



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Centro de Ensino de graduação em Exatas e da Natureza  
Departamento de Física

Pós-Graduação em Física Aplicada

**Estudo Dinâmico da Criticalidade do  
Modelo XY em três Dimensões**

Lindiane Cibele de Souza

Dissertação de Mestrado

Recife

9 de março 2017

Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Centro de Ensino de graduação em Exatas e da Natureza  
Departamento de Física

Lindiane Cibele de Souza

**Estudo Dinâmico da Criticalidade do Modelo XY em três  
Dimensões**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em  
Física Aplicada do Departamento de Física da Universi-  
dade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial  
para obtenção do grau de  
Mestre em Física.*

Orientador: *Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza*

Recife  
9 de março 2017

*Aos meus familiares e amigos, em especial minha mãe*

*Maria José.*

# Agradecimentos

Ao professor Aduino pela confiança demonstrada durante estes anos, pela amizade, disponibilidade e valiosa orientação.

Aos professores do Departamento de Física pelas contribuições em minha formação.

Aos meus colegas de mestrado pela amizade, bate-papos e pelos momentos de estudo que ajudaram a moldar esse trabalho.

Aos secretários do Departamento pela colaboração em diferentes momentos do mestrado.

Aos meus irmãos Leandro e Lisiane, assim como, aos meus primos Wagner, Andreza, Vanessa e Aline pelo apoio e por contribuições diversas.

A minha mãe que não mediu esforços para que eu pudesse chegar até aqui.

Ao meu namorado Leandro por estar do meu lado em todos os momentos, ao longo desses anos de graduação e mestrado. Com palavras de incentivo, paciência e amor que me fizeram seguir mais confiante.

À todas as pessoas que me apoiaram e contribuíram para realização deste trabalho.

À Deus por estar sempre presente em todos os momentos de minha vida e ser o responsável por esta conquista acadêmica.

# Resumo

Neste trabalho, estudamos as propriedades críticas do  $XY$  definido em uma rede cúbica simples através da relaxação dinâmica em tempos curtos. O sistema consiste de rotores planares, localizados nos sítios da rede. Os rotores são dotados de momento magnético e inércia rotacional. Existe interação apenas entre os primeiros vizinhos. Uma vez que o modelo  $XY$  não possui uma dinâmica intrínseca, adicionamos ao hamiltoniano de interação do sistema um termo de energia cinética rotacional para permitir uma dinâmica hamiltoniana. Dessa forma, a evolução dinâmica do sistema foi obtida através da integração numérica das equações de movimento de Hamilton. Empregamos um algoritmo simplético, baseado na decomposição Trotter-Suzuki do operador exponencial, para na integração do sistema de equações acopladas. No instante inicial da simulação,  $t = 0$ , o sistema é preparado em um microestado completamente ordenado e sua energia total é fixada em um valor na região crítica. Em seguida ele é liberado para evoluir e as grandezas termodinâmicas são calculadas ao longo do tempo. Monitoramos a magnetização, seu segundo momento e a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos. Esse cálculo foi repetido para vários valores da densidade de energia no regime crítico. Nesta abordagem determinística, a energia é conservada e as configurações do sistema estão distribuídas de acordo com um ensemble microcanônico. Por outro lado, tradicionalmente as simulações computacionais de sistemas modelos são realizadas no ensemble canônico, pelo método Monte Carlo. Aqui, comparamos nossos resultados obtidos pela relaxação determinística com aqueles obtidos de simulações estocásticas. Comprovamos que a relaxação crítica do parâmetro de ordem do sistema satisfaz a mesma lei de escala observada pelos métodos estocásticos. O cálculo dos expoentes críticos estáticos e dinâmicos, mostram que a dinâmica determinística e a dinâmica estocástica pertencem a uma mesma classe de universalidade.

**Palavras-chave:** Modelo  $XY$ , dinâmica-crítica, tempos curtos.

# Abstract

In this work, we study the critical properties of the  $XY$  model defined in a simple cubic lattice through short-time critical dynamic relaxation. The system consists of planar rotors, located in the lattice sites. The rotors are endowed with magnetic moment and rotational inertia. There is interaction only among the first neighbors. Since the  $XY$  model does not have an intrinsic dynamic, we add to the interaction Hamiltonian a rotational kinetic energy term to allow Hamiltonian dynamics. Thus, the dynamic evolution of the system was obtained through the numerical integration of Hamilton's equations of motion. We employ a symplectic algorithm, based on the Trotter-Suzuki decomposition of the exponential operator, for the integration of the system of coupled equations. At the initial time of the simulation,  $t = 0$ , the system is prepared in a completely ordered state and its total energy is fixed at a value in the critical region. Then it is released to evolve and the thermodynamic quantities are calculated over time. We monitor the magnetization, its second moment, and the Fourier transform of the two-point correlation function. This calculation was repeated for several values of the energy density at the critical regime. In this deterministic approach, the energy is conserved and the system configurations are distributed according to a microcanonical ensemble. On the other hand, traditionally the computational simulations of model systems are realized in the canonical ensemble, by the Monte Carlo method. Here, we compare our results obtained by deterministic relaxation with those obtained from stochastic simulations. We verified that the critical relaxation of the order parameter of the system satisfies the same scale law observed in stochastic methods. The calculation of static and dynamic critical exponents shows that the deterministic dynamics and the stochastic dynamics belong to the same universality class.

**Keywords:** Model  $XY$ , dynamic-critical, short-time.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Mecânica Estatística de Sistemas Macroscópicos	2
<b>2</b>	<b>Transições de Fases e Fenômenos Críticos</b>	<b>7</b>
2.1	Transições de Fases	7
2.2	Fenômenos Críticos	15
<b>3</b>	<b>Materiais e Métodos</b>	<b>17</b>
3.1	Modelo XY	17
3.1.1	Modelo XY em Duas Dimensões	19
3.1.2	Modelo XY Tridimensional	20
3.2	Algoritmo de Integração de Equações Diferenciais	22
3.2.1	Decomposição Suzuki-Trotter	25
3.2.2	Vantagens da Fórmula do Produto Exponencial	26
3.2.3	Decomposição Fractal	27
3.3	Dinâmica Crítica em Tempos Curtos	32
3.4	Determinação do valor crítico do parâmetro de controle	36
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>38</b>
4.1	Magnetização	41
4.2	Derivada logarítmica da Magnetização	42
4.3	Colapso de Dados	47
4.4	Expoentes Críticos	48
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>52</b>

# Lista de Figuras

2.1	Diversas fases da substância água, mar na fase líquida, o gelo na fase sólida, e as nuvens, na forma de gasosa. Figura adaptada da referência [22].	8
2.2	Diagrama de fases simplificado da água. As linhas indicam onde ocorrem a transição entre os estados da substância. Em destaque, o ponto triplo onde ocorre a coexistência das três fases e o ponto crítico. Figura adaptada da referência [23].	9
2.3	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, em temperatura ambiente. Figura adaptada da referência [25].	10
2.4	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, para altas temperaturas. Figura adaptada da referência [25].	11
2.5	Comportamento da magnetização em função do campo magnético, na temperatura crítica. Figura adaptada da referência [25].	11
2.6	O diagrama de fases do ferromagneto num plano temperatura $T$ versus campo magnético $H$ . No ponto $T = T_c$ o sistema apresenta um comportamento totalmente singular de qualquer outro ponto e está na fase crítica. Antes do ponto crítico temos uma fase e após ele, outra fase. Figura adaptada da referência [25].	12
2.7	Ilustração da estrutura microscópica da substância água nas diversas fases. Figura adaptada da referência [26].	13
3.1	Rede cúbica simples com os $N$ sítios, localizados nos vértices dos cubos.	18
3.2	Representação esquemática da rede. As setas indicam a orientação dos rotores que podem rodar apenas em torno do eixo $z$ . $\theta$ é o ângulo com o eixo $x$ .	19
4.1	Estado inicial do sistema, o momento magnético dos rotores apontam ao longo da direção $x$ .	39
4.2	Estado do sistema em um instante $t = t'$ , os momentos magnéticos podem estar apontando em qualquer direção.	39

- 4.3 Flutuação da densidade de energia total do sistema em função do tempo. Para  $e = 0.1128$ ,  $T = 5000$  e  $L = 256$ . 40
- 4.4 Magnetização como uma função do tempo em uma escala duplo-logarítmica para vários valores de densidade de energia,  $L = 256$ . 43
- 4.5 Derivada do logaritmo da magnetização em relação a  $\tau$ ,  $\Psi$ , em função de  $\tau$ . Na fase ordenada,  $e < e_c$ , as curvas são côncavas para cima, e na fase desordenada,  $e > e_c$ , côncavas para baixo.  $\Psi$  não depende do tempo em  $e = e_c$ . 44
- 4.6 Mostra um corte na figura (4.5), para maiores valores de  $\tau$ . 45
- 4.7  $\Psi$ , como uma função da energia para alguns instantes de tempo selecionados. Como esperado, as curvas se cruzam na energia crítica. 46
- 4.8 Ajuste das curvas da figura (4.7). Como esperado, as curvas apresentam um comportamento mais suave que as curvas da figura (4.7) 47
- 4.9 A figura mostra o colapso dos dados apresentados na figura (4.7) . 49
- 4.10 Magnetização em função do tempo em uma escala duplo-logarítmica, para o valor estimado da densidade de energia mais próxima do valor crítico. A inclinação da reta fornece uma estimativa para o expoente  $\beta/\nu z$ . 51

# Lista de Tabelas

4.1	Densidades de energia utilizadas nas simulações	42
4.2	Expoentes críticos do modelo $XY$ obtidos neste trabalho através da dinâmica crítica de tempos curtos a partir de um estado inicial ordenado. Empregamos uma rede com $256 \times 256 \times 256$ rotores. Para comparação, incluímos resultados obtidos para o mesmo modelo utilizando outros métodos.	50

## CAPÍTULO 1

# Introdução

Nesta dissertação estudamos o comportamento crítico de um modelo  $XY$  tridimensional que obedece uma dinâmica determinística. Procuramos verificar se as equações de movimento microscópicas descrevem suas propriedades críticas adequadamente. Em particular, se emerge alguma lei de escalonamento dinâmico no regime de tempos curtos, como a observada em simulações do tipo Monte Carlo. Faremos uma comparação entre os comportamentos observados com a dinâmica determinística com aqueles observados com dinâmicas estocásticas. As propriedades críticas serão calculadas através da relaxação dinâmica em tempos curtos. Neste método, as propriedades do sistema são obtidas durante a relaxação para o equilíbrio. Investigaremos as similaridades e diferenças entre as abordagens determinística e estocástica para o modelo  $XY$  e se as duas dinâmicas estão na mesma classe de universalidade. Tendo em vista que existem muitos resultados e estudos sobre o modelo  $XY$  na literatura, muito se conhece de suas propriedades críticas de equilíbrio. Além disso, existem sistemas físicos cujas propriedades são bem descritas pelo modelo  $XY$  em certas condições experimentais. Isto facilita a comparação dos nossos resultados com resultados experimentais e previsões teóricas.

O modelo mais simples estudado do ponto de vista da mecânica estatística clássica é o modelo de Ising [1]. Suas variáveis dinâmicas possuem apenas um grau de liberdade. No entanto, este modelo não se presta para o nosso propósito por não possuir uma dinâmica própria e, introduzir um modelo quântico seria desnecessariamente sofisticado. Assim, escolhemos o Modelo  $XY$  clássico. As variáveis dinâmicas deste modelo são contínuas e, facilmente, pode-se acrescentar um termo de energia cinética dotando-o de uma dinâmica. Dessa forma, a evolução temporal pode ser obtida através de soluções das equações diferenciais de movimento. Escolhemos o modelo tridimensional porque em uma dimensão não existe transição de fases, em duas dimensões a transição é topológica e difícil de ser estudada. Em três dimensões a transição é de segunda ordem, aparentemente bem comportada e suas propriedades críticas são bem conhecidas. Além disso, o expoente crítico associado a divergência do calor específico é próximo de zero. Dessa forma, não são esperadas diferenças acentuadas nos resultados obtidos no ensemble microcanônico (dinâmica determinística) e no ensemble canônico (dinâmica estocástica).

## 1.1 Mecânica Estatística de Sistemas Macroscópicos

Os sistemas macroscópicos apresentam propriedades que estão relacionadas à dinâmica, essencialmente determinística, de seus constituintes microscópicos. Para descrever as propriedades desses sistemas, pode-se, em princípio, utilizar os fundamentos da dinâmica e tentar resolver as equações de movimento, seja em termos da Mecânica Clássica, resolvendo as equações hamiltonianas, ou, da Mecânica Quântica, com a solução da equação de Schrödinger. Nas duas abordagens, clássica ou quântica, deparamo-nos com um imenso problema — resolver um conjunto enorme de equações acopladas. Uma vez que tais sistemas são constituídos por um número colossal de partículas, da ordem de  $N \sim 10^{23}$ . A tarefa de guardar e transferir a quantidade de informações necessárias para resolver as equações de movimento e descrever com precisão as propriedades macroscópicas, é virtualmente impossível mesmo com o uso dos recursos computacionais disponíveis atualmente. Certamente, antes do surgimento dos computadores digitais, a dinâmica microscópica não era uma abordagem prática para a investigação de qualquer tipo de sistema físico macroscópico. Não obstante, o aumento do poder computacional impulsionou o uso da técnica de dinâmica molecular para atacar problemas de muitos corpos [2]. Embora longe do limite termodinâmico, atualmente é possível simular o comportamento de sistema com milhares ou mesmo milhões de partículas.

A mecânica estatística foi desenvolvida como uma forma de evitar o problema de se resolver as equações microscópicas de movimento e, mesmo assim, fazer previsões quantitativas para os observáveis termodinâmicos. Nesta abordagem, uma probabilidade de ocorrência é atribuída a cada um dos estados microscópicos do sistema. Um estado inacessível ou incompatível com as condições físicas impostas ao sistema tem probabilidade nula de ocorrência. O cálculo das médias temporais de grandezas microscópicas é substituído por um análogo estatístico, no qual, a média de um observável é calculada sobre os valores assumidos pela variável dinâmica, associada ao observável [3]. A distribuição de probabilidade dos microestados é denominada de *ensemble* e a média mencionada anteriormente é a média no ensemble.

A evolução dinâmica de um sistema de muitos corpos pode, sob certas circunstâncias, ser aproximadamente descrita por equações de movimento estocásticas. Tipicamente, em um nível mesoscópico, através de equações de Langevin [4] ou por algum algoritmo Monte Carlo [5]. Essas dinâmicas estocásticas são caracterizadas pelo fenômeno conhecido como amortecimento crítico (*critical slowing down*), ou seja, na região crítica devido às partículas estarem bastante correlacionadas ocorre uma desaceleração na evolução dinâmica do sistema, e por um peculiar comportamento de escalonamento dinâmico. Em particular, a relaxação crítica sob uma dinâmica estocástica apresenta comportamento de escala em tempos curtos. Muito antes do sistema

atingir o equilíbrio, sua relaxação é governada por leis de potências [6]. O mais surpreendente é que os expoentes associados à relaxação crítica estão relacionados com aqueles descrevendo as flutuações críticas de equilíbrio [7]. A relaxação crítica em tempos curtos tem se consolidado como uma importante técnica para se investigar o comportamento crítico de modelos da mecânica estatística [8].

Em simulações Monte Carlo, uma cadeia de Markov de microestados é gerada, isto é, uma configuração é obtida a partir da imediatamente anterior. Os microestados ocorrem de acordo com uma dada distribuição de probabilidades. Por construção, as configurações são dinamicamente correlacionadas entre si.

O método Monte Carlo é uma técnica numérica, largamente utilizada no estudo de transições de fases e fenômenos críticos. Desde que foi descrito pela primeira vez [9] ele vem sendo empregado na investigação de uma diversidade de sistemas. Este método, pode ser visto como um algoritmo de soluções numéricas, baseado fundamentalmente, na simulação de variáveis aleatórias, igualmente distribuídas e estatisticamente independentes, de um mesmo evento sobre as quais são realizadas médias. Entre as diversas formulações do método, o algoritmo de Metropolis tornou-se o mais conhecido, e é utilizado até hoje para simular o comportamento de processos que dependem de fatores aleatórios [10, 11]. No contexto da mecânica estatística, o método foi aplicado a estudos dos modelos Ising [12], Potts [13], Heisenberg [14] e o modelo XY [15], para citar apenas os mais conhecidos. Essencialmente, o método Monte Carlo consiste em um procedimento para gerar um conjunto de microestados distribuídos de acordo com uma distribuição de probabilidades prescrita. Em sua forma mais simples, um algoritmo de Monte Carlo parte de uma configuração (microestado) inicial qualquer e, a cada passo, modifica a configuração atual alterando o estado de uma ou mais partículas do sistema. A nova configuração é aceita com uma certa probabilidade de transição que depende do sistema e do método específico. Nesta etapa, números aleatórios são empregados para simular a probabilidade de transição. E o processo é repetido até um número suficientemente grande de configurações ter sido gerado. As propriedades físicas de interesse são calculadas através de médias aritméticas tomadas neste conjunto de configurações. Como regra geral, um certo número de configurações iniciais são desprezadas para o ensemble de equilíbrio ser alcançado.

Para propriedades de interesse estáticas ou independentes do tempo este procedimento é bastante apropriado. Pois é suficiente que o conjunto de configurações gerado satisfaça as propriedades do ensemble estatístico prescrito. Por outro lado, problemas dinâmicos, onde o significado físico do processo é uma parte essencial do modelo, algoritmos ou procedimentos especiais devem ser adotados. Por exemplo, existem formulações do método Monte Carlo que preservam o significado físico do processo [16, 17].

O estudo das transições de fases via simulações computacionais apresenta algumas limitações. Entre elas está o fato de apenas sistemas finitos poderem ser simulados. Próximo a uma transição de fases tanto as correlações entre as partículas do sistema quanto as flutuações crescem dramaticamente e para se obter uma precisão estatística modesta é necessário um número proibitivamente grande de configurações. A análise das transições é prejudicada e sua localização é difícil de se estimar. Estas limitações tem sido estudadas ao longo dos anos e várias técnicas satisfatórias surgiram para se calcular as propriedades críticas de sistemas estatísticos. Uma dessas técnicas consiste em fazer extrapolações, para um número de partículas infinitamente grande. Outra técnica, baseia-se em observar o sistema, e assim calcular as propriedades, antes do sistema entrar no estado de equilíbrio. Esta última técnica, denominada *short-time*, será explorada neste trabalho.

As simulações em tempos curtos contornam as dificuldades associadas ao longo tempo de correlação que os sistemas desenvolvem. Principalmente, quando a interação entre as partículas faz surgir diferentes estados de agregação. A passagem de um estado de agregação da matéria para outro é o que chamamos de uma transição de fases. E o entorno do ponto onde ocorre a transição chamada de região crítica. Uma vez que as medidas são realizadas muito antes que o sistema alcance o equilíbrio, a análise em tempos curtos, evita lidarmos com longos tempos de relaxação causados pelo crescimento colossal do comprimento de correlação próximo a uma transição de fases de segunda ordem.

