente o ponto crítico. O método também pode ser usado com outras dinâmicas além de Glauber e de Metropolis.

Utilizamos como valor inicial para o cálculo da temperatura crítica $T/T_c = 0.4$, isso para todos os tamanhos na rede quadrada. Para a dinâmica de Glauber obtivemos as temperaturas críticas mostradas na tabela 3 para as redes bidimensionais de tamanho $L = 20$ (Fig. 2.5c), $L = 40$ (Fig. 2.5d), $L = 60$ (Fig. 2.6c) e $L = 100$ (Fig. 2.6d). Para Metropolis achamos resultados semelhantes aos de Glauber também mostrados na Tabela 4 para redes de tamanho $L = 20$ (Fig. 2.7c) e $L = 40$ (Fig. 2.7d). Sabemos que para $D = 2$ a temperatura crítica analítica é $k_B T_c / J = 2.269185\dots$. Para o caso de Glauber achamos uma discrepância ($|T^* - T_c|/T_c$) em torno de 4% ($L = 100$), enquanto para Metropolis achamos uma discrepância de 4% ($L = 40$). Nossos resultados indicam que o MBA é capaz de encontrar ótimos resultados para a temperatura crítica considerando o pequeno tamanho das redes empregadas.

Estudamos também o modelo de Ising ferromagnético em uma rede cúbica. A exemplo do caso bidimensional encontramos a curva da magnetização, que está de acordo com a curva já conhecida de uma transição de segunda ordem (Fig. 2.8a), usando a dinâmica de Glauber. Iniciando com o valor $T/T_c = 0.2$, o sistema evolui até atingir a temperatura crítica (Fig. 2.8b). O valor da temperatura crítica conhecido numericamente é: $k_B T_c / J \simeq 4.51142$ ⁸⁸ (ver Tabela 3). Comparando com o nosso resultado, a discrepância ($|T^* - T_c|/T_c$) é de 1.1%. Não utilizamos o algoritmo de Metropolis para a rede cúbica, mas acreditamos que os resultados sejam tão bons quanto o utilizado com a dinâmica de Glauber.

Observamos que nossos resultados do caso bidimensional são melhores quando utilizamos a dinâmica de Metropolis. No caso $D = 3$ ainda não podemos fazer esta comparação porque só utilizamos a dinâmica de Glauber.

Tabela 3

Tamanho do Sistema	D	Glauber			T_c
		T^*	T^*/T_c	$ T^* - T_c /T_c$	
20	2	2.53(1)	1.11	12%	2.269185
40	2	2.41(1)	1.06	6%	2.269185
60	2	2.38(1)	1.05	5%	2.269185
100	2	2.37(1)	1.04	4%	2.269185
10	3	4.56(1)	1.01	1.1%	$\simeq 4.511617$

Tabela 3: Temperaturas críticas encontradas usando a relação de recorrência para vários tamanhos de uma rede quadrada ($L = 20, 40, 60$ e 100) e para rede cúbica ($L = 10$). Utilizamos a dinâmica de Glauber. Os resultados são surpreendentemente satisfatórios para tamanhos modestos de redes. A última coluna mostra as temperaturas conhecidas na literatura.

Tabela 4

Tamanho do Sistema	Metropolis			T_c
	T^*	T^*/T_c	$ T^* - T_c /T_c$	
20	2.41(1)	1.06	6%	2.269185
40	2.37(1)	1.04	4%	2.269185

Tabela 4: Temperaturas críticas a partir do algoritmo de Metropolis. Utilizamos uma rede quadrada de tamanho $L = 20$ e 40 .

Se escolhermos um valor de m^* pequeno (próximo da transição) e partimos de uma temperatura próxima de zero, O MBA dirige o sistema ponto por ponto através da curva de magnetização (Fig. 2.6). Para adquirir mais confiança no método podemos traçar esta curva escolhendo vários valores de m^* (entre 1 e 0) e calculando passo a passo as respectivas temperaturas T^* . Se o MBA é consistente as curvas devem se assemelhar à curva verdadeira da magnetização e é isso o que ocorre. Para este fim usamos redes de tamanhos $L = 20, 30, 35, 40$ e 45 , apresentamos os resultados extrapolados na Fig. 2.9b.

2.2.2 Resultados e Discussões do Expoente da Magnetização (β)

Anteriormente fizemos um teste utilizando o modelo de Ising para calcular a temperatura crítica com o MBA e obtivemos bons resultados utilizando a dinâmica de Glauber e de Metropolis. Agora estamos interessados em mostrar que o MBA não é apropriado somente para obter fronteiras críticas, mas também para calcular os expoentes críticos, ou seja, o sistema se dirige para a criticalidade através da curva do parâmetro de ordem (o caminho termodinâmico correto). Calculamos o expoente β ⁸⁵ do modelo de Ising utilizando a dinâmica de Glauber. Para a temperatura crítica vimos que a dinâmica de Metropolis encontrava bons resultados para algumas redes e resultados razoáveis para outras. Estudamos várias redes bidimensionais (quadrada, triangular e hexagonal) de tamanho linear $L = 40$ uma rede cúbica com $L = 10$. A partir das mesmas configurações iniciais (todos os spins para cima) e mesmos processos de simulações, encontramos a magnetização média por spin e as temperaturas críticas para cada rede.

Após o estado estacionário ser atingido deixamos o sistema oscilar por $\Delta n = 100$ passos de iterações; feito isto, estimamos o valor médio $K^* = J/k_B T^*$ e suas respectivas barras de erro. Por esse motivo se comparamos as duas tabelas 3 e 5 notamos que para o caso $L = 40$ nossos resultados estão melhores que os obtidos anteriormente; isso se deve ao fato de que a estimativa do valor médio agora foi feita com mais amostragem e desse modo com mais precisão.

Nossos resultados são resumidos na tabela 5. Em cada caso, os valores das tempera-

turas estacionárias T^* são muito próximos do valores conhecidos da temperatura T_c (a maior discrepância aconteceu para a rede quadrada, onde $|T^* - T_c|/T_c \approx 5\%$). Na fig. 2.10 apresentamos a magnetização versus temperatura para a rede triangular. Destacamos a região utilizada para estimar o expoente crítico β . Os expoentes são obtidos a partir da Fig. 2.11 e estão mostrados na tabela 5. Apesar dos tamanhos das redes utilizadas serem pequenos, nossas estimativas dos expoentes críticos concordam, dentro das barras de erro, com os valores disponíveis na literatura. Para as redes bidimensionais (quadrada, triangular e hexagonal) nossos resultados são universais, como esperado, concordando com o valor exato bem conhecido, $\beta = 1/8$ ⁵.

É importante comparar alguns dos nossos resultados com aqueles encontrados por métodos padrão de MC. A presente estimativa de β e T_c para a rede cúbica de tamanho linear $L = 10$ está em boa concordância com os valores obtidos da simulação de MC padrão $8 \leq L \leq 96$ ⁸⁸, como mostrado na Tabela 5. Para a rede quadrada, Newman e Barkema ⁸⁹ efetuaram uma análise de escala de tamanho finito (finite-size scaling), numa simulação convencional de MC para vários tamanhos de rede ($10 \leq L \leq 200$), encontrando $k_B T_c / J = 2.27(1)$. Eles calcularam os expoentes críticos da susceptibilidade magnética e comprimento de correlação, $\gamma = 1.76(1)$, $\nu = 1.00(5)$; e também o expoente crítico da magnetização, $\beta = 0.12(5)$, obtido para uma rede bidimensional de tamanho $L = 40$. Vemos que é surpreendente como o MBA pode estimar bons resultados para tamanhos de redes pequenas, pois conseguimos um melhor resultado em relação aos dos citados autores referente ao expoente crítico β . Com relação à temperatura crítica não foi tão bom, porém eles trabalharam com redes muito maiores que a nossa. Devemos salientar que os resultados presentes na tabela 5 podem ser melhorados aumentando o tamanho das redes.

No próximo capítulo iremos usar novamente o MBA para calcular as propriedades críticas num modelo de Ising ferromagnético diluído.

Tabela 5

	Rede Quadrada	Rede Triangular	Rede Hexagonal	Rede Cúbica
$k_B T^*/J$	2.385(2)	3.671(5)	1.553(1)	4.487(2)
$k_B T_c/J$	2.269185...	3.640956...	1.518651...	4.51142(5) ⁸⁸
$ T^* - T_c /T_c$	5.1%	0.8%	2.3%	0.5%
β (presente trabalho)	0.127(2)	0.125(3)	0.124(2)	0.31(1)
β (literatura)	1/8	1/8	1/8	0.326(4)

Tabela 5: Temperatura crítica ($k_B T^*/J$) e os correspondentes expoentes críticos da magnetização para o modelo de Ising ferromagnético para várias redes geométricas. Para as redes bidimensionais $k_B T_c/J$ e β são conhecidos exatamente ⁵ ($\beta = 1/8$ em todos os casos, devido à universalidade). Em cada caso, apresentamos a discrepância relativa ($|T^* - T_c|/T_c$) de T^* com respeito à temperatura crítica conhecida na literatura.

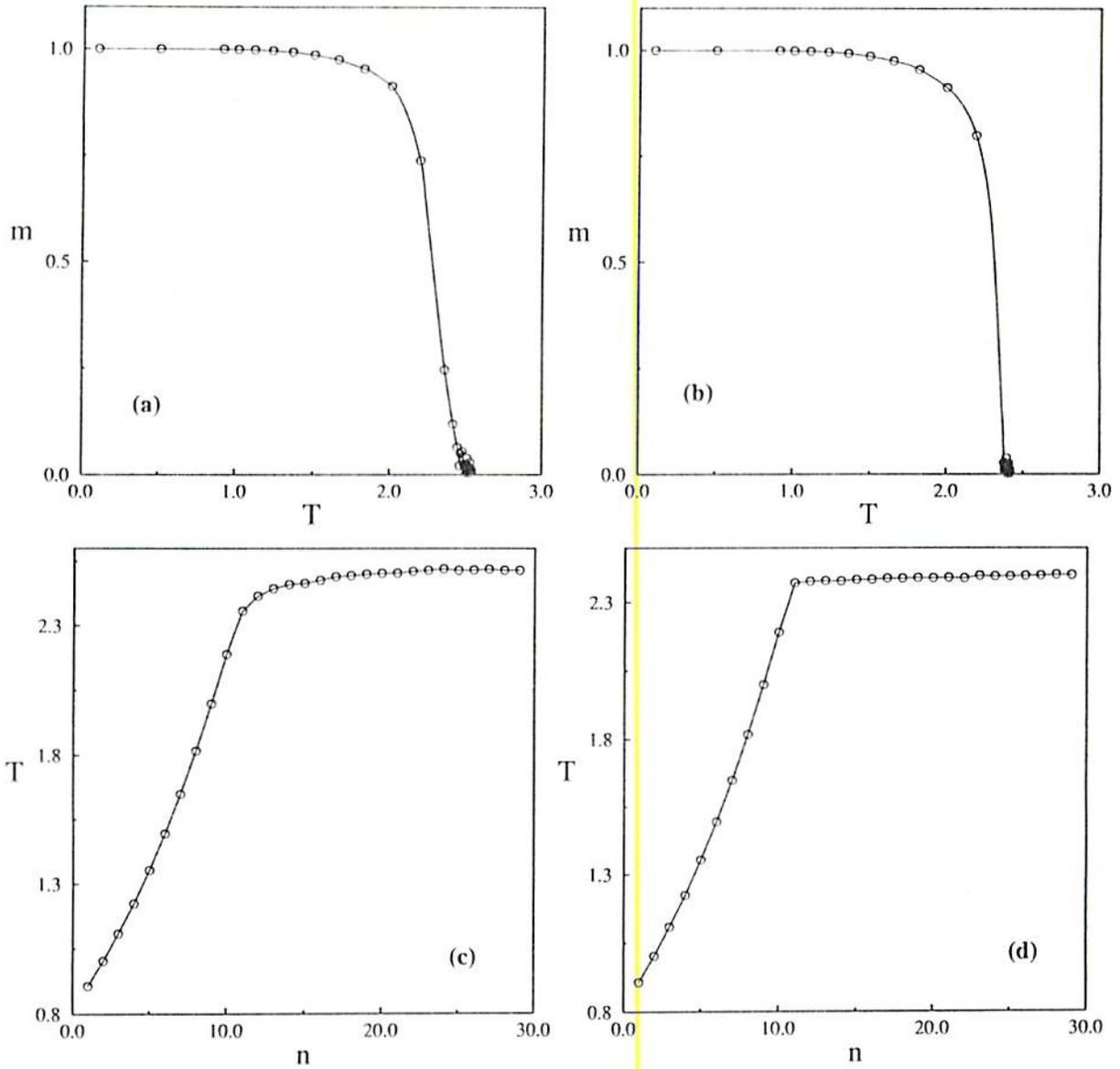


Figura 2.5: Magnetização *versus* temperatura para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada, utilizando a dinâmica de Glauber. (a) $L = 20$ and (b) $L = 40$. (c) Temperatura *versus* número de passos de iterações para $L = 20$; obtemos $k_B T^*/J = 2.53$ ($T^*/T_c = 1.11$) e (d) para $L = 40$; encontramos $k_B T^*/J = 2.41$ ($T^*/T_c = 1.06$).

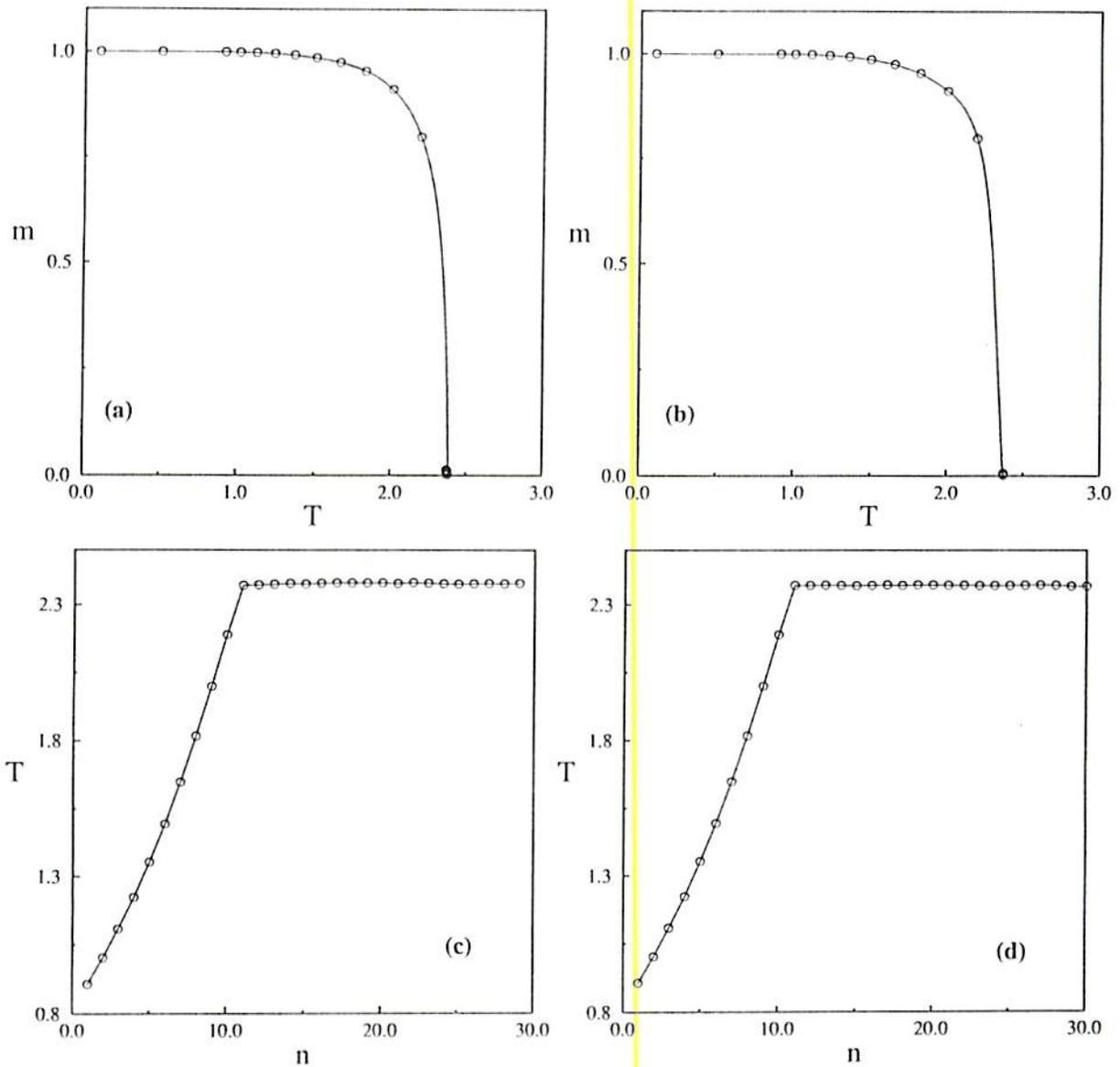


Figura 2.6: Magnetização *versus* temperatura para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada, utilizando a dinâmica de Glauber. (a) $L = 60$ and (b) $L = 100$. (c) Temperatura *versus* número de passos de iterações para $L = 60$; obtemos $k_B T^*/J = 2.38$ ($T^*/T_c = 1.05$) e (d) para $L = 100$; encontramos $k_B T^*/J = 2.37$ ($T^*/T_c = 1.04$).

