

CARLOS EDUARDO KRASSINSKI SOARES

**ESTUDO DO EFEITO DE DESORDEM NO
MODELO DE POTTS COM INTERAÇÕES
DE LONGO ALCANCE**

FLORIANÓPOLIS - SC

2017

CARLOS EDUARDO KRASSINSKI SOARES

**ESTUDO DO EFEITO DE DESORDEM NO
MODELO DE POTTS COM INTERAÇÕES DE
LONGO ALCANCE**

Tese submetida ao programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Orientador: Nilton da Silva Branco

FLORIANÓPOLIS - SC

2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Soares, Carlos Eduardo Krassinski

Estudo do efeito de desordem no modelo de Potts com
interações de longo alcance. / Carlos Eduardo Krassinski
Soares ; orientador, Nilton da Silva Branco -
Florianópolis, SC, 2017.

108 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas.
Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. Fenômenos críticos. 3. Transições de fase. 4.
Modelo de Potts. 5. Método de Monte Carlo. I. Branco,
Nilton da Silva. II. Universidade Federal de Santa
Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Agradecimentos

Quero agradecer ao meu orientador e amigo, Professor Nilton da Silva Branco, pela oportunidade de realizar este trabalho. Obrigado pela dedicação, paciência e por estar sempre disposto a colaborar não só com projeto mas em outras questões, auxiliar com as minhas dúvidas e direcionar meu trabalho. Muito obrigado!

Aos professores João Plascak, Wagner Figueiredo e Marcio Santos pelas contribuições e sugestões para o trabalho.

Quero agradecer em especial a minha mãe pela educação, pelo amor recebido, por ser essa pessoa tão amável, exemplo de simplicidade e generosidade. Sem você eu nada seria. Sou eternamente grato por tudo. Você é a melhor mãe que um filho poderia ter!

À minha namorada Karina A. Soares, pela companhia nesses anos, carinho e apoio fornecido. Obrigado pela paciência pelos dias que ficamos longe, pelas palavras de incentivo, por deixar meus dias mais alegres, me fazer sorrir, por ser tão especial. Você fez a diferença me motivando a seguir em frente e nunca desistir. Muito obrigado por tudo Coração! Te amo. *“Because all we really need to survive is one person who truly loves us”*.

À minha irmã e meu pai pelo apoio em muitos momentos e ajuda financeira fornecida.

Ao meu querido amigo Raphael E. P. Salem pela ajuda fornecida em tantos momentos da minha vida. São anos de amizade desde o ensino médio, você fez parte em me direcionar na minha vida acadêmica, me ajudar também em muitos momentos difíceis que passei. É bom ter você como amigo pra contar em qualquer momento. Valeu por tudo rapaz!

À minha querida amiga Cristiane R. Zucconelli pela ajuda,

incentivo e conselhos. Sou muito grato por tudo que você fez por mim. Ter conhecido você me fez entender melhor o significado da palavra amizade. Sempre vou levar comigo seus ensinamentos, suas ideias. Você é uma amiga muito especial. “Você que me diz as verdades com frases abertas”.

Ao pessoal da sala de Mecânica Estatística e ao Daniel Salvador, Paulo, Ian e Daniel Girardi pelas ajudas nas discussões e auxílios em programação. Agradeço também a Jheniffer Gonsalves por me ajudar em muitos momentos para a realização da tese. Obrigado!

Ao pessoal da casa, Bruno Clasen, Rafael Hillesheim pelas conversas, churrascos e toda ajuda fornecida nesses anos que convivemos juntos.

Ao meu orientador de mestrado e amigo, Professor Antonio Sérgio Magalhães de Castro, por toda colaboração fornecida ao longo dos anos desde a iniciação científica até o mestrado.

Ao secretário Antonio Marcos Machado da pós graduação de Física da UFSC, pelo excelente trabalho e colaboração realizado no período que estive na UFSC sempre disposto a ajudar.

Ao suporte financeiro da agência brasileira CAPES.

Determinação é o combustível da vitória.

Resumo

Neste trabalho, é estudado o modelo de Potts unidimensional incluindo desordem, com interações ferromagnéticas decaindo com a distância r na forma $1/r^{1+\sigma}$. Na primeira parte deste trabalho, tratamos este modelo dentro grupo de renormalização de campo médio para transições contínuas em $q = 2$ e $q = 3$ estados sob diferentes valores de σ ; utilizando a expansão em primeira ordem na magnetização, foram obtidas estimativas para o acoplamento crítico e ambos os expoentes y_t e y_h . Estas estimativas são extrapoladas para o limite termodinâmico, usando os chamados processos de extrapolações BST e VBS. Além disso, o grupo de renormalização de campo médio estendido foi aplicado no caso homogêneo, permitindo obter os expoentes de campo de superfície y_{h_s} .

Na segunda parte, simulações de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Wolff modificado possibilitaram obter resultados numéricos sob diferentes tamanhos de redes. As análises dos dados foram feitas pelos métodos de histogramas simples e múltiplos, permitindo que o método de escala de tamanho finito fosse utilizado para a determinação dos expoentes críticos. Considerando diferentes valores de q e σ , foi investigado o efeito de diluição nas interações de longo alcance; foi verificado que no modelo de 3 estados para $\sigma = 0, 5$ no caso homogêneo o sistema exibe transição de primeira ordem, enquanto que a introdução de diluição leva o sistema para transição de segunda ordem. Para o modelo de 2 estados, os casos analisados de transição de segunda ordem, foram obtidos os expoentes críticos α , β , γ e ν no caso homogêneo e diluído.

Palavras-chave: Modelo de Potts, interações de longo-alcance, grupo de renormalização de campo médio, Monte Carlo.

Abstract

In this work, we study the one-dimensional Potts model including disorder, with ferromagnetic interactions decaying with distance r as $1/r^{1+\sigma}$. In the first part of this work, we analyzed this model using the mean field renormalization group for continuous transitions in $q = 2$ and $q = 3$ states under different values of σ ; using the first order expansion in the magnetization, estimates were obtained for the critical coupling and for both exponents y_t and y_h . These estimates are extrapolated to the thermodynamic limit, using the so-called BST and VBS extrapolation processes. In addition, the extend mean field renormalization group was applied in the homogeneous case, in order to obtain the surface field exponent y_{h_s} .

In the second part, we performed Monte Carlo simulations, using the modified Wolff algorithm in order to obtain numerical results under different lattice sizes. Data analysis was performed using simple and multiple histograms methods, allowing the finite size scale method to be used for the determination of critical exponents. Considering different values of q and σ , the dilution effect on the long range interactions was investigate; it was verified that in the 3-state model for $\sigma = 0.5$, in the homogeneous case, the system exhibits a first order transition, while the introduction of dilution leads the system to a continuous transition. For the 2-state model, the studied cases of continuous transition, we obtain the critical exponents α , β , γ and ν for the homogeneous and for the diluted case.

Keywords: Potts model, long range interactions, mean field renormalisation group, Monte Carlo.

Lista de figuras

- Figura 1 – Ilustração do modelo de Potts unidimensional para o caso puro (a) e o caso diluído (b). Cada sítio interage com os demais sítios da rede e a constante de acoplamento é dada por $J(r) = 1/r^{1+\sigma}$ com r sendo a distância entre os sítios. 18
- Figura 2 – Dados da temperatura crítica T_c em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$ 25
- Figura 3 – Dados da temperatura crítica T_c em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$ 26
- Figura 4 – Dados do expoente crítico y_h em função p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$ 27
- Figura 5 – Dados do expoente crítico y_h em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$ 28

Figura 6 – Dados do expoente crítico y_t em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$	31
Figura 7 – Dados do expoente crítico y_t em função p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$	32
Figura 8 – Ilustração do algoritmo de Wolff modificado. A partir do sítio s_0 (\uparrow), são determinados quais sítios serão incluídos na ilha e após esse processo a ilha é transformada em um novo estado (\downarrow).	42
Figura 9 – Gráfico função de correlação $\varphi(t)/\varphi(0)$ em função de t para o modelo de Potts de 3 estados de uma rede linear de tamanho $L=25000$	49
Figura 10 – Gráfico semi-log da função de correlação $\varphi(t)$ em função de t para o modelo de Potts de 3 estados de uma rede linear de tamanho $L=25000$. O valor de τ é obtido pelo inverso da inclinação da reta (laranja).	50
Figura 11 – Resultados obtidos pelas simulações (quadrado) realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$. As curvas representam os valores obtidos pelo método dos múltiplos histogramas	57
Figura 12 – Resultados obtidos pelas simulações (quadrado) realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$. As curvas, representam os valores obtidos pelo método dos múltiplos histogramas	59
Figura 13 – Gráfico da distribuição da energia para redes lineares no caso homogêneo ($p=1$), obtido pelas simulações no modelo de Potts de 3 estados para $\sigma = 0,5$	62

Figura 14 – Gráfico da distribuição da energia para redes lineares no caso diluído ($p=0,7$) obtidos pelas simulações no modelo de Potts de 3 estados para $\sigma = 0,5$	63
Figura 15 – Gráfico da barreira da energia ΔF em função do inverso do tamanho da rede linear $1/L$ para o modelo de Potts de 3 estados com $\sigma = 0,5$ para os casos homogêneo ($p = 1$) e diluído ($p = 0,7$). No caso diluído, as barras de erro são menores que os símbolos.	64
Figura 16 – Gráfico log-log dos máximos obtidos da derivada de $\log\langle m \rangle$ e de U_4 em relação a K para caso de $q = 2$ e $p = 1$	66
Figura 17 – Gráfico log-log de $\langle m \rangle \langle T_c(L) \rangle$ obtido em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$	67
Figura 18 – Gráfico log-log dos máximos obtidos da susceptibilidade χ em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$	68
Figura 19 – Gráfico log-log dos máximos obtidos do calor específico em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$	68
Figura 20 – Resultados dos expoentes obtidos pelas simulações realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 2$ com $\sigma = 0,7$	70
Figura 21 – Resultados dos expoentes obtidos pelas simulações realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$ com $\sigma = 0,5$	72

Lista de tabelas

Tabela 1 – Grandezas termodinâmicas e leis de potência com os respectivos expoentes críticos. Em todas as definições, temos $t \rightarrow 0$	3
Tabela 2 – Valores obtidos para $K_c = 1/T_c$ no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$	25
Tabela 3 – Valores obtidos para T_c no caso puro para o modelo de Potts com $q = 3$	26
Tabela 4 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$	27
Tabela 5 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$	28
Tabela 6 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$	29
Tabela 7 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$	30
Tabela 8 – Valores obtidos para $K_c = 1/T_c$ no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$	34
Tabela 9 – Valores obtidos para y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$	34
Tabela 10 – Valores obtidos para o expoente y_{h_s} no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$	34
Tabela 11 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$	35
Tabela 12 – Valores obtidos para T_c no caso puro para o modelo de Potts com $q = 3$	36
Tabela 13 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$	36
Tabela 14 – Valores obtidos para o expoente y_{h_s} no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$	36

Tabela 15 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$	36
Tabela 16 – Comparação dos expoentes obtidos no caso homogêneo e diluído no modelo de Potts de dois estados com $\sigma = 0,7$	71

Sumário

1	Introdução	1
2	Método do Grupo de Renormalização de Campo Médio	11
2.1	O Grupo de Renormalização	11
2.2	Grupo de Renormalização de Campo Médio	14
2.3	Interação de Longo Alcance no Modelo de Potts Unidimensional	17
2.4	Métodos de extrapolação	21
2.4.1	Método BST	21
2.4.2	Método VBS	22
2.5	Resultados	24
2.5.1	Grupo de renormalização de campo médio estendido	32
3	Método de Monte Carlo em sistemas de longo alcance com diluição	39
3.1	Correlação no modelo de Potts unidimensional com diluição	47
3.2	Métodos de histograma	49
3.2.1	Método do histograma simples	50
3.2.2	Múltiplo histograma	53
3.2.3	Derivadas de grandezas termodinâmicas	57
3.3	Resultados	59
3.3.1	Determinando a ordem da transição	60
3.3.2	Escala de tamanho finito	64
3.3.3	Determinando os expoentes críticos: caso $q=2$, $\sigma = 0,7$ e $p=1$	66
3.3.4	Determinando os expoentes críticos: caso $q=2$, $\sigma = 0,7$ e $p = 0,7$	69

3.3.5	Determinando os expoentes críticos: caso $q = 3$, $\sigma = 0,5$ e $p = 0,7$	71
4	Conclusões e Perspectivas	75
Referências	79

1 Introdução

Em muitos problemas físicos, a busca para se obter uma forma matemática adequada em descrever tais processos nem sempre se torna uma tarefa fácil. Muitas vezes, apenas soluções aproximadas podem ser encontradas. Em outros casos é necessário ainda recorrer a soluções numéricas. O avanço computacional nos últimos anos permitiu um desenvolvimento importante e crescente nas pesquisas científicas, sendo à Física amplamente aplicados os recursos computacionais.

Uma das áreas que despertaram e ainda tem atraído atenção de pesquisas na Física é a que está relacionada aos fenômenos magnéticos. Poucos desses sistemas dispõem de soluções exatas e não-triviais; como exemplo, podemos citar o modelo de Ising (ISING, 1925; BRUSH, 1967), resolvido analiticamente por Ernst Ising em 1925 em uma dimensão e por Lars Onsager em duas dimensões em 1944 na ausência de campo magnético (ONSAGER, 1944). Entretanto, devido à complexidade de casos mais gerais, há uma limitação para se obter soluções exatas (BAXTER, 2007). Com o desenvolvimento tecnológico fornecendo melhores processadores e a introdução de novos algoritmos o uso de simulações e análises numéricas tem-se tornado uma importante ferramenta no estudo de sistemas de muitos corpos, fornecendo resultados dos modelos matemáticos.