O trabalho de J. D. van der Waals de 1873, sobre a transição líquido-gás, apresenta uma das primeiras teorias para descrever uma transição de fases. Consistindo no uso pioneiro da teoria molecular para explicar um fenômeno macroscópico. Ele demonstrou que a transição resulta da interação molecular. Que é composta de um termo atrativo de longo alcance e outro termo repulsivo de curto alcance. O primeiro termo reduz a pressão em relação à do gás ideal (sem interação), enquanto que o segundo termo é responsável pela alteração do volume de ocupação disponível. A equação de estado resultante dessas considerações concordava com os resultados experimentais. Além disso, Van der Waals demonstrou que, através de uma parametrização adequada, dados experimentais para diversos fluidos diferentes colapsam em uma mesma curva. Desta forma, pela primeira vez a característica da universalidade de um fenômeno crítico foi evidenciada [18].

Um dos desafios encontrados pelos físicos do século XX, foi tentar compreender microscopicamente como essas transições de fases ocorrem. Mesmo nos dias de hoje, para muitos sistemas físicos, não é um problema trivial. Fundamentalmente, é difícil entender uma das fases a partir do ponto de vista microscópico, explicar o comportamento dos fenômenos na vizinhança do ponto crítico, e como uma pequena mudança de um parâmetro provoca alterações

profundas nas propriedades do material. Entender, por exemplo, como a água se organiza na forma de gelo e como ela passa de uma fase macroscópica para outra.

As transições de fase e os fenômenos críticos são descritos por teorias e modelos baseados na Mecânica Estatística mas com ideias vinculadas nas proposições de van der Waals, a síntese dessas ideias foi abordada por Gibbs no livro *Elementary Principles of Statistical Mechanics* [19]. De acordo com ele, as propriedades de um sistema em equilíbrio termodinâmico a uma determinada temperatura podem ser obtidas a partir da distribuição canônica de probabilidades. As propriedades termodinâmicas são determinadas a partir da energia livre que é proporcional ao logaritmo da função de partição. Uma transição de fases manifesta-se como uma singularidade na energia livre que se reflete no comportamento das grandezas termodinâmicas.

Os trabalhos realizados por Onsager sobre o modelo Ising [1], demonstrou que modelos aparentemente simplificados, podem apresentar um comportamento complexo. Por exemplo, a quebra espontânea de simetria que ocorre em um sistema quando, seus constituintes possuem a capacidade de abandonar a sua própria simetria, muitas vezes gerada por uma força ou campo, e deixam emergir uma nova simetria. A unificação dessas abordagens clássicas ocorreu posteriormente através da teoria proposta por Ginzburg-Landau que, embora tenha deixado muitos aspectos da teoria sem o detalhamento desejável, conseguiu definir completamente, a nível qualitativo, o comportamento de escala.

Neste capítulo, expomos nossos objetivos e a motivação em realizar este trabalho. Além disso, destacamos alguns conceitos sobre mecânica estatística de sistemas macroscópicos e sobre as transições de fases.

No capítulo 2, fazemos um breve estudo sobre fenômenos críticos, destacamos algumas definições mais gerais, definimos os expoentes críticos e relações termodinâmicas importantes. Exploramos dois tipos mais gerais de transições de fases e mencionamos também o que seria uma classe de universalidade. Além disso, revisamos alguns conceitos que tratam de simulações computacionais.

No capítulo 3 destacamos algumas características gerais do modelo  $XY$  e apresentamos o hamiltoniano utilizado neste trabalho. Apresentamos o método de integração utilizado na solução das equações de movimento hamiltonianas e salientamos a importância do operador exponencial, quais principais características do método que o torna eficiente e adequado para ser aplicado nos mais variados sistemas. Além disso, mostramos como o operador é usado como um integrador simplético na dinâmica de Hamilton. Explicamos uma maneira recursiva de construir aproximantes de ordem superior, ou seja, a decomposição fractal. E o emprego desse aproximante de ordem superior num modelo físico, particularmente no modelo  $XY$ . Além disso, discutimos o procedimento de dinâmica crítica em tempos curtos e fazemos referência a

outras técnicas utilizadas em nossas análises.

No capítulo 4 apresentamos os resultados de nossa investigação e análise com respeito ao modelo  $XY$  definido em uma rede cúbica simples.

O último capítulo 5, é reservado para nossas considerações sobre o trabalho e nossas perspectivas futuras.

# Transições de Fases e Fenômenos Críticos

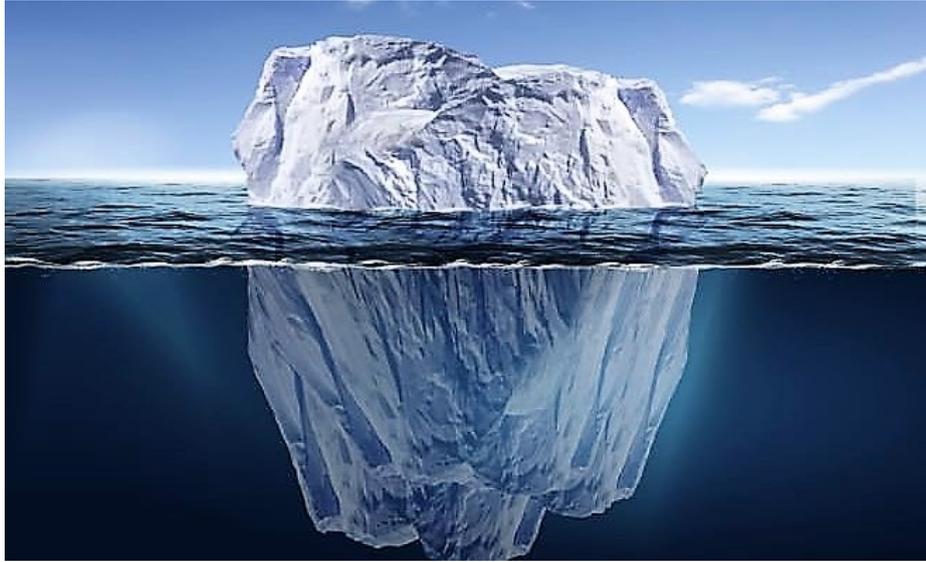
## 2.1 Transições de Fases

Os parâmetros externos a um sistema físico, ou seja, aqueles associados ao ambiente no qual o sistema se encontra, influenciam a organização interna de seus constituintes. Exemplos de tais parâmetros são a temperatura e a pressão e suas variações podem alterar temporariamente ou permanentemente o estado do sistema. Em alguns casos, há uma completa reorganização interna da matéria que se reflete numa drástica alteração das propriedades macroscópicas do sistema. A esta mudança brusca de estados do sistema denominamos de uma transição de fases. O estudo de mudanças de estado da matéria é um dos temas de maior relevância em Física. Particularmente, um dos grandes desafios da Mecânica Estatística é explicar as transições de fases a partir de modelos microscópicos.

Uma das substâncias que nos é mais familiar e na qual as transições de fases são facilmente observadas é a água. A figura 2.1 mostra as diversas fases da substância água, mar na fase líquida, o gelo na fase sólida, e as nuvens, na forma de vapor d'água, todas coexistindo em um único ambiente. Como sabemos, a água no estado líquido pode vaporizar-se, ou solidificar-se, o gelo pode sublimar-se, o vapor liquefazer-se. A substância pode mudar de uma fase para outra quando um ou mais parâmetros externos que controlam o estado do sistema como, a temperatura e a pressão, são alterados [20, 21].

Na figura 2.2 apresentamos, um diagrama de fases da água no plano pressão *versus* temperatura. O diagrama de fases é uma maneira mais quantitativa de resumir as observações feitas anteriormente. No diagrama é ilustrado o comportamento da água como uma função da pressão  $P$  e da temperatura  $T$ . Os parâmetros  $P$  e  $T$  nesta figura são internos ao sistema, pois são a temperatura e a pressão nas quais o sistema se encontra. Porém, esses parâmetros internos podem ser controlados externamente, por exemplo, podemos trocar o sistema de ambiente, colocá-lo a uma temperatura mais alta, ou, a uma pressão maior, nestes casos, o estado do sistema será modificado. Particularmente neste diagrama os parâmetros internos e externos são iguais, uma vez que o sistema encontra-se em equilíbrio.

As linhas no diagrama representam as fronteiras das fases e são denominadas linhas de

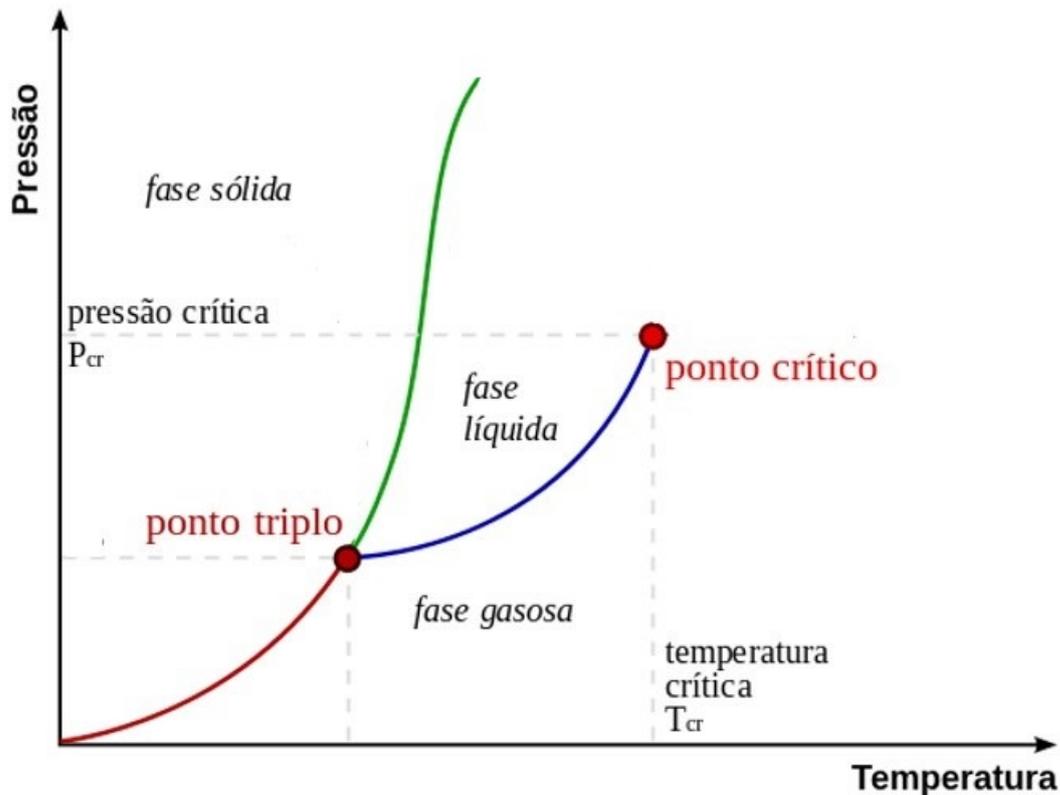


**Figura 2.1** Diversas fases da substância água, mar na fase líquida, o gelo na fase sólida, e as nuvens, na forma de gasosa. Figura adaptada da referência [22].

coexistência. Sobre elas, duas fases da substância coexistem em equilíbrio termodinâmico. Isto é, uma dada quantidade de água pode estar no estado sólido ou líquido, por exemplo. Ou ainda, uma porção no estado sólido e o restante no líquido. As interseções dessas linhas de coexistência demarcam os pontos nos quais múltiplas fases coexistem. Em destaque, o ponto triplo da água no qual as três fases da substância coexistem em equilíbrio estável.

A coexistência de fases na água é um dos aspectos que caracterizam as transições de **primeira ordem**. Nestas transições, o comprimento de correlação é finito, ou seja, as flutuações que ocorrem no comportamento das partículas são praticamente descorrelacionadas se as partículas estão distantes entre si. E por isso, duas fases da substância podem coexistir em equilíbrio. A fase na qual o sistema se encontra é caracterizada por um parâmetro de ordem. Simplesmente, uma grandeza convenientemente definida que é diferente de zero apenas na fase de interesse e zero em todas as outras fases do sistema. Diferentes sistemas demandam distintos parâmetros de ordem. Para a água, por exemplo, um parâmetro de ordem conveniente é alguma função de sua densidade. Pois a densidade nas fases líquida, sólida e gasosa assume valores bem distintos. O parâmetro de ordem pode ser um grandeza escalar, por exemplo, uma diferença de densidade entre as fases. Mas também, pode ser um vetor, como é o caso da magnetização para certos sistemas magnéticos. Nas transições de primeira ordem, o parâmetro de ordem vai a zero descontinuamente.

Salientamos que o ramo da esquerda na figura 2.2 separa a fase sólida da líquida se estende indefinidamente. Já o ramo a direita da figura possui um ponto crítico terminal ( $T_c, P_c$ ). Neste



**Figura 2.2** Diagrama de fases simplificado da água. As linhas indicam onde ocorrem a transição entre os estados da substância. Em destaque, o ponto triplo onde ocorre a coexistência das três fases e o ponto crítico. Figura adaptada da referência [23].

ponto, a substância apresenta um comportamento peculiar caracterizado por grandes flutuações e não é possível afirmar em que fase a substância se encontra. Neste ponto ocorre uma transição de fases de segunda ordem e os comportamentos no entorno deste ponto são chamados de **fenômenos críticos**.

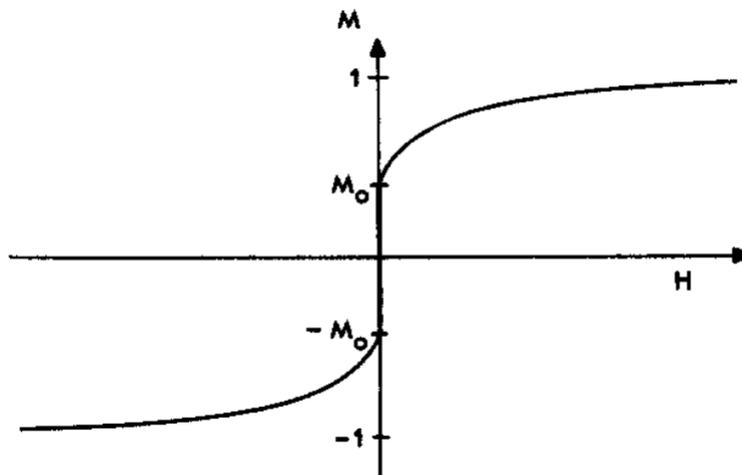
Nas transições de segunda ordem o comprimento de correlação é infinito e isto obriga todo o sistema evoluir para uma única fase, não pode haver coexistência de fases. Próximo ao ponto crítico, as flutuações espontâneas do sistema estão fortemente correlacionadas tanto espacial quanto temporalmente. Numa transição de segunda ordem o parâmetro de ordem vai a zero continuamente.

Embora a água seja uma substância familiar, seu comportamento termodinâmico é bastante sofisticado e de difícil modelagem [24].

Assim, vamos considerar um sistema mais simples para introduzir noções sobre os fenôme-

nos críticos, ou seja, um ferromagneto uniaxial.

Considere uma barra de ferro, na temperatura ambiente, imersa em um campo magnético de intensidade  $H$ , orientado paralelo ao eixo da barra. Devido à ação do campo magnético a barra magnetiza-se quase completamente se o campo é intenso o bastante. Em unidades apropriadas, podemos dizer que sua magnetização,  $M$ , é  $+1$ . Se, agora,  $H$  é reduzido a zero, observamos que  $M$  diminui, porém, não para zero. Em vez disso, em  $H = 0$  existe uma magnetização residual  $M_0$ , dita espontânea. Por outro lado, se repetirmos o experimento com o campo magnético orientado no sentido inverso, a magnetização torna-se  $-1$  e se aproxima de  $-M_0$  a medida que a intensidade do campo vai a zero. A curva  $M(H)$  apresenta uma descontinuidade para  $H = 0$  à temperatura ambiente. A função  $M(H)$  deve apresentar o comportamento esboçado na figura 2.3.

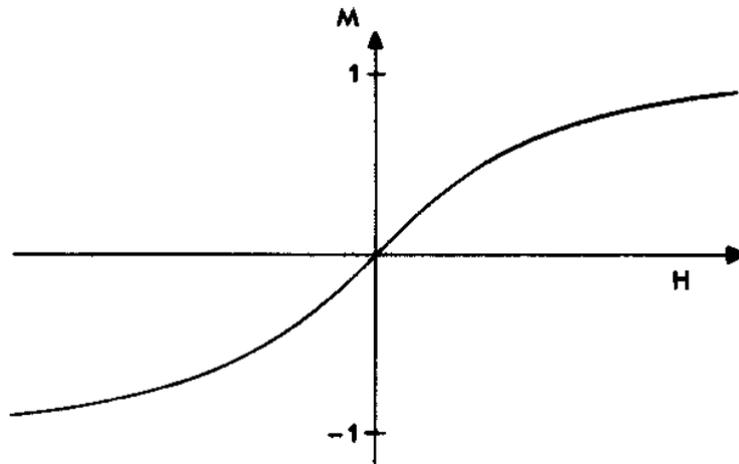


**Figura 2.3** Comportamento da magnetização em função do campo magnético, em temperatura ambiente. Figura adaptada da referência [25].

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

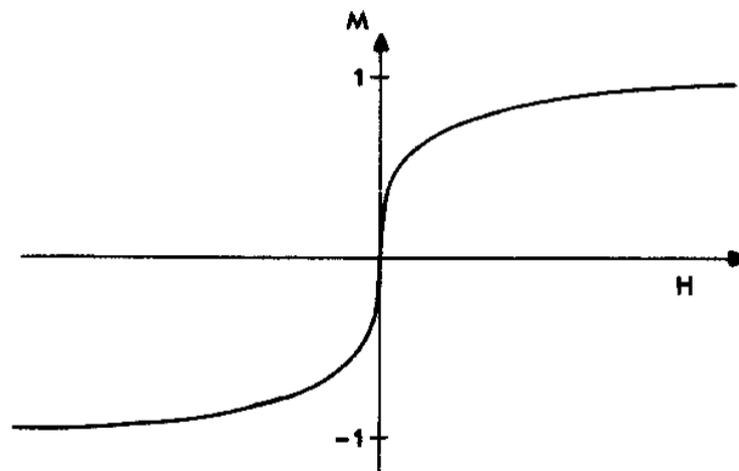
Considere agora, que aumentamos a temperatura para um valor muito acima da temperatura ambiente e repetimos o experimento anteriormente descrito. Neste caso, observamos que  $M(H)$  apresenta o comportamento mostrado na figura 2.4. Em altas temperaturas a magnetização é nula a campo nulo.