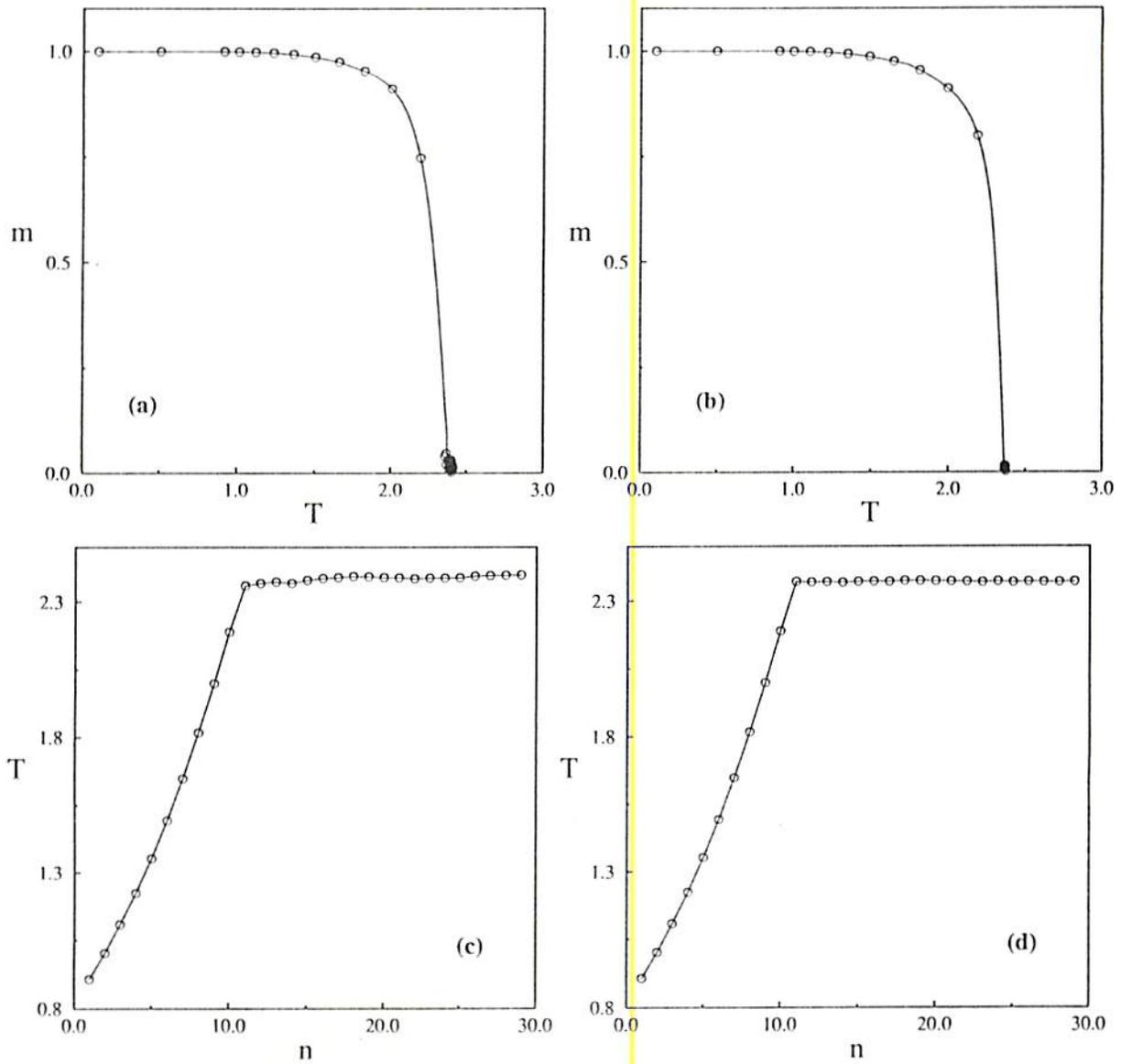


Figura 2.7: Magnetização *versus* temperatura para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada, utilizando a dinâmica de Metropolis. (a) $L = 20$ and (b) $L = 40$. (c) Temperatura *versus* número de passos de iterações para $L = 20$; obtemos $k_B T^*/J = 2.40$ ($T^*/T_C = 1.06$) e (d) para $L = 40$; encontramos $k_B T^*/J = 2.37$ ($T^*/T_C = 1.04$).

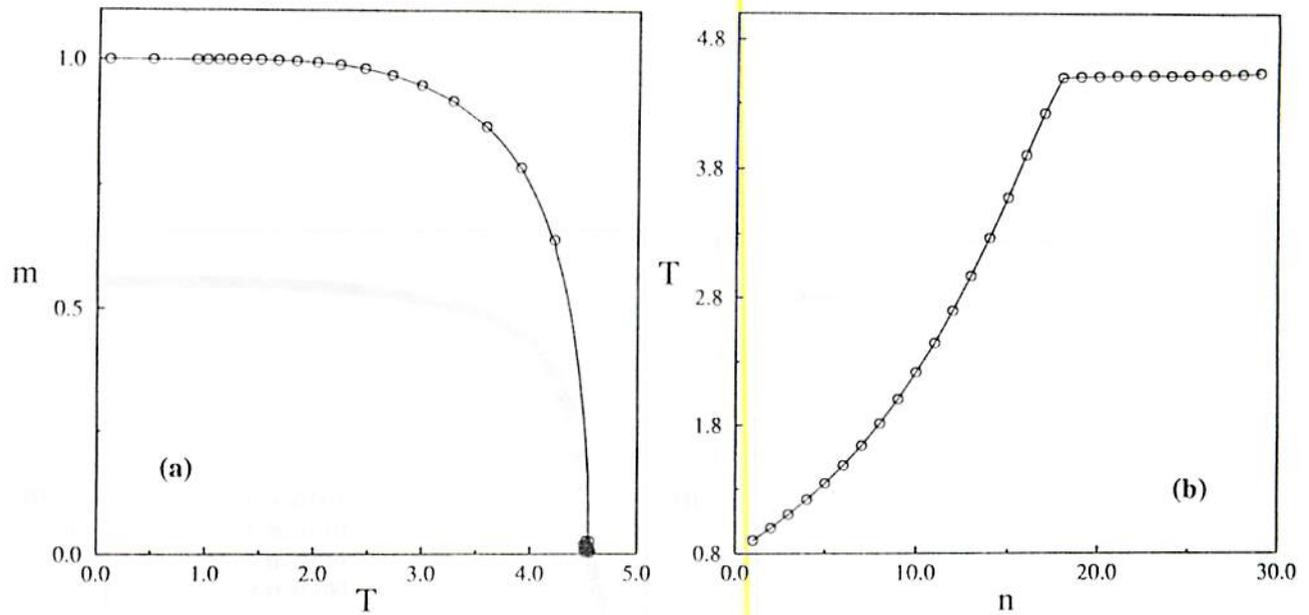


Figura 2.8: (a) Magnetização *versus* temperatura para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede cúbica com $L = 10$, usando a dinâmica de Glauber. (b) Temperatura *versus* número de passos de iterações. Obtemos $k_B T^*/J = 4.56$ ($T^*/T_c = 1.01073$, onde $T_c = 4.51142(5)^{88}$); encontramos uma discrepância ($|T^* - T_c|/T_c$) de 1%.

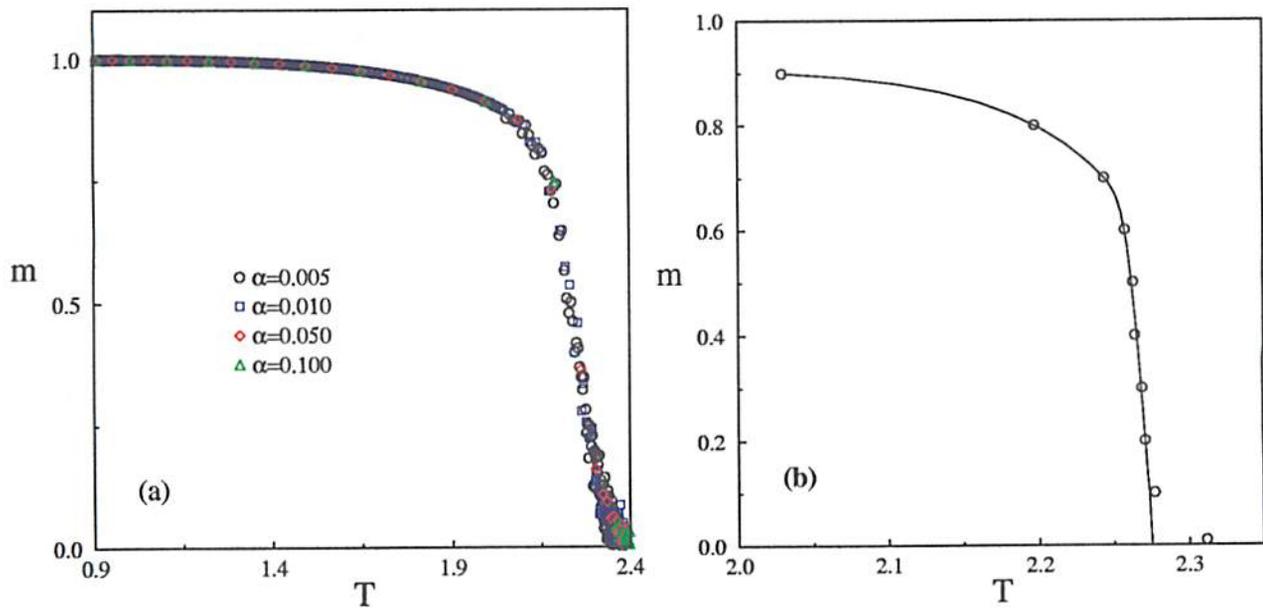


Figura 2.9: (a) Magnetização *versus* temperatura para vários valores de α , mostrando que o método independente de α . O algoritmo de Metropolis foi utilizado em uma rede de tamanho $L = 20$. (b) Escolhendo valores para m^* entre 0 e 1 e calculando suas respectivas temperaturas, encontramos a curva da magnetização.

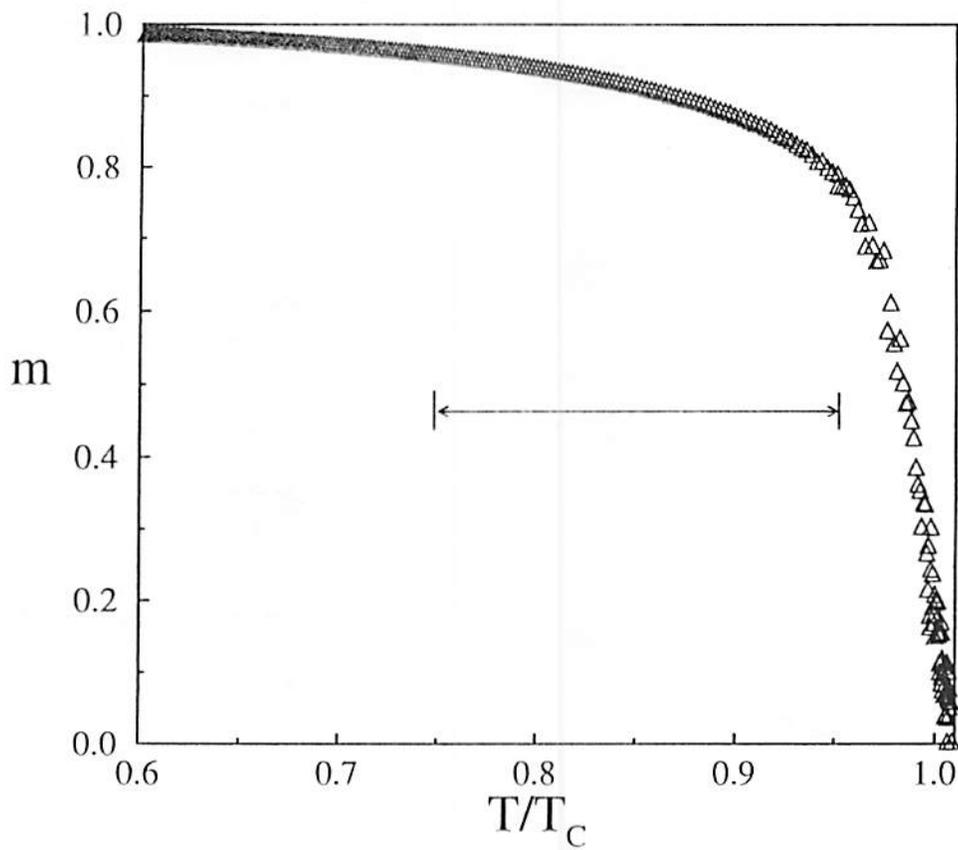


Figura 2.10: Magnetização por spin versus temperatura [em unidades correspondentes ao valor exato de T_c (ver Tabela 5)], obtida da relação de recorrência [Eq. 2.3], para o caso do modelo de Ising ferromagnético em uma rede triangular de tamanho linear $L = 40$. A iteração inicia em $T_0/T_c = 0.60$ e os parâmetros usados foram $m^* = 10^{-2}$ e $\alpha = 10^{-3}$. O intervalo de temperatura usado para estimar o expoente crítico β está indicado (este intervalo está dentro da região de escala).

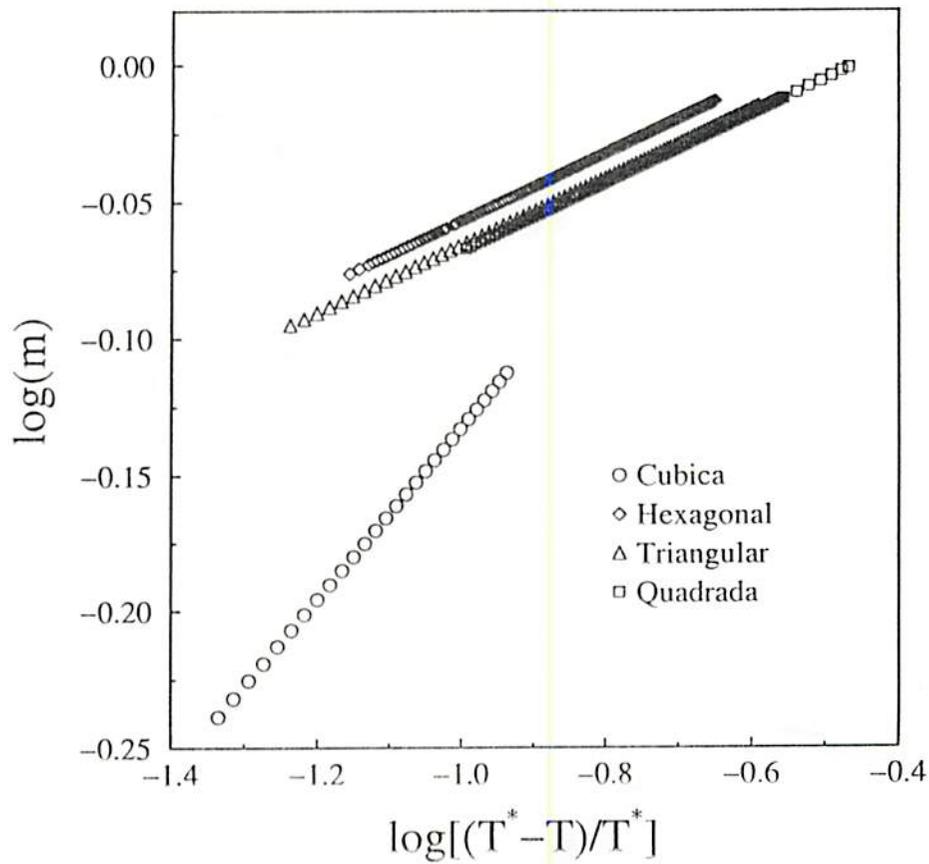


Figura 2.11: Ajuste dos expoentes β para várias redes bidimensionais e para a rede cúbica, calculados a partir das curvas de magnetização *versus* temperatura. Observa-se que o expoente β para uma mesma dimensão apresenta o mesmo valor (mesma inclinação) independentemente do tipo de rede que está sendo utilizada. Em cada caso, a abscissa está escrita em relação à sua correspondente temperatura estacionária (T^*) da Tabela 5.