Além disso, teorias e aproximações foram desenvolvidas para explicar os fenômenos físicos, e uma delas é a teoria do grupo de renormalização (STANLEY, 1971; YEOMANS, 1992). K. G. Wilson introduziu o formalismo do grupo de renormalização (WILSON, 1971a; WILSON, 1971b), baseado na ideia de invariância de escala, introduzido por Widom (WIDOM, 1965b; WIDOM, 1965a), e na não analiticidade da energia livre no ponto crítico, ou seja, na vizinhança de uma transição de fase contínua. É uma eficiente ferramenta para

tratar problemas teóricos em vários campos da física, sendo aplicado em muitos casos na Mecânica Estatística.

Na natureza, diversos sistemas de muitas partículas, na condição de equilíbrio, apresentam diversas fases termodinâmicas, de acordo com as condições externas impostas a ele. Uma fase é um estado de agregação da matéria caracterizada pela densidade, estrutura cristalina, mobilidade, etc. Como exemplos, temos as fases sólida, líquida e gasosa da água e outras substâncias. Há também compostos que podem assumir fases magnéticas, como o ferromagneto, no qual os spins se alinham em uma determinada direção dando origem a uma magnetização macroscópica. Cada uma dessas fases possui características próprias que diferem umas das outras. Ao realizar uma mudança em algum parâmetro externo, como temperatura ou campo magnético, por exemplo, de modo que ocorra transição entre uma fase e outra num mesmo sistema, essa transição se dá em geral de forma abrupta, num ponto, linha ou superfície. Um exemplo é o de uma substância ferromagnética que, quando aquecida, perde sua imantação, tornando-se paramagnética. Nessa fase paramagnética a substância só adquire magnetização quando se aplica um campo magnético externo e na ausência desse campo a magnetização se anula. Na fase ferromagnética, uma magnetização permanece mesmo depois na ausência do campo magnético.

Para a descrição das transições de fases, uma grandeza importante é o parâmetro de ordem, o qual assume o valor nulo na fase desordenada ($T > T_c$) e valores não nulos na fase ordenada ($T < T_c$) ao considerar a variação do parâmetro T . Um exemplo de parâmetro de ordem é a magnetização em alguns sistemas magnéticos. Quanto à classificação das transições de fases, elas são classificadas como sendo contínuas ou descontínuas, conforme as primeiras derivadas da energia livre sejam contínuas ou descontínuas, respectivamente. A transição de fase de primeira ordem é caracterizada por uma descontinuidade no parâmetro de ordem e neste caso o sistema apresenta coexistência de fases. Já para transições contínuas (chamada também de transição de

segunda ordem), o parâmetro de ordem se modifica de forma contínua.

Um fato verificado experimentalmente é que, nas proximidades da transição de fase contínua, as grandezas termodinâmicas podem ser bem representadas por certos expoentes, de modo a obedecer leis de potência. Os expoentes dessas grandezas recebem o nome de expoentes críticos. A tabela 1 mostra algumas grandezas termodinâmicas e seus respectivos expoentes críticos nas proximidades do ponto crítico para sistemas magnéticos, onde foi introduzida a notação conveniente da temperatura reduzida t :

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (1.1)$$

Tabela 1 – Grandezas termodinâmicas e leis de potência com os respectivos expoentes críticos. Em todas as definições, temos $t \rightarrow 0$.

Quantidade Física	Lei de potência
Calor específico a campo nulo	$c \sim t ^{-\alpha}$
Susceptibilidade isotérmica a campo nulo	$\chi_T \sim t ^{-\gamma}$
Magnetização a campo nulo	$m \sim t ^{-\beta}, t < 0$
Comprimento de correlação	$\xi \sim t ^{-\nu}$
Função de correlação	$\Gamma(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, r \gg 1$

Um resultado interessante observado, sobre o conceito de universalidade, é que sistemas aparentemente diferentes apresentam o mesmo comportamento crítico. Este comportamento de universalidade depende de poucas propriedades do modelo, como número de componentes do parâmetro de ordem, dimensão do sistema, e se as interações são de curto ou longo alcance (HOHENBERG; HALPERIN, 1977). Assim, sistemas diferentes, que apresentam os mesmos expoentes críticos são ditos que possuem a mesma classe de universalidade.

Dentre as formulações desenvolvidas na tentativa de explicar fenômenos físicos sob uma descrição matemática, pode-se citar o modelo de Potts. Ele foi proposto por Domb (DOMB, 1974) e foi tema

de estudo no doutoramento de Renfrey B. Potts (1952). Trata-se de um modelo mais geral, quando comparado ao modelo de Ising (que possui apenas dois estados possíveis); no modelo de Potts, considera-se que há q estados diferentes, $(0, 1, \dots, q - 1)$. Ele tem despertado grande interesse ao apresentar diferentes tipos de transições para diferentes valores de q em distintas dimensões e também pela grande variedade de aplicações; várias substâncias e sistemas podem ser considerados como realizações do modelo de Potts (JONGH, 1978; WU, 1982). Uma revisão sobre o modelo de Potts pode ser encontrada em (WU, 1982).

O hamiltoniano do modelo de Potts, na ausência de campo magnético, é definido por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{s_i, s_j}, \quad (1.2)$$

onde $\sum_{\langle i,j \rangle}$ refere-se à soma feita sobre os primeiros vizinhos de uma dada rede e

$$\delta_{s_i, s_j} = \begin{cases} 0, & \text{se } s_i \neq s_j \\ 1, & \text{se } s_i = s_j, \end{cases} \quad (1.3)$$

com $s_i = 0, 1, \dots, q - 1$ sendo o valor do estado atribuído ao sítio i . O valor de J_{ij} pode variar ao longo da rede e também em diferentes direções. O caso mais simples é considerar $J_{ij} = J_0$: $J_0 > 0$ representa o caso ferromagnético e $J_0 < 0$ o caso antiferromagnético.

Quanto aos valores atribuídos de q , em $q = 1$, por exemplo, temos o caso de percolação por ligações (WU, 1982), já para $q = 2$ ele recai sobre o modelo de Ising, fazendo-se a substituição $\delta_{s_i, s_j} = (s_i s_j + 1)/2$ e $J = J_0/2$ em que $s_i = \pm 1$ e J representa a constante de interação dos sítios no modelo de Ising. Outra consideração que pode ser feita, além do caso uniforme, é o tratamento de interações aperiódicas¹, considerada, por exemplo, para $d = 2$ e diferentes valores de q (GIRARDI; BRANCO, 2011).

¹ Sequências aperiódicas são formadas através de regras determinísticas. Contudo, nenhuma sub-sequência apresenta algum período de repetição.

Sobre o modelo de Potts homogêneo ainda, pode-se destacar alguns resultados: existe um valor de q_c para o qual, para valores de q acima desse valor q_c , as transições de fase são de primeira ordem, e para valores abaixo de q_c as transições são contínuas. Devemos mencionar que este valor de q_c depende da dimensão d do sistema (NIENHUIS; RIEDEL; SCHICK, 1981). Em duas dimensões para $q \leq 4$, o modelo exibe transição contínua e para $q > 4$ a transição é de primeira ordem (BAXTER, 2007; BAXTER; TEMPERLEY; ASHLEY, 1978). Considerando três dimensões, com $q > 2$ as transições são de primeira ordem (WU, 1982). Para uma dimensão, no caso uniforme de interação entre primeiros vizinhos, o valor de T_c , para todo q , é $T_c = 0$ (TSALLIS; MAGALHÃES, 1996). O hamiltoniano (1.2) torna essa descrição matemática muito rica nas análises de diversos sistemas físicos. Através deste modelo, um efeito adicional que pode ser levado em conta, de extrema importância, são interações de longo alcance.

Modelos microscópicos com interações de longo alcance do tipo $1/r^{d+\sigma}$ têm despertado um grande interesse durante as últimas décadas. Além da relevância de se entender os problemas fundamentais, eles desempenham um papel importante para uma grande classe de modelos físicos, biológicos ou químicos. As interações de longo alcance começaram a atrair um interesse na modelagem microscópica, abrangendo um número cada vez maior de sistemas. Do ponto de vista teórico, esses modelos são importantes para se estudar a influência de interações de longo alcance no comportamento crítico.

Dentro da descrição teórica dos modelos de estudo, estamos interessados no caso de uma dimensão para o modelo de Potts de dois e três estados. Seu comportamento crítico apresenta características interessantes, variando a classe de universalidade entre a de campo médio e a de sistemas com interações de curto alcance. De forma geral, para modelos de Potts unidimensional e com interação de troca decaindo com a distância como uma lei de potência (BISKUP; CHAYES;

CRAWFORD, 2006), o termo de acoplamento considerado é dado por:

$$J(r) = \frac{J_0}{r^{1+\sigma}}, \quad (1.4)$$

com J_0 constante e $J_0 > 0$.

Sob esta consideração, o modelo de Potts de q estados em uma dimensão com interações de longo alcance foi estudado analiticamente (AIZENMAN et al., 1988; AIZENMAN; FERNÁNDEZ, 1988; IMBRIE; NEWMAN, 1988) e numericamente (GLUMAC; UZELAC, 1993; CANNAS; MAGALHÃES, 1997) e na aproximação de campo médio na rede de Bethe (BERNARDES; Goulart Rosa, 1994). Esses modelos têm relevância em várias situações físicas: sistemas com interação $RKKY$ (FORD, 1982), fenômenos críticos em sistemas iônicos (PITZER; De Lima; SCHREIBER, 1985), segregação de fases em ligas (GIACOMIN; LEBOWITZ, 1996), reconhecimento de padrões (STOŠIĆ; FITTIPALDI, 1997), etc.

Para diferentes valores de σ há comportamentos diversos (CANNAS; MAGALHÃES; TAMARIT, 2000; CANNAS; MAGALHÃES, 1997). Estudos do modelo de Potts para $q = 2$ unidimensional para interações $1/r^{1+\sigma}$ foram realizados em (RUELLE, 1968; DYSON, 1969a; DYSON, 1969b), onde verificaram que não há temperatura crítica finita para $\sigma > 1$, e foi provado a existência de transição de fase com temperaturas diferente de zero para $0 < \sigma < 1$. Este resultado se mostra diferente de quando se considera o caso para interações de primeiros vizinhos, onde $T_c = 0$. Considerando o caso $\sigma > 1$, para $q \geq 1$, o comportamento crítico é o de um modelo de curto alcance, ou seja, não há fase ordenada a temperatura finita e a temperatura crítica é nula (CANNAS; MAGALHÃES, 1997; BREZIN; ZINN-JUSTIN; GUILLOU, 1976; DYSON, 1969a; FRÖHLICH; SPENCER, 1982; RUELLE, 1968; THOULESS, 1969). Para $\sigma \leq 0$, o sistema se torna não extensivo e o limite termodinâmico não está definido.

Nos primeiros trabalhos utilizando o grupo de renormalização para interações de longo alcance (FISHER; MA; NICKEL, 1972), analisando as classes de universalidade do modelo de $q = 2$ unidimen-

sional, dois regimes foram identificados: no intervalo $0 < \sigma < 1$, a temperatura crítica é finita e para $\sigma \leq 0,5$ os expoentes críticos são de tipo campo médio para o modelo em questão; para $\sigma > 0,5$ os expoentes variam com σ e não são conhecidos exatamente (FISHER; MA; NICKEL, 1972). Estas suposições foram parcialmente confirmadas (NAGLE; BONNER, 1970), mais tarde, em simulações de Monte Carlo (LUIJTEN; BLÖTE, 1996; LUIJTEN; BLÖTE, 1997; LUIJTEN, 1999; KRECH; LUIJTEN, 2000; BLÖTE; HERINGA; LUIJTEN, 2002). Estes resultados confirmam que os modelos de longo alcance possuem uma diversidade nas classes de universalidade com a variação de σ . Resultados numéricos para o expoente y_t indicam que o regime $1/2 < \sigma \leq 1$ pode ser dividido em duas partes: $y_t > 1/2$ para $1/2 < \sigma \lesssim 0,65$ e $y_t < 1/2$ para o intervalo restante, que corresponde a interações que decaem rápido (KRECH; LUIJTEN, 2000). Já no modelo de Potts de três estados, dependendo do valor de σ considerado, a transição pode ser de primeira ordem ou contínua (GLUMAC; UZELAC, 1998; UZELAC; GLUMAC; BARIŠIĆ, 2008).