Note que  $M(H)$  é contínua e tem derivada contínua em  $H = 0$ , ou seja, é analítica neste ponto.



**Figura 2.4** Comportamento da magnetização em função do campo magnético, para altas temperaturas. Figura adaptada da referência [25].

Portanto, deve existir um valor crítico da temperatura,  $T_c$ , a partir do qual a transição deixa de ocorrer. Em  $T_c$ , verificamos que  $M_0$  desaparece e  $M(H)$  é contínua em  $H = 0$ , porém sua derivada é infinita neste ponto. Ver figura 2.5.

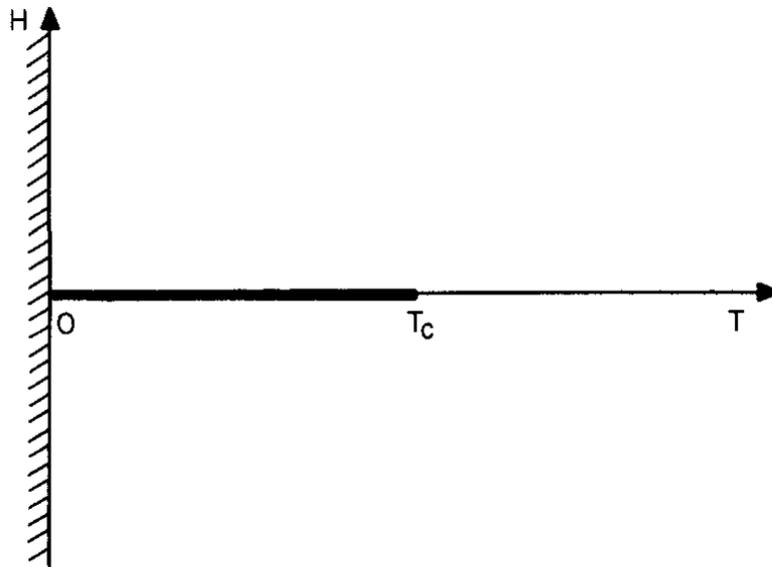


**Figura 2.5** Comportamento da magnetização em função do campo magnético, na temperatura crítica. Figura adaptada da referência [25].

O diagrama de fases 2.6 representa, um resumo do comportamento da  $M(T, H)$  para os estados observados anteriormente no plano temperatura *versus* campo magnético. A magnetização é uma função contínua em todos os pontos do plano  $T \times H$ , exceto sobre a linha escura que estende-se  $(0, 0)$  até um ponto terminal  $(T_c, 0)$ . Sobre a linha de coexistência de fases, a

magnetização pode assumir tanto valores positivos quanto negativos. Quando  $T > T_c$ ,  $M_0 = 0$  e o sistema encontra-se na fase paramagnética. No entanto, quando o valor da temperatura é crítico  $T = T_c$ , o sistema possui um comportamento peculiar e apresenta-se numa fase crítica.

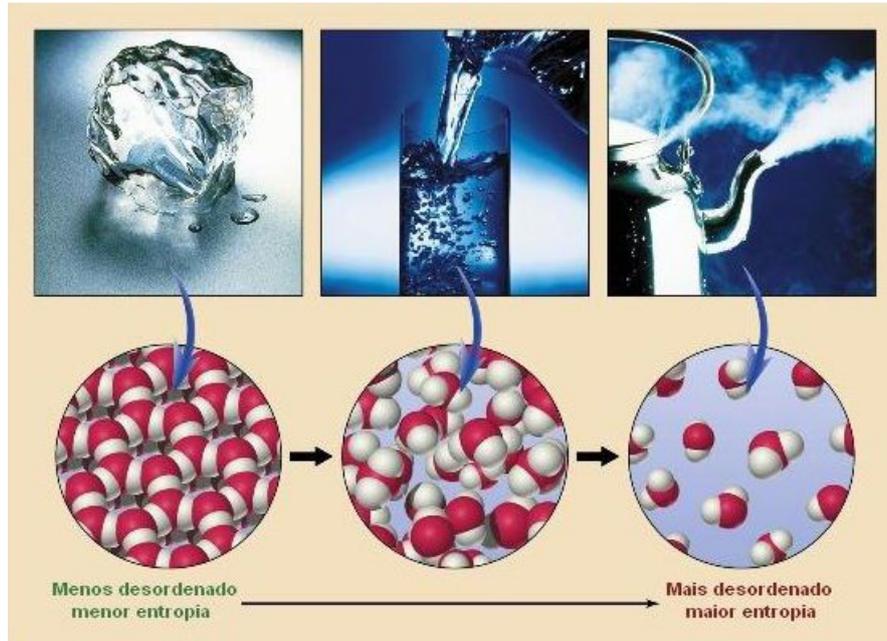
O corte é uma linha de transições de fase. Seu ponto final  $(T_c, 0)$  é conhecido como ponto crítico. Como dito acima, a função  $M(H, T)$  é singular neste ponto, e um dos aspectos mais fascinantes da mecânica estatística é o estudo desse comportamento singular próximo ao ponto crítico



**Figura 2.6** O diagrama de fases do ferromagneto num plano temperatura  $T$  versus campo magnético  $H$ . No ponto  $T = T_c$  o sistema apresenta um comportamento totalmente singular de qualquer outro ponto e está na fase crítica. Antes do ponto crítico temos uma fase e após ele, outra fase. Figura adaptada da referência [25].

Como mostra a figura 2.7, no gelo as moléculas estão espacialmente arranjadas, há uma estrutura ordenada e que se repete. Já na fase líquida, as moléculas estão desorganizadas, mas, existe uma certa ordem orientacional. E na fase gasosa, percebemos as moléculas bastantes desordenadas. É interessante observar que quanto mais desordenado é o arranjo, maior é o grau de simetria. Por exemplo, no sólido, além da simetria de translação, temos uma simetria de rotação discreta, ou seja, deveríamos girar de ângulos bem específicos para observar o mesmo retrato do sistema. Se rotacionarmos a figura de um ângulo aleatório veremos algo muito diferente do original. Na fase líquida temos um estado intermediário pois ele exibe simetria de rotação contínua e nenhuma simetria de translação. Por exemplo, quando giramos um líquido, em torno de uma molécula é basicamente simétrico, por rotação, no entanto, o líquido perde

a ordem translacional, se olharmos para uma molécula e nos afastarmos dela observaremos um sistema desordenado. E na fase gasosa, o grau de desordem é o mesmo, independente de rodarmos ou transladarmos a figura. Quanto mais desordenado um sistema mais simétrico ele parece [20].



**Figura 2.7** Ilustração da estrutura microscópica da substância água nas diversas fases. Figura adaptada da referência [26].

Próximo ao ponto crítico o sistema exibe um comportamento singular, caracterizado pelas flutuações de suas propriedades termodinâmicas.

Como vimos, um ferromagneto uniaxial apresenta uma magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica  $T_c$ , também chamada de temperatura de Curie. Um parâmetro de ordem conveniente para caracterizar a fase ferromagnética é justamente a densidade de magnetização espontânea

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle, \quad (2.1)$$

onde  $\langle \dots \rangle$ , representa uma média no ensemble,  $N$  o número de partículas do sistema e  $S_i$  as componentes dos momentos magnéticos em unidades de  $\hbar/g_s$ , em que  $g_s \approx 2$  é o fator de giro, e representa uma correção dimensional.

As flutuações das propriedades termodinâmicas de um sistema tornam-se particularmente importantes na vizinhança de um ponto crítico. É, portanto, necessário quantificar como tais

flutuações estão correlacionadas espacialmente. Uma grandeza útil para este fim é a função de correlação,  $g(r)$ , uma medida de como as flutuações locais em uma parte do sistema afeta flutuações em outra parte. Tipicamente, tais influências ocorrem sobre uma distância característica  $\xi$ , denominada como comprimento de correlação [27, 28]. A função de correlação é definida por

$$g(r) = \langle [s(r) - \langle s(r) \rangle][s(0) - \langle s(0) \rangle] \rangle \quad (2.2)$$

$$\propto e^{-r/\xi}, \quad (2.3)$$

onde assumimos um sistema isotrópico e translacionalmente invariante.

Pode-se interpretar o comprimento de correlação,  $\xi(T)$ , como o raio de uma esfera que limita o alcance das flutuações espontâneas que ocorre próximo ao centro da esfera. Ou seja, partículas separadas por distâncias  $r \gg \xi(T)$  estão descorrelacionadas. O comportamento da função de correlação para longas distâncias é dado por

$$g(r) \sim \frac{1}{\xi^{d-2}} \frac{e^{-r/\xi(T)}}{(r/\xi)^{(d-1)/2}} \quad (r \gg \xi), \quad (2.4)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema.

Observa-se também que exatamente em  $T = T_c$ , a função de correlação comporta-se na forma de uma lei de potência

$$g(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (2.5)$$

onde introduzimos o expoente crítico  $\eta$ , também chamado de dimensão anômala.

Na região crítica o comprimento de correlação também exhibe um comportamento tipo lei de potência

$$\xi_{\pm}(T, H = 0) \sim |t|^{v_{\pm}}, \quad (2.6)$$

onde,  $t = |T - T_c|/T_c$  e  $v = v_{\pm}$  é um expoente crítico. O comprimento de correlação diverge quando  $T \rightarrow T_c$ , sendo infinito no ponto crítico.

Não só o comprimento de correlação diverge, na região crítica, as singularidades nas funções termodinâmicas podem ser descritas por leis de potências com expoentes não-inteiros. Na próxima seção alguns desses expoentes serão introduzidos.

Os fenômenos críticos possuem entre outras características a de apresentar invariância por

escala. Além disso, vários sistemas podem ser agrupados numa mesma classe de **universalidade**. Isto significa que sistemas físicos distintos possuem comportamentos críticos idênticos. [18]

## 2.2 Fenômenos Críticos

Nas proximidades do ponto crítico, diferentes sistemas podem comportar-se de modo semelhante, por exemplo, a transição líquido/gás e a transição ferromagnética/paramagnética, as leis de potências características desses sistemas são definidas por um conjunto de expoentes críticos universais. Estes expoentes são determinantes para descrever, qualitativamente, o comportamento crítico de um dado sistema e representam a não-analiticidade de algumas funções termodinâmicas. Como resultado, sistemas que apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos classificam-se em uma mesma **classe de universalidade**. Os expoentes críticos geralmente utilizados são definidos abaixo

O que caracteriza uma determinada classe de universalidade é um conjunto muito pequeno de propriedades e simetrias gerais dos sistemas [29]. A classe de universalidade independe da natureza das interações e dos elementos constituintes do sistema. Caracteriza-se apenas pelo alcance das interações microscópicas, se estas são de longo ou curto alcance, pela dimensão espacial do sistema e o número de componentes do parâmetro de ordem. Em alguns sistemas, a presença de impurezas ou defeitos aleatórios pode afetar a classe de universalidade [30].

Se um sistema físico pertence a uma classe de universalidade, ele deve possuir o mesmo conjunto de expoentes críticos de qualquer outro membro da classe.

Por definição, O parâmetro de ordem  $M$  de um sistema é uma função termodinâmica que é diferente em cada fase, por isso, pode ser utilizado para identificá-las. No limite em que o campo de ordenamento  $H \rightarrow 0$ , a magnetização possui um valor finito  $M = M_0$ , e além disso, são válidas as seguintes condições:

$$M(T, H \rightarrow 0^+) \sim \begin{cases} 0 & \text{se } T \geq T_c, \\ |t|^\beta & \text{se } T < T_c, \end{cases} \quad (2.7)$$

onde,  $t = (T - T_c)/T_c$  expressa a distância à temperatura crítica. E o expoente crítico  $\beta$  caracteriza o comportamento do parâmetro de ordem na região crítica.

Na região crítica o sistema é fortemente correlacionado e pode dar respostas colossais se perturbado por estímulos externos. Numa transição líquido-gás, por exemplo, a compressibili-

dade isotérmica,

$$k_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial P} \right|_T, \quad (2.8)$$

diverge no ponto crítico.

A compressibilidade é um tipo de susceptibilidade. A susceptibilidade de um sistema (ou seja, como o parâmetro de ordem responde a uma variação de seu campo conjugado) e seu comportamento crítico é caracterizado por um outro expoente crítico  $\gamma$ , ou seja

$$\chi_{\pm}(T, H \rightarrow 0^+) = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} \sim |t|^{-\gamma_{\pm}}. \quad (2.9)$$

O expoente  $\gamma_+$  e o  $\gamma_-$  descrevem as divergências de cada lado da transição de fases.

De modo semelhante podemos caracterizar a capacidade térmica de um corpo, e suas singularidades a campo nulo por um outro expoente crítico  $\alpha$ , pela seguinte expressão

$$C_{\pm} = \frac{\partial E}{\partial T} \sim |t|^{-\alpha_{\pm}}, \quad (2.10)$$

onde  $E$  é a energia interna do sistema.

A estimativa dos expoentes críticos  $\alpha, \gamma, \beta$  assim, como também, o comprimento de correlação podem ser obtidos através da utilização de métodos de escalonamento de tamanho finito, como o do grupo de renormalização fenomenológica [31] que utiliza como fonte os dados obtidos por simulações Monte Carlo. Ou, como veremos mais adiante pelo método da dinâmica crítica em tempos curtos.

## Materiais e Métodos

### 3.1 Modelo XY

Os modelos empregados em mecânica estatística, comumente, são uma descrição *efetiva* de determinados fenômenos. Ou seja, eles são definidos em termos de variáveis dinâmicas que englobam apenas os graus de liberdade que efetivamente contribuem para o fenômeno de interesse. Este é o caso bem conhecido do modelo de Ising para o ferromagnetismo [1]. Embora, em última instância, o magnetismo resulte das propriedades dos elétrons, estes não estão presentes na formulação do modelo de Ising. Apenas o grau de liberdade associado ao momento magnético é incluído e o modelo é definido em uma *rede* rígida.

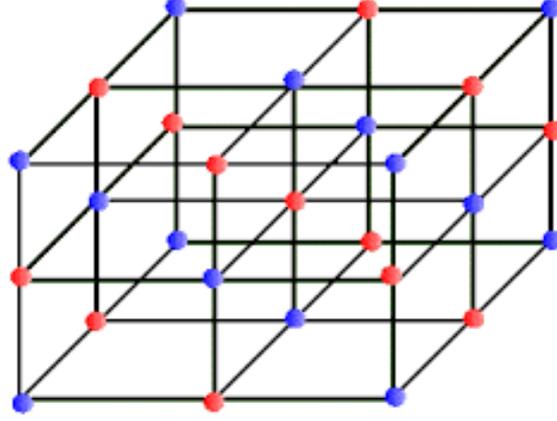
Uma rede é um conjunto finito de pontos ligados por linhas. Nas redes regulares, os pontos são igualmente espaçados e elas estão completamente definidas por sua *unidade geradora*. Nos referimos aos pontos por *sítios* e a linha conectando dois sítios de uma *ligação*. Os comprimentos dessas linhas (os lados da unidade geradora) são os *parâmetros de rede* da rede considerada. Os sítios da rede podem ser rotulados atribuindo-se a cada um deles um índice  $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ , onde  $N$  é número de sítios da rede.

Dada a rede, associamos a cada sítio uma variável dinâmica. Uma configuração é a atribuição de um valor para cada uma dessas variáveis. Para concluir a definição do modelo, especificamos a energia de configuração.

Aqui, vamos trabalhar com um modelo XY definido numa rede cúbica simples para a qual a unidade geradora é um cubo de lado  $a$  e volume  $V_0 = a^3$ . O comprimento de uma aresta da rede é  $La$ , e o volume total da rede  $V = (La)^3$ , em função do volume inicial e do comprimento  $L$  é igual a  $V = L^3 V_0$ . O número de sítios incluídos no volume da rede é portanto,  $N = V/V_0$ . Uma ilustração de uma rede cúbica simples pode ser vista na figura 3.1.

Os vizinhos mais próximos a um sítio são aqueles conectados por uma ligação. Se os sítios da fronteira forem excluídos, cada sítio de uma rede  $d$ -dimensional possui  $2d$  primeiros vizinhos. Nesta rede, em particular, cada sítio possui seis vizinhos mais próximos ou primeiros vizinhos.

Como a rede é finita, o número de primeiros vizinhos de um sítio na fronteira é diferente do



**Figura 3.1** Rede cúbica simples com os  $N$  sítios, localizados nos vértices dos cubos.

número de vizinhos de um sítio no interior da rede, isto quebra a simetria de translação. Para restaurar a simetria adotamos condições de contorno periódicas, isto é, ligações são inseridas para conectar os sítios nas fronteiras de lados opostos.

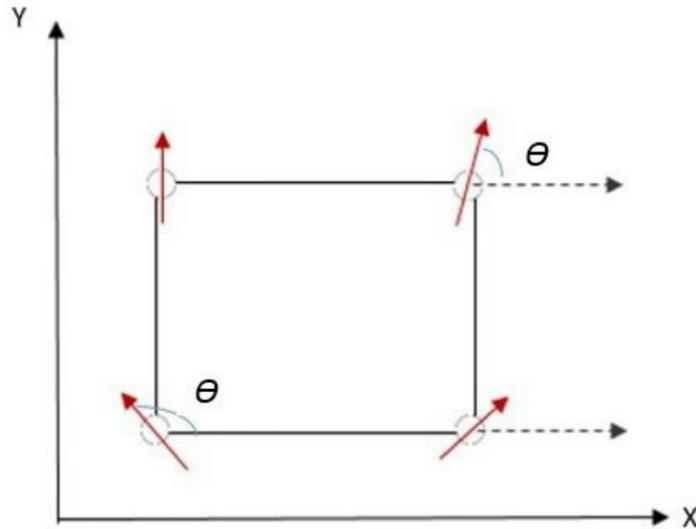
Associamos a cada sítio,  $i$ , da rede um rotor planar clássico dotado de momento magnético  $\vec{S}_i$  e momento de inércia  $I$ . Vamos adotar um sistema de unidades onde tanto  $I$  quanto o módulo do momento magnético são unitários. É, então, conveniente escrever  $\vec{S}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$ , sendo  $\theta_i$  a direção que o  $i$ -ésimo rotor faz com a direção do eixo  $x$ . Os rotores podem apenas rotacionar em torno do eixo  $z$ , no plano  $x \times y$  como mostra a figura 3.2, vem daí o nome  $XY$  para o modelo. Os ângulos  $\theta_i \in [0, 2\pi]$  [32].

Quando valores são atribuídos para cada  $\theta_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , da rede, dizemos que o sistema se encontra em um particular microestado ou em uma dada configuração. A energia de configuração desse sistema de rotores é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{XY} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde  $J > 0$  é a constante de *exchange* e fixa a escala de energia. O símbolo  $\langle i, j \rangle$  indica que  $i$  e  $j$  são primeiros vizinhos. Vamos adotar uma unidade para energia na qual  $J = 1$ , ou seja, iremos medir energia em unidades de  $J$ .