Capítulo 3

Busca Eficiente de Grandezas

Críticas no Ferromagneto de Ising na Rede Quadrada com Diluição de Sítios

3.1 Introdução

O modelo de Ising ferromagnético desordenado⁹⁰⁻⁹² tem atraído a atenção de muitos pesquisadores durante as últimas duas décadas. Um entendimento do comportamento desse modelo representa um grande desafio na física dos sistemas desordenados, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Uma das maiores questões ainda não respondidas, consiste no tipo de influência (mudança) no comportamento crítico que um sistema puro pode apresentar quando introduzimos algum tipo de desordem. O comportamento crítico pode ser alterado de três maneiras diferentes: (i) A desordem pode ser uma perturbação irrelevante de modo que o comportamento crítico seja assintoticamente inalterado; (ii) a desordem pode ser relevante e conduzir a uma diferente classe de universalidade (“crossover”); e (iii) em casos raros⁹³, a desordem pode levar os expoentes

críticos a uma dependência contínua na concentração.

Um argumento heurístico proposto por Harris ⁹⁴, indica que a desordem modifica (ou não) o comportamento crítico se no correspondente sistema puro o expoente crítico do calor específico α é positivo (negativo). Visto que em duas dimensões temos $\alpha = 0$ para o sistema puro, isto representa um caso marginal; como consequência, o modelo de Ising ferromagnético desordenado em duas dimensões tem sido o objeto de muitas controvérsias, com diferentes cenários emergindo. Muitos trabalhos sustentam o quadro conhecido por universalidade forte ^{91,95,92,96-101}, reivindicando que a presença de desordem afeta as propriedades críticas do modelo apenas por um conjunto de correções logarítmicas com relação ao comportamento do sistema puro; de fato, tal quadro só é estritamente válido no limite de pouca desordem ⁹⁵. Por outro lado, alguns trabalhos numéricos ^{102,103} sugerem quantidades termodinâmicas que apresentam o comportamento de lei de potência usual com os expoentes críticos variando continuamente com a desordem, mantendo certas relações (γ/ν e β/ν) fixas aos valores do sistema puro; este quadro é chamado de universalidade fraca ¹⁰⁴. Contudo, uma recente análise ¹⁰⁵ sistemática da escala de tamanho finito reivindica que uma discriminação clara entre os quadros de universalidade forte e fraca ainda não são possíveis com base nos dados disponíveis de sistemas finitos. Isto sugere continuar abordando este tipo de problema.

O caso ferromagnético com diluição temperada (desordem congelada: sítios ocupados com probabilidade p) tem sido estudado recentemente através de extensiva simulação de Monte Carlo por vários autores ^{93,96,106}, produzindo resultados que não estão de acordo entre si. Souza e Moreira ¹⁰⁶ encontraram expoentes críticos na região $0.7 \leq p \leq 1.0$, compatíveis com aqueles do modelo puro. Para os valores da concentração no intervalo $0.6 \leq p < 0.7$, seus resultados são inconclusivos devido a grandes barras de erro. Heuer ⁹³ argumentou em favor de expoentes efetivos que dependem da concentração p , embora se aproximando assintoticamente dos valores puros próximo da temperatura crítica. De outra maneira, Kim e Patrascioiu ⁹⁶ alegaram ter encontrado evidência da dependência da diluição nos expoentes críticos.

A principal razão de tais desacordos consistem nos efeitos de tamanho finito ^{107,108} (finite-size scaling) que se tornam cada vez mais intensos à medida que diminuimos p ,

resultando em sérias dificuldades na extrapolação para o limite termodinâmico.

Outro obstáculo adicional encontrado comumente nas simulações de Monte Carlo em sistemas desordenados é a presença de muitos estados metaestáveis em baixas temperaturas, separados por barreiras que podem divergir no limite termodinâmico, fazendo com que se torne muito difícil equilibrar o sistema. Mesmo acima da temperatura crítica, existe uma fase de Griffiths ⁶⁹, caracterizada por um comportamento dinâmico peculiar na qual a magnetização vai a zero lentamente, comparado com o decaimento exponencial usual de uma fase paramagnética convencional. Para o modelo de Ising ferromagnético diluído, tais regimes são definidos dentro de um intervalo de temperatura $T_c(p) \leq T \leq T_c(1)$, onde $T_c(p)$ e $T_c(1)$ correspondem às temperaturas críticas para o caso ferromagnético diluído e puro, respectivamente.

Muitos trabalhos tentaram estudar e explicar os vários tipos de problemas que existem para o caso diluído, alguns já mencionados acima. Vários métodos diferentes foram utilizados, entre eles os resultados calculados baseados em simulação computacional, onde destacamos: o método de Monte Carlo ^{109,93,101,110}, o método de Monte Carlo vetorial ¹¹¹, o método de grupo de renormalização Monte Carlo ¹¹², o algoritmo de Swendsen e Wang ^{54,113,114}, propagação de danos ¹¹⁵ e o algoritmo de Wolff ^{109,116}. Como aproximações teóricas podemos destacar as seguintes técnicas: aproximação de campo molecular ¹¹⁷, técnica variacional, grupo de renormalização campo médio ^{118,119}, o método de expansão em séries ^{120,121}, e a técnica de matriz de transferência ^{103,105,122}.

Citamos alguns trabalhos ^{95,99,105,123-126} onde existem métodos analíticos para calcular as quantidades físicas, tais como, expoentes e temperaturas críticas com a inclusão de correções logarítmicas. Nestes trabalhos melhoramentos de resultados obtidos por métodos usuais tipo Monte Carlo são efetuados, com o emprego de correções logarítmicas.

Neste trabalho estudaremos as propriedades críticas do modelo ferromagnético de Ising com diluição temperada de sítios para uma rede quadrada utilizando o MBA ⁸⁶. Nosso principal interesse para este problema é calcular as dependências da temperatura crítica e dos comportamentos críticos (expoentes) com relação à diluição próximo ao ponto de transição de fase. Investigamos o diagrama de fase $T_c(p)/T_c(1)$ versus p que separa as fases paramagnética e ferromagnética e calculamos também o valor da derivada da fronteira

desse diagrama nas proximidades do ponto $p = 1$, correspondente ao modelo puro.

3.2 Modelo e Formalismo

Consideremos o modelo de Ising ferromagnético diluído, definido pelo Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_i \epsilon_j S_i S_j, \quad (3.1)$$

com $J > 0$, e $S_i = \pm 1$. O modelo é definido numa rede quadrada de tamanho L , cujas variáveis ϵ_i correspondem à desordem e obedecem à seguinte distribuição de probabilidades,

$$P(\epsilon_i) = p\delta(\epsilon_i - 1) + (1 - p)\delta(\epsilon_i). \quad (3.2)$$

Relembremos a relação de recorrência (2.4) que constitui o MBA

$$X_{n+1} = X_n - \alpha (Y_n - Y^*). \quad (3.3)$$

Como já foi mencionado no capítulo 2, precisamos considerar o parâmetro (Y^*) suficientemente pequeno, de modo que a relação (3.3) dirija o sistema ao ponto crítico. Também já comentamos que existe um α crítico, abaixo do qual T^* não se altera. Esse valor é $\alpha = 10^{-2}$. Já para obter dados razoáveis para os expoentes críticos, consideramos um valor menor para α ($\alpha = 10^{-4}$) visto que no caso dos expoentes a sintonia é mais difícil.

Aplicamos o MBA para o modelo de Ising ferromagnético desordenado em uma rede quadrada bidimensional de tamanho linear $L = 60$ com condições de contorno periódicas. Construímos para um dado valor de concentração p , uma configuração desordenada diluída produzida de acordo com a distribuição de probabilidades (3.2). A probabilidade p representa a fração de sítios ocupados por spins. Ao analisar uma configuração inicial da rede, primeiro verificamos se ocorre percolação, isto é, se existe um caminho de sítios ocupados, conectados, ligando lados opostos da rede. Caso não exista percolação tal configuração não é considerada no cálculo das médias térmicas. No caso da configuração apresentar percolação, consideramos apenas os spins que pertençam ao aglomerado infinito para serem utilizados nos cálculos da magnetização, susceptibilidade, etc.

Para atingir o equilíbrio do sistema é necessário um tempo da ordem $t_0 = N/2$ passos de MC (N é número de sítios). Uma vez o sistema equilibrado, calculamos a média termodinâmica para a magnetização por spin tomando $t_1 = N$ passos de MC. Para melhorar a estatística, o procedimento como um todo será repetido para $N_s = 200$ amostras (diferentes realizações da desordem) (com diferentes sequências de números aleatórios). A magnetização por spin é dada pela seguinte expressão

$$m = \frac{1}{N_s t_1 N} \sum_{\gamma=1}^{N_s} \sum_{t=1}^{t_1} \sum_{i=1}^N S_{i\gamma}(t). \quad (3.4)$$

Após o estado estacionário ter sido alcançado (quando Y_n e X_n apresentam pequenas oscilações ao redor do valor Y^* e X^*), deixamos o sistema oscilar por $\Delta n = 100$ passos de iterações; destes dados estimamos o valor médio $K^* = J/k_B T_c^*(p)$ e suas respectivas barras de erro.

3.2.1 Resultados e Discussões

Simulamos o sistema para uma rede quadrada de tamanho $L = 60$ com as seguintes concentrações de sítios $p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.85, 0.80, 0.75$ e 0.70 . Calculamos as temperaturas críticas para cada caso e seus correspondentes expoentes críticos.

Inicialmente fizemos nossos cálculos utilizando a mesma relação de recorrência para a magnetização que utilizamos no capítulo 2, ou seja

$$K_{n+1} = K_n - \alpha(m_n - m^*). \quad (3.5)$$

Calculamos as temperaturas críticas utilizando a relação (3.5) e as mesmas considerações feitas anteriormente para a escolha tanto de m^* como de α . Nossos resultados apresentaram uma discrepância muito grande em relação aos valores encontrados na literatura. O grande problema consiste no fato de que ao diluirmos a rede, os efeitos de tamanho finito se tornam bastante acentuados. Por esta razão, pode acontecer que ao invés de calcularmos a temperatura crítica, que equivale ao ponto de inflexão da curva da magnetização, podemos estar calculando um ponto da cauda da curva, resultando em um grande erro (ver figura (3.1)).

Devido a tais dificuldades em calcular corretamente as temperaturas críticas utilizando a magnetização como parâmetro de busca, procuramos uma outra grandeza termodinâmica que também exiba a transição. A grandeza que utilizamos foi a susceptibilidade (ver figura (3.3))(em verdade, o inverso da susceptibilidade) e a correspondente relação de recorrência é dada abaixo

$$K_{n+1} = K_n - \alpha(1/J\chi - 1/J\chi^*), \quad (3.6)$$

onde χ é a susceptibilidade por spin dada por

$$\chi = \frac{1}{Nk_B T} \left\{ \left\langle \left(\sum_i S_i \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_i S_i \right\rangle^2 \right\}. \quad (3.7)$$

O MBA calcula aproximações para a temperatura crítica usando valores de m^* cada vez menores. Isto corresponde a valores cada vez maiores para a susceptibilidade χ , atingindo a divergência quando $T \approx T_c$. Esta é a razão para utilizarmos o inverso da susceptibilidade como parâmetro iterativo em (3.6). Por conseguinte, devemos considerar valores cada vez menores para $1/\chi$ para obtermos melhores aproximações para a temperatura crítica.

Quando estamos tratando com a susceptibilidade temos que efetuar uma análise semelhante à que é feita para a magnetização, lembrando que um máximo para χ equivale a um mínimo em $1/\chi$. Este mínimo é considerado como o ponto correspondente à transição de fase. O valor adequado de $1/\chi^*$ é determinado da seguinte forma: iniciamos com um valor muito pequeno para $1/\chi^*$ e verificamos se a relação de recorrência converge para algum valor $(T^*, 1/\chi^*)$. Se isto não ocorre, significa que estamos abaixo da curva $1/\chi^*$ (lembrar que para um sistema finito a curva $1/\chi$ não toca o eixo $1/\chi = 0$). Aumentamos continuamente o valor $1/\chi^*$ até que o MBA localize a primeira bacia atratora, ou seja localiza o mínimo $(T^*, 1/\chi^*)$.

Calculamos a temperatura e expoentes críticos utilizando a dinâmica de Glauber. Mais uma vez, gostaríamos de enfatizar a eficiência do método, permitindo bons resultados mesmo para redes pequenas.

Neste capítulo, a variável $T^*(p)$ corresponde a variável reduzida $T_c(p)/T_c(1)$, onde $T_c(1)$ é a temperatura crítica exata do caso puro, ou seja $T_c(1) = 2.269185 \dots$ ²².

Utilizamos uma rede pequena ($L = 60$) em relação a outros trabalhos na literatura, que utilizam redes de tamanhos maiores (por exemplo, o trabalho de Heuer⁹³ que utiliza redes de tamanhos L ($72 \leq L \leq 250$)). Por esse motivo, conseguimos calcular valores para a temperatura crítica não tão bons quanto os dos outros trabalhos, pois nossas redes são muito menores. Acreditamos que se usarmos redes um pouco maiores, melhorariamos muito nossos resultados e conseguiríamos ter precisões tão boas ou melhores do que as encontradas por outros autores.

Os resultados e suas discrepâncias ($|T^*(p) - T_c(p)|/T_c(p)$) com relação aos valores encontrados na literatura estão mostrados na Tabela 6. Comparamos nossos resultados com aqueles encontrados por outros métodos que utilizam o Monte Carlo padrão ou combinado com outras técnicas. As presentes estimativas de $T^*(p)$, para as várias concentrações p , numa rede quadrada de tamanho linear $L = 60$, apresentam discrepâncias ($|T^*(p) - T_c(p)|/T_c(p)$) com relação a outros valores da literatura. O trabalho de Kim e Patrascioiu ⁹⁶, que utilizaram uma rede de tamanho $570 \leq L \leq 822$, apresentam uma temperatura crítica $T_c(p)/T_c(1) = 0.604$ para $p = 0.75$, o que corresponde a uma discrepância em relação ao nosso resultado de 7.8%. No trabalho de Selke et al. ¹⁰⁹, com redes de tamanho $8 \leq L \leq 256$ para a concentração $p = 0.70$, a temperatura crítica é dada por $T_c(p)/T_c(1) = 0.478$ e portanto, a discrepância em relação ao nosso resultado é de 20%. Já para o trabalho de Ballesteros et al., ¹⁰¹ para concentração $p = 0.75$ e rede de tamanho $24 \leq L \leq 256$, temos uma temperatura crítica $T_c(p)/T_c(1) = 0.571$ e uma discrepância de 13.9%. Nos trabalhos acima mencionados eles utilizam o método de Monte Carlo combinado com as seguintes extensões: correção logarítmica e o algoritmo de Wolf respectivamente. Comparamos também nossos resultados com o trabalho de Heuer ⁹³ que utiliza o método de Monte Carlo padrão com redes de tamanhos L ($72 \leq L \leq 250$) e o trabalho de Souza e Moreira ¹⁰⁶ que utiliza o método Grupo de Renormalização Monte Carlo com redes de tamanho L ($L = 128$ e $L = 192$). Nesses dois trabalhos não só comparamos as temperaturas que estão mostradas na tabela 6, como também os expoentes β e γ . As estimativas dos expoentes críticos estão em boa concordância com os valores obtidos por eles (ver tabela 8). Na tabela 7 comparamos nossos resultados com os trabalhos de propagação de danos ¹¹⁵, para redes de tamanho $20 \leq L \leq 80$. Outro trabalho que utilizou a dinâmica de Swendsen-Wang ¹¹⁴ em redes de tamanho $L = 200$ e 400 , está mostrado na Tabela 7. Devemos ressaltar que o nosso método é bastante eficaz quando temos pouca diluição ($p \geq 0.85$) pois encontramos ótimos resultados, mesmo utilizando redes pequenas. Se a diluição aumenta nossos resultados estão em desacordo com os outros autores e entendemos que o fato de usarmos redes pequenas é o motivo para esta discordância. Como ainda temos a liberdade de aumentar o tamanho das redes, os resultados presentes nas tabelas 6, 7 e 8 podem ser melhorados substancialmente.

Na Fig. 3.2 apresentamos a susceptibilidade versus número de passos de iterações, para o caso de concentração $p = 0.80$ de sítios ativos. Iniciamos com $T_c(p)/T_c(1) = 0.4$ e deixamos que o sistema evolua até atingir a temperatura estacionária. O valor correspondente para a susceptibilidade é $\chi^* = 50$ (ou $1/\chi^* = 0.02$). Este ponto consideramos como uma aproximação para a temperatura crítica.