Uma das questões recorrentes no caso de longo alcance é a possível existência de $\sigma_c(q)$, que indica o valor crítico de σ em que ocorre a separação da transição de primeira para segunda ordem. Resultados numéricos apontam a existência de um valor $\sigma_c(q)$, fornecido pela primeira vez por Glumac e Uzelac (GLUMAC; UZELAC, 1998) para o modelo de Potts de 3 estados unidimensional, utilizando simulações de Monte Carlo com base no algoritmo de ilhas desenvolvido por Erik Luijten e Henk W. J. Blöte (LUIJTEN, 2000; LUIJTEN; BLÖTE, 1995), determinando que $\sigma_c(q)$ situa-se entre 0,6 e 0,7, Krech e Luijten encontraram $\sigma_c(q) = 0,7$, isto é, valores de $\sigma < \sigma_c(q)$ ainda pertencem ao regime de primeira ordem, enquanto a transição de segunda ordem ocorre para valores de σ maiores que $\sigma_c(q)$ (KRECH; LUIJTEN, 2000). Reynal e Diep (REYNAL; DIEP, 2004) consideraram outros valores de q no modelo de Potts, para a determinação de $\sigma_c(q)$, em que foram obtidos $\sigma_c(3) = 0,72(1)$, $\sigma_c(5) = 0,88(2)$, $\sigma_c(7) = 0,94(2)$ e $\sigma_c(9) = 0,965(20)$. Em geral, há indicação de que $\sigma_c(q)$ aumenta com

q (REYNAL; DIEP, 2004).

Em $d = 1$, o caso de $\sigma = 1$ representa a interação com o inverso do quadrado da distância. O trabalho de Dyson (DYSON, 1969a), no modelo de Ising, mostrou que este caso representa o limite entre o caso em que há transição de fase à temperatura diferente de zero ($\sigma < 1$) e o caso em que $T_c = 0$ ($\sigma > 1$). Anderson e Yuval (ANDERSON; YUVAL, 1971) estudaram o modelo de Ising unidimensional relacionando ao problema de Kondo. Em 1982, Fröhlich e Spencer (FRÖHLICH; SPENCER, 1982) provaram rigorosamente a existência de transição de fase para $\sigma = 1$ no modelo de Ising. Para este valor de σ , a mudança da ordem da transição de fase de um sistema de segunda ordem para a primeira ordem ocorre em $q \geq 9$ (BAYONG; DIEP; DOTSENKO, 1999). Outro resultado obtido foi de que a temperatura de transição é dependente de q (LUIJTEN; MESSINGFELD, 2001). Neste trabalho, não será estudado este caso.

Além de incluir interações de longo alcance no modelo de Potts unidimensional, neste trabalho há também o interesse de analisar efeitos de desordem na rede. Do ponto de vista experimental, não é incomum que na natureza sistemas físicos sejam encontrados com impurezas; além disso, técnicas modernas de preparação de amostras permitem que estas impurezas, em várias situações, sejam construídas de modo controlado, a fim de obter mudanças adequadas no comportamento físico do sistema. Mais especificamente, sistemas com interação de longo alcance e desordem têm relevância na modelagem de sistemas ferroelásticos (VASSEUR et al., 2012).

Sob o enfoque teórico, o estudo de modelos com impurezas tem interesse claro, no que se refere à possibilidade de estas mudarem a classe de universalidade de sistemas que sofrem transições de fases. Quando esses sistemas, em sua versão uniforme, apresentam transições contínuas, uma indicação da influência das impurezas é dada pelo critério de Harris (HARRIS, 1974). O efeito da desordem leva a modificação da temperatura crítica quando comparada com o sistema homogêneo e, em sistemas em que ocorrem transições contínuas,

havendo uma mudança na classe de universalidade a introdução da desordem é denominada de relevante. Contudo, se a transição for de primeira ordem, o efeito da desordem pode conduzir o sistema a uma transição de fase de segunda ordem (IMRY; WORTIS, 1979).

Dessa forma, o propósito deste trabalho, no modelo de Potts, é adicionar diluição ao sistema nas interações de longo alcance, considerando diferentes valores de q e σ no modelo unidimensional.

O restante deste trabalho está organizado da seguinte forma: No capítulo 2 é feita uma revisão sobre o método do grupo de renormalização de campo médio, os métodos de extrapolação utilizados e em seguida são apresentados os resultados obtidos. Além disso, utilizaremos ainda uma versão mais atualizada do grupo de renormalização de campo médio ao modelo puro. No capítulo 3, é apresentado o método de Monte Carlo utilizando algoritmo de ilha para a aplicação do modelo de Potts com interações de longo alcance com introdução de diluição. Para o tratamento dos dados numéricos, descrevem-se os métodos de histograma e da análise de escala de tamanho finito. Posteriormente, são apresentados os resultados obtidos considerando diferentes valores de q e σ . Finalmente, no capítulo 4 apresentamos as conclusões e perspectivas futuras.

2 Método do Grupo de Renormalização de Campo Médio

No desenvolvimento dos estudos de fenômenos críticos, muitos modelos físicos foram criados para tentar descrever o comportamento desses fenômenos, sendo que muito deles se deparam com a impossibilidade de se obter resultados exatos. Deste fato, métodos de aproximação e técnicas computacionais são de grande ajuda para tratar estes modelos.

Neste capítulo é realizada uma extensão do modelo de Potts unidimensional, considerando o caso de interações de longo alcance, para diferentes valores do decaimento σ dessas interações. Além disso, adiciona-se também efeitos de diluição de sítios na rede linear. Neste caso, os cálculos numéricos envolvidos se tornam mais complexos quando comparados com o caso homogêneo e de interações de primeiros vizinhos, devido ao grande número de interações que se deve levar em conta e também devido às diversas configurações associadas a diluição, ocorrendo assim, um aumento no tempo computacional para as realizações destes processamentos. A primeira abordagem a ser considerada para interações de longo alcance no modelo de Potts com diluição foi empregar o grupo de renormalização de campo médio. Revisaremos brevemente este método a seguir.

2.1 O Grupo de Renormalização

Proposto por K. G. Wilson em 1971, quando publicou o primeiro artigo descrevendo o grupo de renormalização (WILSON, 1971a; WILSON, 1971b), seu trabalho revolucionou a área de fenômenos críticos e ele recebeu o prêmio Nobel em Física por este desenvolvi-

mento em 1982. A teoria do grupo de renormalização se baseia na não analiticidade da energia livre na proximidade do ponto crítico e na invariância por escala do modelo.

A técnica do grupo de renormalização se divide em duas classes: uma denominada no espaço recíproco, por tratar as quantidades descritas no espaço \vec{k} , e a outra denominada de espaço real, que trata ao envolver quantidades que dependem da posição no espaço das coordenadas usual. Nesta teoria, uma das características da criticalidade é que o comprimento de correlação é infinito e sistemas nesta condição são invariantes por qualquer transformação de escala¹.

Widom(WIDOM, 1965a; WIDOM, 1965b) formulou a hipótese de escala de que, nas proximidades do ponto crítico, a energia livre pode ser escrita como a soma da parte analítica, considerada como constante na região crítica, mais a parte que contém as singularidades da função. Essa parte singular é uma função homogênea descrita como $f(\lambda^a t, \lambda^b h) = \lambda f(t, h)$ por exemplo. Dessa forma, pode-se obter as derivadas da energia livre, obtendo o comportamento assintótico nas vizinhanças do ponto crítico e as relações de escala.

O grupo de renormalização utiliza-se da mudança do comprimento de escala do sistema removendo graus de liberdade. O primeiro passo é definir o grupo de renormalização e introduzir o conceito de pontos fixos que descrevem sistemas na criticalidade. O modelo inicial, descrito por um hamiltoniano \mathcal{H} , é renormalizado para um novo sistema, descrito por um novo hamiltoniano \mathcal{H}' (YEOMANS, 1992):

$$\mathcal{H}' = \mathbf{R}\mathcal{H}. \quad (2.1)$$

O operador \mathbf{R} do grupo de renormalização diminui o número de graus de liberdade de N para N' . Kadanoff considerou que, próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação possui um valor muito grande, $\xi \rightarrow \infty$, e assim, detalhes de curto alcance já não são

¹ Uma função invariante por escala $f(\lambda x)$, dita homogênea generalizada de grau p , é descrita na forma $f(\lambda x) = \lambda^p f(x)$.

relevantes. Dessa forma, pode-se fazer uma substituição do conjunto de sítios, denominados blocos de Kadanoff, por um único sítio efetivo, correspondendo à eliminação de graus de liberdade. Deste modo, \mathcal{H} e \mathcal{H}' são equivalentes e a função de partição deve ser a mesma, a menos de uma constante, sob esta transformação

$$\mathcal{Z}_N(\mathcal{H}) = \mathcal{Z}_{N'}(\mathcal{H}'), \quad (2.2)$$

e a parte singular da energia livre é escrita na forma

$$f_s(\mathcal{H}) = l^{-d} f_s(\mathcal{H}'), \quad (2.3)$$

onde $l = (N/N')^{1/d}$ é o fator de escala, que define como são transformadas as escalas de comprimento da rede $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$, $\vec{r}' = l^{-1}\vec{r}$. Kadanoff supôs que cada bloco se comporta como um sítio efetivo com interações simples e após sucessivas renormalizações, pode-se então encontrar os pontos fixos, isto é, pontos onde $\mathcal{H}' = \mathcal{H} = \mathcal{H}^*$. Neste ponto fixo, devemos ter a invariância do comprimento de correlação: $\xi = \xi' = \xi^*$. Esta igualdade é respeitada, sob uma transformação de escala, se $\xi = \xi' = \infty$ (pontos críticos) ou $\xi = \xi' = 0$ (atratores da transformação do grupo de renormalização, os quais caracterizam a fase a que pertencem os pontos na bacia de atração). Próximo do ponto fixo, a energia livre pode ser escrita em termos de u_i e u'_i , denominados de campos de escala lineares. Assim,

$$f_s(u_1, u_2, \dots) \sim l^{-d} f_s(u'_1, u'_2, \dots) = l^{-d} f_s(l^{y_1} u_1, l^{y_2} u_2, \dots), \quad (2.4)$$

onde $u'_i = l^{y_i} u_i$. Ao se repetirem várias iterações da transformação de renormalização, o sistema será conduzido para longe do ponto fixo quando $y_i > 0$. Neste caso, a variável y_i é dita variável relevante. Se $y_i < 0$, corresponde a campos de escala lineares os quais, após repetir as iterações do grupo de renormalização, movem o sistema para próximo do ponto fixo; denominamos y_i de variável irrelevante. Para o caso de $y_i = 0$ trata-se do caso denominado marginal e ordens maiores dos termos se tornam importantes (YEOMANS, 1992). Assim, a estabilidade dos pontos fixos depende do número de campos escalares lineares relevantes e irrelevantes associados ao sistema. Em sistemas

magnéticos, por exemplo, a temperatura e o campo magnético são os campos revelantes com as seguintes notações utilizadas $u_1 = t$ e $u_2 = h$, respectivamente. Na criticalidade, devemos ter $u_1 = u_2 = 0$ ou $t = 0$ e $h = 0$. Dessa forma a energia livre pode ser escrita na forma

$$f_s(t, h) = l^{-d} f_s(t', h') = l^{-d} f_s(l^{y_t} t, l^{y_h} h), \quad (2.5)$$

em que os expoentes y_h e y_t são dados por:

$$h' = l^{y_h} h, \quad (2.6)$$

$$t' = l^{y_t} t. \quad (2.7)$$

Uma implementação específica do grupo de renormalização, é o método do grupo de renormalização de campo médio (INDEKEU; MARITAN; STELLA, 1982), que é uma técnica simples e eficiente que permite calcular as propriedades críticas de determinados sistemas. O grupo de renormalização de campo médio surgiu dentro do chamado grupo de renormalização fenomenológico e será definido a seguir. O método consiste em comparar dois blocos finitos de diferentes tamanhos, tratando as interações entre os sítios de cada bloco exatamente, sendo os sítios do restante da rede considerados como um campo efetivo agindo na mesma.

2.2 Grupo de Renormalização de Campo Médio

Este método foi introduzido por Indekeu *et al.* (INDEKEU; MARITAN; STELLA, 1982) na década de 80, e permite calcular as propriedades críticas do sistema. O método se baseia na comparação das magnetizações dos sistemas, considerando diferentes tamanhos (finitos) do sistema em questão e foi aplicado a diversos modelos (DE'BELL, 1983; DE'BELL; LOOKMAN, 1984; RIERA, 1984; DROZ; MARITAN; STELLA, 1982; DROZ; PEKALSKI, 1985; EVANGELISTA; SAXENA, 1985; PLASCAK; FIGUEIREDO; GRANDI, 1999). Fixado um tamanho de bloco finito, analisa-se as interações exatamente entre

os sítios presentes neste bloco. Com relação aos sítios restantes (fora do bloco), pela aproximação de campo médio, são substituídos por um valor efetivo b correspondendo a N e b' para N' .

Para dois blocos, de tamanhos N e N' ($N' < N$), a relação entre as magnetizações é obtida, utilizando (2.6),

$$\begin{aligned} m_N = -\frac{\partial f(\mathcal{H})}{\partial h} &= -\frac{\partial}{\partial h} \left(l^{-d} f(\mathcal{H}') \right), \\ &= l^d \frac{\partial h'}{\partial h} \frac{\partial}{\partial h'} (f(\mathcal{H}')), \\ &= l^{-d} l^{y_h} \frac{\partial f(\mathcal{H}')}{\partial h'}, \\ m_N &= l^{y_h - d} m_{N'}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

em que d é a dimensão do sistema considerado. De forma análoga, para os campos b e b' , considera-se que escalam da mesma forma que m_N e $m_{N'}$ (INDEKEU; MARITAN; STELLA, 1987), ou seja

$$b' = l^{d - y_h} b. \quad (2.9)$$

Para se obter a magnetização, pode-se expandir em termos de primeira ordem nos parâmetros b e h . Desta forma, o método se adequa ao estudo de transições contínuas. A equação (2.8) se torna então

$$B'_N(K')b' + C'_N(K')h' = l^{d - y_h} [B_N(K)b + C_N(K)h] \quad (2.10)$$

onde

$$B_N(K) = \left. \frac{\partial m_N(K, h, b)}{\partial b} \right|_{h=0, b=0}, \quad B'_N(K') = \left. \frac{\partial m_{N'}(K', h', b')}{\partial b'} \right|_{h'=0, b'=0}, \quad (2.11)$$

$$C_N(K) = \left. \frac{\partial m_N(K, h, b)}{\partial h} \right|_{h=0, b=0}, \quad C'_N(K') = \left. \frac{\partial m_{N'}(K', h', b')}{\partial h'} \right|_{h'=0, b'=0} \quad (2.12)$$

e $K = 1/T$.