É importante enfatizar, que os rotores possuem apenas energia cinética de rotação e não de translação. Pois, os rotores estão localizados em seus respectivos sítios e eles conseguem girar



**Figura 3.2** Representação esquemática da rede. As setas indicam a orientação dos rotadores que podem rodar apenas em torno do eixo  $z$ .  $\theta$  é o ângulo com o eixo  $x$ .

apenas no plano é perpendicular a uma dada direção  $z$ .

Para  $J > 0$  o estado fundamental do modelo XY é ferromagnético. Sua energia é mínima quando os momentos magnéticos apontam na mesma direção.

O modelo XY é bastante estudado no contexto da mecânica estatística, clássica e quântica. Este modelo permite compreender o comportamento de diversos sistemas, por exemplo, sociais e supercondutores [33, 34], que podem ter sua dinâmica modelada numa representação de um modelo do tipo XY.

### 3.1.1 Modelo XY em Duas Dimensões

Embora o modelo XY em duas dimensões com interações de curto alcance, em baixas temperaturas, apresente um comportamento mais ordenado ele preserva a simetria de rotação. De acordo com teorema de Mermin-Wagner [35], modelos que apresentam simetrias contínuas, em duas dimensões com interações de curto alcance, não podem ter sua simetria quebrada espontaneamente em nenhuma temperatura finita e, como consequência, não há transição de fases convencional. Como a simetria é preservada, em baixas temperaturas o sistema não apresenta ordem de longo alcance, por isso, ocorre um outro tipo de transição de fases. Ao contrário do modelo de Ising, por exemplo, que possui ordem de longo alcance, em baixas temperaturas.

Conforme cedemos energia ao sistema, a partir de seu estado fundamental, a temperatura

aumenta a medida que algumas excitações ocorrem no sistema. Ou seja, vórtices são criados, por causa da formação de aglomerados de spins que se orientam aleatoriamente em certa direção. O momento de spin de cada partícula desses aglomerados dá origem ao momento angular dos vórtices. Esses vórtices estão ligados e interagem entre si. Ao cedermos mais energia ao sistema, parte dessa energia é destinada à formação de vórtices e antivórtices, criados aos pares e que possuem uma energia de interação entre eles. A medida que aumentamos a temperatura do sistema, esses pares de vórtices-antivórtices se afastam, aparecem e desaparecem. Outra consequência do aumento da temperatura, é que a densidade de vórtices-antivórtices aumenta. Eles, passam a se mover na rede e mudam seu posicionamento. Se continuarmos a aumentar a temperatura, acima de um certo valor, os pares de vórtices-antivórtices se separam e os defeitos passam a mover-se independentemente. A temperatura onde ocorre essa transição é denominada de temperatura de Kosterlitz e Thouless [36].

O parâmetro de ordem para o modelo descrito anteriormente, em redes bidimensionais infinitas, é nulo para qualquer valor de temperatura finito, ou seja, o sistema não apresenta ordem de longo alcance. Porém, analisando o comportamento da função de correlação para altas e baixas temperaturas Kosterlitz e Thouless [37], e independentemente Berenzinskii [38], perceberam que para uma determinada temperatura haveria uma transição de fases. Um dos motivos que poderiam causar essa transição seriam as excitações topológicas estáveis formadas pelos pares de vórtices-antivórtices. Essa transição, é denominada como Berenzinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) e apresenta propriedades muito distintas das transições de segunda ou primeira ordem. Em baixas temperaturas os defeitos topológicos estão ligados e em altas temperaturas eles estão livres.

### 3.1.2 Modelo XY Tridimensional

Existem muitos sistemas que podem ser estudados através de um modelo XY tridimensional. A exemplo disso, Matsuda [39] utilizou este modelo em uma descrição quântica de spins na rede, o Hélio líquido  ${}^4\text{He}$  superfluido. Esta modelagem permitiu a predição das propriedades na transição de fases superfluido-líquido normal do  ${}^4\text{He}$ . Podemos destacar a existência de muitos outros sistemas que são bem descritos pelo modelo XY tridimensional como é o caso, de alguns materiais magnéticos (ferromagnéticos, antiferromagnéticos e de íons Terras Raras [40] [41] [34]). Por outro lado, o modelo XY clássico é bastante interessante, por ser o modelo mais simples da mecânica estatística com graus de liberdade contínuo.

O modelo XY tridimensional em uma rede cúbica simples, entre outras características exhibe uma transição de fases de segunda ordem numa temperatura finita [34]. O hamiltoniano (3.2)

não possui uma dinâmica própria, é necessário um termo associado à energia cinética para o sistema obedecer a uma dinâmica hamiltoniana.

Esse modelo é, geralmente, estudado com a utilização da teoria dos ensembles ou simulações estocásticas, como por exemplo, simulações numéricas por algoritmos Monte Carlo. Estas abordagens permitem calcular algumas grandezas relevantes para análise do sistema e que descrevem completamente seu comportamento macroscópico. É possível, por exemplo, calcular grandezas tais quais a magnetização, susceptibilidade, capacidade térmica entre outras variáveis de estado por esta técnica.

Na região crítica, como foi apresentado na seção anterior, o comportamento crítico é identificado por um conjunto de expoentes críticos, estáticos e dinâmicos, que caracterizam o sistema. Embora não seja conhecida uma solução exata para o modelo  $XY$  em três dimensões, suas propriedades críticas são bem conhecidas na literatura com boa precisão. Recentemente, uma estimativa supostamente exata foi obtida para expoente dinâmico  $z$ , com a utilização de técnicas de teorias de campos [42].

Como definido no capítulo 2, a universalidade de um sistema é determinada, entre outros fatores, pelas simetrias do parâmetro de ordem. Logo, podemos identificar que os modelos Ising,  $XY$  e Heisenberg estão em classes de universalidade distintas. O modelo Ising possui apenas uma componente do parâmetro de ordem, o  $XY$  possui duas e o Heisenberg três. Numa rede tridimensional, estes três modelos apresentam uma transição de fases crítica, em uma temperatura finita.

Quando um termo de energia cinética é adicionado ao hamiltoniano (3.1), o conjunto de rotores passam a obedecer uma dinâmica hamiltoniana. O hamiltoniano do sistema levando em consideração a energia cinética dos rotores é escrito como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{XY} + \sum_i \frac{p_i^2}{2}, \quad (3.2)$$

onde  $p_i$  é o momento conjugado à coordenada  $\theta_i$ . Assim, o sistema evolui segundo as equações de movimento hamiltonianas. Descreveremos essa abordagem com mais detalhes na próxima seção.

### 3.2 Algoritmo de Integração de Equações Diferenciais

A simulação de um sistema via dinâmica molecular implica em resolver as equações clássicas de movimento. Porém, comumente, a escala de tempo dos fenômenos nos quais estamos interessados é muito mais longa que o intervalo de tempo durante o qual conseguimos acompanhar a evolução do sistema via a integração numérica das equações por métodos elementares. É necessário um grande número de etapas de integração para se conseguir observar a evolução dinâmica do sistema durante o tempo de duração do fenômeno que queremos descrever. A enorme quantidade de etapas, por sua vez, amplifica os erros de truncamento dos métodos de diferenças finitas. Podemos minimizar consideravelmente estes erros reduzindo o tamanho do passo de tempo de integração. No entanto, um passo de tempo muito pequeno contribui com o aumento do número de etapas de integração e o consequente aumento do custo computacional. Um ponto importante é o quanto conseguimos manter a precisão do método de integração para descrever coerentemente as propriedades macroscópicas.

A limitação de recursos computacionais e a necessidade de conhecer a evolução das equações de movimento numa escala de tempo suficiente para observar os fenômenos evidencia a relevância que a velocidade do algoritmo de integração possui. O número total de etapas do processo é reduzido se o algoritmo utiliza o maior passo de tempo possível e mantém a precisão numérica para intervalos de tempo grandes. No entanto, mesmo que a velocidade de um passo de integração seja mais complexo e, conseqüentemente, mais lento, ele pode permitir a utilização de intervalos de tempo muito maiores, gerando um algoritmo mais rápido sem maiores erros de truncamento. Outro critério para um bom método de integração é que ele reproduza as leis de conservação e propriedades das equações de movimento clássicas. De particular importância é que ele conserve a energia e o volume do espaço de fase, e que seja reversível temporalmente. Estas propriedades estão intimamente relacionados com a estabilidade do algoritmo e a precisão que ele apresenta para intervalos grandes de tempo.

Com o surgimento dos integradores simpléticos, ou seja, subclasse de integradores geométricos, que por definição, são transformações canônicas, para a integração das equações acopladas de movimento foi possível acelerar o tempo total de simulação e assim, conseguir diminuir os erros causados durante o processo. Estes algoritmos numéricos são baseados em decomposições de operadores exponenciais. Eles são reversíveis no tempo, conservam exatamente o volume do espaço de fase. Ou seja, o método permite gerar uma trajetória no espaço de fase, com a propriedade de que a probabilidade de uma determinada configuração ser representada por um ponto nesta trajetória dependa apenas do seu peso probabilístico. Como consequência, o erro na energia total do sistema é limitado. Isto é, o algoritmo é simplético por construção. Es-

tamos interessados em um sistema de partículas interagentes descrito pelo hamiltoniano (3.2). É conveniente escrevê-lo em termos do ângulo,  $\theta_i$  que o  $i$ -ésimo rotor faz com o eixo  $x$ . Assim, o hamiltoniano do sistema é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} - J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (3.3)$$

onde  $p_i$  é o momento conjugado à coordenada  $\theta_i$  e  $N$  é o número de rotores.

As equações de movimento são obtidas a partir das equações de Hamilton

$$\dot{\theta}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad (3.4)$$

$$-\dot{p}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_i} \quad (3.5)$$

A evolução temporal do sistema é investigada integrando-se as equações de movimento para obter  $p_i(t)$  e  $\theta_i(t)$ , para  $i = 1, 2, \dots, N$ . A evolução dinâmica de qualquer outra grandeza física de interesse pode ser também investigada expressando-a em termos dos  $\theta_i$  e dos  $p_i$ .

Para o método de integração que aplicamos nesta dissertação, devemos reescrever as equações de movimento em termos de um operador de Liouville. Ou seja, as de equações acima, são equivalentes a

$$\frac{dy}{dt} = \hat{L}y(t), \quad (3.6)$$

onde  $y(t) = \{\theta_i(t), p_i(t)\}$  denota uma configuração do sistema, e  $\hat{L}$  é o operador Liouville definido por

$$\hat{L} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \equiv \hat{A} + \hat{B}. \quad (3.7)$$

Onde introduzimos os operadores não-comutantes

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \quad (3.8)$$

e

$$\hat{B} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_i} \frac{\partial}{\partial p_i}. \quad (3.9)$$

Para o hamiltoniano (3.3), temos

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = p_i \quad (3.10)$$

e

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta_i} = J \sum_{j(i)} \sin(\theta_i - \theta_j) \equiv \alpha_i, \quad (3.11)$$

onde  $j(i)$  indica os primeiros vizinhos do sítio  $i$ .

Em termos destes operadores a equação (3.6) torna-se

$$\frac{dy}{dt} = (\hat{A} + \hat{B})y(t), \quad (3.12)$$

cuja solução formal é expressa como

$$y(t + \Delta) = e^{(\hat{A} + \hat{B})\Delta} y(t), \quad (3.13)$$

em que  $t$  é um instante de tempo qualquer e  $\Delta$  representa um passo de tempo.

Para um sistema de equações arbitrárias, envolvendo muitos termos ( $N$  grande) a operação  $\exp[(A + B)\Delta]y(t)$  não é facilmente realizada. Porém, cada operador é muito mais facilmente tratado, separadamente. De fato,

$$\begin{aligned} e^{A\Delta} y &= e^{\Delta \sum_{i=1}^N p_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}} \{ \theta_j, p_j \} \\ &= e^{p_1 \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_1}} e^{p_2 \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_2}} \dots e^{p_N \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_N}} (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N, p_1, p_2, \dots, p_N) \\ &= \left( e^{p_1 \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_1}} \theta_1, e^{p_2 \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_2}} \theta_2 \dots e^{p_N \Delta \frac{\partial}{\partial \theta_N}} \theta_N, p_1, p_2, \dots, p_N \right) \\ &= \left( \sum_{n=0}^{\infty} p_1^n \frac{\Delta^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \theta_1^n} \theta_1, \dots, \sum_{n=0}^{\infty} p_N^n \frac{\Delta^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \theta_N^n} \theta_N, p_1, p_2, \dots, p_N \right) \\ &= (\theta_1 + p_1 \Delta, \theta_2 + p_2 \Delta, \dots, \theta_N + p_N \Delta, p_1, p_2, \dots, p_N) \\ &= \{ \theta_i + p_i \Delta, p_i \}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Da mesma forma,

$$e^{B\Delta} y = e^{B\Delta} \{ \theta_i, p_i \} = \{ \theta_i, p_i + \alpha_i \Delta \}. \quad (3.15)$$

As equações (3.14) e (3.15) representam as atualizações das posições e dos momentos, respectivamente. Note, todavia, que em geral os operadores exponenciais não comutam entre si.

Portanto,

$$e^{(\hat{A}+\hat{B})\Delta} \neq e^{\hat{A}\Delta}e^{\hat{B}\Delta}. \quad (3.16)$$

Frequentemente as equações de movimento são numericamente integradas por métodos de diferenças finitas [43]. O procedimento consiste em utilizar as variáveis como posição e suas derivadas temporais, num instante  $t$  para calcular valores posteriores destas quantidades, num tempo  $t + \Delta$ . A precisão deste procedimento é muitas vezes proporcional a uma potência de  $\Delta$ . E um método de integração é denominado como um algoritmo de  $m$ -ésima ordem quando o erro de truncamento é da ordem de  $\Delta^{m+1}$ .

Para resolver o conjunto de equações diferenciais acopladas que governam a evolução dinâmica do sistema, empregamos nesse trabalho um método que deriva de uma classe de algoritmos baseados na decomposição do operador exponencial. Mais especificamente, na decomposição Suzuki-Trotter do operador exponencial[44].

Como vimos acima, a evolução dinâmica de um sistema de muitos corpos pode ser obtida aplicando-se um operador exponencial ao vetor de estado. Porém, o operador é composto por dois termos que não comutam entre si e sua aplicação ao vetor de estado é muito difícil quando o número de partículas é grande. Não obstante, a aplicação de cada um dos termos separadamente é muito simples. A decomposição Suzuki-Trotter consiste justamente em escrever a exponencial de uma soma de operadores como o produto de exponenciais envolvendo um único operador de cada vez.

### 3.2.1 Decomposição Suzuki-Trotter

A decomposição Suzuki-Trotter mais simples é dada por

$$e^{t(A+B)} = e^{tA}e^{tB} + \mathcal{O}(t^2), \quad (3.17)$$

onde  $t$  é um parâmetro,  $A$  e  $B$  são operadores arbitrários cuja relação de comutação é expressa em (3.18), ou seja, eles não comutam.

$$[A, B] = AB - BA \neq 0. \quad (3.18)$$

Logo,  $\exp[t(A+B)] \neq \exp(tA)\exp(tB)$ , O lado direito da (3.17), produto dos operadores exponenciais, é considerado como uma decomposição aproximada do operador exponencial dado à esquerda. E o termo restante como uma correção de segunda ordem em  $t$ , que é necessária devido à desigualdade entre as expressões. Podemos reescrever a expressão (3.17) como

[44]

$$e^{tA}e^{tB} = e^{t(A+B)+\mathcal{O}(t^2)}. \quad (3.19)$$

O desafio é generalizar a decomposição (3.19) para decomposições com termos de correção de ordem mais altas. Uma forma conveniente para a fórmula de Trotter generalizada é

$$e^{p_1tA}e^{p_2tB}e^{p_3tA}e^{p_4tB} \dots e^{p_MtB} = e^{t(A+B)+\mathcal{O}(t^{m+1})}. \quad (3.20)$$

Os parâmetros  $\{p_1, p_2, p_3, \dots, p_M\}$  são escolhidos de forma a fazer o termo de correção da ordem de  $t^{m+1}$ . O lado esquerdo da equação (3.20) é considerado um aproximante de  $m$ -ésima ordem, pois ele deve ser correto até a  $m$ -ésima ordem em  $t$ . Para outras possibilidades e comentários adicionais, bem como outras aplicações da fórmula de produtos de operadores exponenciais, ver referência [44].

### 3.2.2 Vantagens da Fórmula do Produto Exponencial

Antes de prosseguirmos, cabe alguns comentários sobre as vantagens do aproximante de Trotter para o operador exponencial.

Para começar, vamos confirmar que o aproximante (3.19) é de fato de primeira ordem. Para tal, basta expandir os dois lados da expressão (3.19)

$$\begin{aligned} e^{t(A+B)} &= I + t(A+B) + \frac{1}{2}t^2(A+B)^2 + \frac{1}{6}t^3(A+B)^3 + \dots \\ &= I + t(A+B) + \frac{1}{2}t^2(A^2 + AB + BA + B^2) + \mathcal{O}(t^3), \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} e^{tA}e^{tB} &= \left( I + A + \frac{1}{2}t^2A^2 + \mathcal{O}(t^3) \right) \left( I + tB + \frac{1}{2}t^2B^2 + \mathcal{O}(t^3) \right) \\ &= I + t(A+B) + \frac{1}{2}t^2(A^2 + 2AB + B^2) + \mathcal{O}(t^3) \\ &= I + t(A+B) + \frac{1}{2}t^2(A^2 + AB + BA + [A, B] + B^2) + \mathcal{O}(t^3), \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde  $I$  é o operador identidade. Note que na expressão (3.22) o operador  $A$  só aparece à esquerda do operador  $B$ . Assim, fazendo a diferença entre as equações (3.21) e (3.22), obtemos

$$e^{tA}e^{tB} = e^{t(A+B)+\frac{1}{2}t^2[A, B]+\mathcal{O}(t^3)}. \quad (3.23)$$

Nas aplicações, o aproximante acima é usado de forma modificada. O parâmetro  $t$  é fatiado

em  $n$  pedaços e o aproximante é escrito da seguinte forma

$$\begin{aligned} \left( e^{\frac{t}{n}A} e^{\frac{t}{n}B} \right)^n &= \left[ e^{\frac{t}{n}(A+B) + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{n}\right)^2 [A,B] + \mathcal{O}\left(\left(\frac{t}{n}\right)^3\right)} \right]^n \\ &= e^{t(A+B) + \frac{1}{2} \frac{t^2}{n} [A,B] + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{n^2}\right)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Nessa forma, o termo de correção vai a zero no limite  $n \rightarrow \infty$ . O inteiro  $n$  é conhecido na literatura especializada como número de Trotter.