Neste trabalho também estamos interessados em calcular os expoentes críticos da magnetização β e o da susceptibilidade γ . Como já mencionamos, trabalhamos com várias concentrações de diluição com uma rede bidimensional de tamanho $L = 60$. Nossos resultados são resumidos na Tabela 6. O gráfico da susceptibilidade por spin *versus* $T/T_c(1)$ está mostrado na Fig. 3.3 para os vários valores da concentração ($p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.85, 0.80, 0.75$ e 0.70). Neste gráfico calculamos as curvas da susceptibilidade usando a relação (3.5) que utiliza o parâmetro da magnetização por spin (m). Nota-se que a medida que vamos diluindo o sistema (diminuindo p), a temperatura e a susceptibilidade diminuem e o pico da curva da susceptibilidade vai se tornando arredondado até desaparecer a cúspide (transição). Isto ocorre quando estivermos abaixo do limiar de percolação ($p_c \approx 0.59275$)^{18,90,127}, onde já não existe transição de fase. Calculamos os expoentes críticos da susceptibilidade (γ) e da magnetização (β) para cada concentração p , como mostrado nas Figs. 3.4 e 3.5. Apesar dos tamanhos das redes utilizadas, esta é uma das vantagens do nosso método: nossas estimativas dos expoentes críticos concordam, dentro das barras de erro, com os valores disponíveis na literatura. Para o caso da rede bidimensional, para as várias concentrações p utilizadas, nossos resultados mostram que variando p obtemos o mesmo valor para o expoente γ que do caso puro. Na Fig. 3.4 dá para notar que os ajustes para as várias concentrações de p com relação aos dados calculados pelo nosso método nos dão a mesma inclinação, concluindo assim que o conjunto de expoentes pertencem à mesma classe de universalidade do caso puro. Isso também acontece para o conjunto de expoentes β (ver Fig. 3.5), onde mostramos também os ajustes para o expoente β para todas as concentrações p . Os valores exatos ($p = 1.0$) conhecidos para os expoentes são: $\beta = 1/8$ e $\gamma = 7/4$ ^{5,128}. Não encontramos evidência do quadro de universalidade fraca^{102,103}, com os expoentes críticos variando continuamente com a desordem; de fato, nosso resultado favorece o quadro da universalidade

Na Fig 3.6 apresentamos o diagrama de fase calculado pelo MBA, onde na fronteira crítica próximo de $p = 1$, podemos fazer uma boa aproximação por uma linha reta^{90,129}. A inclinação da curva $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração p em $p = 1$,

$$s = \frac{1}{T_c(1)} \left. \frac{dT_c(p)}{dp} \right|_{p=1}, \quad (3.8)$$

é conhecido exatamente, $s = 1.564785\dots$ ^{90,130}. Ajustando os dados para o intervalo entre $p = 1.00$ até $p = 0.80$ por uma linha reta (onde os valores de $T^*(p)/T_c(1)$ estão mostrados na Tabela 6), nosso resultado forneceu $s \cong 1.57$. A quantidade s é importante pois podemos saber com que declividade a curva sai do ponto $p = 1.00$; por isso, a preocupação de sempre determinar seu valor para avaliar se os resultados são bons ou confiáveis. Como vemos, o nosso método consegue encontrar resultados próximos do valor exato. Isto nos dá confiabilidade para o resto da curva.

Nós consideramos o valor do s de vários trabalhos que discutem a variável s ou que podemos calculá-la a partir de seus dados. A seguir, apresentaremos os resultados obtidos por vários autores: Néda¹¹⁴, que utilizou o método de Monte Carlo combinado com Swendsen and Wang, estimou explicitamente a quantidade s e encontrou um valor $s = 1.7$. Para o caso dos trabalhos de Souza e Moreira¹⁰⁶ (que é originado de um esquema baseado no Grupo de Renormalização Monte Carlo para uma rede quadrada de tamanho $L = 192$) e de Heuer⁹³ (que utiliza o método de Monte Carlo numa rede quadrada de tamanho L ($72 \leq L \leq 250$)) ajustando os dados para $p = 0.90$ e $p = 1.00$ (ver tabela 6), obtém-se $s = 1.62$ e $s = 1.625$, respectivamente. Ajustando agora os pontos para $p = 0.95$ e $p = 1.00$ (ver tabela 7) por uma linha reta, obtém-se $s = 1.60$ e $s = 1.594$, respectivamente. É importante mencionar que para as referências^{106,93} o s não foi calculado explicitamente e que os números acima representam estimativas aproximadas obtidas dos dados contidos nas tais referências. No trabalho de Sousa et al¹¹⁵, que utiliza propagação de danos^{131,132} numa rede quadrada de tamanho L ($20 \leq L \leq 80$), estima-se o valor $s = 1.53$. Outro trabalho que estudou sistemas diluídos de sítios foi Ballesteros et al¹⁰¹, utilizando a simulação de Monte Carlo incorporando os efeitos de tamanho finito para encontrar as

temperaturas. Considerando os dados da referência ¹⁰¹ para $p = 0.889$ e $p = 1.00$ mostrado na tabela 9, encontra-se $s = 1.63$.

Nota-se que a nossa estimativa para a inclinação s mesmo utilizando rede pequenas em relação aos trabalhos mencionados, é bem melhor que as mostrados acima. Encontramos uma discrepância ($|s - s'|/s'$, onde s' é o valor exato) em relação ao valor exato de 0.32%, que é muito menor do que as demais.

Um outro trabalho que devemos citar é o de Giorgio Mazzeo e Reimer Kühn ¹⁰⁵. Eles utilizam a técnica de Matriz de Transferência através de uma tira com comprimento semi-infinito $N \rightarrow \infty$ (limite termodinâmico) e largura $L = 11$, para estimar o valor de s que difere do valor exato por aproximadamente 0.01%. Vemos que o resultado de Giorgio Mazzeo e Reimer Kühn é melhor que o nosso, e atribuímos isso ao fato que enquanto trabalhamos com redes pequenas, eles utilizam tiras semi-infinitas.

Tabela 6

p	$T^*(p)/T_c(1)$	$T_c(p)/T_c(1)^{93}$	$T_c(p)/T_c(1)^{106}$	δ^{93}	δ^{106}
1.00	1.034(1)	1.000	1.000	3.4%	3.4%
0.95	0.944(1)	0.920	0.920	2.6%	2.6%
0.90	0.869(1)	0.838	0.838	3.7%	3.7%
0.85	0.789(1)	0.752	0.753	4.9%	4.8%
0.80	0.719(1)	0.665	0.664	8.1%	8.3%
0.75	0.651(1)	0.569	-	14.4%	-
0.70	0.574(1)	0.474	0.462	21.1%	24.2%

Tabela 6: Temperatura estacionária adimensional $T^*(p)/T_c(1)$ e discrepâncias com relações a outras estimativas, $\delta = |T^*(p) - T_c(p)|/T_c(p)$, para valores específicos da concentração. Nossos resultados estão na coluna 2, sendo comparados com outras estimativas das temperaturas críticas $T_c(p)/T_c(1)$. A coluna 3 mostra os valores de Heuer⁹³. Na coluna 5 temos as discrepâncias desses valores com relação ao presente trabalho. Na coluna 4 temos as temperaturas críticas calculada no trabalho de Souza e Moreira¹⁰⁶ e na coluna 6 temos as respectivas discrepâncias desses valores com relação ao nosso.

Tabela 7

p	$T^*(p)/T_c(1)$	$T_c(p)/T_c(1)^{114}$	$T_c(p)/T_c(1)^{115}$	δ^{114}	δ^{115}
1.00	1.034(1)	0.994	1.112	4.0%	7.0%
0.90	0.869(1)	0.841	0.846	3.3%	2.7%
0.80	0.719(1)	0.673	0.636	6.8%	13.1%
0.70	0.574(1)	0.464	0.451	23.7%	27.3%

Tabela 7: A coluna 2 mostra os nossos resultados para diferentes concentrações p . Na coluna 3 temos os valores das temperaturas do trabalho de Néda ¹¹⁴. Na coluna 5 apresentamos os valores das discrepâncias $\delta = |T^*(p) - T_c(p)|/T_c(p)$. As outras duas colunas estão mostrando os valores referentes ao trabalho de Sousa ¹¹⁵, onde a coluna 4 mostra as temperaturas críticas e na coluna 6 a discrepância em relação aos nossos valores.

Tabela 8

p	β	γ	β^{93}	γ^{93}	β^{106}
1.00	0.126(2)	1.76(5)	0.125(5)	1.75(1)	0.125(6)
0.95	0.123(3)	1.76(5)	0.125(5)	1.75(2)	0.12(3)
0.90	0.126(1)	1.76(4)	0.125(5)	1.76(2)	0.125(4)
0.85	0.123(2)	1.76(5)	0.12(1)	1.76(2)	0.124(8)
0.80	0.127(3)	1.75(4)	0.11(1)	1.78(2)	0.123(7)
0.75	0.126(1)	1.76(3)	0.10(2)	1.80(3)	-
0.70	0.125(1)	1.76(3)	-	-	0.120(2)

Tabela 8: Expoentes críticos da magnetização e da suscetibilidade calculados a partir de nosso método, para o modelo de Ising ferromagnético diluído. Comparamos nossos resultados com relação ao trabalho de Heuer⁹³ (colunas 4 e 5). Na coluna 6 encontra-se os valores do expoente β calculados por Souza e Moreira¹⁰⁶. Para o caso puro numa rede bidimensional β e γ são conhecidos exatamente⁵ ($\beta = 1/8$ e $\gamma = 7/4$).

Tabela 9

	presente resultado	Ref. ¹¹⁵	Ref. ¹⁰⁶	Ref. ⁹³	Ref. ¹¹⁴	Ref. ¹⁰¹	Valor Exato
s	1.57	1.53	1.60	1.594	1.7	1.631	1.564785...

Tabela 9: Cálculo da inclinação da curva $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração p em $p = 1$ ($s = T_c(1)^{-1}T_c(p)/dp|_{p=1}$) a partir do diagrama de fase. As colunas 3, 4, 5, 6 e 7 mostram os valores de s para as seguintes referências respectivamente: Sousa et al¹¹⁵, Souza e Moreira¹⁰⁶, Heuer⁹³, Néda¹¹⁴ e Ballesteros et al¹⁰¹. As referências^{93,106,101} foram calculadas por nós a partir dos dados retirados de seus trabalhos e as demais referências já apresentava o valor de s . A última coluna mostra o valor exato de s ^{90,130}.

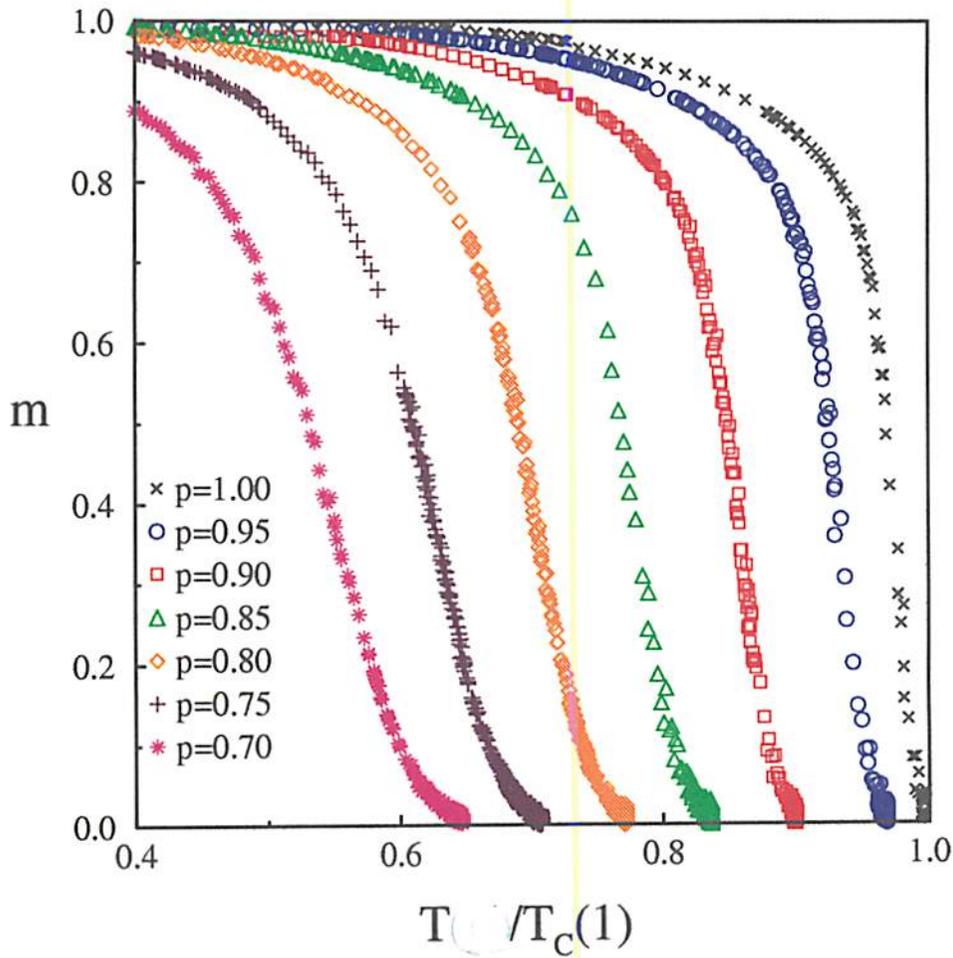


Figura 3.1: Magnetização por spin *versus* temperatura para vários valores da diluição p , variando de 1.00 até 0.70. Para encontrar essas curvas utilizamos a relação de recorrência (3.5), onde o parâmetro usado é a magnetização por spin. É fácil ver que quando diluimos a rede, o efeito de tamanho finito fica mais visível.

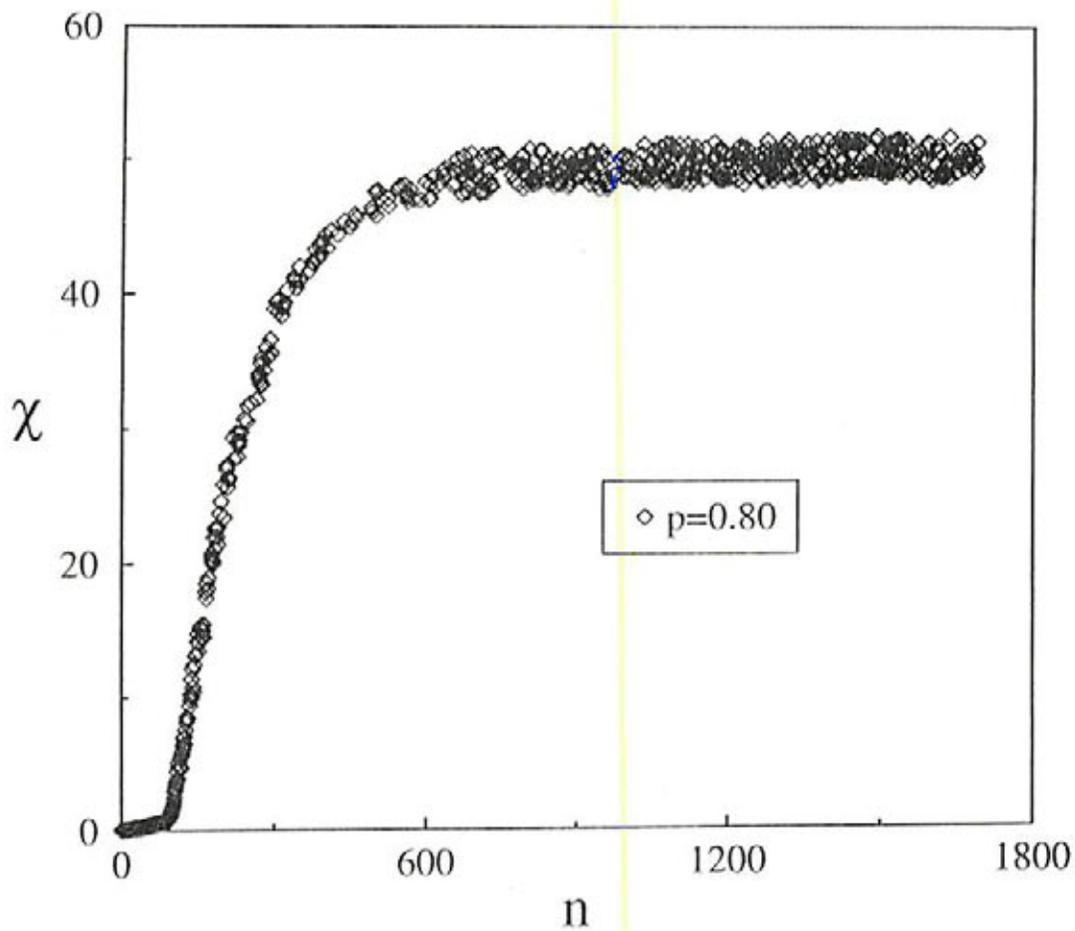


Figura 3.2: Susceptibilidade *versus* número de iterações para uma rede $L = 60$ com 20% de diluição ($p = 0.80$). A susceptibilidade crítica é calculada ($J\chi \approx 50$) depois que o estado estacionário é alcançado e deixamos oscilar por 100 passos de iterações. Iniciamos as iterações com um valor para a temperatura ($T_c(p)/T_c(1) = 0.4$). Isto mostra como o método funciona (evolução) para encontrar qualquer ponto crítico desejado.