Pela relação de escala em b dada por (2.9), a expressão (2.10), a campo nulo, conduz a

$$B_{N'}(K') = B_N(K), \quad (2.13)$$

e

$$C_{N'}(K')h' = l^{d-y_h} C_N(K)h. \quad (2.14)$$

Estas duas expressões podem ser interpretadas como as equações de renormalização para K e h , respectivamente. Dessa forma através da equação (2.13), é possível determinar o ponto fixo, denominado de K^* , com $K' = K = K^*$,

$$B_{N'}(K^*) = B_N(K^*). \quad (2.15)$$

Uma vez obtido o ponto fixo K^* , pode-se obter o expoente crítico y_t pela equação (INDEKEU; MARITAN; STELLA, 1987)

$$y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln l}, \quad (2.16)$$

onde λ_t é definido por

$$\lambda_t = \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K^*}. \quad (2.17)$$

Utilizando a equação (2.13),

$$\frac{dB_N(K)}{dK} = \frac{dB_{N'}(K')}{dK'} \frac{dK'}{dK}, \quad (2.18)$$

$$\left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K^*} = \left. \frac{\frac{dB_N(K)}{dK}}{\frac{dB_{N'}(K')}{dK'}} \right|_{K^*}. \quad (2.19)$$

Retornando à equação (2.16), substituindo (2.19), temos

$$y_t = \frac{1}{\ln(N/N')} \ln \left[\left. \frac{\frac{dB_N(K)}{dK}}{\frac{dB_{N'}(K')}{dK'}} \right] \right|_{K^*}. \quad (2.20)$$

Para o cálculo de y_h , utiliza-se a equação (2.14), combinada com a relação de escala do campo h dada em (2.6) e do campo b dada em (2.9). Dessa forma temos,

$$l^{y_h} h C_{N'}(K^*) = l^{d-y_h} h C_N(K^*), \quad (2.21)$$

$$l^{d-2y_h} = \frac{C_{N'}(K^*)}{C_N(K^*)}, \quad (2.22)$$

isolando y_h temos

$$y_h = \frac{d}{2} + \frac{1}{2} \frac{\ln \left[\frac{C_N(K^*)}{C_{N'}(K^*)} \right]}{\ln(N/N')}. \quad (2.23)$$

Portanto, obtendo o ponto fixo K^* e respectivamente a temperatura crítica dada por $T_c = 1/K^*$, pode-se determinar os expoentes críticos y_t e y_h pelas equações (2.20) e (2.23) respectivamente. Uma vez determinados os expoentes y_t e y_h , os demais expoentes $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$ podem ser obtidos pelas relações (HUANG, 1987):

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{2y_t - d}{y_t}, \\ \beta &= \frac{d - y_h}{y_t}, \\ \gamma &= \frac{2y_h - d}{y_t}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Além disso, o comprimento de correlação varia de acordo com o fator de escala, $\xi' = l^{-1}\xi$, e como ξ escala da forma $\xi \sim |t|^{-\nu}$, segue então que, utilizando (2.7):

$$\frac{\xi'}{\xi} = \left(\frac{t'}{t} \right)^{-\nu} = l^{-\nu y_t}, \quad (2.25)$$

ou seja, comparando com a expressão $\xi' = l^{-1}\xi$ com (2.25), obtemos a relação do expoente crítico ν com o expoente y_t :

$$\nu = \frac{1}{y_t}. \quad (2.26)$$

2.3 Interação de Longo Alcance no Modelo de Potts Unidimensional

O objetivo dessa primeira parte do trabalho é aplicar o grupo de renormalização de campo médio ao modelo de Potts unidimensional, na análise do comportamento crítico, com interação de longo alcance no caso puro e também sob a adição de diluição. A figura 1 ilustra os

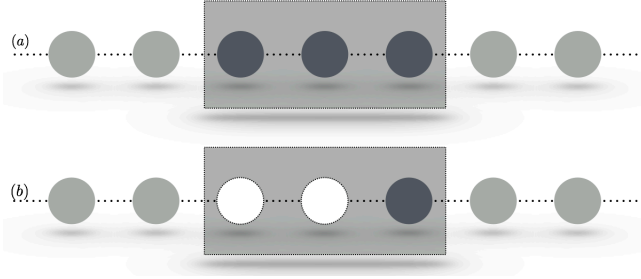


Figura 1 – Ilustração do modelo de Potts unidimensional para o caso puro (a) e o caso diluído (b). Cada sítio interage com os demais sítios da rede e a constante de acoplamento é dada por $J(r) = 1/r^{1+\sigma}$ com r sendo a distância entre os sítios.

casos considerados: o sistema homogêneo e o diluído. Nesta figura, o tamanho do bloco considerado é $N = 3$ e os sítios dentro do bloco em (a), denotados por sítios pretos, representam o caso homogêneo. Já em (b), há diluição no bloco: há apenas um sítio presente (preto) e dois ausentes. Em ambos os casos ilustrados, fora do bloco, considera-se uma cadeia de sítios infinita (em cinza) e atribui-se, pelo método do grupo de renormalização de campo médio, que seu estado é dado pelo valor médio b .

O hamiltoniano que descreve este modelo é definido por

$$-\beta\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_h + \mathcal{H}_{1D}, \quad (2.27)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e

$$\mathcal{H}_0 = K \sum_{i,j, i>j}^N J(r_{ij}) \delta_{s_i s_j} \epsilon_i \epsilon_j = K \sum_{i,j, i>j}^N \frac{\delta_{s_i s_j} \epsilon_i \epsilon_j}{r_{ij}^{1+\sigma}}, \quad (2.28)$$

representa a parte de interação dos sítios i e j dentro do bloco considerado, $s_i = 0, 1, \dots, q-1$, $J(r_{ij})$ é o valor do acoplamento dos sítios i e j , definido por $J(r_{ij}) \equiv J_0/r_{ij}^{1+\sigma}$, onde

$$r_{ij} \equiv |i - j|, \quad (2.29)$$

mede a distância entre os sítios i e j . Por simplicidade, a seguinte consideração é feita: $k_B = J_0 = 1$, $K = 1/T$. A variável ϵ_i assume o valor 1 com probabilidade p para o sítio presente e 0 com probabilidade $1-p$ para o caso de ausência do sítio. Para \mathcal{H}_{1D}

$$\mathcal{H}_{1D} = Kb \sum_{i=1}^N \left(\sum_{n=N-i+1}^{\infty} \frac{1}{n^{1+\sigma}} + \sum_{l=i}^{\infty} \frac{1}{l^{1+\sigma}} \right) \delta_{s_i,1} \epsilon_i, \quad (2.30)$$

inclui a interação dos sítios presentes no bloco com todos os outros sítios fora do bloco, representados pelo valor médio b . O valor do estado utilizado em $\delta_{s_i,1}$ é arbitrário dentre todos os estados de Potts. Para o termo representando o campo externo, \mathcal{H}_h , considera-se a seguinte forma,

$$\mathcal{H}_h = h \sum_{i=1}^N \delta_{s_i,1} \epsilon_i. \quad (2.31)$$

Assim, no modelo de Potts, similar ao cálculo da magnetização no modelo de Ising, o parâmetro de ordem (“magnetização”) é dado por (WU, 1982):

$$m_N = \frac{\text{Tr} \left[\left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{-\beta \mathcal{H}} \right]}{\text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}})}, \quad (2.32)$$

onde Tr representa a soma de todas as configurações do bloco considerado e a notação \bar{s} representa o sítio localizado no centro do bloco. Aqui, optamos por utilizar o sítio central no cálculo de m_N devido à simetria do problema.

No método do grupo de renormalização de campo médio, considera-se que os campos envolvidos são muito pequenos ($b \ll 1, h \ll 1$). Utilizando (2.27), m_N pode ser obtido expandindo em termos de primeira ordem nos parâmetros b e h :

$$m_N \simeq \frac{\text{Tr} \left[\left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} (1 + A_N b + D_N h) \right] \epsilon_{\bar{s}}}{\text{Tr} [e^{\mathcal{H}_0} (1 + A_N b + D_N h)]}, \quad (2.33)$$

em que definimos $A_N \equiv \mathcal{H}_{1D}/b$ e $D_N \equiv \mathcal{H}_h/h$. Dessa forma, temos

$$m_N \simeq \frac{\text{Tr} \left[\left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right] + b \text{Tr} \left[A_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right] + h \text{Tr} \left[D_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\text{Tr} (e^{\mathcal{H}_0}) + b \text{Tr} (A_N e^{\mathcal{H}_0}) + h \text{Tr} (D_N e^{\mathcal{H}_0})}. \quad (2.34)$$

O primeiro termo de (2.34) do numerador é zero, pois representa a média sobre os estados que compõem o bloco, a campo nulo, e todos os estados obtidos são equiprováveis. Dessa forma, expandindo em primeira ordem (2.34) nos parâmetros de b e h , obtém-se

$$m_N \simeq \frac{b \text{Tr} \left[A_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right] + h \text{Tr} \left[D_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\mathcal{Z}_0} \quad (2.35)$$

em que

$$\mathcal{Z}_0 = \text{Tr} \left(e^{\mathcal{H}_0} \right). \quad (2.36)$$

Portanto, m_N pode então ser escrito da seguinte forma

$$m_N \simeq b B_N(K) + h C_N(K), \quad (2.37)$$

onde define-se

$$B_N(K) = \frac{\text{Tr} \left[A_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\mathcal{Z}_0}, \quad (2.38)$$

$$C_N(K) = \frac{\text{Tr} \left[D_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\mathcal{Z}_0}. \quad (2.39)$$

Assim, com os hamiltonianos \mathcal{H}_{1D} e \mathcal{H}_h dados em (2.30) e (2.31) respectivamente, os termos A_N e D_N são descritos por

$$A_N = K \sum_{i=1}^N \left(\sum_{n=N-i+1}^{\infty} \frac{1}{n^{1+\sigma}} + \sum_{l=i}^{\infty} \frac{1}{l^{1+\sigma}} \right) \delta_{s_i,1} \epsilon_i, \quad (2.40)$$

$$D_N = K \sum_{i=1}^N \delta_{s_i,1} \epsilon_i. \quad (2.41)$$

Então, com $B_N(K)$ dado em (2.38), utilizando (2.40) e levando em conta a diluição, sendo p a probabilidade de um dado sítio do bloco estar presente, $B_N(K)$ é escrito como

$$B_N(K) = \sum_{n=0}^N \frac{\text{Tr} \left[p^{N-n} (1-p)^n A_N \left(\frac{q^{\delta_{\bar{s},1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\mathcal{Z}_0}, \quad (2.42)$$

e para $C_N(K)$ dado em (2.39), utilizando (2.41) e incluindo a probabilidade p de diluição do sistema, temos

$$C_N(K) = \sum_{n=0}^N \frac{\text{Tr} \left[p^{N-n} (1-p)^n D_N \left(\frac{q^{\delta_{s,1}-1}}{q-1} \right) \epsilon_{\bar{s}} e^{\mathcal{H}_0} \right]}{\mathcal{Z}_0}. \quad (2.43)$$

Deste modo, utilizando a equação (2.15), $B_N(K^*) = B_{N'}(K^*)$, determinou-se os valores de K^* para diferentes tamanhos de blocos, considerando sempre tamanhos ímpares de N' e N e diferentes valores de σ . Após determinar os valores de K^* , foram obtidos os valores de y_t e y_h através das equações (2.20) e (2.23) respectivamente. Para o modelo de Potts com $q = 2$, foram realizados cálculos de blocos iniciando em $N' = 3$ e $N = 5$ até tamanhos $N' = 15$ e $N = 17$. Já para $q = 3$, também se iniciou em $N' = 3$ e $N = 5$ e foram realizados cálculos até os tamanhos $N' = 13$ e $N = 15$. À medida que se aumentam os tamanhos dos blocos, maior é o tempo computacional requerido para se obter K^* .

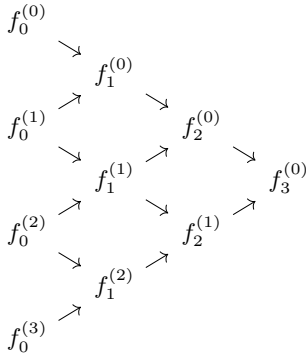
2.4 Métodos de extrapolação

Para a determinação das quantidades de interesse no limite termodinâmico e devido à limitação em se utilizar tamanhos finitos de blocos para a obtenção de K^* e os respectivos expoentes y_t e y_h , métodos de extrapolação oferecem um auxílio na obtenção das quantidades de interesse para uma rede infinita. Através dos resultados obtidos para diferentes tamanhos de blocos finitos considerados, em conjunto com os métodos de extrapolação, é possível obter o valor das grandezas no limite termodinâmico.