Uma razão para estarmos interessados na generalização da aproximação de Trotter (na forma (3.17) ou (3.20)) é a extraordinária vantagem que ela tem sobre outras aproximações comumente utilizadas como, por exemplo,

$$e^{t(A+B)} = I + t(A+B) + \mathcal{O}(t^2). \quad (3.25)$$

Um aproximante na forma (3.20) preserva uma importante simetria de problemas de dinâmicas quânticas ou hamiltonianas.

No caso quântico o operador exponencial é unitário e, portanto, preserva a norma da função de onda que, por sua vez, corresponde à conservação da carga. Por outro lado, o aproximante do lado direito de (3.25) não preserva a norma da função de onda. De fato, com este aproximante, a norma cresce mais ou menos linearmente com o tempo [44].

No caso da dinâmica hamiltoniana, a aproximação dada na equação (3.20) conserva o volume no espaço de fase, por construção. Logo o operador, bem como o método de integração resultante, é simplético. Um critério para um bom método de integração é sua capacidade de reproduzir as leis de conservação e as propriedades das equações de movimento da mecânica clássica. Em particular, conservação da energia e conservação do volume do espaço de fase são duas qualidades exigidas de um bom integrador. Assim, o integrador deve ser temporalmente reversível. Tais propriedades estão intimamente relacionadas à estabilidade do algoritmo e a sua precisão para passos de tempo longos.

Na próxima subseção vamos descrever brevemente como construir fórmulas de produtos de operadores exponenciais de alta ordem, recursivamente, a partir de aproximantes de ordem inferior. A principal característica do procedimento é manter os aproximantes temporalmente reversíveis e simpléticos.

### 3.2.3 Decomposição Fractal

A decomposição (3.19) é a fórmula de Trotter mais simples, que corresponde a  $n = 1$  na

aproximação (3.24). Podemos construir um aproximante melhorado tomando  $n = 2$  em (3.24), porém tomando o produto simetrizado. Ou seja,

$$\begin{aligned} S_2(t) &= \left( e^{\frac{t}{2}A} e^{\frac{t}{2}B} \right) \left( e^{\frac{t}{2}B} e^{\frac{t}{2}A} \right) \\ &= e^{\frac{t}{2}A} e^{tB} e^{\frac{t}{2}A}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Observe a inversão da ordem dos operadores  $A$  e  $B$  (simetrização) nos produtos compondo o operador  $S_2$ .

Realizando a expansão do operador  $S_2$  temos

$$S_2(t) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{t^{(n_1+n_2+n_3)}}{2^{n_1+n_3}} \frac{A^{n_1}}{n_1!} \frac{B^{n_2}}{n_2!} \frac{A^{n_3}}{n_3!}. \quad (3.27)$$

Vamos explicitar alguns termos da equação (3.27). Para  $n_1 + n_2 + n_3 = 0$ , a única possibilidade é  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ . O termo de ordem zero é a identidade.

Para  $n_1 + n_2 + n_3 = 1$ , apenas uma das parcelas é igual a 1, e as outras duas são nulas. Assim, o termo de primeira ordem em  $t$  é  $t(A + B)$ .

Para o termo de segunda ordem em  $t$ , temos  $n_1 + n_2 + n_3 = 2$ . Nesse caso, há várias possibilidades para  $(n_1, n_2, n_3)$ . Ou seja,  $(0, 0, 2)$  ou  $(0, 1, 1)$  e suas respectivas permutações. Logo, o termo correspondente à segunda ordem em  $t$  é

$$\frac{t^2}{4} \frac{A^2}{2} + \frac{t^2}{4} \frac{A^2}{2} + t^2 \frac{B^2}{2} + \frac{t^2}{2} BA + \frac{t^2}{4} A^2 + \frac{t^2}{2} AB. \quad (3.28)$$

A expressão (3.28) pode ser reescrita como

$$\frac{t^2}{2} (A + B)^2, \quad (3.29)$$

que corresponde exatamente ao segundo termo da expansão do operador exponencial da equação (3.21)

O termo de ordem  $t^3$  é composto de fatores envolvendo  $(n_1, n_2, n_3)$  com  $n_1 + n_2 + n_3 = 3$ . Ou seja,  $(1, 1, 1)$ ,  $(0, 0, 3)$  ou  $(0, 1, 2)$  mais permutações. O termo de terceira ordem em  $t$  é dado por

$$\frac{t^3}{48} A^3 + \frac{t^3}{6} B^3 + \frac{t^3}{48} A^3 + \frac{t^3}{4} ABA + \frac{t^3}{8} BA^2 + \frac{t^3}{4} B^2A + \frac{t^3}{16} A^3 + \frac{t^3}{4} AB^2 + \frac{t^3}{8} A^2B + \frac{t^3}{16} A^3, \quad (3.30)$$

que pode ser rearrumado como

$$\frac{t^3}{6}(A+B)^3 + \frac{t^3}{24}(2ABA - BA^2 + 2B^2A + 2AB^2 - A^2B). \quad (3.31)$$

Nesta última expressão, a primeira parcela coincide com o termo de terceira ordem da expansão (3.21). A segunda parcela é uma correção de terceira ordem em  $t$  devido ao carácter não comutativo dos operadores. De fato, há uma correspondência biunívoca entre os termos de ordem par da expansão do operador  $S_2$  e os termos, de mesma ordem, da expansão (3.21).

Procedendo de maneira similar, podemos escrever os termos de ordem superior. Por exemplo, para  $t^5$  há combinações de  $(n_1, n_2, n_3)$  tais quais  $(0, 0, 5)$ ,  $(0, 1, 4)$ ,  $(1, 1, 3)$ ,  $(0, 2, 3)$ ,  $(1, 1, 3)$ ,  $(1, 2, 2)$  mais suas permutações.

Assim, de maneira geral, podemos escrever

$$S_2(t) = e^{t(A+B)+t^3R_3+t^5R_5+\dots}. \quad (3.32)$$

Os operadores  $R_3, R_5, \dots$ , são combinações de  $A$  e  $B$  e estão associados às correções semelhantes aquela que aparece na expressão (3.31).

Uma importante propriedade do aproximante simetrizado descrito na equação (3.26) é sua reversibilidade temporal

$$\begin{aligned} S_2(t)S_2(-t) &= e^{\frac{t}{2}A}e^{tB}e^{\frac{t}{2}A}e^{-\frac{t}{2}A}e^{-tB}e^{-\frac{t}{2}A} \\ &= I. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Esta propriedade é responsável pelo cancelamento dos termos de ordem par no lado direito da equação (3.32), o que torna o aproximante de segunda ordem.

Vamos agora mostrar como pode-se contruir um aproximante de quarta ordem simetrizado a partir do aproximante de segunda ordem simetrizado. O ponto de partida é a expressão

$$\begin{aligned} S(t) &\equiv S_2(st)S_2((1-2s)t)S_2(st) \\ &= e^{\frac{s}{2}tA}e^{stB}e^{\frac{1-s}{2}tA}e^{(1-2s)tB}e^{\frac{1-s}{2}tA}e^{stB}e^{\frac{s}{2}tA}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

na qual  $s$  é um número real arbitrário, por enquanto.

Agora, o parâmetro  $s$  pode ser escolhido de forma a promover o aproximante (3.34) à quarta ordem. Para tal, considere a expressão do erro dado em (3.32)

$$\begin{aligned}
S(t) &= S_2(st)S_2((1-2s)t)S_2(st) \\
&= e^{st(A+B)+s^3t^3R_3+\mathcal{O}(t^5)} e^{(1-2s)t(A+B)+(1-2s)^3t^3R_3+\mathcal{O}(t^5)} e^{st(A+B)+s^3t^3R_3+\mathcal{O}(t^5)} \\
&= e^{t(A+B)+[2s^3+(1-2s)^3]R_3+\mathcal{O}(t^5)}. \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Observe que a escolha dos parâmetros na forma  $\{s, 1-2s, s\}$  na primeira linha da equação (3.34) permitiu que o termo de primeira ordem na última linha da equação (3.35) tornar-se exatamente igual a  $t(A+B)$  e, além disso, tornar o produto  $S(t)$  simetrizado. Implicando assim que  $S(t)S(-t) = I$  e fazendo com que as correções de ordem par se anule na última linha da equação (3.35). Para promover o aproximantes  $(t)$  à quarta ordem, basta escolher  $s$  como a solução de

$$2s^3 + (1-2s)^3 = 0, \tag{3.36}$$

ou

$$s = \frac{1}{2-2^{1/3}}. \tag{3.37}$$

Seguindo a mesma linha de raciocínio, um outro aproximante de quarta ordem pode ser construído da seguinte forma

$$S_4(t) \equiv [S_2(s_2t)]^2 S_2((1-4s_2)t) [S_2(s_2t)]^2 \tag{3.38}$$

$$= e^{\frac{s_2}{2}tA} e^{s_2tB} e^{s_2tA} e^{s_2tB} e^{\frac{1-3s_2}{2}tA} e^{(1-4s_2)tB} e^{\frac{1-3s_2}{2}tA} e^{s_2tB} e^{s_2tA} e^{s_2tB} e^{\frac{s_2}{2}tA}, \tag{3.39}$$

onde o parâmetro  $s_2$  é a solução da equação

$$4s_2^3 + (1-4s_2)^3 = 0, \tag{3.40}$$

ou

$$s_2 = \frac{1}{4-4^{1/3}}. \tag{3.41}$$

Embora, tanto o aproximante  $S(t)$  quanto o  $S_4(t)$  sejam ambos de quarta ordem, há algumas vantagens em se usar o segundo na solução numérica das equações de movimento [44]. Para uma revisão mais detalhada dos aspectos gerais do método consulte as seguintes referências [45, 46].

Nesta dissertação, empregamos o aproximante  $S_4(t)$  para resolver numericamente as equações de movimento hamiltonianas para o modelo  $XY$ .

Observe que a aplicação dos operadores na ordem em que aparecem no algoritmo é impor-

tante. E a aplicação em diferentes sequências altera como cada componente é atualizada.

### 3.3 Dinâmica Crítica em Tempos Curtos

Como apresentado no capítulo anterior, os fenômenos críticos referem-se ao comportamento do sistema na região próxima ao ponto crítico. Esse comportamento, em geral, é descrito por leis de potência envolvendo, os assim chamados, expoentes críticos e a distância ao ponto crítico. Por exemplo, tanto a susceptibilidade quanto o calor específico divergem no ponto crítico. Outras grandezas termodinâmicas nessa região, também, exibem comportamento crítico. O interesse no comportamento singular dessas grandezas tem uma longa história [47] e tem sido sempre crescente ao longo dos anos. O esforço continuado para uma melhor compreensão dos fenômenos críticos, culminou com a teoria do grupo de renormalização, os conceitos de universalidade e invariância de escala. Essas ideias fundamentais ultrapassaram o escopo da Física e são aplicadas a diversos outros campos da atividade intelectual humana [48].

A teoria fenomenológica dos fenômenos críticos considera que o sistema encontra-se no limite termodinâmico, ou seja, nessa condição o sistema encontra-se em equilíbrio e o número de partículas que compõem o sistema  $N \rightarrow \infty$ . Outrossim, na região crítica, as partículas do sistema desenvolvem uma forte correlação espaço-temporal. Isto faz com que os tempos de relaxação cresçam sem limites na criticalidade. Todavia, nos sistemas estudados por simulações computacionais, tem-se um número finito de partículas e um intervalo de tempo  $t$  de simulação ou observação, finito. Surge desse fato, a problemática de como estudar eventos que em princípio, ocorreriam apenas para estados de equilíbrio ( $t \rightarrow \infty$ ) de um sistema com um número infinito de partículas.

Uma solução para este dilema é utilizar técnicas de extrapolação na análise dos resultados de uma simulação computacional. Ou seja, simular sistemas com diferentes números de partículas e fazer a extrapolação para  $N \rightarrow \infty$ . Assim como, extrapolar o tempo para valores de  $t \gg \tau$  onde,  $\tau$  é o tempo de relaxação do sistema (que é finito para  $N$  finito). O tempo de relaxação define uma escala de tempo característica, associada à demora que um sistema termodinâmico levaria para relaxar e atingir o estado de equilíbrio.

O escalonamento de tamanho finito [49], é uma das técnicas de extrapolação que permite tratar os dados obtidos por simulações baseadas em métodos estocásticos ou determinísticos, e determinar as propriedades críticas de um sistema.

Na vizinhança de um ponto crítico o comprimento de correlação  $\xi$  cresce indefinidamente. Seu comportamento é expresso como

$$\xi \sim \varepsilon^{-\nu}, \quad (3.42)$$

onde  $\varepsilon$  é a distância ao ponto crítico. E o tempo de relaxação do sistema escala com o compri-

mento de correlação da seguinte forma

$$\tau \sim \xi^z, \quad (3.43)$$

onde introduzimos o expoente crítico dinâmico,  $z$ . Essas divergências são as chaves para entendermos o comportamento peculiar das grandezas termodinâmicas na região crítica.

Apesar da maioria dos estudos em fenômenos críticos concentrarem-se sobre uma descrição das propriedades de equilíbrio, uma predição fundamentada em um tratamento de grupo de renormalização [7], mostrou que a evolução dinâmica de um sistema preparado, inicialmente, para evoluir a partir de um estado distante do equilíbrio também é crítica.

Esta predição foi confirmada em diversos sistemas idealizados, como o modelo de Ising [12] e o modelo  $XY$  [50]. Nesses estudos, verificou-se que a evolução temporal de certos observáveis, no ponto crítico, segue uma lei de potência após um intervalo de tempo microscópico. Através de uma simulação Monte Carlo do modelo de Ising, relatada na referência [6], fica demonstrado que o comportamento de escala e o fenômeno da universalidade podem ser observados em um relativamente curto intervalo de tempo durante a relaxação do sistema para o equilíbrio. Um intervalo de tempo curto, significa que o tempo de observação é muito menor que o necessário para o sistema atingir o equilíbrio. Este resultado é extremamente relevante, uma vez que propõe que a abordagem em tempos curtos pode ser utilizada para identificar corretamente os valores dos parâmetros críticos de um modelo. É importante observar que os expoentes universais que caracterizam a transição de fases do sistema estão diretamente relacionados com os expoentes que governam as leis de potência observados durante a relaxação crítica.

Assim, a localização das transições de fases e os expoentes críticos estáticos e dinâmicos podem ser obtidos através da relaxação de não-equilíbrio do sistema. Este método ficou conhecido como *dinâmica crítica de tempos curtos*. Pois, o estudo é realizado numa escala de tempo muito menor que o tempo necessário para o sistema atingir o estado de equilíbrio.

A teoria que descreve formalmente a relaxação de um sistema em tempos curtos foi originalmente desenvolvida por Janssen, Schaub e Schmittmann em 1989 [7], usando técnicas de teoria de campo. Estes autores demonstraram que os expoentes críticos calculados, em tempos curtos, são os mesmos que seriam obtidos caso as medidas fossem realizadas com o sistema no equilíbrio termodinâmico.

No nosso trabalho, vamos obter as propriedades críticas do modelo  $XY$  através da relaxação crítica em tempos curtos. A evolução do sistema segue uma dinâmica hamiltoniana e, portanto, sua energia total deve se conservar. Assim, o parâmetro de controle é a densidade de energia, ao contrário da temperatura como é usual em simulações realizadas no ensemble canônico.

Para um ferromagneto o parâmetro de ordem é a magnetização. Porém, o hamiltoniano (3.1) é invariante por rotação e esta simetria é preservada, mesmo em baixas temperaturas, para sistemas de tamanho finito. Uma quebra espontânea de simetria só pode ocorrer no limite termodinâmico. Em simulações computacionais, onde o sistema é sempre finito, é conveniente empregar o módulo da magnetização como parâmetro de ordem [5]. Portanto, o parâmetro de ordem é dado por

$$M = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \right|. \quad (3.44)$$

De acordo com a formulação apresentada [7], na região crítica e para um estado inicialmente ordenado, a relaxação do parâmetro de ordem obedece ao seguinte escalonamento

$$\langle M(t, e) \rangle = t^{-\beta/\nu z} \mathcal{M}(t^{1/\nu z} \varepsilon), \quad (3.45)$$

com  $t$  o tempo,  $e$  a densidade de energia,  $e_c$  a energia crítica,  $\varepsilon = (e - e_c)/e_c$  a distância ao ponto crítico, enquanto que  $\beta$  e  $\nu$  são os expoentes críticos estáticos associados a divergência do parâmetro de ordem e ao comprimento de correlação, respectivamente e  $z$  é o expoente crítico dinâmico. Na equação (3.45),  $\langle \dots \rangle$  indica uma média sobre diferentes estados iniciais do sistema, ou diversas realizações do processo de relaxação, e  $\mathcal{M}$  é uma função de escala.

Ressaltamos que o comportamento de escala do parâmetro de ordem depende do estado inicial do sistema [50]. Por exemplo, para um estado inicial completamente desordenado, o parâmetro de ordem inicialmente cresce com o tempo para, só algum tempo depois, decair para zero [8].

Numa análise de dinâmica crítica em tempos curtos, o sistema é preparado em um estado inicial bem definido, e liberado para evoluir de acordo com sua dinâmica com o parâmetro de controle fixado. No nosso caso, o estado inicial escolhido é completamente ordenado e o parâmetro de controle a densidade de energia. Note ainda que devemos repetir o processo para tomarmos médias sobre várias realizações do processo de relaxação. Quando a dinâmica é uma dinâmica estocástica, algum método Monte Carlo, por exemplo, a configuração inicial pode ser única para todas realizações. Como em nosso estudo a dinâmica é determinística, precisamos de uma configuração inicial distinta para cada realização. Assim, escolhemos orientar todos os rotores na direção  $\hat{x}$  de forma que a energia configuracional é mínima. A quantidade de energia necessária para atingir o valor da densidade de energia prescrita na simulação, é aleatoriamente distribuída como energia cinética dos rotores.

Além da magnetização do sistema, várias outras grandezas termodinâmicas são úteis para analisar o comportamento coletivo do sistema. As grandezas que monitoramos ao longo do

processo de relaxação são definidas abaixo.

O segundo momento da magnetização, é outra grandeza relevante que fornece informações importantes sobre o comportamento crítico do sistema. O segundo momento da magnetização é dado por

$$\chi_0(t) = \frac{1}{N} \left\langle \left( \sum_i S_{\vec{r}_i} \right)^2 \right\rangle. \quad (3.46)$$

Em que  $\vec{r} = \vec{r}_i$  localiza o  $i$ -ésimo sítio da rede num sistema de coordenadas arbitrário. E o somatório estende-se sobre todos sítios da rede.

Monitoramos também a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos em função do tempo  $t$

$$\chi_{\vec{k}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \left\langle \vec{S}_{\vec{r}_i} \cdot \vec{S}_{\vec{r}_j} \right\rangle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}, \quad (3.47)$$

na qual escolhemos  $\vec{k} = (2\pi/L)\hat{x}$ , sendo  $L$  a dimensão linear da rede.