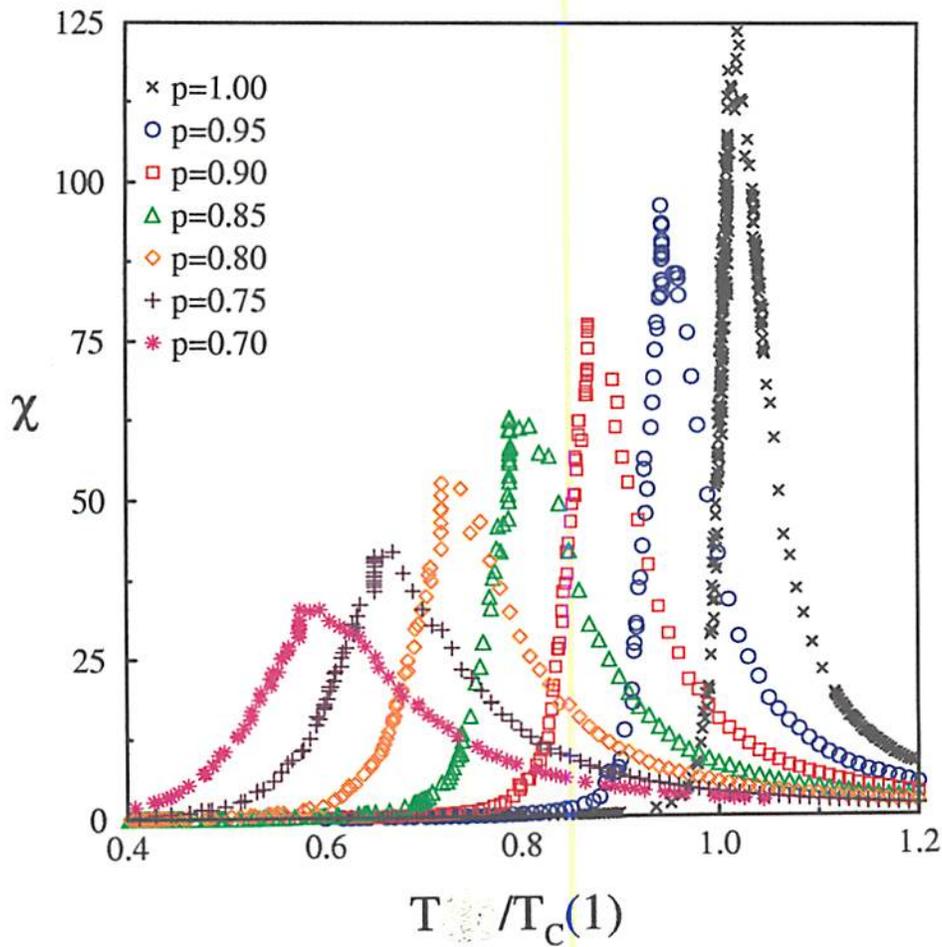


Figura 3.3: Susceptibilidade *versus* $T/T_c(1)$ para várias diluições, variando de $p = 1.00$ até 0.70 . As curvas são calculadas usando a relação de recorrência 3.5, onde o parâmetro utilizado é a magnetização por spin. Mostramos que quando vamos diluindo a rede o pico (valor máximo) vai diminuindo e se tornando mais arredondado, até desaparecer a transição abaixo do limiar de percolação ($p_c \approx 0.59275$).

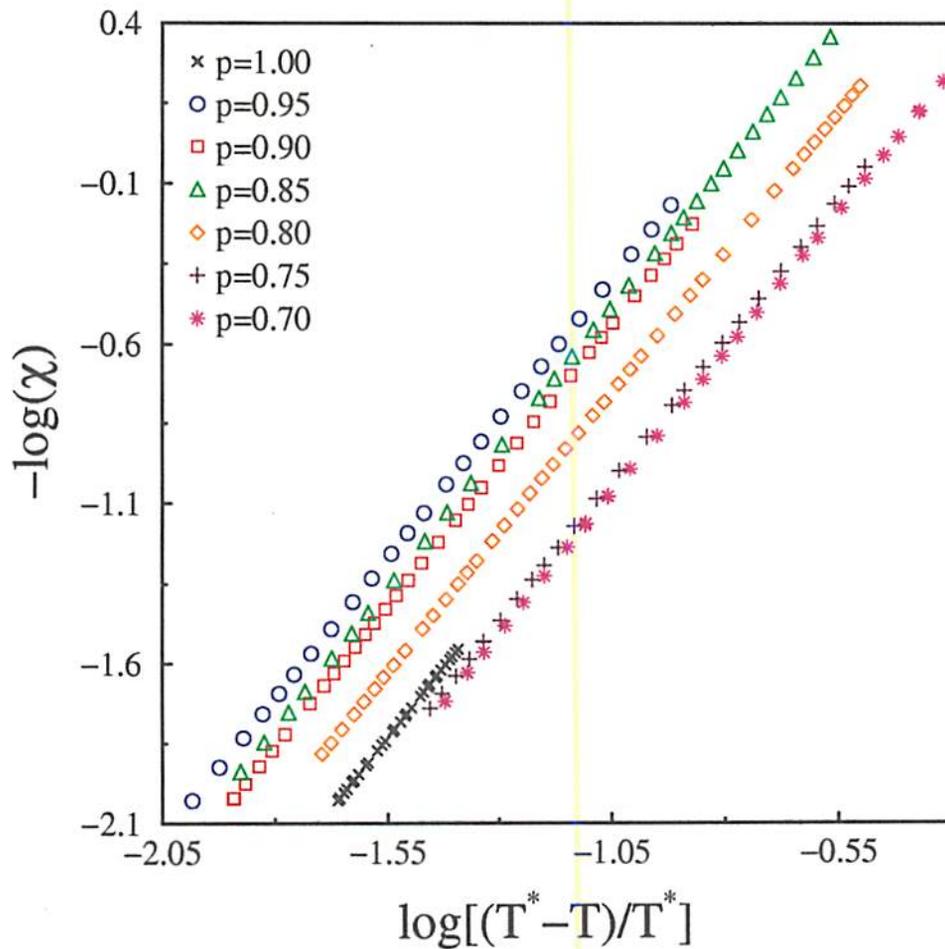


Figura 3.4: Ajustes das curvas da suscetibilidade versus temperatura próximo do ponto crítico, em relação aos pontos calculados usando o MBA. A inclinação desses ajustes mostram os valores que estimamos para os expoentes γ . Nota-se que os ajustes para cada concentração p apresentam a mesma inclinação; isso nos leva a concluir que todos os casos pertencem à mesma classe de universalidade do caso puro (ver tabela 8). O valor exato para o expoente crítico da suscetibilidade é $\gamma = 7/4$.

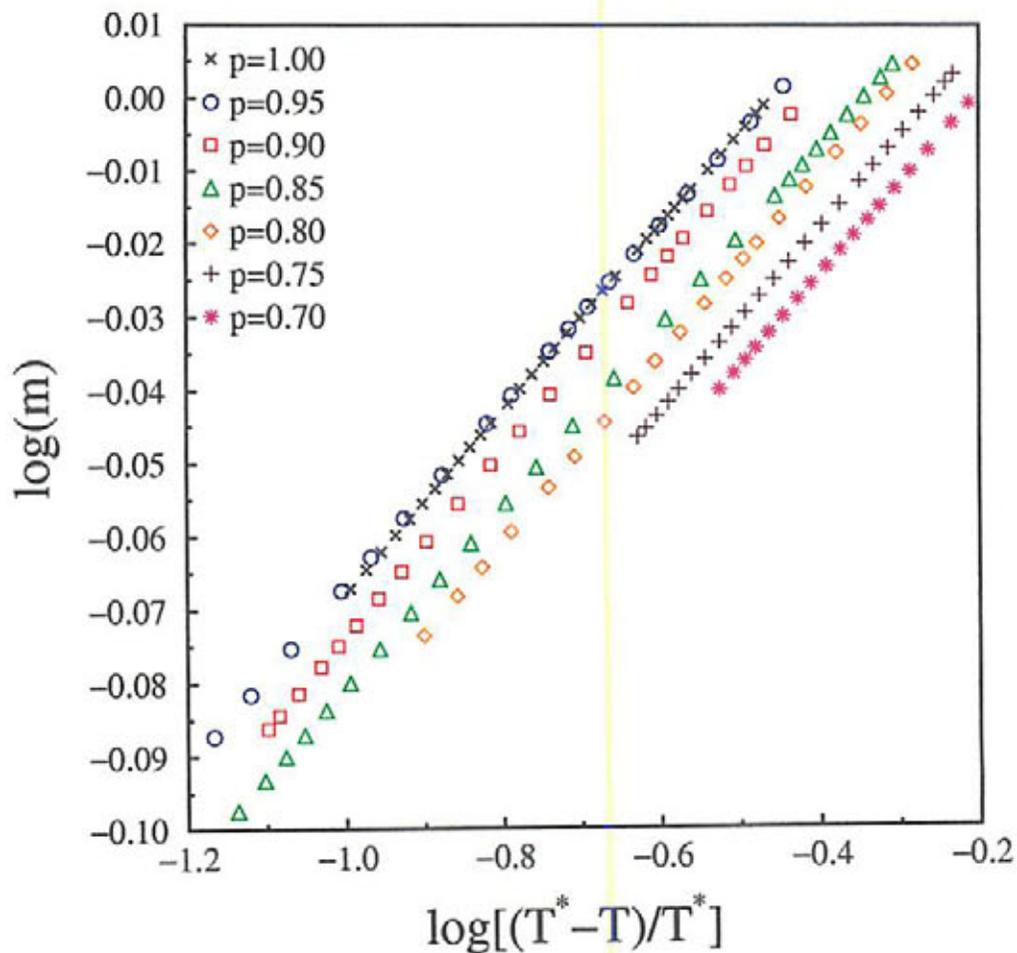


Figura 3.5: Os ajustes das curvas da magnetização em relação aos pontos calculados usando o MBA. A inclinação desses ajustes mostram os valores que calculamos dos expoentes β . Observamos que os ajustes para cada concentração p apresentam a mesma inclinação, concluindo que todos os valores de p se encontram na mesma classe de universalidade do caso puro (ver tabela 8). O valor exato para o expoente crítico da magnetização é $\beta = 1/8$.

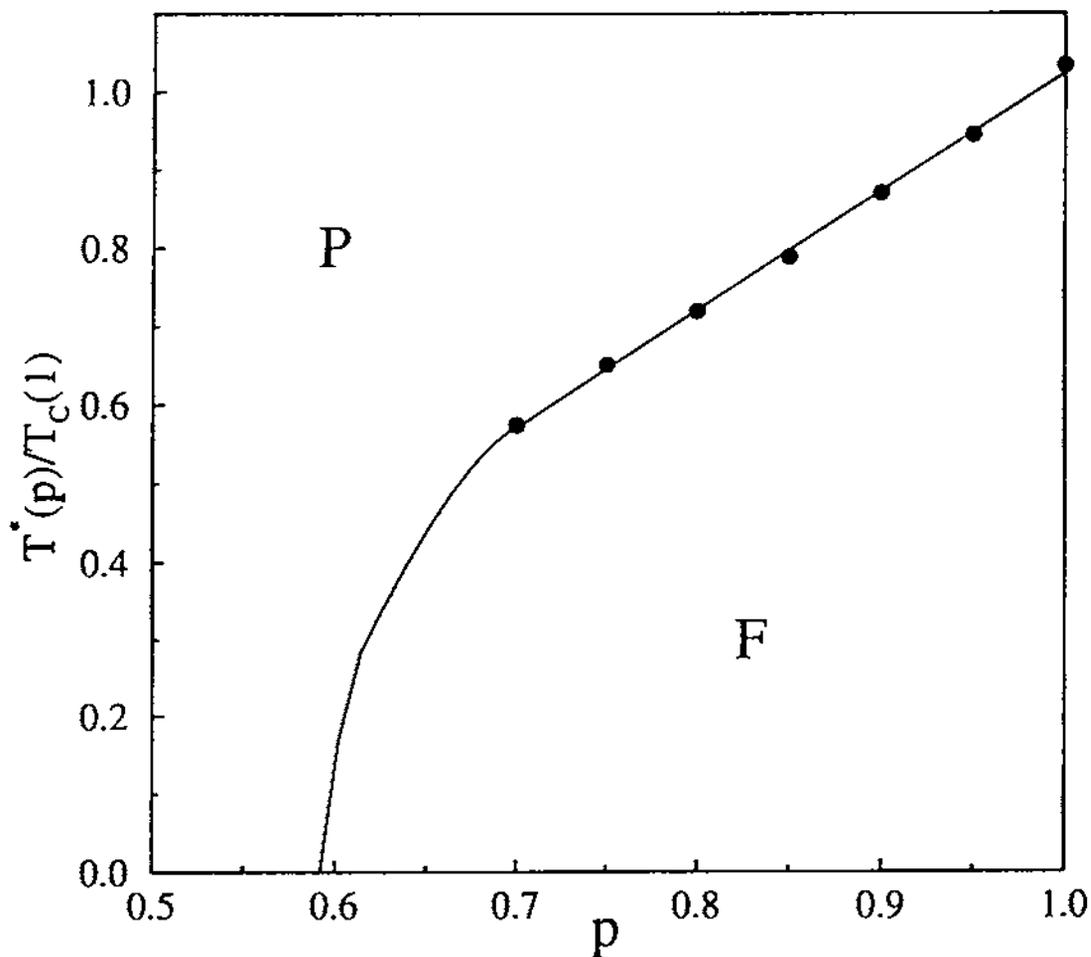


Figura 3.6: Diagrama de fase para o modelo de Ising diluído para $d = 2$, exibindo as fases paramagnética (P) e ferromagnética (F) obtido pelo presente método. As bolas cheias correspondem aos valores das temperaturas estacionárias ($T^*(p)$) calculadas para cada concentração p ($0.7 \leq p \leq 1.0$). Abaixo de $p = 0.7$ até o ponto, bem conhecido, que refere-se ao limiar de percolação ($p_c \approx 0.592745$ ^{18,90,127}) a linha é meramente especulativa.

Capítulo 4

Percolação de Ligações de Longo Alcance em uma Cadeia Linear Diluída

4.1 Introdução

Na natureza alguns sistemas não são satisfatoriamente descritos pela Mecânica Estatística padrão de Boltzmann-Gibbs (BG). Geralmente são sistemas que apresentam interações de longo alcance, efeitos de memória efetiva de longo alcance, ou geometrias não Euclidianas.

O efeito de interações de longo alcance em sistemas Hamiltonianos está atualmente bastante em evidência ¹³³. Estes sistemas apresentam uma variedade de propriedades dinâmicas e termodinâmicas interessantes tais como expoente de Lyapunov anômalo, a discussão extensividade versus não extensividade, difusão anômala, etc. Em alguns destes sistemas ocorre violação de ergodicidade. Neste sentido é necessário reformular alguns conceitos de Mecânica Estatística visando englobar esta nova classe de sistemas. Como o alcance da interação pode até ser infinito, questões como o limite termodinâmico devem ser rediscutidas. Nos sistemas ditos extensivos, a ordem entre os limites do tempo de

relaxação ($t \rightarrow \infty$) e o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) é irrelevante. Já no caso de interações de longo alcance isto não ocorre.

A Termodinâmica e a Mecânica Estatística usuais, obedecem à duas propriedades matemáticas importantes: a extensividade (parâmetros macroscópicos) e as transformadas de Legendre. Os parâmetros macroscópicos desempenham um papel importante em toda Termodinâmica, já que especificam o macroestado de um sistema. Estes podem ser classificados como extensivos, não extensivos e intensivos. De maneira simples afirmamos que um parâmetro extensivo é aquele que dobra seu valor, quando o tamanho do sistema também é duplicado, enquanto um parâmetro intensivo independe do tamanho do sistema.

A extensividade consiste no fato que as quantidades relevantes sejam, no limite termodinâmico proporcionais a N .