2.4.1 Método BST

Um dos métodos utilizados para realizar a extrapolação, é o método conhecido como BST (BULIRSCH; STOER, 1964; HENKEL; SCHUTZ, 1988), devido a Bulirsch e Stoer, para se obter y_t e y_h e

também K_c no limite termodinâmico. Neste método, pode-se determinar a convergência de uma grandeza f , que é uma função do tipo $f(h_N)$, na qual h_N deve ser uma sequência qualquer que converge a zero quando se tem $N \rightarrow \infty$. Dessa forma, através dos dados iniciais obtidos, o valor extrapolado é obtido como mostra, por exemplo, a sequência a seguir em que $f_3^{(0)}$ é o valor final.



Os elementos $f_m^{(N)}$ são determinados da forma:

$$f_{-1}^{(N)} = 0, \quad (2.44)$$

$$f_0^{(N)} = f(h_N), \quad (2.45)$$

$$f_m^{(N)} = f_{m-1}^{(N+1)} + (f_{m-1}^{(N+1)} - f_{m-1}^{(N)}) \left[\left(\frac{h_N}{h_{N+m}} \right)^\omega \left(1 - \frac{f_{m-1}^{(N+1)} - f_{m-1}^{(N)}}{f_{m-1}^{(N+1)} - f_{m-2}^{(N+1)}} \right) - 1 \right]^{-1}, \quad (2.46)$$

em que ω é um parâmetro a ser determinado, que minimiza o erro $\epsilon_m^{(N)} = 2|f_m^{(N+1)} - f_m^{(N)}|$ ao realizar a extrapolção.

Com isso, pode-se identificar $f(h_N)$ como sendo a temperatura T_c e também os expoentes críticos y_t e y_h , e a variável h_N como $1/N$ em que N é o tamanho do bloco considerado.

2.4.2 Método VBS

Para comparar com o método descrito na seção anterior, foi utilizado também o chamado método VBS. Ele é devido a Van den Broeck e Schartz (BROECK; SCHWARTZ, 1979; HENKEL; SCHUTZ,

1988; HAMER; BARBER, 1981). Inicialmente, é introduzido a notação a_n que indica os valores dos dados obtidos pelos blocos finitos, colocados em ordem crescente de acordo com cada tamanho do bloco utilizado, de modo que

$$[n, 0] = a_n. \quad (2.47)$$

O valor extrapolado que se deseja obter é descrito por $a_\infty = [n, l]$. l representa as colunas que são geradas ao utilizar método até atingir a_∞ . Como exemplo, o seguinte diagrama ilustra os estágios realizados até se obter, neste caso, $a_\infty = [3, 3]$.

$$\begin{array}{cccc} [0, 0] & & & \\ [1, 0] & [1, 1] & & \\ [2, 0] & [2, 1] & [2, 2] & \\ [3, 0] & [3, 1] & [3, 2] & [3, 3] \\ [4, 0] & [4, 1] & [4, 2] & \\ [5, 0] & [5, 1] & & \\ [6, 0] & & & \end{array}$$

A $(l + 1)$ -ésima coluna é gerada através da l -ésima coluna, formada por $[n, l]$ e determinada por

$$\frac{1}{[n, l+1] - [n, l]} + \frac{\alpha_l}{[n, l-1] - [n, l]} = \frac{1}{[n+1, l] - [n, l]} + \frac{1}{[n-1, l] - [n, l]}, \quad (2.48)$$

com a imposição de que $[n, -1] = \infty$. O valor de α_l utilizado foi $\alpha_l = -\frac{(1-(-1)^l)}{2}$ (KHOO; SY, 2001). O cálculo do erro é realizado multiplicando o fator $(1 + \frac{\epsilon}{N'})$ nos dados entrada $[n, 0]$, obtidos pelos blocos finitos, onde $\epsilon \in [-1, 1]$ e N' é o tamanho do menor bloco utilizado ($N' < N$). Em seguida, determina-se a região onde o valor extrapolado possui valores aproximadamente constante e é obtido a média e desvio padrão desse conjunto de dados.

Além desses métodos usados para extrapolar os dados, outro tipo de ajuste realizado foi utilizar, para as grandezas de K_c , y_t e y_h uma função do tipo

$$f(N) = f(\infty) + aN^{-b}, \quad (2.49)$$

realizado no programa gnuplot (CRAWFORD, 2006). A seguir, mostramos os resultados obtidos para o caso de $q = 2$ e $q = 3$ para o caso puro e também incluindo a diluição de sítios.

2.5 Resultados

Considerando o modelo com $q = 2$, foram estudados os casos $\sigma = 0, 2$, $\sigma = 0, 5$, $\sigma = 0, 7$ e $\sigma = 0, 9$. Para o modelo puro ($p = 1$), os resultados obtidos são exibidos na tabela 2, comparando com os resultados reportados em (GLUMAC; UZELAC, 1993). Para tamanhos de blocos utilizados com a extrapolação BST e VBS, nossos resultados estão em ótima concordância quando comparados com os resultados obtidos pelo método FRS². Considerando já o caso $p \neq 1$ junto com o caso puro, na figura 2 mostramos os resultados obtidos para a temperatura crítica em função de p . À medida que a diluição incluída é aumentada, a temperatura crítica diminui, sendo conduzida a zero em todos os casos e quanto maior valor de σ considerado, mais rapidamente a temperatura crítica diminui.

Outra questão proposta foi a tentativa de se obter pelo grupo de renormalização de campo médio para os casos estudados, um possível valor de p_c dependente de q e σ . p_c representa a situação que valores $p \leq p_c$ a temperatura crítica é zero. Os resultados obtidos mostrados nas figuras 2 e 3 dão indício de que este valor de p_c seja zero. Foram realizados cálculos tomando o limite $T_c \rightarrow 0$ ($K_c \rightarrow \infty$) nas expressões de $B_{N'}(\infty) = B_N(\infty)$ em (2.15). A medida que tamanhos maiores de blocos foram considerados, o valor de p_c obtido foi diminuindo, mas não se anulou em nenhum caso (para blocos finitos). Entretanto, generalizações para o valor de p_c no limite termodinâmico mostram que ele se anula para todos os valores de σ considerados. As expressões obtidas de B_N e $B_{N'}$ forneceram uma indicação de que o valor de p_c seja zero. Essa é ainda uma questão em aberto que requer

² Do inglês *finite range scaling*. Este método consiste em truncar as interações de longo alcance até um determinado valor de N , que representa a N -ésima interação, de forma que $J_r = 0$ para $r > N$.

uma análise mais detalhada ou outro método seja aplicado para a obtenção de p_c .

Tabela 2 – Valores obtidos para $K_c = 1/T_c$ no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	FRS ^a	VBS ^b
0,2	0,18507(2)	0,184592(9)	0,18496(4)	0,1831	0,184469(1)
0,5	0,45843(2)	0,45935(4)	0,4564(1)	0,4590	0,458334(6)
0,7	0,687319(1)	0,6829(4)	0,68783(8)	0,6833	0,682488(2)
0,9	0,99933(1)	0,9953(1)	1,00029(4)	0,9973	0,999204(9)

^a *Finite range scaling*, (GLUMAC; UZELAC, 1993) .

^b (KHO; SY, 2001) .

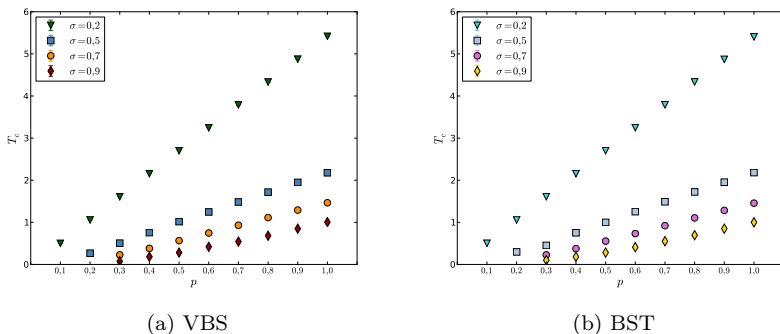


Figura 2 – Dados da temperatura crítica T_c em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$.

Para o caso de $q = 3$, realizamos os cálculos para três valores distintos de σ sob a consideração de transição contínua: $\sigma = 0,7$, $\sigma = 0,8$ e $\sigma = 0,9$ como mostra a figura 3. Primeiramente no caso homogêneo, nos três casos de σ considerados, obteve-se valores de T_c bem próximos dos valores obtidos nas referências (GLUMAC; UZELAC, 1993; MONROE, 1999) como mostra a tabela 3. Apenas no ajuste realizado na forma de (2.49) em $\sigma = 0,7$ e $\sigma = 0,8$, os valores

obtidos em todos os casos se mostraram com maior diferença entre os valores obtidos na literatura e pelos métodos VBS e BST. Novamente, nos três casos considerados, à medida que a diluição passa a aumentar, assim como no caso de $q = 2$, o valor de T_c decresce em direção à temperatura nula.

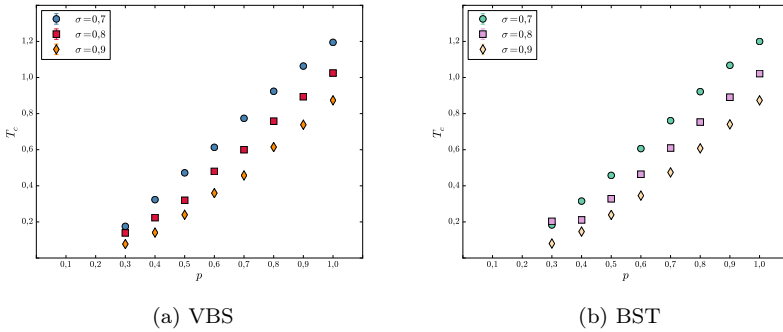


Figura 3 – Dados da temperatura crítica T_c em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$.

Tabela 3 – Valores obtidos para T_c no caso puro para o modelo de Potts com $q = 3$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	VBS ^a	FRS ^b
0,7	1,19971(1)	1,1947(1)	1,218(1)	1,1968	1,194
0,8	1,02186(5)	1,02483(7)	1,093(3)		1,023
0,9	0,873541(2)	0,87386(2)	0,87290(7)	0,8785	0,874

^a (MONROE, 1999).

^b *Finite range scaling*, (GLUMAC; UZELAC, 1993).

Para o expoente y_h , obtido por (2.23), verificamos que, adicionando efeitos de diluição, não há uma alteração significativa nos valores dos expoentes para diferentes valores de σ considerados, como mostra a figura 4 no caso $q = 2$. Com exceção de $\sigma = 0,9$ para a extrapolação BST, estes resultados sugerem que y_h não muda com

a diluição. Para o caso puro, a tabela 4 mostra nossos resultados comparados com os resultados obtidos na referência (KHOO; SY, 2001). Novamente, nossos resultados estão em boa concordância para os valores de σ considerados quando comparados com os resultados obtidos nesta referência.

Tabela 4 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	VBS ^a	¹ Exato ou ² Monte Carlo ^a
0,2	0,60000566(1)	0,600020(1)	0,59967(3)	0,600041(38)	0,60 ¹
0,5	0,750422(3)	0,750383(6)	0,7487(1)	0,75085(51)	0,75 ¹
0,7	0,8507648(2)	0,85022(4)	0,8469(3)	0,85085(51)	0,848(3) ²
0,9	0,94359(1)	0,9418(1)	0,9340(8)	0,9446(15)	0,9508(10) ²

^a (KHOO; SY, 2001).

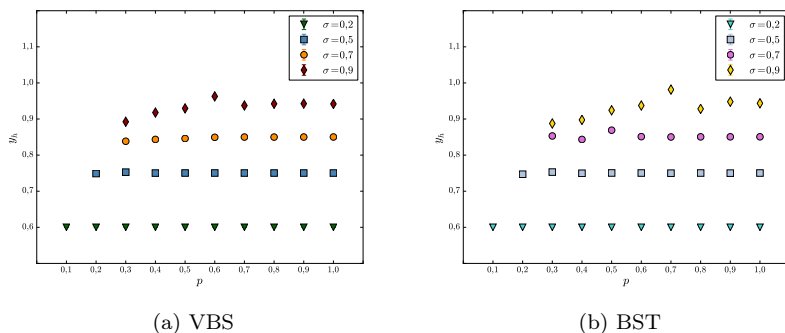


Figura 4 – Dados do expoente crítico y_h em função p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$.

Para o caso de $q = 3$, os casos de $\sigma = 0,8$ e $\sigma=0,9$, os valores de y_h apresentaram uma oscilação para alguns valores de p utilizados. Já em $\sigma = 0,7$ não houve uma alteração significativa nos valores dos expoentes y_h como mostra a figura 5 para diferentes valores de p

considerados. A tabela 5 apresenta os resultados obtidos para o caso de ($p=1$) comparados com outros resultados obtidos na literatura exibindo boa concordância nos casos de $\sigma = 0,8$ e $\sigma = 0,9$. Em $\sigma = 0,7$, esse valor está próximo da região de separação entre a transição de fase de primeira para segunda ordem e a concordância entre nossos resultados e da referência (BAYONG; DIEP; DOTSENKO, 1999) é menor.