As equações (3.46) e (3.47) nos permitem introduzir um comprimento de correlação dependente do tempo [51]

$$\xi(t) = \frac{1}{\kappa} \sqrt{\left( \frac{\chi_0}{\chi_{\vec{k}}} - 1 \right)}. \quad (3.48)$$

Também, calculamos a flutuação do parâmetro de ordem

$$\Delta M(t) = \frac{1}{N} \left\langle \left[ \left( \sum_i S_{\vec{r}_i} \right)^2 - \left\langle \sum_i S_{\vec{r}_i} \right\rangle^2 \right] \right\rangle. \quad (3.49)$$

Todas essas grandezas apresentam leis de escala no ponto crítico [8]. O fator de estrutura (3.47) e a flutuação do parâmetro escalam como

$$\chi_{\vec{k}}(t) \sim \Delta M(t) \sim t^{\gamma/\nu z}, \quad (3.50)$$

onde  $\gamma$  é o expoente crítico da susceptibilidade. O expoente crítico dinâmico pode ser obtido tanto do comprimento de correlação

$$\xi(t) \sim t^{-3/2z} \quad (3.51)$$

quanto da razão entre o segundo momento e o primeiro ao quadrado, denominado como cumu-

lante de Binder de segunda ordem [8]

$$U_2(t) \sim t^{3/z}. \quad (3.52)$$

Além disso,

$$\left. \frac{\partial \langle M(t, \varepsilon) \rangle}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \sim t^{1/vz}. \quad (3.53)$$

### 3.4 Determinação do valor crítico do parâmetro de controle

Vamos agora descrever um método para determinar o valor crítico do parâmetro de controle (densidade de energia) usando a relaxação crítica do parâmetro de ordem. Vários expoentes críticos podem também ser obtidos de forma independente no processo descrito abaixo.

A equação (3.45) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\ln M(t, \varepsilon) = -\frac{\beta}{vz} \ln(t) + \ln \mathcal{M}(t^{1/v} \varepsilon). \quad (3.54)$$

Derivando os dois lados da equação (3.54) acima, em relação à  $\ln(t)$  obtemos

$$\frac{\partial \ln M(t, \varepsilon)}{\partial \ln t} = -\frac{\beta}{vz} + \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(t^{1/v} \varepsilon)}{\partial \ln t}. \quad (3.55)$$

Para realizar a derivação contida no último termo da equação (3.55) é conveniente introduzir

$$\tau = \ln(t) \quad (3.56)$$

e

$$\begin{aligned} x &= t^{1/vz} \varepsilon \\ &= \varepsilon e^{\tau/vz}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(t^{1/v_z} \varepsilon)}{\partial \ln t} &= \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(x)}{\partial \tau} \\
 &= \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(x)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} \\
 &= \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(x)}{\partial x} \frac{\varepsilon e^{\tau/v_z}}{v_z} \\
 &= \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(x)}{\partial x} \frac{x}{v_z} \\
 &= x \widetilde{\mathcal{M}}(x).
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

onde introduzimos a função universal de escala  $\widetilde{\mathcal{M}}$  definida por

$$\widetilde{\mathcal{M}}(x) = \frac{1}{v_z} \frac{1}{\mathcal{M}} \frac{\partial \mathcal{M}(x)}{\partial x}. \tag{3.59}$$

Agora, definindo

$$\Psi(t, \varepsilon) = \frac{\partial \ln M(t, \varepsilon)}{\partial \ln t} \tag{3.60}$$

e usando o resultado (3.58), a expressão (3.55) torna-se

$$\Psi(t, \varepsilon) = -\frac{\beta}{v_z} + x \widetilde{\mathcal{M}}(x), \tag{3.61}$$

onde  $x$  é uma variável de escala definida na equação (3.57).

O resultado obtido em (3.61), fornece um método para se determinar o valor da energia crítica  $e_c$ . De fato, como  $x \propto \varepsilon$ , em  $\varepsilon = 0$  ( $e = e_c$ ) a equação (3.61) torna-se

$$\Psi(t, \varepsilon = 0) = -\frac{\beta}{v_z}. \tag{3.62}$$

Uma maneira prática de se determinar  $e_c$  é construir um gráfico da forma descrita a seguir.

Seja  $\Psi_i(e) = \Psi(t_i, e)$ , isto é, a curva dada pela interseção do plano  $t = t_i$  com a superfície  $\Psi(t, e)$ . Agora, se traçarmos um gráfico de  $\Psi_i(e)$  como uma função de  $e$ , a equação (3.62) diz que as curvas se interseparão no ponto  $(-\beta/v_z, e_c)$ .

Além disso, da equação (3.61) temos que

$$\left. \frac{\partial \Psi(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \widetilde{\mathcal{M}}(0) t^{1/v_z}. \tag{3.63}$$

## Resultados e Discussões

Neste trabalho estudamos o modelo  $XY$  definido em uma rede cúbica simples, de lado  $L$ . Adotamos um sistema de unidades no qual o espaçamento da rede é unitário. A cada um dos  $N = L \times L \times L$  sítios da rede associamos um rotor planar  $\vec{S}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$ , onde  $\theta_i$  é o ângulo que o  $i$ -ésimo rotor faz com a direção do eixo  $x$ . Impomos condições de contorno periódicas para reduzir os efeitos de fronteira. Os rotores interagem de acordo com o hamiltoniano expresso na equação (3.1).

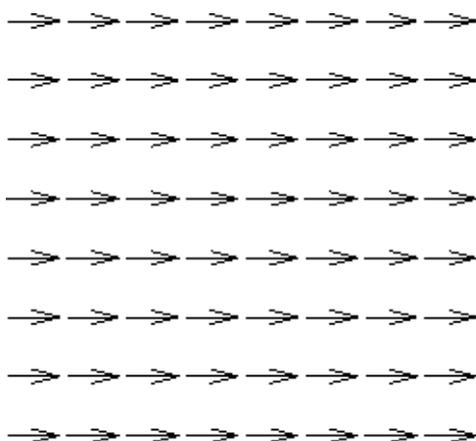
As propriedades do modelo foram obtidas através da relaxação dinâmica crítica em tempos curtos. A evolução dinâmica do sistema foi realizada integrando-se as equações hamiltonianas de movimento pelo método de integração numérica descrito na seção 3.2.

A integração foi realizada utilizando um programa computacional escrito em linguagem C. Aplicamos alguns artifícios de paralelização que permitiram gerar os dados numa plataforma de computação paralela. Dessa forma, foi possível evoluir um sistema com até  $256 \times 256 \times 256$  rotores por trajetórias composta por  $5 \times 10^4$  passos de integração.

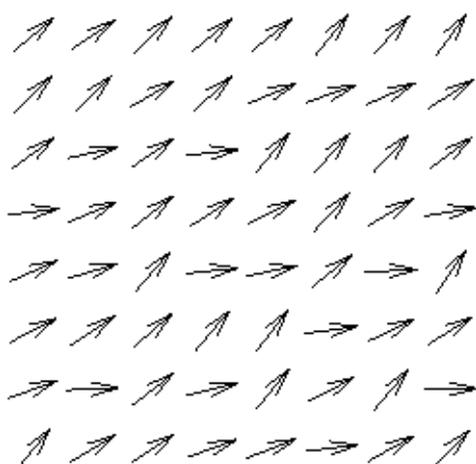
Nossa simulação partiu de um microestado completamente ordenado  $M(t=0) = 1$ , devido a este ordenamento o ângulo é  $\theta_i = 0$  para todos os rotores da rede e a energia descrita pelo hamiltoniano (3.1) é mínima. Os rotores possuem apenas energia cinética devido à rotação em torno do eixo  $z$  e não possuem energia cinética de translação. Como a energia é fixa, introduzimos no termo de energia cinética certa aleatoriedade, para que as amostras se diferenciem uma das outras e não reproduzam o mesmo microestado inicial. Fazemos isto, através de uma amostragem aleatória no ensemble das configurações iniciais dos microestados que possuem a mesma energia cinética, mesma magnetização e mesma energia potencial.

Após iniciada a evolução dinâmica, o sistema aumenta a energia configuracional, aumentando a energia de interação dos pares de rotores vizinhos. Em um instante  $t = t'$ , os momentos magnéticos dos rotores deixam de estar alinhados, como pode ser observado 4.2.

Nesta configuração, o comprimento de correlação é pequeno, apenas um diminuto grupo de partículas estão correlacionadas e movem-se mais ou menos juntas enquanto  $M(t)$  diminui lentamente. Esses aglomerados se comportam como partículas um pouco maiores, que se movem independentes.



**Figura 4.1** Estado inicial do sistema, o momento magnético dos rotores apontam ao longo da direção  $x$ .

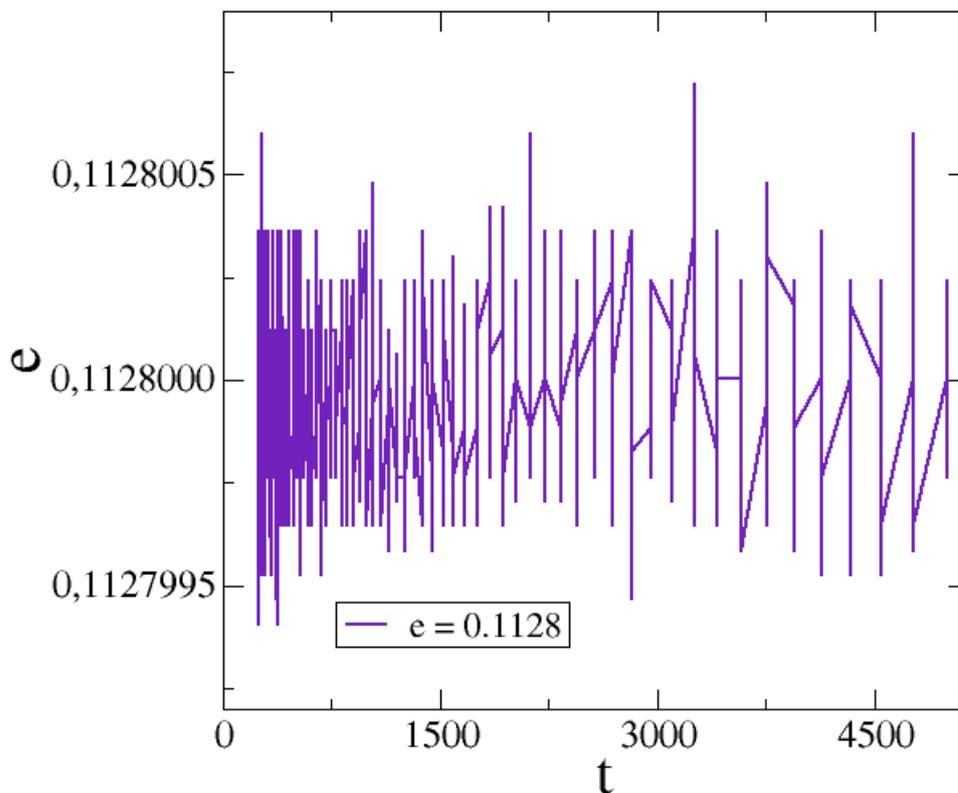


**Figura 4.2** Estado do sistema em um instante  $t = t'$ , os momentos magnéticos podem estar apontando em qualquer direção.

Inicialmente, simulações exploratórias foram realizadas para localizar a região crítica. Utilizamos redes com distintos tamanhos,  $L = 32$ ,  $L = 64$  e  $L = 128$ , por uma questão técnica em nossa implementação,  $L$  necessariamente deve ser uma potência de dois. Além disso, investigamos a possibilidade do tamanho do sistema ter alguma influência em nossas análises. Observamos que aparentemente este fato é irrelevante, ou melhor, não detectamos a presença de efeitos de tamanho finito. Embora, o tamanho do sistema seja relevante para o comprimento da “janela” de tempo na qual podemos observar o sistema. Quanto maior o sistema maior é o tamanho do comprimento de correlação que ele pode acomodar. Dessa forma, podemos simular o sistema mais próximo do ponto crítico. De fato, como o comprimento de correlação cresce sem limite, ele fatalmente se tornará maior que  $L$  para uma energia suficientemente próxima da

crítica  $e$ , quanto maior o sistema, mais próxima da crítica estará essa energia.

Nas simulações exploratórias, definimos além do intervalo de densidades de energias utilizadas, qual o valor do passo de tempo ou, intervalo de integração  $\delta t$ , usáramos para integrar as equações de movimento, realizamos testes para  $\delta t = 0.1$ ,  $\delta t = 0.02$  e  $\delta t = 0.5$ . Pois, se o  $\delta t$  fosse muito pequeno o tempo de simulação se tornaria muito grande. E se ele fosse muito grande poderíamos introduzir flutuações indesejáveis. Realizamos várias amostras para comparar os resultados e assegurar que o valor do  $\delta t$  preserva a estabilidade do método. Além disso comprovamos que de fato nosso algoritmo conserva a energia total do sistema. A figura 4.3 ilustra a conservação total de energia para 16 realizações da dinâmica na densidade de energia  $e = 0.1128$ . Observamos que a energia flutua em uma faixa estreita em torno da energia média, mesmo para um grande número de etapas de integração.



**Figura 4.3** Flutuação da densidade de energia total do sistema em função do tempo. Para  $e = 0.1128$ ,  $T = 5000$  e  $L = 256$ .

Após fixarmos o tamanho da rede,  $L = 256$  e  $\delta t = 0.2$  realizamos durante a evolução dinâmica do sistema o cálculo das grandezas de interesse em função do tempo. Repetimos o procedimento para diversas amostras e calculamos o valor médio para a magnetização  $\vec{M}(t)$ , para o segundo momento da magnetização  $\chi(t)$ , transformada de Fourier da função de correlação  $\chi_k(t)$ , e do comprimento de correlação  $\xi(t)$ .

Após os dados serem obtidos por meio das simulações numéricas, aplicamos uma técnica de reamostragem de acordo com [52], e que permite além de eliminar possíveis tendências nos dados, estimar médias e os desvios estatísticos associadas as grandezas.

Dados da Simulação

- O tempo máximo de simulação foi da ordem  $10^4$ .
- $N = 256^3$
- Consideramos cerca de 2048 amostras nas médias.
- O tempo estimado para simular cerca de 64 amostras foi aproximadamente 8 horas.

O parâmetro de controle conveniente é a densidade da energia total. Poderíamos estimar a temperatura correspondente a uma dada densidade de energia e apresentar nossos resultados em função da temperatura mas, como estamos simulando o sistema num ensemble microcanônico resolvemos apresentar os resultados em função da densidade de energia. Os valores das densidades estudadas estão sumarizados na tabela (4.1)

## 4.1 Magnetização

Na figura 4.4 mostramos o relaxamento do parâmetro de ordem do modelo  $XY$ , o módulo da magnetização, como uma função do tempo em uma escala duplo-logarítmica, para uma rede cúbica simples com  $L = 256$ . Os gráficos das figuras desta dissertação foram produzidos com o *software* `xmgrace` [53] e os valores das densidades de energia utilizados nas simulações foram aqueles da tabela (4.1). Podemos observar que para alguns valores da densidade de energia mais baixos, as curvas de  $\ln M$  em função de  $\ln t$  possuem uma concavidade para cima. Enquanto que as curvas para alguns valores maiores da densidade de energia são côncavas para baixo. Para os valores de energia  $e = 0.112$  e  $e = 0.114$  as curvas apresentam um comportamento praticamente linear. Provavelmente, o valor da densidade de energia crítica deve estar inserida neste intervalo entre estas densidades, pois os pontos parecem estar sobre linhas retas. Como mencionado anteriormente na seção 2 esperamos que na região crítica o comportamento da

**Tabela 4.1** Densidades de energia utilizadas nas simulações

Densidades de Energia
0.1090
0.1095
0.1100
0.1105
0.1110
0.1115
0.1120
0.1125
0.1130
0.1135
0.1140
0.1145
0.1150
0.1155
0.1160
0.1165
0.1170

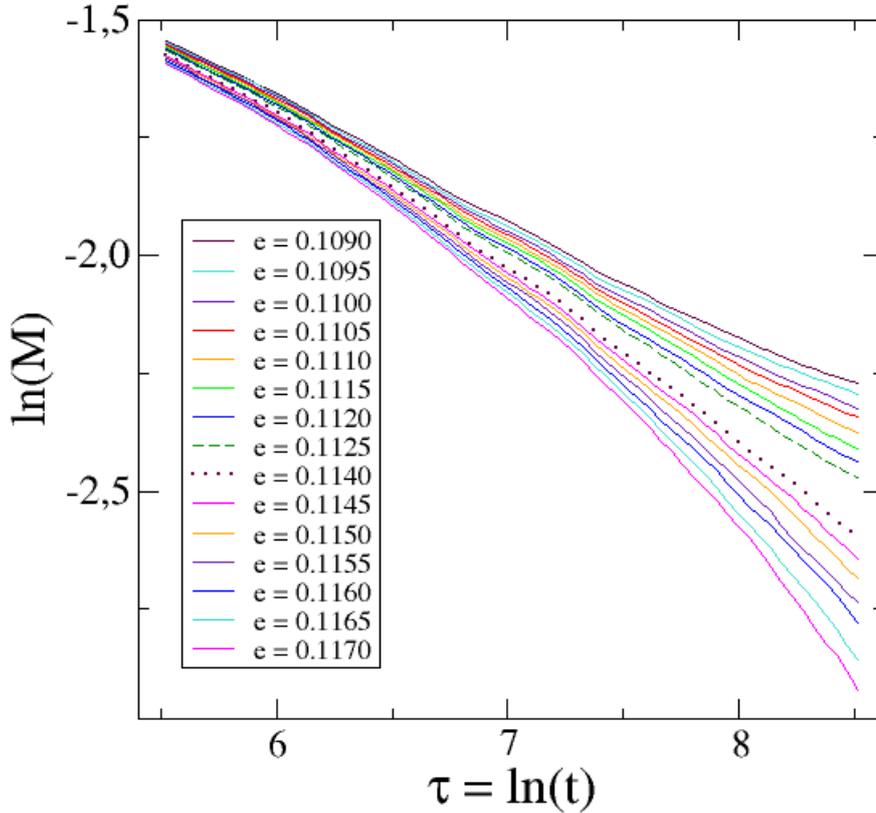
curva do logaritmo da magnetização em função do logaritmo do tempo no valor  $e = e_c$  seja linear. A partir disso, o valor da densidade de energia para o qual a curva de  $\ln M$  em função de  $\ln t$  possui o comportamento linear deve estar no intervalo entre  $e_c = 0.1125$ , sinalizada pela linha tracejada, e  $e_c = 0.1140$ , sinalizada pela linha pontilhada.

Ressaltamos que a magnetização é uma grandeza fundamental para nossa análise visto que, é através do comportamento dela que conseguimos encontrar o valor crítico  $e_c$  do nosso parâmetro de controle.