O significado de uma quantidade extensiva é claro em Mecânica Estatística usual. Por exemplo, para uma temperatura T fixa e um número de partículas N e volume V , respectivamente grandes, com a densidade de $\rho = N/V$ fixa, a entropia é extensiva e dada por

$$S(V, N, T) \sim Ns(\rho, T) \quad (4.1)$$

$$\lim_{N, V \rightarrow \infty} \frac{1}{N} S(V, N, T) = s(\rho, T) \quad (4.2)$$

Portanto a entropia por partícula s depende de ρ e da temperatura, que são quantidades intensivas. Outros parâmetros extensivos são por exemplo: volume, massa total e energia interna.

No caso do fractal de Sierpinski, a densidade do sistema se comporta como uma lei de potência do tipo $\rho = L^\alpha$, onde L é o tamanho do sistema. Nesse caso temos uma situação

onde ρ é uma variável que nem é extensiva, nem intensiva. Outros exemplos semelhantes ocorrem em sistemas que apresentam interações de longo alcance.

Sistemas não extensivos não são descritos adequadamente pela estatística de BG. Surge então a necessidade de tratar esses problemas com um formalismo mais geral. Inspirado em conceitos multifractais, Tsallis ¹³⁴⁻¹³⁷ propôs uma generalização da estatística de BG, que pretende ser apropriada a sistemas com interações de longo alcance. Este formalismo tem recebido aplicações numa grande variedade de situações, tais como difusão anômala do tipo Levy e do tipo correlacionada ¹³⁸, turbulências em plasmas ¹³⁹, materiais granulares tais como pilha de areia ¹⁴⁰, bem como técnicas de otimização ¹⁴¹. Na sua expressão matemática, ela contém um parâmetro livre q que expressa o grau de não extensividade do sistema. O limite $q \rightarrow 1$ corresponde ao caso extensivo e a estatística de BG é recuperada. O postulado que generaliza a entropia é dado por

$$S_q = k \frac{[1 - \sum_{i=1}^W p_i^q]}{(q-1)} \quad (4.3)$$

onde k é uma constante positiva, W é o número total de possibilidades microscópicas, p_i a probabilidade de ocorrência da i -ésima configuração microscópica com energia E_i . A soma é realizada sobre todas as possibilidades, enquanto q denota o índice entrópico o qual está relacionado e também determinado, pela dinâmica microscópica do sistema. Para o caso $q < 0$, deve se ter cuidado para excluir todas as possibilidades, cuja probabilidade seja negativa. Quando isto acontece considera-se $p_i = 0$. Este cuidado não é necessário para $q > 0$.

Quando usamos $p_i^{q-1} \sim 1 + (q-1) \ln p_i$ no limite $q \rightarrow 1$ na equação 4.3, recuperamos a entropia de Boltzmann dada por

$$S_1 = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (4.4)$$

O índice entrópico q , que caracteriza o grau de não-extensividade do sistema, aparece na seguinte relação de pseudo-aditividade da entropia

$$\frac{S_q(A+B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + (1-q) \frac{S_q(A)}{k} \frac{S_q(B)}{k}, \quad (4.5)$$

com A e B sendo dois sistemas independentes, no que se refere à probabilidade de $A+B$ se fatorizar nas probabilidades de A e de B (ou $p_{ij}(A+B) = p_i(A)p_j(B)$). Desde que $S_q \geq 0$ (propriedade da não-negatividade), $q < 1$, $q = 1$ e $q > 1$ respectivamente correspondem a super-aditividade (super-extensividade), aditividade (extensividade) e sub-aditividade (sub-extensividade) ¹⁴².

De acordo com os trabalhos de Tsallis, dependendo do alcance das interações ou do alcance dos efeitos de memória presentes no sistema, o formalismo de BG pode não ser o mais conveniente. Usualmente se estuda sistemas onde o alcance das interações e os efeitos de memória são do tipo curto-alcance e o formalismo BG é aplicado sem problemas.

No caso mais geral, dependendo de algum parâmetro que caracterize o alcance da interação, o sistema pode apresentar uma região extensiva e uma região não extensiva.

4.2 Percolação de Ligações de Longo-Alcance

A teoria da percolação simples, descrita em redes geométricas, considera que dois sítios da rede estão conectados quando eles são vizinhos próximos. No caso de percolação mais geral podemos considerar que todos os sítios estão interconectados.

A finalidade do presente trabalho é fazer um estudo Monte Carlo do problema de percolação de ligações de longo alcance na cadeia linear diluída. Para fazer a simulação consideramos uma cadeia aberta de tamanho N . A diluição aleatória da cadeia resulta na presença de uma concentração p_s de sítios ocupados (ativos). Todos os sítios ativos estão conectados entre si através de ligações que estão presentes com probabilidades p_{ij} entre os sítios i e j , separados por uma distância r_{ij} ($r_{ij} = 1, 2, \dots$).

Rego et al. ¹⁴³ estudaram o problema da percolação de ligações de longo alcance na cadeia linear correspondente ao caso puro. Eles consideraram que cada ligação estava presente com probabilidade p_{ij} dada pela seguinte expressão

$$p_{ij} = p_1/r_{ij}^\alpha, \quad (4.6)$$

onde p_1 é a probabilidade de ocupação de ligação entre os sítios primeiros vizinhos ($r_{ij} = 1$) e satisfaz $0 \leq p_1 \leq 1$ e $\alpha \geq 0$.

Eles obtiveram através do método de Monte Carlo os seguintes resultados para o parâmetro de ordem $P_\infty(p_1)$, para valores típicos de α e N , onde $P_\infty(p_1)$ é a probabilidade de um sítio se encontrar no cluster infinito.

(i) Quando N aumenta e $0 \leq \alpha \leq 1$ as curvas de $P_\infty(p_1)$ colapsam na vertical $p_1 = 0$ resultando em $p_c = 0$.

(ii) Para $\alpha > 2$ $P_\infty(p_1)$ colapsam na vertical $p_1 = 1$, como consequência $p_c = 1$.

(iii) Quando temos $1 < \alpha \leq 2$, $P_\infty(p_1)$ converge para uma curva final intermediária entre $p_1 = 0$ e $p_1 = 1$.

A região não extensiva ($0 \leq \alpha \leq 1$) pode ser unificada com a região extensiva ($\alpha > 1$) quando se expressa o parâmetro de ordem P_∞ em função da variável p^* definida abaixo

$$1 - p^* = (1 - p_1)^{N^*} \quad (4.7)$$

onde N^* é obtido a partir da seguinte integral ¹⁴⁴⁻¹⁴⁶:

$$N^* \equiv D \int_1^{N^{1/d}} r^{D-1} r^{-\alpha} dr = \frac{(N^{1-\frac{\alpha}{D}} - 1)}{(1 - \frac{\alpha}{D})}, \quad (4.8)$$

N é o número de sítios da rede.

Quando $N \rightarrow \infty$, N^* se comporta como

$$N^* \sim \frac{1}{\frac{\alpha}{D} - 1} \quad \text{se } \frac{\alpha}{D} > 1$$

$$N^* \sim \ln N \quad \text{se } \frac{\alpha}{D} = 1$$

$$N^* \sim \frac{N^{1-\frac{\alpha}{D}}}{1-\frac{\alpha}{D}} \quad \text{se } 0 \leq \frac{\alpha}{D} < 1$$

O tipo de lei de potência da distribuição de probabilidade $p_{ij} = p_1/r_{ij}^\alpha$ é muito semelhante àquela usada por Cannas e Tamarit¹⁴⁴ para a constante de acoplamento $J_{(r_{ij})}$ em seu modelo de spin ferromagnético com interações de longo-alcance.

Podemos ver que no limite $\alpha \rightarrow \infty$, corresponde à cadeia linear padrão com ligações entre primeiros vizinhos, para a qual sabemos não existir transição de fase. O outro extremo, i.e., $\alpha = 0$, temos uma situação tipo campo médio, no qual todos os sítios estão conectados entre si com a mesma probabilidade p , ou melhor, onde todas as ligações estão presentes com igual probabilidade p .

Os casos não triviais são aqueles com $0 \leq \alpha \leq \infty$, para o qual o presente estudo é dedicado, especialmente na região de fronteira $\alpha = 1$, valor no qual ocorre uma passagem (“crossover”) de um comportamento extensivo para um não extensivo.

Consideremos agora a questão da extensividade. Esta discussão se torna mais clara quando usamos a variável N^* ¹⁴² definida anteriormente na equação 4.2.

O sistema é extensivo se $\frac{\alpha}{D} > 1$, para o qual a termodinâmica usual pode ser aplicada. Caso contrário ($0 \leq \frac{\alpha}{D} \leq 1$) o sistema é não-extensivo e uma termodinâmica estendida se faz necessária.

No caso puro, $D = 1$, duas subregiões fisicamente diferentes emergem da região extensiva. Quando $1 < \alpha \leq 2$, temos $0 < p_c < 1$ e para $\alpha > 2$ $p_c = 1$. Uma peculiaridade ocorre em $\alpha = 2$. Neste valor $p_c(\alpha)$ é descontínuo: o valor exato $p_c(2)$ ainda não é conhecido, mas existe uma conjectura proposta por Cannas e de Magalhães¹⁴⁷ dada por $p_c(2) = 1 - e^{-12\pi^2} \sim 0.703 \dots$. Para $0 \leq \alpha \leq 1$, $p_c = 0$.

Seguindo as linhas do problema tratado por Rego et al. nós estudamos a cadeia linear diluída através do método de Monte Carlo.

4.3 Resultados e Discussões

Consideremos a cadeia linear diluída, onde cada sítio desta cadeia tem uma probabilidade p_s de estar ativo (presente). A ausência de um determinado sítio implica na ausência de todas as ligações conectadas a este sítio.

No problema da percolação de longo alcance com diluição, temos dois ingredientes que competem. Enquanto a conexão de longo alcance favorece a fase percolante, a diluição tem efeito contrário.

Apresentamos na fig. 4.2(a) o parâmetro de ordem P_∞ versus p_1 , para $N = 300$, $p_s = 0.8$ e vários valores de α . Verificamos que a exemplo do caso puro, à medida que diminuimos α as curvas do parâmetro de ordem tendem a se colapsar em $p_1 = 0$ no limite termodinâmico. Na fig. 4.2 (b) apresentamos para $N = 300$ e $\alpha = 0.8$ a evolução do parâmetro de ordem com o aumento da diluição. Neste caso observamos que a curva limite é $p_1 = 1$. Portanto a fig. 4.2 exhibe as duas tendências, uma que favorece e outra que desfavorece a fase percolante.

No caso puro existe três regiões fisicamente diferentes, a saber $0 \leq \alpha \leq 1$, $1 < \alpha \leq 2$ e $\alpha > 2$. Vejamos como estas regiões se modificam quando introduzimos diluição. Os nossos dados (ainda não conclusivos) nos dão as seguintes conclusões:

(a) O caso $\alpha > 2$ (interação de curto alcance), $p_c = 1$. Quando introduzimos diluição com maior razão, p_c vai continuar sendo igual a 1 (a diluição requer um valor maior da probabilidade crítica para que o sistema continue a percolar).

(b) A região $1 < \alpha \leq 2$ encolhe. A descontinuidade que acontecia em $\alpha = 2$ vai se mover da vertical $\alpha = 2$ para um novo valor $\alpha_d < 2$ (aqui α_d diminui com o aumento da diluição). A probabilidade $p_c(\alpha)$ aumenta com a diluição. Portanto a curva $p_c(\alpha)$ (fig. 4.3) se desloca para a esquerda e para cima.

(c) Vejamos o que acontece com a região $0 \leq \alpha \leq 1$; $p_c = 0$. Quando a curva $p_c(\alpha)$ do caso anterior se move para cima, o valor $p_c(\alpha = 1) = 0$ acompanha este movimento e se torna $p_c(\alpha = 1) \neq 0$. Este ponto por sua vez “arrasta” a região contígua à esquerda ($p_c = 0$; $0 \leq \alpha \leq 1$), até um valor de $\alpha'_d(p_s)$ parecendo que a região extensiva estivesse

invadindo a região não extensiva (ver fig. 4.4).

Em resumo a diluição provoca o deslocamento de toda a figura 4.3 (caso puro) para a esquerda e para cima. O ponto assinalado na figura 4.3 (conjectura de Cannas e de Magalhães) descreve uma trajetória contínua à medida que diluimos o sistema.

Apresentamos na fig. 4.4 o valor da probabilidade crítica de percolação p_c para toda região $\alpha > 0$ e para várias diluições do sistema: $p_s = 0.4, 0.6$ e 0.8 . Utilizamos cadeias de tamanho $N = 100, 300, 500$ e 1000 e extrapolamos nossos resultados para $N \rightarrow \infty$. Para cada tamanho fazemos 1000 realizações.

Focalizemos agora a região não extensiva $0 \leq \alpha \leq 1$. A exemplo do caso puro, todas as curvas do parâmetro de ordem P_∞ versus p_1 colapsam em $p_1 = 0$ no limite termodinâmico.

Podemos unificar todas estas curvas $P_\infty(p_1, \alpha, N)$ se utilizamos em lugar de p_1 a variável \tilde{p} definida a seguir

$$1 - \tilde{p} = (1 - p_1)^{N^* 2^\alpha}, \quad (4.9)$$

Na fig. 4.5 apresentamos a curva universal P_∞ versus \tilde{p} para várias diluições, vários valores de N e vários valores de α .

Nós exibimos como os efeitos competitivos (interação de longo alcance e diluição) podem modificar a probabilidade p_c de percolação do sistema puro. Observamos que se $\alpha \rightarrow 0$ o sistema percola por maior que seja a diluição $p_s < 1$. Outro resultado que queremos destacar é a variável \tilde{p} . Esta variável consegue unificar o parâmetro de ordem P_∞ para diferentes valores de N e α independente se o sistema está diluído ou não.

Um resultado que queremos destacar é que a descontinuidade que ocorre em $\alpha = 2$ ou seja $p_c(\alpha = 2) \sim 0.703 \dots$ continua a existir no caso diluído. Para uma dada diluição a descontinuidade passa a ocorrer em $\alpha = \alpha_d < 2$.

Um resultado que ainda estamos investigando é que como a diluição provoca o deslocamento da curva p_c versus p_1 para a esquerda perguntariamos se não havia a necessidade de redefinir o N^* incorporando a diluição, tendo como consequência algumas implicações

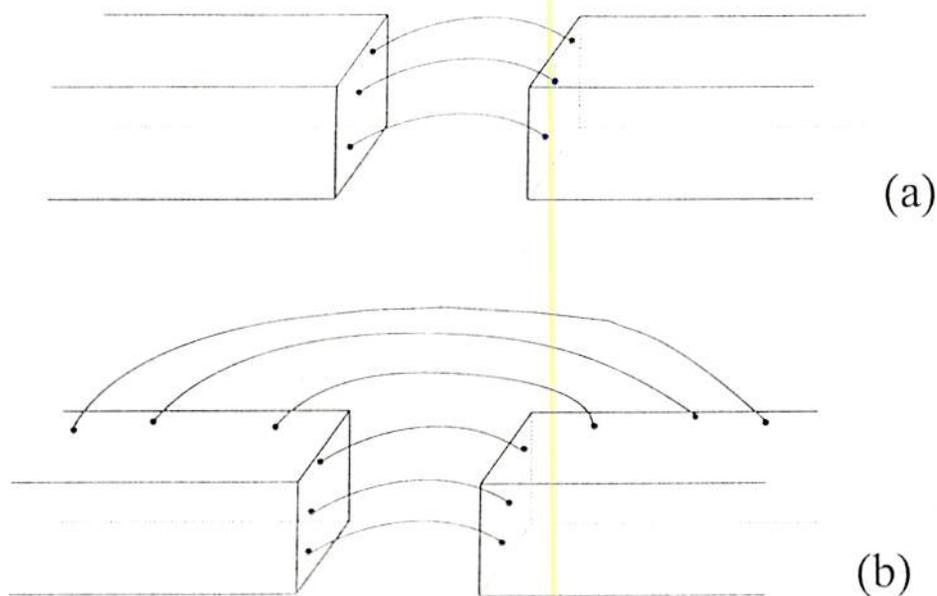


Figura 4.1: Ilustração das interações (a) curto alcance. (b) Longo alcance em um sistema físico esquemático.

nos domínios das regiões extensivas e não extensivas.

Ilustramos esta possibilidade através da fig. 4.1. Em (a) vemos que se dividimos o sistema em dois, a energia total é a soma das energias das partes (caso extensivo). Em (b) claramente a partição é não extensiva. Especulamos que a diluição do sistema restringiria muitas conexões e portanto afetaria o cálculo da soma das partes. O sistema continuaria não extensivo porém numa situação intermediária entre os casos (a) e (b). Isto poderia justificar a inclusão da diluição na variável N^* e portanto no limite termodinâmico.