Tabela 5 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	MC ^a	MC ^b
0,7	0,851830(6)	0,85137(3)	0,8482(4)		0,90(1)
0,8	0,902137(9)	0,90029(7)	0,8956(6)	0,899(5)	
0,9	0,94878(3)	0,94458(1)	0,9380(8)	0,947(5)	

^a Monte Carlo. (REYNAL; DIEP, 2004).

^b Monte Carlo. (BAYONG; DIEP; DOTSENKO, 1999).

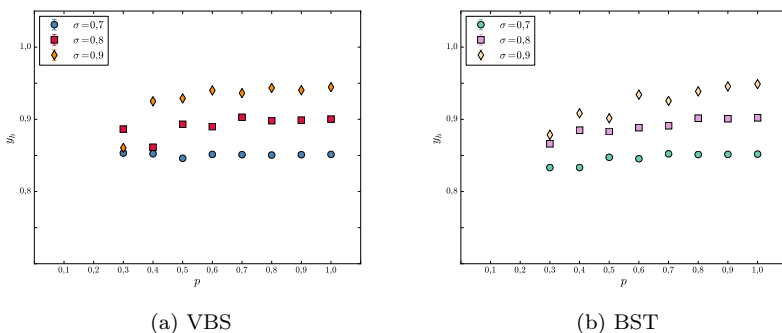


Figura 5 – Dados do expoente crítico y_h em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$.

Considerando o expoente y_t , para o caso puro, as tabelas 6 e 7 apresentam os resultados obtidos com 2 e 3 estados, respectivamente, e outros resultados obtidos na literatura. Para $q = 2$, obteve-se para $\sigma = 0,2$ um valor bem próximo aos resultados obtidos na literatura e

no caso de $\sigma = 0,9$ o resultado obtido pelo método BST está de acordo com o resultado obtido por Monte Carlo em (KHOO; SY, 2001). Já para outros valores de σ considerados, nossos valores apresentaram uma pequena diferença dos resultados obtidos nas referências (KHOO; SY, 2001; GLUMAC; UZELAC, 1993). Em $\sigma = 0,5$ a diferença pode ser devida a correções logarítmicas (FISHER; MA; NICKEL, 1972). Ainda sob $p = 1$, todos os valores de σ considerados, os valores obtidos de y_t pelos métodos de extrapolação utilizados são menores que $1/2$.

Tabela 6 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	VBS ^a	Exato ¹ ou ² MC ^a	FRS ^b
0,2	0,201192(3)	0,19855(4)	0,1946(3)	0,200022(65)	0,20 ¹	0,202
0,5	0,458651(6)	0,4598(2)	0,415(1)	0,463(13)	0,50 ¹	0,430
0,7	0,48627(3)	0,4676(2)	0,463(1)	0,50134(24)	0,491(10) ²	0,518
0,9	0,378507(4)	0,4274(2)	0,4438(8)	0,4093(32)	0,379(15) ²	0,405

^a Monte Carlo, (KHOO; SY, 2001).

^b Finite range scaling, (GLUMAC; UZELAC, 1993).

Para $q = 3$, em $\sigma = 0,8$ e $\sigma = 0,9$ nossos resultados ficaram bem próximos aos da referência (GLUMAC; UZELAC, 1993) como mostra a tabela 7. Já em $\sigma = 0,7$, houve uma certa diferença comparado com este artigo. Na referência (REYNAL; DIEP, 2004), não foi realizado o cálculo de y_t , pois este trabalho obtém que $\sigma_c = 0,72(1)$, tais que valores de $\sigma > \sigma_c$ correspondem a transições contínuas. Assim, apesar de termos estudado o caso $\sigma = 0,7$, não está claro que a transição para este valor de σ seja contínua. Se for de primeira ordem, o método usado nesse trabalho não se aplica.

O critério para verificar se a presença de desordem é capaz de alterar o comportamento crítico de sistemas e ocorrer uma mudança na classe de universalidade do sistema puro foi introduzido por Harris (HARRIS, 1974). Considera-se um sistema que possa ser dividido em partes, e digamos que uma dessas partes seja de tamanho ξ , onde ξ é o comprimento de correlação e seu volume seja dado por

Tabela 7 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$.

σ	BST	VBS	Ajuste (2.49)	FRS ^a	MC ^b
0,7	0,6522(1)	0,5602(3)	0,5719(3)	0,636	
0,8	0,5756(1)	0,5699(2)	0,5510(9)	0,574	0,624(6)
0,9	0,51031(5)	0,5072(2)	0,5194(4)	0,491	0,54(1)

^a Finite range scaling, (GLUMAC; UZELAC, 1993).

^b Monte Carlo, (REYNAL; DIEP, 2004).

ξ^d , sendo d a dimensão do sistema. O número de ligações deste bloco é proporcional ao seu volume ξ^d e ao inserir efeitos de desordem neste bloco, pode haver alteração local da temperatura crítica. Essa alteração pode ser quantificada pelas flutuações presentes no subsistema de tamanho ξ , de modo que as flutuações estatísticas δT_c em T_c são inversamente proporcionais a raiz quadrada do número de ligações, ou seja, $\delta T_c \sim \xi^{-d/2}$. Para o sistema uniforme, o comprimento de correlação ξ escala na forma $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$, ou ainda, $T - T_c = \Delta T \sim \xi^{-1/\nu}$. Assim, dizemos que a desordem será irrelevante se as flutuações locais diminuírem mais rapidamente do que ΔT , quando se tem $\xi \rightarrow \infty$,

$$\frac{\delta T_c}{\Delta T} \sim \frac{\xi^{-d/2}}{\xi^{-1/\nu}} = \xi^{1/\nu - d/2} \rightarrow 0, \quad (2.50)$$

ou seja, se $2 - \nu d < 0$. Quando a desordem é irrelevante, ela não altera a classe de universalidade do sistema. Para o caso onde $2 - \nu d > 0$, a desordem é então relevante e os expoentes críticos no sistema desordenado são diferentes dos do sistema puro, mudando assim a classe de universalidade. Na situação de $2 - \nu d = 0$, temos o caso marginal e o critério de Harris não é conclusivo. No modelo de estudo, para uma dimensão, sendo $\nu = 1/y_t$, devemos ter $y_t > \frac{1}{2}$.

Para o caso de $q = 2$ e os valores de σ considerados, como mostra a tabela 6, o critério de Harris sugere que a desordem seja irrelevante em todos os casos, com possível exceção de $\sigma = 0, 7$, onde pelo método de extrapolação VBS utilizado na referência (KHOO; SY, 2001), $y_t = 0,50134(24)$, indicando que ainda não há uma conclusão

sobre a relevância deste caso. Já nossos resultados indicam que em $\sigma = 0,2$ o valor de y_t não sofre alteração em seu valor, comparado com o caso puro (veja figura 6). Para outros valores de σ , y_t no caso diluído não é o mesmo que o caso puro. Este resultado contradiz o critério de Harris de modo que métodos mais precisos são então necessários e por essa razão utilizamos simulações numéricas no estudo deste modelo.

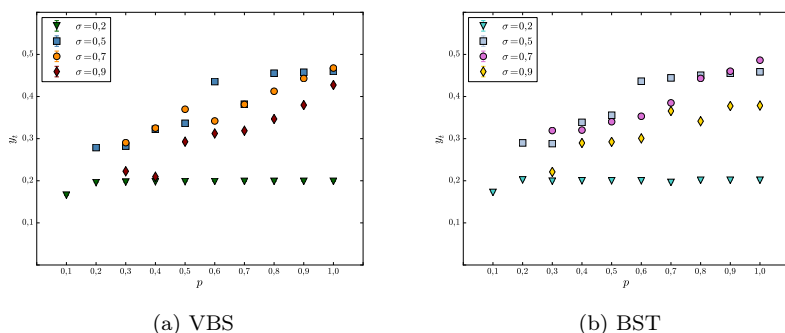


Figura 6 – Dados do expoente crítico y_t em função de p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 2$.

Para o modelo de Potts de 3 estados, os dados obtidos de y_t são mostrados na figura 7. Pelo critério de Harris, y_t é maior do que $1/2$ nos três casos de σ considerados como mostra a tabela 7, ou seja, a desordem é relevante. Vemos ainda que y_t cai para um valor menor que o do caso puro já para $p = 0,9$. Isto, junto com o contraste dos resultados para $q = 2$, $\sigma \geq 0,5$, indicam que esses dois casos sejam relevantes, no contexto do grupo de renormalização. O mesmo não pode ser prontamente concluído para $\sigma = 0,7$; note, entretanto, que não é certo que este valor de σ apresente uma transição contínua.

Nossos resultados para $q = 2$ indicam então que y_h não mudam com a desordem, enquanto y_t sofre alteração para $\sigma = 0,5$, $\sigma = 0,7$ e $\sigma = 0,9$. Este resultado, para $\sigma = 0,5$ e $\sigma = 0,9$ está em

desacordo com o critério de Harris.

Para $q = 3$, espera-se que a desordem seja relevante para os 3 valores de σ estudados e nossos resultados obtêm este comportamento, com uma mudança clara de y_t para o caso diluído, em relação ao modelo puro. Entretanto, não fomos capazes de prever os valores de y_t para o modelo desordenado.

O estudo mais preciso destas questões faz necessário o uso de um método numérico, o que será discutido adiante.

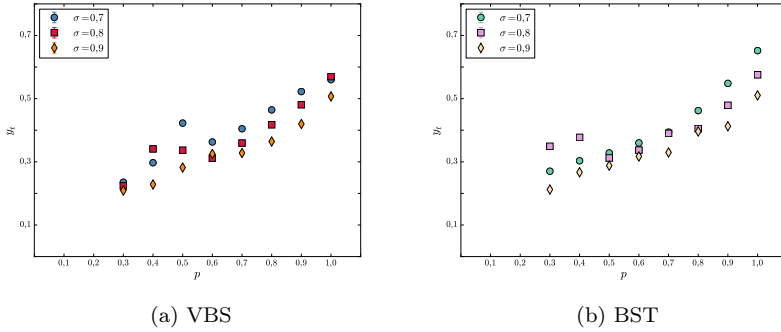


Figura 7 – Dados do expoente crítico y_t em função p (porcentagem de sítios presentes) obtidos pelo grupo de renormalização de campo médio considerando diferentes valores de σ para o modelo de Potts com $q = 3$.

2.5.1 Grupo de renormalização de campo médio estendido

Além do grupo de renormalização de campo médio, outro método foi aplicado no caso homogêneo a fim de se estudar o comportamento crítico do sistema: o chamado grupo de renormalização de campo médio estendido (INDEKEU; MARITAN; STELLA, 1987; PLASCAK; FIGUEIREDO; GRANDI, 1999). Neste método, os sítios fora do bloco atuam como um campo externo na borda do sistema, agindo como um campo de superfície e este campo escala da seguinte

forma:

$$b' = l^{y_{h_s}} b, \quad (2.51)$$

onde y_{h_s} é o expoente crítico do campo de superfície. Com a inserção desta nova quantidade é necessário agora comparar 3 blocos de tamanhos finitos, de modo que $N > N' > N''$, sendo $b' = l_{NN'}^{y_{h_s}} b$ e $b'' = l_{N'N''}^{y_{h_s}} b'$, com $l_{NN'} \equiv \left(\frac{N}{N'}\right)^{1/d}$ e $l_{N'N''} \equiv \left(\frac{N'}{N''}\right)^{1/d}$. Dessa forma, a equação (2.13) é escrita agora nas seguintes formas

$$B_{N'}(K') = l_{NN'}^{d-y_h-y_{h_s}} B_N(K), \quad (2.52)$$

e

$$B_{N''}(K'') = l_{N'N''}^{d-y_h-y_{h_s}} B_{N'}(K'). \quad (2.53)$$

O expoente $d - y_h - y_{h_s}$ é determinado impondo que as equações (2.52) e (2.53) conduzam ao mesmo ponto fixo, denominado K^* ,

$$B_{N'}(K^*) = l_{NN'}^{d-y_h-y_{h_s}} B_N(K^*) \text{ e } B_{N''}(K^*) = l_{N'N''}^{d-y_h-y_{h_s}} B_{N'}(K^*). \quad (2.54)$$

Desse modo, são determinados, para cada conjunto de blocos considerados, dois diferentes valores para as grandezas $\nu = 1/y_t$, y_h e y_{h_s} pelas equações (2.52) e (2.53) e o método empregado para a obtenção da extrapolação foi o BST.

Para $q = 2$ foram realizados cálculos de blocos variando desde $N = 3$ até $N = 17$. Já em $q = 3$, os blocos variaram entre 3 até 15. Os resultados obtidos de K_c para $q = 2$ nos quatro valores de σ utilizados são apresentados na primeira coluna da tabela 8 e concordam com os valores obtidos na literatura e também com os valores obtidos pelo método do grupo de renormalização de campo médio.

Nas tabelas 9 e 10 são apresentados os valores de y_h e y_{h_s} respectivamente. Novamente, os valores obtidos concordam com os resultados disponíveis na literatura. O valor calculado em $\sigma = 0, 2$

Tabela 8 – Valores obtidos para $K_c = 1/T_c$ no caso puro para o modelo de Potts com $q = 2$.