Para encontrar o valor da energia crítica, observamos na figura (4.4) aquelas com comportamento mais linear, estimamos um intervalo onde a energia crítica provavelmente, estaria localizada e executamos o programa novamente para alguns outros valores  $e$ , inseridas neste intervalo. Uma estimativa para  $e_c = 0.1133$ .

## 4.2 Derivada logarítmica da Magnetização

A figura 4.5 mostra o comportamento de  $\Psi$ , como uma função de  $\tau = \ln t$ . De acordo com a equação (3.61) temos que  $\Psi(\varepsilon, t)$  assume um valor constante ou seja, não depende do tempo

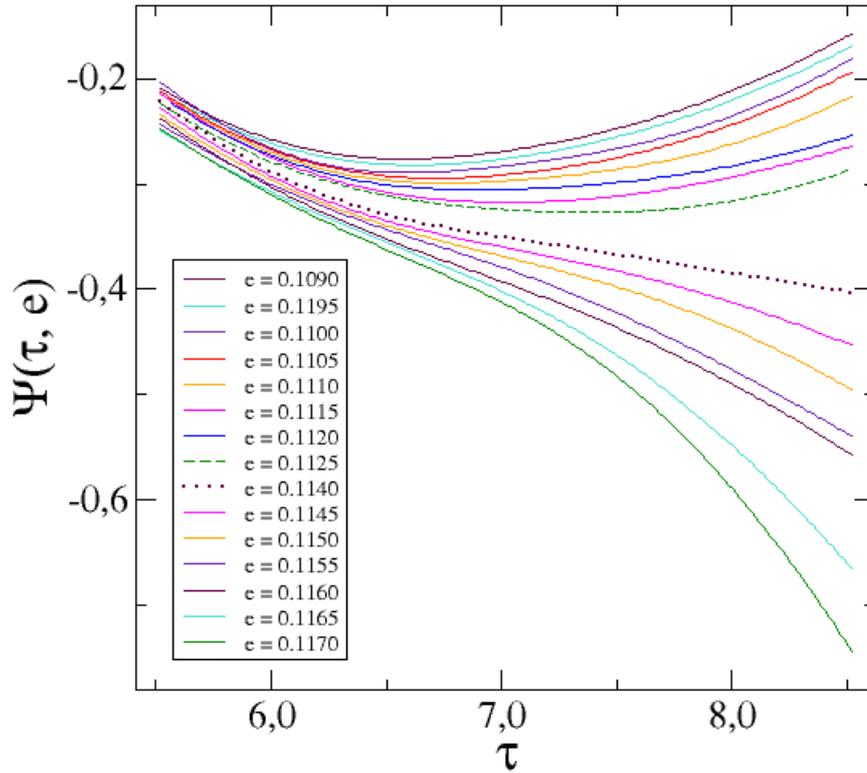


**Figura 4.4** Magnetização como uma função do tempo em uma escala duplo-logarítmica para vários valores de densidade de energia,  $L = 256$ .

para  $e = e_c$ . Esta grandeza permite localizar a densidade de energia crítica com precisão. O valor de  $\Psi(\epsilon, t)$  exatamente no ponto crítico determina o valor de  $\beta/\nu z$ . Observamos ainda que o comportamento da função é crescente para energias abaixo de um certo valor e decrescente acima de um outro valor. A energia crítica está entre esses dois valores.

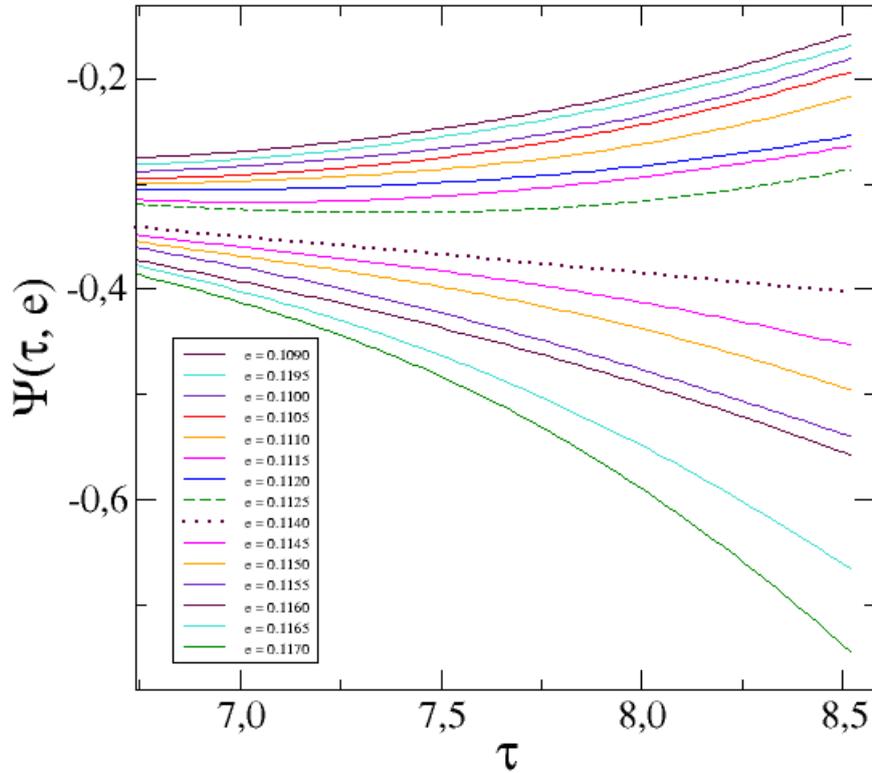
Podemos observar na figura (4.5), que o comportamento do parâmetro de ordem  $\Psi$  para os valores de densidade de energia simulados é bem próximo, e praticamente parabólico para  $\tau \gtrsim 7$ . Este comportamento além de estar relacionado ao fato da configuração inicial ser a do estado fundamental e o sistema estar na região crítica.

Para ter uma melhor visualização do comportamento de  $\Psi$ , para instantes de tempo onde o sistema está mais correlacionado, ampliamos à figura (4.5). A figura (4.6) exhibe o comportamento de  $\Psi$  após este corte.



**Figura 4.5** Derivada do logaritmo da magnetização em relação a  $\tau$ ,  $\Psi$ , em função de  $\tau$ . Na fase ordenada,  $e < e_c$ , as curvas são côncavas para cima, e na fase desordenada,  $e > e_c$ , côncavas para baixo.  $\Psi$  não depende do tempo em  $e = e_c$ .

As derivadas numéricas da figura (4.5), foram calculadas de acordo com a técnica descrita em [33]. A técnica permite ajustes que mantêm as características de cada curva e depende de um parâmetro que controla o nível de flutuação que deve ser filtrado no processo de ajuste. Como as curvas na figura 4.4 estavam suaves o suficiente, o valor desse parâmetro foi praticamente irrelevante. A utilização de um valor diferente para o parâmetro, embora não altere drasticamente o cálculo das derivadas, pode tornar a curva mais suave. Logo, o valor do parâmetro embora influencie, não distorce o comportamento das derivadas obtidas com nossos dados. O valor de  $\Psi$  é constante na energia crítica. Porém, o tempo de relaxação escala com o comprimento de correlação. Assim, para valores de  $\xi \sim L$  é possível observar um desvio do comportamento linear do decaimento do parâmetro de ordem para  $\tau$  grande o bastante, pois o



**Figura 4.6** Mostra um corte na figura (4.5), para maiores valores de  $\tau$ .

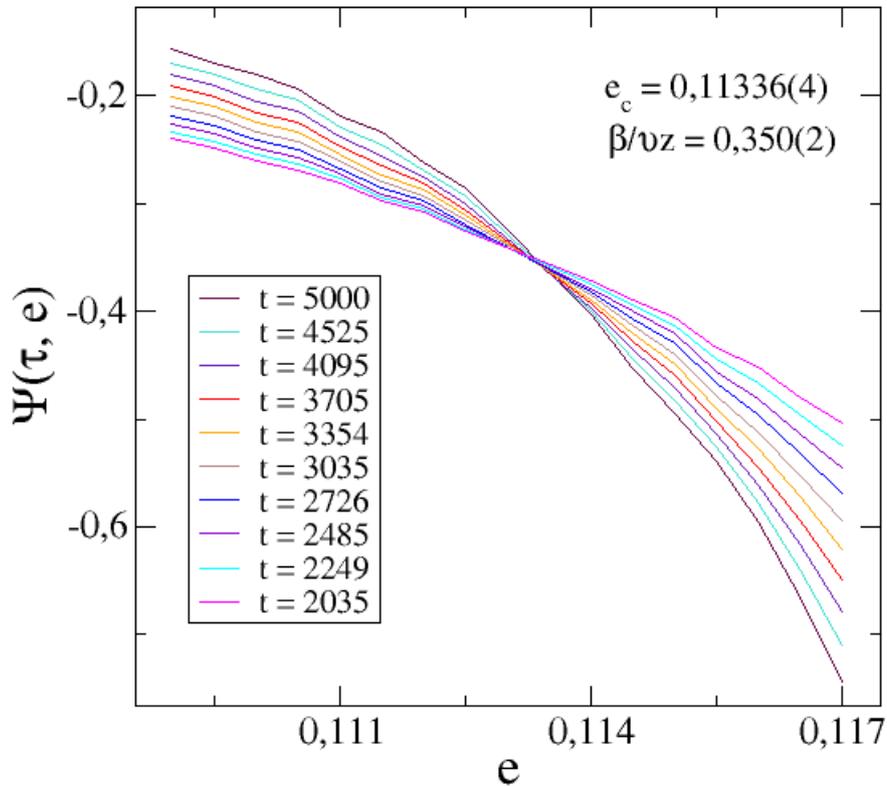
sistema deve ir para o equilíbrio. Como o parâmetro de ordem só é nulo no ponto crítico no limite  $L \rightarrow \infty$ ,  $\Psi(\tau, e = e_c)$  para tempos maiores que o tempo necessário para o sistema relaxar completamente e alcançar o estado de equilíbrio. É natural esperar que esse tempo para o sistema relaxar completamente e passar para o estado de equilíbrio aumente com o tamanho do sistema.

A partir das observações feitas da figura (4.5), é possível fazer uma nova análise para estimar o valor da  $e_c$  e da razão  $\beta/vz$ . Na figura (4.5) são feitos cortes, por meio de linhas verticais. Cada linha representa um instante de tempo diferente. Com os pontos obtidos das interseções das linhas verticais com as curvas da figura (4.5), traçamos o gráfico mostrado na figura (4.7). Isto é,  $\Psi(\tau, e)$  em função dos respectivos valores de densidade de energias para  $\tau$  fixo. É importante ressaltar, que cada curva da figura (4.7) representa um instante  $t$  e a interseção destas curvas fornece o valor da energia crítica  $e_c$ . De acordo com o método descrito na seção (3.4),

existe um valor de energia tal que o parâmetro de ordem assume um valor que não depende do tempo. Logo,

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right|_{e=e_c} = 0. \quad (4.1)$$

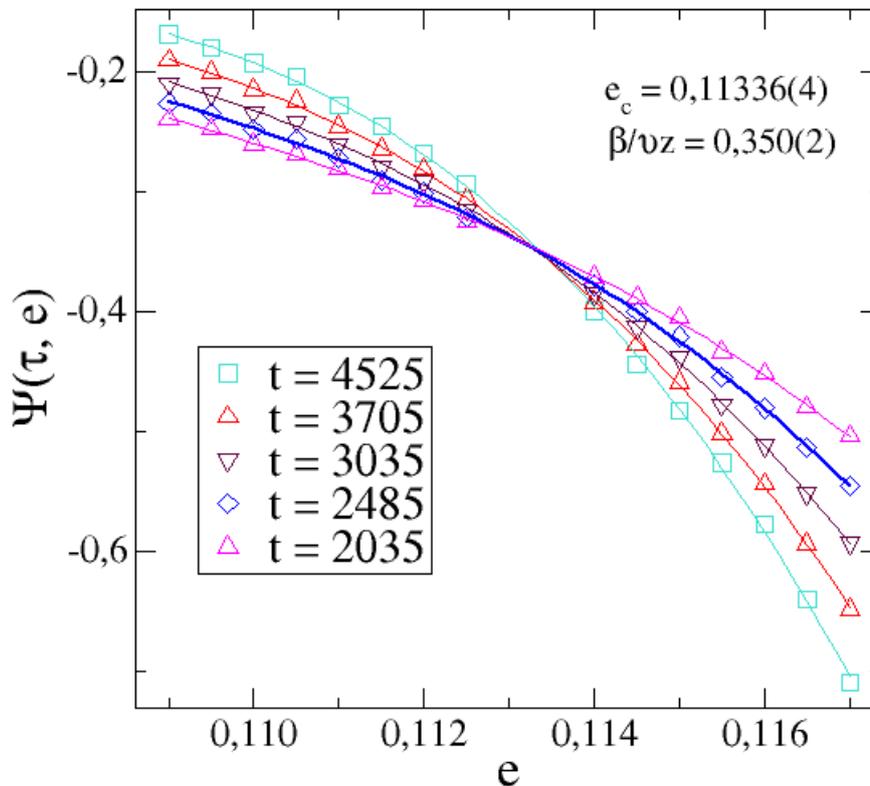
O valor da energia crítica estimado da figura (4.7) foi  $e_c = 0,11336(4)$  com um erro na quinta casa decimal.



**Figura 4.7**  $\Psi$ , como uma função da energia para alguns instantes de tempo selecionados. Como esperado, as curvas se cruzam na energia crítica.

Com a utilização do método de diferenciação numérica descrito na referência [33], fizemos um ajuste para as curvas da figura (4.7). Através deste ajuste conseguimos uma estimativa mais precisa do valor  $e_c$  e da razão  $\beta/vz$ . Alguns pontos que causavam flutuações foram ajustados e as curvas agora, possuem um comportamento mais suave que as curvas da figura (4.7). A figura

(4.8) exhibe o comportamento deste ajuste. Na figura (4.8), os pontos representam os dados originais para cada curva e as linhas contínuas as respectivas curvas suavizadas. Próximo da  $e_c$  devido as grandes flutuações torna-se mais difícil obter resultados pois, os dados para serem suavizados precisam de um número enorme de amostras. E isto, tornar-se computacionalmente inviável.



**Figura 4.8** Ajuste das curvas da figura (4.7). Como esperado, as curvas apresentam um comportamento mais suave que as curvas da figura (4.7)

### 4.3 Colapso de Dados

Os dados mostrados na figura (4.7) podem ser colapsados em uma única curva de acordo com a equação (3.61). Neste procedimento é feito um gráfico de  $x \cdot \tilde{\mathcal{M}}(x)$  em função da variável

de escala  $x = t^{1/\nu z} \varepsilon$ . Sem levar em conta o termo independente de  $x$  na equação (3.61), temos

$$\Psi(t, e) = x \widetilde{\mathcal{M}}(x). \quad (4.2)$$

Como conhecemos os tempos e as densidades de energias, ver a figura 4.7 e a tabela 4.1 podemos assumir que os outros valores para calcular  $x$  são conhecidos. Para cada par de valores  $(t_i, e_i)$  teremos um valor de  $x = x_i$ . A equação (4.2) implica que  $x_i \widetilde{\mathcal{M}}(x_i) = \Psi(t_i, e_i)$ . Dessa forma, o gráfico da função de escala desconhecida  $x \widetilde{\mathcal{M}}(x)$  pode ser traçado em função de  $x$ . Pelo menos para os valores de  $x = x_i$ . Note que os dados devem colapsar sobre uma única curva apenas se os valores corretos dos parâmetros  $e_c$  e  $1/\nu z$  forem empregados para calcular os valores  $x_i$ . Casos os valores desses parâmetros sejam incorretos os dados ficarão espalhados. Quanto maior este espalhamento, mais distantes os valores escolhidos estão dos valores corretos. Um ajuste, a la mínimos quadrados, fornece uma medida do grau de espalhamento ou discrepância. Quando a variância do ajuste for mínima toda discrepância pode ser atribuída às incertezas estatísticas contidas nos dados. Para minimizar a variância sintonizamos os valores dos parâmetros na expressão de  $x$ . A melhor estimativa para os parâmetros corresponde àqueles valores que resulta na menor variância.

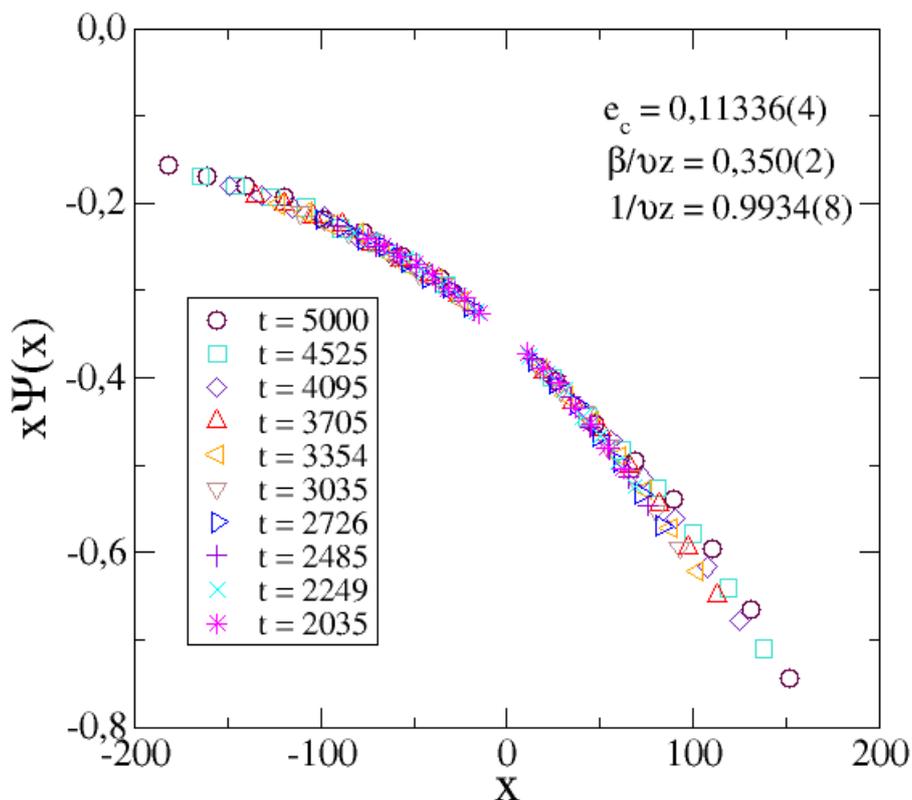
O melhor colapso foi obtido para  $(1/\nu z) = 0,9934(8)$  e  $e_c = 0,11336(4)$  e, na figura (4.9), mostramos o colapso dos dados.