No próximo capítulo apresentaremos nossas conclusões e as futuras extensões.

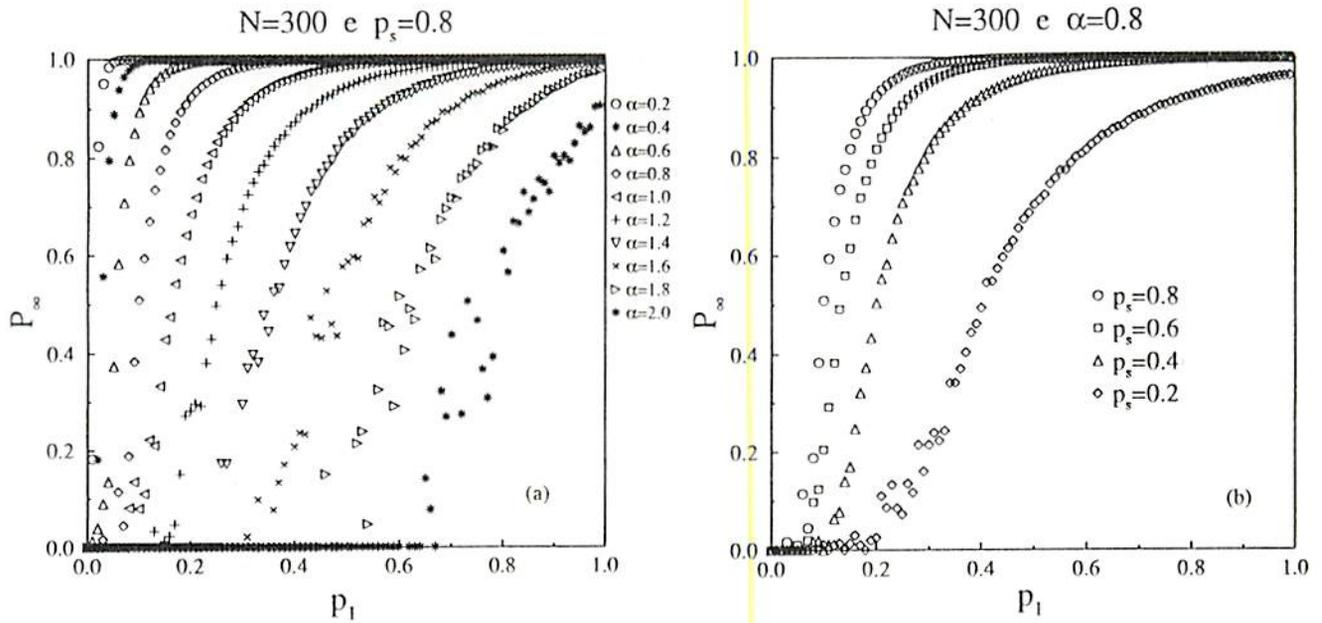


Figura 4.2: Os gráficos mostram a competição entre ligação de longo alcance versus diluição (a) P_∞ versus p_1 para $N = 300$, $p_s = 0.8$ e para vários valores de α , mostrando que diminuindo α as curvas tendem a se caminhar para $p_1 = 0$. (b) Neste caso mostramos P_∞ versus p_1 para $N = 300$, $\alpha = 0.8$ e várias concentrações de diluição $p_s = 0.2, 0.4, 0.6$ e 0.8 onde mostramos que a diluição tende a levar as curvas para $p_1 = 1$.

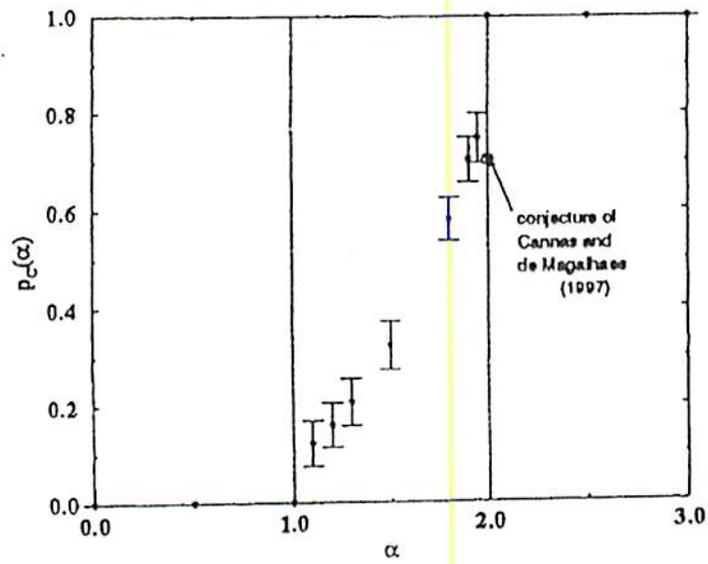


Figura 4.3: O gráfico p_c versus α para o caso puro ¹⁴³.

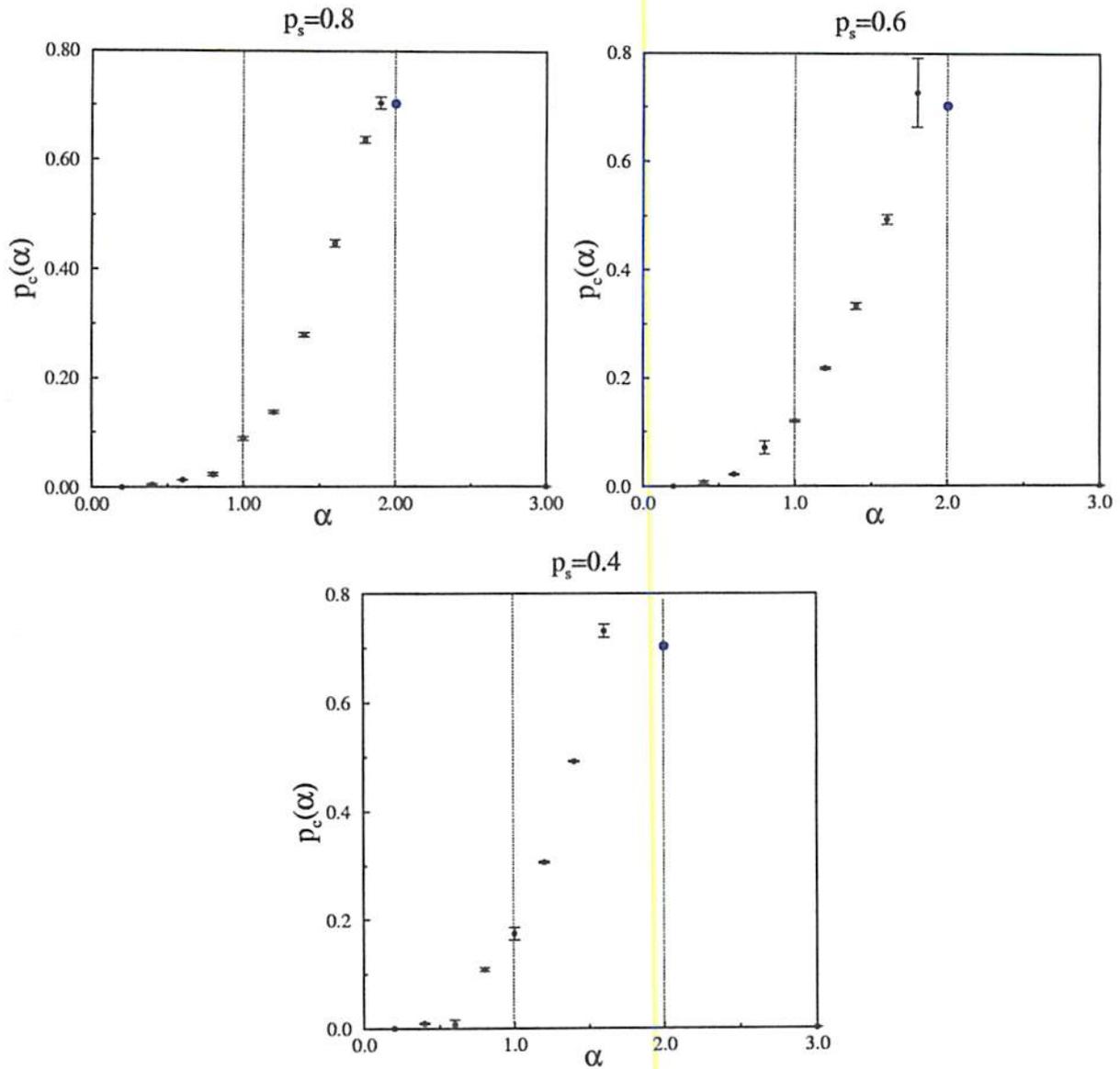


Figura 4.4: O gráfico p_c versus α para várias diluições. Notamos que a diluição provoca um deslocamento de toda a figura para esquerda e para cima. O ponto azul representa a conjectura de Cannas e de Magalhães¹⁴⁷.

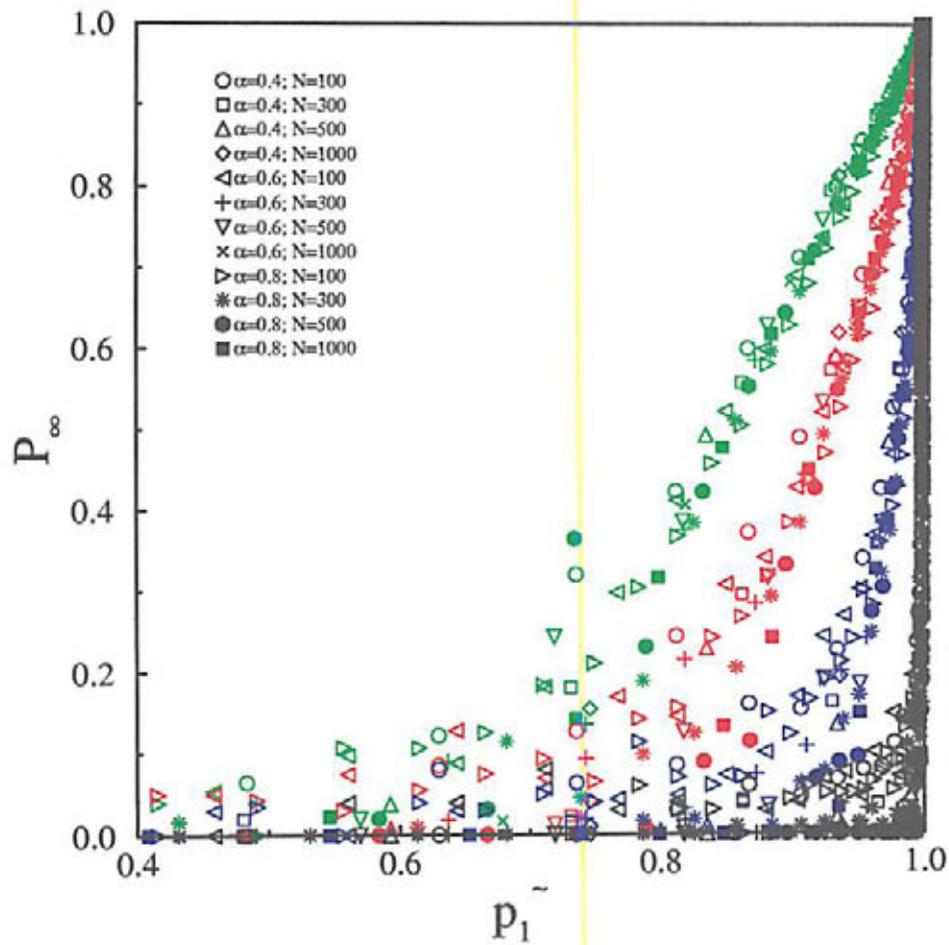


Figura 4.5: P_∞ versus \tilde{p} , mostrando a curva universal para vários N e vários valores de α . As curvas em preto são para $p_s = 0.2$, as em azul são para $p_s = 0.4$, as vermelhas para $p_s = 0.6$ e as verdes para $p_s = 0.8$. Nota-se que a diluição desloca o colapso para $\tilde{p} = 1$.

Capítulo 5

Conclusões e Extensões

5.1 Conclusões

Sistemas complexos representam uma das áreas da Física em grande evidência. Estes sistemas têm características especiais, apresentam ordem de longo alcance, efeitos de memória longa, características fractais, não linearidades, caráter holístico, leis de potência, transições de fase, etc. Muitos destes sistemas fora do equilíbrio se dirigem espontaneamente para o estado crítico. A teoria da criticalidade auto organizada explica este fenômeno.

Transições de fase ocorrem com frequência nos sistemas complexos. Usualmente as fronteiras críticas são determinadas fixando-se $N - 1$ parâmetros relevantes e fazendo a sintonia do N -ésimo parâmetro.

Um novo método (MBA) inspirado em criticalidade auto organizada localiza a fronteira crítica e o parâmetro de ordem de uma forma automática. Este método já foi testado com sucesso no problema de percolação e no crescimento de polímeros em meios desordenados. Neste trabalho, testamos a eficiência do MBA para sistemas Hamiltonianos. Tratamos o modelo de Ising ferromagnético, puro e diluído, para várias redes geométricas. Calculamos a fronteira crítica, o expoente da magnetização β e o expoente da susceptibilidade γ . Observamos que a rapidez do método é impressionante. A qualidade dos resultados é

bastante satisfatória.

O fato de que o método dirige o sistema através de um caminho termodinâmico correto (via curva do parâmetro de ordem), permite calcular simultaneamente o ponto e os expoentes críticos.

O MBA é baseado numa relação de recorrência. Quando foi proposto inicialmente se utilizava como parâmetro recursivo alguma grandeza (parâmetro de ordem) que se aproximando de zero na transição. Neste trabalho vemos que também é possível utilizar grandezas que divergem na transição. Nestes casos escolhemos como parâmetro recorrente o inverso desta grandeza e recaímos no caso anterior.

Para o modelo de Ising (puro) $D = 2$, são conhecidos os resultados exatos para a temperatura crítica e o expoente β da magnetização, das redes quadrada, triangular e hexagonal. Nossos resultados apresentam, respectivamente discrepâncias da ordem de 5%, 0.8% e 2.3%, para a temperatura crítica, assim como expoentes β que concordam com os valores exatos dentro das barras de erro. Se considerarmos que usamos uma rede de tamanho $L = 40$, concluímos que nossos resultados são muito bons e que podem ser melhorados, ao aumentarmos o tamanho das redes.

Para o caso $D = 3$ tratamos a rede cúbica de tamanho $L = 10$. Apesar do pequeno tamanho da rede obtivemos uma discrepância de 0.5% para a temperatura crítica em relação ao resultado aceito na literatura⁸⁸ e uma discrepância desprezível para o expoente β .

Para o caso diluído, estudamos a rede quadrada de tamanho $L = 60$ para várias concentrações. Não existe resultados exatos para este caso. Comparamos nossos resultados da temperatura crítica e dos expoentes com vários trabalhos existentes na literatura. Consideramos como exemplo uma concentração ($p = 0.85$) e comparamos com o resultado de Heuer que utiliza o método de Monte Carlo. Temos uma discrepância da ordem de 5%; é bom lembrar que Heuer utiliza redes de tamanho $72 \leq L \leq 250$. Ainda para $p = 0.85$, no que diz respeito aos expoentes, obtivemos os valores $\beta = 0.123(2)$ para ser comparado com $\beta = 0.125(\text{resultado exato})$ do caso puro e $\gamma = 1.76(5)$ para ser comparado com $\gamma = 1.75(\text{resultado exato})$ do caso puro. Nossos expoentes críticos não são consistentes com o cenário de universalidade fraca, de acordo com o qual os expoentes críticos variam

continuamente com a desordem. Embora não tenha sido possível investigar as correções logarítmicas dos expoentes críticos, como uma consequência da desordem, nossos resultados suportam o cenário da universalidade forte.

Para diluições acima de 25% nossos resultados para as temperaturas críticas não são bons e atribuímos isto ao fato de efeitos de tamanho finito crescerem com a diluição, e portanto, precisaríamos utilizar redes maiores para obter resultados melhores.

Outra grandeza que calculamos foi a grandeza $s \equiv \frac{1}{T_c(1)} \frac{dT_c(p)}{dp} \Big|_{p=1}$, definida no diagrama de fase para-ferromagnético, que mede a declividade com que a curva sai do ponto puro $p = 1.0$. Nosso resultado $s = 1.57$ é próximo do valor exato $s = 1.564785 \dots$. Isto garante uma grande confiabilidade para o resto da curva.

Focalizemos agora nossa atenção no problema de percolação de longo alcance. Verificamos que a diluição provoca um deslocamento de todo o gráfico p_c versus α para a esquerda (α menores) e para cima (p_c maiores). Isto parece sugerir que a diluição altera as regiões extensivas (e portanto a não extensiva) e que talvez seja necessário redefinir o N^* para incorporar a diluição, de tal maneira que as várias regiões extensivas e não extensivas saiam naturalmente da definição deste novo N^* .