σ	BST ^a	BST ^b	VBS ^b	Ajuste (2.49)	FRS ^c	VBS ^d
0,2	0,18443(9)	0,18507(2)	0,184592(9)	0,18496(4)	0,1831	0,184469(1)
0,5	0,454852(2)	0,45843(2)	0,45935(4)	0,4564(1)	0,4590	0,458334(6)
0,7	0,681516(9)	0,687319(1)	0,6829(4)	0,68783(8)	0,6833	0,682488(2)
0,9	1,024449(8)	0,99933(1)	0,9953(1)	1,00029(4)	0,9973	0,999204(9)

^a Grupo de renormalização de campo médio estendido.

^b Grupo de renormalização de campo médio.

^c (GLUMAC; UZELAC, 1993) .

^d (KHOO; SY, 2001) .

concorda com o valor exato. Já para $\sigma = 0,5$ o valor obtido é menor do que o valor determinado por Monte Carlo e isso pode ser devido a existência de correções logarítmicas (FISHER; MA; NICKEL, 1972). Os valores de y_{h_s} determinados sob os valores de σ considerados, são os primeiros obtidos para interações de longo alcance.

Tabela 9 – Valores obtidos para y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$.

σ	y_{h_1} - BST	y_{h_2} - BST	VBS ^a	¹ Exato ou ² Monte Carlo ^a
0,2	0,598968(7)	0,6004762(1)	0,600041(38)	0,60 ¹
0,5	0,74097(2)	0,746562(3)	0,75085(51)	0,75 ¹
0,7	0,84131(2)	0,84321(1)	0,85085(51)	0,848(3) ²
0,9	0,961133(3)	0,960792(8)	0,9446(15)	0,9508(10) ²

^a (KHOO; SY, 2001).

Tabela 10 – Valores obtidos para o expoente y_{h_s} no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$.

σ	$y_{h_{s_1}}$ - BST	$y_{h_{s_2}}$ - BST
0,2	0,399613(4)	0,393997(6)
0,5	0,237514(3)	0,237602(2)
0,7	0,140645(2)	0,140356(7)
0,9	0,0805(1)	0,072289(7)

Já para o expoente térmico y_t , obtido para os valores de σ considerados em $q = 2$ não há o mesmo nível de concordância com os demais cálculos (ver tabela 11). Além disso, os valores de y_{t1} e y_{t2} obtidos para cada valor de σ apresentaram uma diferença maior do que os valores obtidos para y_{h1} e y_{h2} . O valor para $\sigma = 0,5$ é menor do que o resultado de Monte Carlo e em $\sigma = 0,7$, o valor de y_t é consistente com o simulações de Monte Carlo (KHOO; SY, 2001), enquanto que para $\sigma = 0,9$ nossa estimativa é consistente com a referência (GLUMAC; UZELAC, 1993) e com o grupo de renormalização de campo médio (KHOO; SY, 2001), como é apresentado na tabela 11.

Tabela 11 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 2$.

σ	y_{t1} - BST	y_{t2} - BST	VBS ^a	¹ Exato ou ² Monte Carlo ^a	FRS ^b
0,2	0,19043(2)	0,2046269(7)	0,200022(65)	0,20 ¹	0,202
0,5	0,3991(1)	0,46538(7)	0,463(13)	0,50 ¹	0,430
0,7	0,444832(2)	0,4893939(6)	0,50134(24)	0,491(10) ²	0,518
0,9	0,41094(2)	0,40368(9)	0,4093(32)	0,379(15) ²	0,405

^a (KHOO; SY, 2001).

^b (GLUMAC; UZELAC, 1993).

Considerando agora o caso de $q = 3$, nossos valores para as temperaturas críticas do modelo estão em boa concordância com os resultados disponíveis apresentados na tabela 12. Até agora, os valores obtidos para os expoentes y_h e y_{h_s} nas tabelas 13 e 14, respectivamente, são os primeiros obtidos na literatura. Observamos que as duas estimativas fornecidas pelo método que empregamos concordam até a terceira casa decimal.

Na tabela 15, pode-se notar que o valor calculado para y_t e $\sigma = 0,9$ concorda com o obtido na referência (REYNAL; DIEP, 2004), mas é consideravelmente maior do que o calculado na referência (GLUMAC; UZELAC, 1993). Para $\sigma = 0,8$, as duas referências citadas anteriormente e nossos resultados não concordam um com o outro. No entanto, a maior diferença entre os valores estimados ocorre para

Tabela 12 – Valores obtidos para T_c no caso puro para o modelo de Potts com $q = 3$.

σ	BST	VBS ^a	FRS ^b
0,7	1,199840(2)	1,1968	1,194
0,8	1,0268921(4)		1,023
0,9	0,870778(2)	0,8785	0,874

^a (MONROE, 1999).^b (GLUMAC; UZELAC, 1993).Tabela 13 – Valores obtidos para o expoente y_h no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$.

σ	y_{h_1} - BST	y_{h_2} - BST
0,7	0,82606(2)	0,829236(2)
0,8	0,88435(1)	0,88429(2)
0,9	0,950832(6)	0,950870(4)

Tabela 14 – Valores obtidos para o expoente y_{h_s} no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$.

σ	$y_{h_{s_1}}$ - BST	$y_{h_{s_2}}$ - BST
0,7	0,11972(1)	0,120001(1)
0,8	0,07767(3)	0,077986(4)
0,9	0,05079(4)	0,05035(1)

$\sigma = 0,7$. Este valor está na borda das transições contínuas e de primeira ordem e pode ser o caso de blocos maiores serem necessários para permitir uma extrapolação mais precisa ao limite termodinâmico.

Tabela 15 – Valores obtidos para o expoente y_t no caso puro para o modelo de Potts em $q = 3$.

σ	y_{t_1} - BST	y_{t_2} - BST	FRS ^a	MC ^b
0,7	0,52205(5)	0,5272(2)	0,636	
0,8	0,51521(2)	0,52332(1)	0,574	0,624(6)
0,9	0,52717(2)	0,531394(4)	0,491	0,54(1)

^a (GLUMAC; UZELAC, 1993).^b (REYNAL; DIEP, 2004).

Nota-se que de forma geral, a utilização do grupo de renormalização de campo médio estendido não melhora os resultados, em relação ao grupo de renormalização de campo médio. Esta foi a razão de não termos utilizado o grupo de renormalização de campo médio estendido nos cálculos dos modelos diluídos.

3 Método de Monte Carlo em sistemas de longo alcance com diluição

Com o surgimento de computadores, as simulações computacionais tornaram-se uma ferramenta de grande relevância, desempenhando um papel importante no desenvolvimento científico, fornecendo uma ligação entre a teoria e experiência. Um dos métodos desenvolvidos que podemos destacar é o método de Monte Carlo. Ele foi introduzido por Nicholas Metropolis, Enrico Fermi, John Von Neumann, entre outros, para tratar de problemas probabilísticos envolvendo difusão aleatória de neutrons em elementos radioativos. Metropolis e Ulam, em 1949, publicaram um artigo(METROPOLIS; ULAM, 1949) que ficou conhecido como o início do método de Monte Carlo. O método consiste em obter uma estimativa da média de uma determinada grandeza de interesse (Q). Ao realizar simulações, gera-se um número finito de estados de acordo com a probabilidade $P(s) = \frac{\exp\{-\beta\mathcal{H}(s)\}}{\sum_s \exp\{-\beta\mathcal{H}(s)\}}$ e a média é obtida sobre o conjunto desses n estados gerados, na forma

$$\frac{1}{n} \sum_i^n Q(s_i), \quad (3.1)$$

onde i rotula os estados gerados na simulação.

Esta média será a estimativa para $\langle Q \rangle$ e, à medida que n aumenta, melhor será esta estimativa. Para gerar esses n estados, é utilizado o processo de amostragem por importância(NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999) considerando que o processo seja markoviano, onde o estado s' é gerado pelo estado anterior s de acordo com a taxa de transição $w(s \rightarrow s')$ que depende unicamente dos

estados inicial s e final s' (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). A equação mestra que descreve a evolução temporal de $P(s, t)$ é dada por

$$\frac{dP(s, t)}{dt} = \sum_{s' \neq s} \{P(s', t)w(s' \rightarrow s) - P(s, t)w(s \rightarrow s')\}, \quad (3.2)$$

onde $w(s' \rightarrow s)$ é a taxa de transição do estado s' ir para o estado s e $w(s \rightarrow s')$ é a taxa de transição do estado ir de s para s' . Desse modo, o processo estocástico para a probabilidade estacionária do sistema, denotada por $P(s, t \rightarrow \infty) = P(s)$, é obtida sob a seguinte consideração:

$$P(s', t)w(s' \rightarrow s) = P(s, t)w(s \rightarrow s'), \quad (3.3)$$

denominada de balanço detalhado. Note que essa condição é suficiente para a equação (3.2) mas não necessária. Outra condição levada em conta é de que o processo seja ergódico, ou seja, qualquer estado do sistema pode ser acessado pelo método. Além disso, para a realização do método é necessário dispor de um gerador de números aleatórios ditos equiprováveis. Inicialmente, esses números eram gerados manualmente ou mecanicamente, mas com o desenvolvimento de computadores tornou-se possível gerar números, que na realidade, são ditos pseudo-aleatórios, ou seja, um algoritmo gera uma sequência de números que podem ser considerados aproximadamente aleatórios.

No estudo de fenômenos críticos e transições de fases, a análise do comportamento do modelo de estudo se dá na região próxima de T_c denominada de região crítica. Próximo dessa região, o tempo de correlação τ pode ser associado com o tamanho da rede L na forma $\tau \sim L^z$. Diferentes algoritmos empregados produzem diferentes valores dos tempos de correlações para uma dada temperatura e esse tempo de correlação cresce quando se aproxima de T_c . Esse efeito é conhecido como “*critical slowing down*” e é uma importante questão relacionada à eficiência do algoritmo aplicado. Dessa forma, é possível que determinados algoritmos sejam menos afetados pelo chamado “*critical slowing down*”. Quanto maior o valor de z maior será o tempo

computacional para realizar uma simulação para uma dada rede de tamanho L . Dentre os algoritmos empregados em simulações de Monte Carlo, pode-se citar o algoritmo de Metropolis (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999) e o algoritmo de Wolff (WOLFF, 1989; NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999), sendo este baseado na construção de ilhas, de modo que o novo estado do sistema é obtido ao mudar o estado de todos os sítios da ilha construída, chegando a uma nova configuração do sistema. Para o modelo de Ising bidimensional com interações entre primeiros vizinhos, por exemplo, o valor de z obtido pelo algoritmo de Metropolis é $z \approx 2,17$ (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999) enquanto que o algoritmo de Wolff fornece $z \approx 0,25$ (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Quando se leva em conta interações de longo alcance, no algoritmo de Wolff, após sortear um sítio inicial aleatório, seria necessário testar todos os seus vizinhos da rede, já que a interação é de longo alcance e cada sítio da rede interage com todos os outros, ocasionando um processo extremamente custoso computacionalmente. Uma maneira de contornar isso é utilizar uma versão do algoritmo de Wolff modificado para tratar sistemas com interações de longo alcance, introduzida por Erik e Henk (LUIJTEN; BLÖTE, 1995). Este método possui em sua essência o algoritmo de Wolff, porém não será necessário testar, a partir de um sítio inicial, todos os seus vizinhos, como será visto a seguir.

A ideia do algoritmo de Wolff modificado, para a construção de ilhas com interações de longo alcance, é dada pela seguinte forma: inicialmente, sorteia-se aleatoriamente um sítio da rede, denotado pela posição i . As ligações ativas, ou seja, sítios que podem ser adicionados a ilha são verificados por

$$p(s_i, s_j) = \delta_{s_i, s_j} \left(1 - e^{-J_{ij}}\right), \quad (3.4)$$

onde $J_{ij} = \beta/|i-j|^{1+\sigma}$. O fator $(1 - e^{-J_{ij}})$ representa a probabilidade de ativação da ligação entre os dois sítios de mesmo estado separados pela distância $|i-j|$, em unidades de espaçamento da rede. Cada vez que o sítio selecionado pertence a uma ligação ativa, o sítio é adicionado

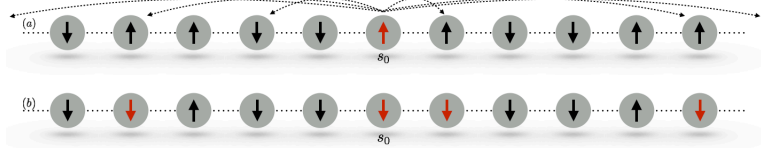


Figura 8 – Ilustração do algoritmo de Wolff modificado. A partir do sítio s_0 (\uparrow), são determinados quais sítios serão incluídos na ilha e após esse processo a ilha é transformada em um novo estado (\downarrow).