Através da figura (4.9) a razão  $\beta/\nu z$  é determinada pelo valor de  $x \widetilde{\mathcal{M}}(x)$ , em  $x = 0$ . E o valor estimado foi  $(\beta/\nu z) = 0,350(2)$ . O resultado de  $(1/\nu z)$  e de  $\beta/\nu z$  implica em  $\beta = 0,348(2)$ . Este valor para o expoente crítico  $\beta$  deve ser comparado com a estimativa de  $0,3486(1)$  [42] para o mesmo expoente, obtido através do método de simulação Monte Carlo combinada com técnicas de teoria de campo.

Ressaltamos que o nosso resultado foi obtido através da dinâmica crítica de tempos curtos, isto é, com o sistema longe do equilíbrio termodinâmico. Além disso, empregamos uma dinâmica determinística descrita pelas equações microscópicas de movimento. O comportamento crítico dinâmico observado na figura (4.9) é compatível com a teoria descrita seção (3.3). É importante salientar que essa teoria foi desenvolvida no contexto de dinâmicas estocásticas. Outrossim, nossas estimativas para os parâmetros críticos concordam com as obtidas no contexto de dinâmicas estocásticas.

## 4.4 Expoentes Críticos

Depois que estimamos o valor da  $e_c$  com precisão, realizamos novas simulações do sistema



**Figura 4.9** A figura mostra o colapso dos dados apresentados na figura (4.7).

no ponto crítico. Com os dados obtidos nesta densidade energia crítica podemos calcular os demais expoentes críticos. A energia crítica deve estar estimada com precisão, pois qualquer desvio nessa quantidade muda bastante as estimativas dos expoentes.

A figura 4.10 exibe a evolução temporal da magnetização em uma escala logarítmica, na densidade de energia crítica, e num intervalo de tempo um pouco mais curto  $1300 < t < 3000$  e média sobre 1024 configurações iniciais. Os pontos representam os dados originais e a curva contínua um ajuste linear. A partir da expressão (3.45), observamos que no ponto crítico a inclinação da reta, obtida pelo ajuste, na figura 4.10 revela o valor estimado do expoente  $\beta/vz = 0,3484(8)$ . Essa nova estimativa, fornece  $\beta = 0,3461(9)$ .

Da mesma forma, o expoente  $\gamma$  pode ser estimado pelo comportamento da transformada de Fourier no ponto crítico. Uma estimativa para a razão  $3/2z$  é obtida do comportamento do comprimento de correlação. Porém, as flutuações nessas grandezas são muito acentuadas e,

aparentemente, 1024 amostras não são suficientes para uma estimativa confiável destes expoentes a partir dos nossos dados. De fato, o resultado obtido é fortemente dependente do intervalo no qual o ajuste é realizado, tanto para a estimativa do expoente  $\gamma$  quanto para o expoente  $z$ . Em uma pequena janela de tempo, fomos capazes de obter uma estimativa para  $z$  muito próxima de 1,5. Porém, não existe uma razão ou justificativa para desprezar os dados fora desta janela de tempo. Por outro lado, os dados para a transformada de Fourier da função de correlação apresentam flutuações de tamanha intensidade que um ajuste linear está fora de questão, pelo menos para o número de amostras que temos no momento. Não obstante, a relação de hiperescala

$$\gamma + 2\beta = D\nu, \quad (4.3)$$

onde  $D = 3$  é a dimensão do espaço, fornece

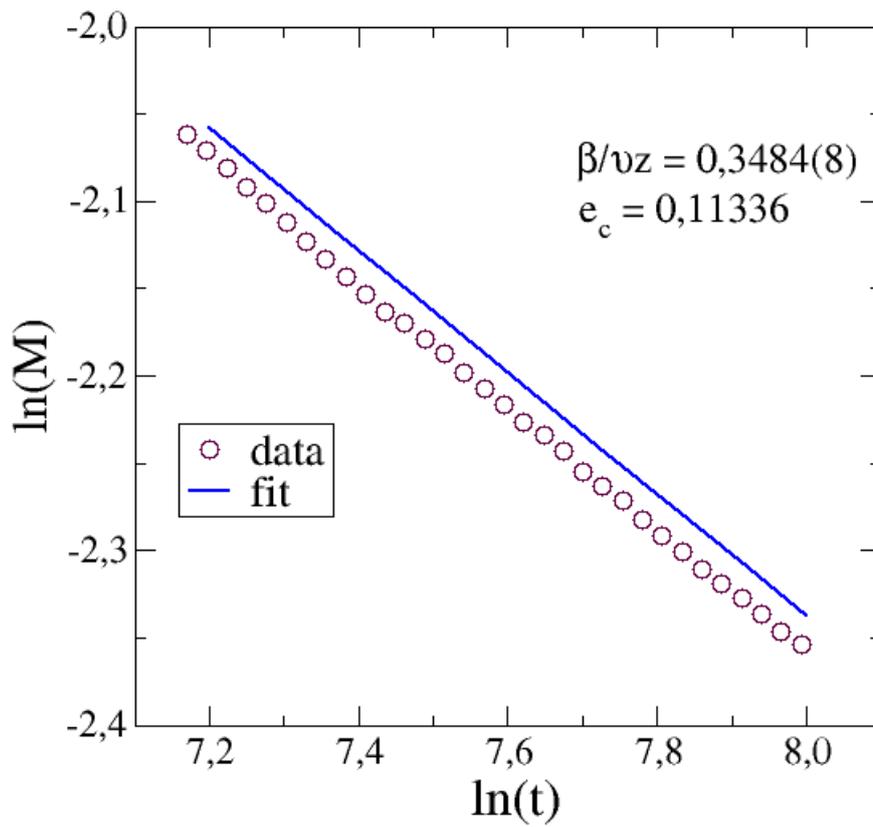
$$\frac{\gamma}{\nu z} = \frac{3}{z} - 2\frac{\beta}{\nu z} = 1,3032(8), \quad (4.4)$$

na qual fizemos  $z = 3/2$ , valor supostamente exato [54]. Usando a nossa estimativa anterior para  $1/\nu z$ , obtemos  $\gamma = 1,2946(9)$  e  $\nu = 0,6711(5)$ .

A tabela 4.2 resume todos os valores encontrados dos expoentes críticos discutidos neste trabalho, juntamente com os valores destes expoentes obtidos de acordo com as referências [42, 33].

**Tabela 4.2** Expoentes críticos do modelo  $XY$  obtidos neste trabalho através da dinâmica crítica de tempos curtos a partir de um estado inicial ordenado. Empregamos uma rede com  $256 \times 256 \times 256$  rotores. Para comparação, incluímos resultados obtidos para o mesmo modelo utilizando outros métodos.

	Este trabalho	Ref. [42]	[33]
$\nu$	0,6711(5)	0,6717(1)	0,670(14)
$\beta$	0,3461(9)	0,3486(1)	0,349(6)
$\gamma$	1,2946(9)	1,3178(2)	1,316(18)
$z$	1,5(1)	—	—



**Figura 4.10** Magnetização em função do tempo em uma escala duplo-logarítmica, para o valor estimado da densidade de energia mais próxima do valor crítico. A inclinação da reta fornece uma estimativa para o expoente  $\beta/vz$ .

## Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação realizamos um estudo das propriedades críticas de um modelo  $XY$  definido em redes cúbicas simples. O modelo, aqui estudado, difere do usual no tocante a um termo de energia cinética rotacional acrescida ao hamiltoniano de interação. Ou melhor, os rotores clássicos planares, além do familiar momento magnético de spin, também possui inércia rotacional. Com a adição da energia cinética, foi possível escrever um conjunto acoplado de equações de movimento que governa a evolução dinâmica do sistema. Dessa forma, o sistema evolui no tempo obedecendo uma dinâmica determinística, ao contrário de uma evolução estocástica como é usual no estudo de fenômenos críticos através de simulações computacionais. Nossa principal motivação para este estudo, foi obter propriedades críticas através de uma dinâmica determinística e verificar se as equações *microscópicas* de movimento reproduzem os resultados do método dos ensembles estatísticos.

Nessa abordagem, precisamos resolver numericamente um enorme número de equações acopladas por um intervalo de tempo relativamente longo. Em nosso trabalho, devido nossas limitações computacionais, analisamos o sistema durante sua relaxação dinâmica em tempos curtos — numa escala de tempo curta comparada ao tempo necessário para o sistema atingir o equilíbrio. Isto evitou as dificuldades associadas ao longo tempo de correlação dos sistemas críticos em equilíbrio, visto que as medidas são realizadas muito antes que o sistema alcance o equilíbrio e as flutuações se tornem muito correlacionadas.

Nossas análises possibilitaram encontrar os expoentes críticos estáticos e o expoente dinâmico. Além disso, conseguimos retratar o comportamento da magnetização, estimar o valor da energia crítica e comprovar que a transição é de segunda ordem, concordando com o que é bem conhecido sobre o modelo  $XY$  tridimensional.

O método de integração utilizado para solucionar as equações acopladas de movimento, mostrou-se eficiente para reproduzir a evolução temporal deste sistema. Outros algoritmos de integração falharam em reproduzir a dinâmica microscópica de modelos com simetria contínua.

Os resultados mostram que a dinâmica determinística descrita pelas equações de movimento hamiltonianas está na mesma classe de universalidade da dinâmica estocástica, descrita por algoritmos Monte Carlo ou, Equações de Langevin. Pelo menos para o modelo estudado

aqui. Porém, acreditamos o mesmo deve acontecer para outros modelos com as mesmas características.

Os resultados obtidos em nosso trabalho concordam com os resultados obtidos em dinâmicas estocásticas para modelos com a mesma classe de universalidade. Embora não tenhamos apresentado uma estimativa para o expoente dinâmico  $z$ , resultados preliminares indicam  $z \sim 1.5$ . Note que o valor de  $z$  considerado exato é  $3/2$  para o modelo  $XY$  tridimensional.

As equações microscópicas de movimento, como as hamiltonianas, são determinísticas por natureza. Qualquer contribuição estocástica vem apenas dos estados iniciais. Nesse contexto, a abordagem determinística é bastante diferente das estocásticas. Logo, a lei de escala que descreve uma ou outra abordagem poderiam ser diferentes. De acordo com os resultados aqui apresentados, não há diferença entre as abordagens.

Não obstante, a dinâmica estocástica gera estados de um ensemble canônico, a dinâmica determinística estados microcanonicamente distribuídos. Nesse caso, a lei de escalonamento dinâmico deve ser modificada para levar em conta a diferença entre os ensembles. No modelo  $XY$  tridimensional o expoente  $\alpha$  associado à divergência do calor específico é muito próximo de zero e nenhuma modificação da lei de escala é necessária para  $\alpha = 0$ .

Portanto, é necessário considerarmos o outro modelo com  $\alpha \neq 0$  e verificarmos que modificação deve ser feita no escalonamento dinâmico para levar em conta a diferença de ensemble.

Além disso, a única condição inicial estudada aqui foi de um estado completamente ordenado. Porém, escalonamento dinâmico também é esperado para um estado inicial desordenado. Nesse caso, um novo expoente dinâmico entra em cena, que governa o crescimento inicial do parâmetro de ordem. Um estudo na linha desenvolvida nesta dissertação pode ser conduzido para uma condição inicial desordenada.

## Referências Bibliográficas

- [1] L. M. da Costa. O Modelo de Ising 2D. *Física Estatística*, page 1, 2006.
- [2] D. C. Rapaport. “*The Art of Molecular Dynamics Simulation*”. Cambridge University Press ISBN 0-521-44561-2, 2004.
- [3] A. J. C. Varandas. Sobre os Fundamentos da Mecânica Estatística. *Boletim Sociedade Portuguesa de Química*, (22):25, 1985.
- [4] T. Tomé e M. J. de Oliveira. “*Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*”. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.
- [5] D. P. Landau e K. Binder. “*A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*”. Cambridge University press, 2009.
- [6] D. Stauffer. Kinetics of Clusters in Ising Models. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 186:197–209, July 1992.
- [7] H. K. Janssen; B. Schaub e B. Schmittmann. New Universal Short-Time Scaling Behaviour of Critical Relaxation Processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 73(4):539–549, 1989.
- [8] E. V. Albano; M. A. Bab; G. Baglietto; R. A. Borzi; T. S. Grigera; E. S. Loscar; D. E. Rodriguez; M. L. Rubio Puzzo e G. P. Saracco. Study of Phase Transitions from Short-Time Non-Equilibrium Behaviour. *Reports on Progress in Physics*, 74(2):026501, 2011.
- [9] N. Metropolis e S. Ulam. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341, 1949.
- [10] I. Sobol. *O Método de Monte Carlo*. Editora Mir Moscou, 1983.
- [11] H. Yoriyaz. Monte Carlo Method: Principles and Applications in Medical Physics. *Revista Brasileira de Física Médica*, 3(1):141, 2009.
- [12] G. A. Canova. Fases Ordenadas no Modelo XY Generalizado, 2013.

- [13] F. Y. Wu. The Potts Model. *Reviews of Modern Physics*, 54:235–268, Jan 1982.
- [14] Hong Li e Tian-lun Chen. Thermodynamic Study of 3D XY Model and Heisenberg Model by Analytical Method. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 100:283—287, April 1996.
- [15] J. B. Santos-Filho e J. A. Plascak. Monte Carlo Simulations of the Site-Diluted Three-Dimensional XY Model. *Computer Physics Communications*, 182(5):1130–1133, 2011.
- [16] M. A. Novotny. “A Tutorial on Advanced Dynamic Monte Carlo Methods for Systems with Discrete State Spaces”. World Scientific Publishing Co, 2001.
- [17] J. D. Muñoz; M. A. Novotny e S. J. Mitchell. Rejection-free Monte Carlo Algorithms for Models with Continuous Degrees of Freedom. *Physical Review E*, 67(2):026101, 2003.
- [18] M. D. Coutinho-Filho. Reflexões sobre o Desenvolvimento da Mecânica Estatística: Um Tributo a Ludwig Boltzmann (1844-1994). *Química Nova*, 17(6):536–550, 1994.
- [19] J. W. Gibbs. “Elementary Principles in Statistical Mechanics”. 1902. [https://en.wikisource.org/wiki/Elementary\\_Principles\\_in\\_Statistical\\_Mechanics](https://en.wikisource.org/wiki/Elementary_Principles_in_Statistical_Mechanics).
- [20] UNICAMP. “Do Microscópico ao Macroscópico”.
- [21] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 1. Oxford University Press, 1987.
- [22] D. C. M. Silva. A Ponta de um Iceberg.
- [23] Wikipédia. Ponto Triplo.
- [24] H. E. Stanley. The Relationship Between Liquid, Supercooled and Glassy Water. *Nature*, 396:329–335, 1998.
- [25] R. J. Baxter. “Exactly Solved Models in Statistical Mechanics”. Academic Press Limited-San Diego, 1989.
- [26] Britannica Escola. Molécula.
- [27] A. Cheung. *Phase Transitions and Collective Phenomena*. 2011.
- [28] E. Miranda. *Transições de Fase e o Grupo de Renormalização*. 2005.
- [29] J. M Yeomans. *Statistical mechanics of phase transitions*. 2013.

- [30] M. D. Coutinho-Filho. Effect of Random Defects on the Critical Behaviour of Ising Models. *Journal of Physics C*, 7(6):1671–1692, 1974.
- [31] M. N. Barber e W. Selke. Phenomenological Renormalisation of Monte Carlo Data. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(11):L617, 1982.
- [32] A. Asad e B. Zheng. Non-Equilibrium Critical Dynamics of Two-Dimensional XY Model with Hamiltonian Equations of Motion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(44):449801, 2008.
- [33] K.P. do Nascimento. Tese: Sociodinâmica: Uma Abordagem por Simulações Computacionais, 2014.
- [34] J. B. dos Santos Filho. Estudo do Modelo XY Vetorial de Blume-Emery-Griffiths: aplicações a sistemas magnéticos e a filmes de misturas de  $3\text{He}-4\text{He}$ , 2011.
- [35] H. Mermin, N. D. e Wagner. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in one- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Physical Review Letters*, 17:1133–1136, Nov 1966.
- [36] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless. Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181, 1973.
- [37] Z. Hadzibabic<sup>1</sup>; P. Krüger; M. Cheneau<sup>1</sup>; B. Battelier e J. Dalibard. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Crossover in a Trapped Atomic Gas. *Nature*, 441:1118–1121, june 2006.
- [38] K. Jensen; A. Karch; D. T. Son e E. G. Thompson. Holographic Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Transitions. *Physical Review Letters*, 105(4):041601, jul 2010.
- [39] T. Matsubara e H. Matsuda. A Lattice Model of Liquid Helium, I. *Progress of Theoretical Physics*, 16(6):569–582, 1956.
- [40] D. D. Betts. Critical Properties of the XY Model. *Physica B+C*, 86:556–561, jan 1977.
- [41] D. C. Carvalho. Dissertação: Estudo Analítico de Modelos Tipo XY Tridimensionais Puros e Diluídos Via Princípio Variacional de Bogoliubov, 2011.
- [42] M. Campostrini. Critical Behavior of the Three-Dimensional XY Universality Class. *Physical Review B, APS*, 63(21):214503, 2001.

- [43] S. Kanaun. “An Efficient Numerical Method for Calculation of Elastic and Thermo-Elastic Fields in a Homogeneous Medium with Several Heterogeneous Inclusions”. *World Journal of Mechanics*, 1(2):31–43, 2011.
- [44] N. Hatano e M. Suzuki. *Finding Exponential Product Formulas of Higher Orders*. Springer Berlin Heidelberg, 2005.
- [45] M. Suzuki. Fractal Decomposition of Exponential Operators with Applications to Many-Body THEories and Monte Carlo simulations. *Physics Letters A*, 146(6):319–323, 1990.
- [46] M. Suzuki. Quantum Monte Carlo methods and General Decomposition Theory of Exponential Operators and Symplectic Integrators. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 205(1):65–79, 1994.
- [47] Static Phenomena Near Critical[ points.
- [48] Instituto de Pesquisa Econômica de Pernambuco. *Modelagem de Sistemas Complexos para Políticas Públicas*. ipea, 2015.
- [49] V. Privman. “*Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*”, volume 1. World Scientific, 1990.
- [50] B. Zheng. Monte Carlo Simulations of Short-Time Critical Dynamics. *International Journal of Modern Physics B*, 12(14):1419–1484, 1998.
- [51] A. J. F. Costa, L. S. A. e de Souza. Continuous Majority-Vote Model. *Physics. Review E*, 71(5):056124, May 2005.
- [52] HOWARD L. JONES. Jackknife Estimation of Functions of Stratum Means. *Biometrika*, 61(2):343, 1974.
- [53] Plasma Gate. Grace. available online at <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/> (access, 20 April 2017).
- [54] D. Nogueira, F. S. e Manske. Critical Dynamics, Duality, and the Exact Dynamic Exponent in Extreme Type II Superconductors. *Physics. Review B*, 72(5):014541, May 2005.