Quando expressamos o parâmetro de ordem P_∞ em função de uma variável conveniente \tilde{p} (em vez de p_1) conseguimos, unificar todas as curvas para diferentes valores de α e N (região não extensiva) numa curva universal.

5.2 Extensões

Com relação ao método de busca automática, este trabalho pode ser continuado, inicialmente empregando redes de tamanhos maiores. O método de Monte Carlo convencional pode ser substituído por versões mais avançadas (por exemplo, o algoritmo de Swendsen-Wang) e outras dinâmicas podem ser utilizadas. No presente trabalho, estudamos os expoentes β e γ ; outros expoentes críticos também podem ser investigados.

No presente trabalho estudamos o modelo de Ising; como extensões imediatas podemos destacar investigações de modelos mais complexos como os modelos de Potts, $Z(n)$, XY e

Heisenberg.

Para o modelo de Ising ferromagnético em uma rede cúbica com diluição de sítios, poderia se verificar a quebra de universalidade para os expoentes críticos.

O MBA pode ser aplicado para o estudo de outras transições de fase: autômatos celulares, transições dinâmicas, sistemas frustrados, modelos dissipativos em geral.

Com relação ao problema de percolação de longo alcance podemos inicialmente aplicar o MBA para calcular as transições de fase; neste trabalho usamos Monte Carlo usual. Posteriormente podemos pesquisar outras redes geométricas e outras dimensões espaciais.

Portanto temos uma técnica poderosa para explorar propriedades críticas de Sistemas Complexos em geral.

Bibliografia

- ¹ M. J. Feigenbaum, *J. Stat. Phys.* **19**, 25 (1978).
- ² J. A. Yorke e E. D. Yorke, *J. Stat. Phys.* **21**, 263 (1979).
- ³ R. Resnick, *Introdução à Relatividade Especial* (Editora Polígono, São Paulo, 1971).
- ⁴ A. Einstein, *Considerações Cosmológicas sobre a Teoria da Relatividade Geral* (Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1980).
- ⁵ R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- ⁶ R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, Ontario, Canadá, 1986).
- ⁷ B. B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance and Dimension* (Freeman, San Francisco, 1977).
- ⁸ B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1982).
- ⁹ J. Von Neumann, *Theory of Self Reproduction Automata* (University of Illinois, Urbana, 1966).
- ¹⁰ P. Lévy, *Théorie de L'Addition des Variables Aléatoires* (Gauthier - Villars, Paris, 1937).
- ¹¹ G. M. Viswanathân, Sergey V. Buldyrev, Shlomo Havlin, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo e H. Eugene Stanley, *Letters to Nature* **401**, 911 (1999).
- ¹² C. Tsallis, *Physica A* **221**, 277 (1995).

- ¹³ C. Tsallis, *Fractals* **3**, 541 (1995).
- ¹⁴ Per Bak, *How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality* (Copernicus, Ney Work, 1996).
- ¹⁵ B. Tadic e D. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1519 (1997).
- ¹⁶ Per Bak, Chao Tang e Kurt Wiesenfeld, *Phys. Rev. A* **38**, 364 (1988).
- ¹⁷ Per Bak, Chao Tang e Kurt Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- ¹⁸ D. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor and Francis, London, 1998).
- ¹⁹ A. L. Efros, *Physics and Geometry of Disorder; Percolation Theory* (Mir Publishers, Moscow, 1986).
- ²⁰ E. Z. Ising, *Phys.* **31**, 253 (1925).
- ²¹ L. J. de Jongh e A. R. Miedema, *Advances in Physics* **23**, 1 (1974).
- ²² L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- ²³ P. Pfeuty e G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena* (John Wiley and Sons, New York, 1977).
- ²⁴ J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group* (Clarendon Press - Oxford, New York, 1992).
- ²⁵ K. Binder e D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1988).
- ²⁶ J. S. Andrade, L. S. Lucena, A. M. Alencar e J. E. Freitas, *Physica A* **238**, 163 (1997).
- ²⁷ A. M. Alencar, J. S. Andrade e L. S. Lucena, *Phys. Rev. E* **56**, R2379 (1997).
- ²⁸ U. L. Fulco, L. S. Lucena e G. M. Viswanathan, *Physica A* **264**, 171 (1999).

- ²⁹ H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, London, 1971).
- ³⁰ C. Domb, *Adv. Phys.* **9**, (1960).
- ³¹ M. E. Fisher, *Rep. Prog. Phys.* **30**, 615 (1967).
- ³² E. Brezin, J. C. Le Guillou e J. Zinn-Justin, *Phys. Lett* **47A**, 285 (1974).
- ³³ J. C. Le Guillou e J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. B* **21**, 3976 (1980).
- ³⁴ J. C. Le Guillou e J. Zinn-Justin, *J. Phys.* **48**, 19 (1987).
- ³⁵ G. S. Pawley, R. H. Swendsen, D. J. Wallace e K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **29**, 4030 (1984).
- ³⁶ H. W. J. Blöte, J. de Bruin, A. Compagner, J. H. Croockewit, Y. T. J. C. Fonk, J. R. Heringa, A. Hoogland e A. L. van Willigen, *Europhys. Lett* **10**, 105 (1989).
- ³⁷ H. W. J. Blöte, J. de Bruin, A. Compagner, J. H. Croockewit, Y. T. J. C. Fonk, J. R. Heringa, A. Hoogland, T. S. Smit e A. L. van Willigen, *Physica A* **161**, 1 (1989).
- ³⁸ H. Gould e J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods* (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1996).
- ³⁹ K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1986).
- ⁴⁰ K. Binder, *Applications of the Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- ⁴¹ K. Binder, *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1995).
- ⁴² R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, 1975).
- ⁴³ N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).

- ⁴⁴ R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- ⁴⁵ Z. W. Salzburg, J. D. Jacobson, W. Fickett e W. W. Wood, *J. Chem. Phys.* **30**, 65 (1959).
- ⁴⁶ P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna e H. J. Heermann, *Braz. J. Phys.* **26**, 677 (1996).
- ⁴⁷ A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
- ⁴⁸ A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
- ⁴⁹ H. Yahata e M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **27**, 1421 (1969).
- ⁵⁰ J. K. Williams, *J. Phys. A* **18**, 49 (1985).
- ⁵¹ C. Kalle, *J. Phys. A* **17**, L801 (1984).
- ⁵² M. Aydin e M. C. Yalabik, *J. Phys. A* **17**, 2531 (1984).
- ⁵³ G. F. Mazenko, M. J. Nolan e O. T. Valls, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 500 (1978).
- ⁵⁴ R. H. Swendsen e J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- ⁵⁵ U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- ⁵⁶ J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer e L. V. Chayes, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2792 (1995).
- ⁵⁷ P. W. Kasteleyn e C. M. Fortuin, *J. Phys. Soc. Jap. (suppl.)* **26**, 11 (1969).
- ⁵⁸ C. M. Fortuin e P. W. Kasteleyn, *Physica* **57**, 536 (1972).
- ⁵⁹ A. Coniglio e W. Klein, *J. Phys. A* **15**, 1873 (1980).
- ⁶⁰ J. M. Hammersley, *In Methods in Computational Physics* (Academic Press, New York, 1963).
- ⁶¹ D. Wilkinson e J. F. Willemsen, *J. Phys. A* **16**, 3365 (1983).

- ⁶² R. Chandler, J. Koplick, K. Lerman e J. F. Willemsen, *Journal of Fluid Mechanics* **119**, 249 (1982).
- ⁶³ J. T. Chayes, L. Chayes e C. M. Newman, *Comm. Math. Phys.* **17**, 129 (1984).
- ⁶⁴ N. J. Giordano, *Computational Physics* (Prentice Hall, Ney Jersey, 1997).
- ⁶⁵ An Introduction to Computer Simulation Methods, *H. Gould and J. Tobochnik* (Addison-Wesley, New York, 1996).
- ⁶⁶ Ezequiel Silva de Sousa, Tese de Doutorado, UFRN, 1997.
- ⁶⁷ J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Clarendon Press - Oxford, New york, 1993).
- ⁶⁸ G. S. Rushbrooke, *J. Chem. Phys.* **39**, 842 (1963).
- ⁶⁹ R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17 (1969).
- ⁷⁰ R. B. Griffiths, *J. Chem. Phys.* **43**, 1958 (1965b).
- ⁷¹ M. J. Buckingham e J. D. Gunton, *Phys. Rev.* **178**, 848 (1969).
- ⁷² B. D. Josephson, *Proc. Phys. Soc.* **92**, 269 (1967).
- ⁷³ B. D. Josephson, *Proc. Phys. Soc.* **92**, 276 (1967).
- ⁷⁴ E. A. Guggenheim, *Journal of Chemical Physics* **13**, 253 (1945).
- ⁷⁵ A. D. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms* (Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, 1989).
- ⁷⁶ T. Andrews, *Phil. Trans. R. Soc.* **159**, 575 (1869).
- ⁷⁷ P. Weiss, *J. Phys. Radium* **6**, 667 (1907).
- ⁷⁸ W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- ⁷⁹ L. Onsager, *Phys. Rev.* **37**, 405 (1931).

- ⁸⁰ L. Onsager, Phys. Rev. **38**, 2265 (1931b).
- ⁸¹ K. E. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **51**, 2175 (1983).
- ⁸² M. Faas e H. J. Hilhorst, Physica A **135**, 571 (1986).
- ⁸³ H. H. Hahn e T. S. J. Streit, Physica A **154**, 108 (1988).
- ⁸⁴ E. P. Stoll, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 6959 (1989).
- ⁸⁵ U. L. Fulco, F. D. Nobre, L. R. da Silva, L. S. Lucena e G. M. Viswanathan, Physica A **284**, 223 (2000).
- ⁸⁶ U. L. Fulco, F. D. Nobre, L. R. da Silva e L. S. Lucena, Physica A (2001).
- ⁸⁷ D. Sornette, A. Johansen e I. Dornic, J. Phys. I France **5**, 325 (1995).
- ⁸⁸ D. P. Landau, Physica A **205**, 41 (1994).
- ⁸⁹ M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
- ⁹⁰ R. B. Stinchcombe, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by editor (Academic Press, New York, 1983).
- ⁹¹ W. Selke, L. N. Shchur e A. L. Talapov, *Annual Reviews of Computational Physics* (World Scientific, Singapore, 1994).
- ⁹² V. S. Dotsenko, Usp. Fiz. Nauk. **165**, 287 (1995).
- ⁹³ Hans-Otto Heuer, Phys. Rev. B **45**, 5691 (1992).
- ⁹⁴ A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- ⁹⁵ Vik. S. Dotsenko e Vi. S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
- ⁹⁶ Jae-Kwon Kim e Adrian Patrascioiu, Phys. Rev. Lett. **72**, 2785 (1994).
- ⁹⁷ Jae-Kwon Kim e Adrian Patrascioiu, Phys. Rev. B **49**, 15764 (1994).

- ⁹⁸ F. D. A. Aarão Reis, S. L. A. de Queiroz e R. R. dos Santos, Phys. Rev. B 54, R9616 (1996).
- ⁹⁹ F. D. A. Aarão Reis, S. L. A. de Queiroz e Raimundo R. dos Santos, Phys. Rev. B 56, 6013 (1997).
- ¹⁰⁰ S. L. A. de Queiroz, J. Phys. A 30, L443 (1997).
- ¹⁰¹ H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi e J. J. Ruiz-Lorenzo, J. Phys. A 30, 8379 (1997).
- ¹⁰² M. Fähnle, T. Holey e J. Eckert, J. Magn. Magn. Mater. 104-107, 195 (1992).
- ¹⁰³ R. Kühn, Tese de Doutorado, Kiel University, 1987.
- ¹⁰⁴ M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 51, 1992 (1974).
- ¹⁰⁵ Giorgio Marzео e Reimer Kühn, Phys. Rev. E 60, 3823 (1999).
- ¹⁰⁶ A. J. F. de Souza e F. G. B. Moreira, Europhys. Lett. 17, 491 (1992).
- ¹⁰⁷ M. E. Fisher, *Critical Phenomena* (Academic, New York, 1971).
- ¹⁰⁸ M. N. Barber, *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic, New York, 1983).
- ¹⁰⁹ W. Selke, L. N. Shchur e O. A. Vasilyev, Physica A 259, 388 (1998).
- ¹¹⁰ J. Marro, A. Labarta e J. Tejoda, J. Phys. Rev. B 34, 347 (1986).
- ¹¹¹ K. Chen e D. P. Landau, J. Appl. Phys. 73, 5645 (1993).
- ¹¹² T. Holey e M. Fähnle, Phys. Rev. B 41, 11709 (1990).
- ¹¹³ J. S. Wang e D. Chowdhury, J. Phys. France 50, 2905 (1989).
- ¹¹⁴ Z. Néda, J. Phys. I France 4, 175 (1994).
- ¹¹⁵ E. S. de Sousa, A. M. Mariz, F. D. Nobre e U. M. S. Costa, Physica A 241, 469 (1997).

- ¹¹⁶ O. A. Vasilyev, Tese de Doutorado, Landau Institute for Theoretical Physics, 1997.
- ¹¹⁷ H. Sato, A. Arrott e R. Kikuchi, *J. Phys. Chem-solids* **10**, 19 (1990).
- ¹¹⁸ E. Mina, A. Bohórquez, L. E. Zamora e G. A. Pérez Alcazar, *Phys. Rev. B* **47**, 7925 (1993).
- ¹¹⁹ M. Droz, A. Maritan e A. L. Stella, *Phys. Lett. A* **92**, 287 (1982).
- ¹²⁰ D. C. Rapaport, *J. Phys. C* **5**, 1830 (1972).
- ¹²¹ T. Idogaki e N. Uryû, *J. Phys. Soc. Jpn.* **45**, 1498 (1978).
- ¹²² R. Kühn, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2268 (1994).
- ¹²³ B. N. Shalaev e *Fiz. Tverd.*, *Sov. Phys. Solid State* **26**, 1811 (1984).
- ¹²⁴ R. Shankar, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2466 (1987).
- ¹²⁵ A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2388 (1988).
- ¹²⁶ B. Derrida, B. W. Southern e D. Stauffer, *J. Phys. (France)* **48**, 335 (1987).
- ¹²⁷ R. M. Ziff e B. Sapoval, *J. Phys. A* **19**, L1169 (1986).
- ¹²⁸ I. O. Mayer, *J. Physica A* **22**, 2815 (1989).
- ¹²⁹ C. Tsallis e A. C. N. Magalhães, *Phys. Rep.* **268**, 305 (1996).
- ¹³⁰ M. F. Thorpe e A. R. McGurn, *Phys. Rev. B* **20**, 2142 (1979).
- ¹³¹ H. J. Herrmann, *Physica A* **168**, 516 (1990).
- ¹³² N. Jam e L. de Arcangelis, *Annual Reviews of Computational Physics I* (World Scientific, Singapore, 1994).
- ¹³³ C. Anteneodo e C. Tsallis, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5313 (1998).
- ¹³⁴ C. Tsallis, *Chaos, Solitons and Fractals* **6**, 539 (1995).
- ¹³⁵ C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).

- ¹³⁶ E. M. F. Curado e C. Tsallis, *J. Phys. A* **24**, L69 (1991).
- ¹³⁷ C. Tsallis, *Phys. Lett. A* **206**, 389 (1995).
- ¹³⁸ C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza e R. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3589 (1995).
- ¹³⁹ B. M. Boghosian, *Phys. Rev. E* **53**, 4754 (1996).
- ¹⁴⁰ A. Metha e S. F. Edwards, *Physica A* **157**, 1091 (1989).
- ¹⁴¹ T. J. P. Penna, *Phys. Rev. E* **51**, R1 (1995).
- ¹⁴² C. Tsallis, *Brazilian Journal of Physics* **29**, 1 (1999).
- ¹⁴³ H. H. A. Rego, L. S. Lucena, L. R. da Silva e C. Tsallis, *Physica A* **266**, 42 (1999).
- ¹⁴⁴ S. A. Cannas e F. A. Tamarit, *Phys. Rev. B* **54**, R12661 (1996).
- ¹⁴⁵ L. C. Sampaio, M. P. de Albuquerque e F. S. de Menezes, *Phys. Rev. B* **55**, 5611 (1997).
- ¹⁴⁶ S. A. Cannas, F. A. Tamarit e A. C. N. de Magalhães, *XX Congresso Brasileiro de Física da Matéria Condensada* (Caxambu, Brazil, 1997).
- ¹⁴⁷ S. A. Cannas e A. C. N. de Magalhães, *J. Phys. A* **30**, 3345 (1997).