à ilha. Dessa forma, este sítio é colocado em uma pilha. Essa pilha, é uma lista que contém os sítios que foram adicionados à ilha, e os sítios são removidos dela uma vez que tenham sido utilizados. Quando todos os vizinhos do primeiro sítio i forem considerados segundo o algoritmo de Wolff modificado, o próximo a ser considerado é o que se encontra na pilha e repete-se o processo de inclusão de sítios na ilha. O sítio que está ativando ligações é denominado de sítio atual, e sempre será designado por s_0 como mostra a figura 8. Este ciclo termina quando a pilha está vazia, ou seja, todos os sítios da pilha forem considerados. Neste algoritmo, uma vez selecionado o sítio atual, os sítios que podem ser incluídos na ilha não são testados um a um em relação a s_0 , como no algoritmo de Wolff padrão. Para determinar de que forma selecionam-se sítios que poderão ser adicionados à ilha, é utilizado a probabilidade acumulada, $C(j)$, definida por

$$C(j) \equiv \sum_{n=1}^j P(n), \quad (3.5)$$

onde

$$\begin{aligned} P(n) &= (1 - p_1)(1 - p_2)(1 - p_3) \cdots (1 - p_{n-1})p_n \\ &= \left[\prod_{m=1}^{n-1} (1 - p_m) \right] p_n. \end{aligned} \quad (3.6)$$

$P(n)$ é a probabilidade de que os primeiros $(n - 1)$ sítios não sejam adicionados à ilha mas o n -ésimo seja, e $p_j \equiv (1 - e^{-J_j})$ é a notação

abreviada para $p_{0j} = (1 - e^{-J_{0j}})$. Assim, um número aleatório é gerado $g \in [0, 1)$, de tal forma que $j - 1$ sítios são ignorados se $C(j - 1) \leq g < C(j)$. Se $s_0 = s_j$, adiciona-se s_j à ilha, caso contrário s_j não é adicionado. Após esta etapa, prosseguindo com a mesma ideia, o próximo sítio a ser adicionado à ilha, digamos s_k em relação a s_0 , é determinado por novo número aleatório de forma que agora deseja-se que $k > j$ (independente se s_j foi ou não adicionado a ilha). Dessa forma, a probabilidade $P_j(k)$ de que após o sítio j os $k - 1$ não sejam adicionados à ilha e o k -ésimo sítio seja, é dada por

$$P_j(k) = \left[\prod_{m=j+1}^{k-1} (1 - p_m) \right] p_k, \quad (3.7)$$

e a probabilidade acumulada agora é escrita na forma

$$C_j(k) = \sum_{n=j+1}^k P_j(n). \quad (3.8)$$

A equação (3.8) pode ser reescrita na seguinte forma,

$$\begin{aligned} C_j(k) &= \sum_{n=j+1}^k \left[\prod_{m=j+1}^{n-1} (1 - p_m) \right] p_n \\ &= p_{j+1} + (1 - p_{j+1})p_{j+2} + (1 - p_{j+1})(1 - p_{j+2})p_{j+3} + \cdots + \\ &\quad (1 - p_{j+1}) \cdots (1 - p_{k-2})p_k + (1 - p_{j+1}) \cdots (1 - p_{k-1})p_k \\ &= (1 - e^{-J_{j+1}}) + e^{-J_{j+1}}(1 - e^{-J_{j+2}}) + e^{-J_{j+1}}e^{-J_{j+2}}(1 - e^{-J_{j+3}}) + \\ &\quad \cdots + e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_{k-2}}(1 - e^{-J_{k-1}}) + e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_{k-1}}(1 - e^{-J_k}) \\ &= 1 - e^{-J_{j+1}} + e^{-J_{j+1}} - e^{-J_{j+1}}e^{-J_{j+2}} + e^{-J_{j+1}}e^{-J_{j+2}} - \\ &\quad e^{-J_{j+1}}e^{-J_{j+2}}e^{-J_{j+3}} + \cdots + e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_{k-2}} - \\ &\quad e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_{k-2}}e^{-J_{k-1}} + e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_{k-1}} - e^{-J_{j+1}} \cdots e^{-J_k} \\ C_j(k) &= 1 - e^{-\sum_{n=j+1}^k J_n} = 1 - \prod_{n=j+1}^k (1 - p_n). \end{aligned} \quad (3.9)$$

A equação (3.9) representa a probabilidade de adicionar um sítio dentro da distância $[j + 1, k]$. Essa equação possui a mesma forma de (3.5), apenas foi alterada a soma sobre as constantes de acoplamento J_n no

intervalo $[j + 1, k]$. Independente se o sítio s_j foi ou não adicionado à ilha, ao gerar um novo número aleatório, o próximo sítio a ser testado, seria identificado pela relação $C_j(k - 1) \leq g < C_j(k)$ fornecendo o índice k . Isso implicaria em calcular $C_j(k)$ dado em (3.9). Dessa forma, seria sempre necessário ficar calculando termos como $C_j(k)$ para testar os sítios em relação a s_0 que poderiam ser adicionados à ilha após a primeira tentativa e isso tornaria o processo muito trabalhoso e lento do ponto de vista computacional. Entretanto, há uma modo de resolver este obstáculo.

Uma maneira de se determinar os sítios que podem ser adicionados à ilha partindo apenas do sítio atual é então construir uma tabela finita de pesquisa, que consiste das probabilidades acumuladas $C(m)$ que variam de 1 até um valor limitante M previamente fixado, formando a tabela cujos elementos são colocados em ordem $(C(1), \dots, C(M))$ e cada um sendo determinado por (3.5). A cada número aleatório gerado, pode-se determinar através dessa tabela qual sítio pode ser adicionado a ilha pela relação $C(m - 1) \leq g < C(m)$ identificando o valor de m distante do sítio atual s_0 . Pela definição de (3.5), escrevendo na forma de (3.9), temos

$$\begin{aligned} C(k) &= 1 - e^{-\sum_{n=1}^k J_n} \\ &= 1 - \prod_{i=1}^j \prod_{l=j+1}^k (1 - p_i)(1 - p_l) \\ &= 1 - \left[\prod_{i=1}^j (1 - p_i) \right] [1 - C_j(k)], \end{aligned} \quad (3.10)$$

sendo

$$C(j) = 1 - e^{-\sum_{n=1}^j J_n} = 1 - \prod_{i=1}^j (1 - p_i), \quad (3.11)$$

a equação (3.10) se torna

$$\begin{aligned} C(k) &= 1 - (1 - C(j))(1 - C_j(k)) \\ &= C(j) + [1 - C(j)]C_j(k), \end{aligned} \quad (3.12)$$

ou seja,

$$C_j(k) = \frac{C(k) - C(j)}{1 - C(j)}. \quad (3.13)$$

Dessa forma, $C_j(k)$ é determinado diretamente por $C(k)$. Uma vez que o sítio j é testado para ser adicionado a ilha, gera-se um novo número aleatório g , e o próximo sítio a ser testado é determinado por

$$C_j(k-1) \leq g < C_j(k), \quad (3.14)$$

ou ainda, utilizando (3.13)

$$\frac{C(k-1) - C(j)}{1 - C(j)} \leq g < \frac{C(k) - C(j)}{1 - C(j)}, \quad (3.15)$$

que pode ser reescrita como

$$C(k-1) \leq g[1 - C(j)] + C(j) < C(k). \quad (3.16)$$

Isso equivale a reescalar g para g' definindo

$$g' \equiv g[1 - C(j)] + C(j), \quad (3.17)$$

e assim, elimina-se o problema de calcular explicitamente $C_j(k)$ ao reescalar g para g' . Compara-se então g' com a tabela de pesquisa $(C(1), \dots, C(M))$ para se determinar qual o próximo sítio a ser testado através de $C(k-1) \leq g' < C(k)$ fornecendo o valor de k em relação ao sítio atual s_0 .

Portanto, basta ao início do processo construir a tabela de pesquisa $(C(1), \dots, C(M))$ apenas uma única vez. Sendo essa tabela limitada, denotada de tamanho M , algumas considerações devem serem feitas quando distâncias superiores a M são consideradas.

Após a tabela pesquisa, a soma (3.9) pode ser aproximada por uma integral de forma que

$$C_j(k) = 1 - e^{-\sum_{n=j+1}^k \frac{1}{Tn^{1+\sigma}}} \rightarrow 1 - \exp\left(-\int \frac{x^{-(1+\sigma)}}{T} dx\right), \quad (3.18)$$

onde foi feita a substituição $J_n = 1/(Tn^{1+\sigma})$. Realizando essa integral da menor ligação j até k temos

$$C_j(k) = 1 - \exp \left[-\frac{1}{T\sigma} \left(\frac{1}{j^\sigma} - \frac{1}{k^\sigma} \right) \right]. \quad (3.19)$$

O índice j refere-se ao último sítio testado para incluir na ilha e o próximo a ser testado, denotado por k sempre será $k > j$. Igualando a equação (3.19) ao número aleatório g , o valor de k fica determinado por

$$k = [j^{-\sigma} + \sigma T \ln(1-g)]^{-1/\sigma}. \quad (3.20)$$

Nesta etapa, não é mais necessário reescalar os novos números aleatórios gerados. A primeira vez que ocorrer do número aleatório gerado estar entre $[C(M), C(\infty))$, o próximo sítio a ser testado é determinado por uma versão modificada da equação (3.20), dada por

$$k = \left[\left(M + \frac{1}{2} \right)^{-\sigma} + \sigma \left(T \ln(1-g) + \sum_{n=1}^M \frac{1}{n^{1+\sigma}} \right) \right]^{-1/\sigma}. \quad (3.21)$$

O fator $1/2$ na primeira parte da equação garante que, quando $g = C(M) = 1 - \exp \left[-1/T \sum_{n=1}^M \frac{1}{n^{1+\sigma}} \right]$, $k = M + 1/2$, que é o menor k após a tabela de tamanho M . Após o primeiro sítio determinado estar além da tabela pesquisa, todos os próximos sítios a serem testados, são determinados pela equação (3.20) gerando sempre um novo número aleatório. O último caso a ser considerado é quando ocorrer de $g \in [C_j(\infty), 1)$, onde

$$C_j(\infty) = 1 - \exp \left[-\frac{1}{T\sigma j^{-\sigma}} \right]. \quad (3.22)$$

Neste caso, considera-se que o próximo sítio a ser testado estaria no infinito. Dessa forma, nenhum sítio é mais testado em relação ao sítio atual. O processo de incluir sítios a ilha é encerrado, o sítio atual é removido da pilha, o próximo sítio da fila da pilha tornar-se o sítio atual e o processo é reiniciado até que todos os sítios da pilha sejam utilizados. Ao final deste processo, a ilha total é então

formada e seu estado é alterado para um novo estado de Potts escolhido aleatoriamente.

A substituição da soma por uma integral na equação (3.22), para $k > M$, equivale a mudar a interação entre os sítios sem, entretanto, modificar a simetria do modelo. Assim, a temperatura crítica pode variar, quando comparada com a de um modelo no qual tal substituição não tenha sido feita, mas, por universalidade, os expoentes críticos serão os mesmos.

3.1 Correlação no modelo de Potts unidimensional com diluição

Para a realização das simulações numéricas, o cálculo do parâmetro de ordem m foi determinado por

$$m = \frac{q \max(\rho) - 1}{q - 1}, \quad (3.23)$$

onde $\max(\rho)$ representa, dentre todos os estados possíveis $(0, 1, \dots, q - 1)$ para os sítios na rede, a maior densidade de estados observada. Já para energia total, ela é determinada por

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^L \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\|i-j|-nL|^{1+\sigma}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{|L(n+1)-|i-j||^{1+\sigma}} \right] \delta_{s_i, s_j} \epsilon_i \epsilon_j, \quad (3.24)$$

onde $s_i = 0, 1, \dots, q - 1$, ϵ_i assume o valor 1 para o sítio presente e 0 para o caso de ausência do sítio. As somas entre colchetes representam contribuições sob a consideração de condição de contorno periódica.

No algoritmo empregado neste trabalho, cada passo de Wolff corresponde a criar uma ilha de tamanho no máximo L , e mudar o estado dessa ilha para um novo estado (arbitrário e diferente do estado anterior) de Potts. Esta nova configuração, evidentemente foi gerada a partir da configuração anterior, sendo aquela considerada como dependente da anterior. Dessa forma, para analisar o erro das grandezas consideradas, é preciso utilizar dados ditos descorrelacionados. Para isso, a cada passo de Wolff, o programa grava os dados de m e da

energia total E total do sistema em uma tabela e através desses valores é possível determinar a correlação do sistema pela função de correlação $\varphi(t)$ (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999), definida por

$$\varphi(t) = \int [m(t') - \langle m(t) \rangle] [m(t+t') - \langle m(t) \rangle] dt', \quad (3.25)$$

ou, escrita na forma discreta,

$$\varphi(t) = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t')m(t'+t) - \left(\frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t') \right) \left(\frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} m(t'+t) \right),$$

em que t_{max} é o número total de dados obtidos para m . A correlação entre os dados gerados obedece o decaimento da forma exponencial decrescente, como mostra a figura 9, em que a função de correlação é descrita aproximadamente por

$$\varphi(t) \sim e^{-t/\tau}, \quad (3.26)$$

onde τ é denominado de tempo de correlação do sistema. Deve-se mencionar que a correlação de um dado sistema depende de vários fatores, como o algoritmo utilizado, modelo em estudo, tamanho do sistema, temperatura utilizada, grandeza estudada, etc.

O tempo de correlação também poderia ser determinado com a utilização dos dados obtidos pela energia do sistema, optamos utilizar apenas a magnetização pois esta possui um tempo de correlação superior ao tempo obtido pela energia para este algoritmo.

Para se determinar τ , foi realizado o ajuste linear fazendo o gráfico semi-log da função de correlação $\varphi(t)$ em função do tempo t como mostra a figura 10. Pode-se notar pela figura que não é para toda região do tempo t que o ajuste linear pode ser realizado na escala semi-log. À medida que t aumenta, há poucos dados para o cálculo da correlação, conduzindo a uma estatística ineficiente.

Após determinado τ , considera-se que dados obtidos no intervalo $\Delta t = 2\tau$ são considerados estatisticamente descorrelacionados

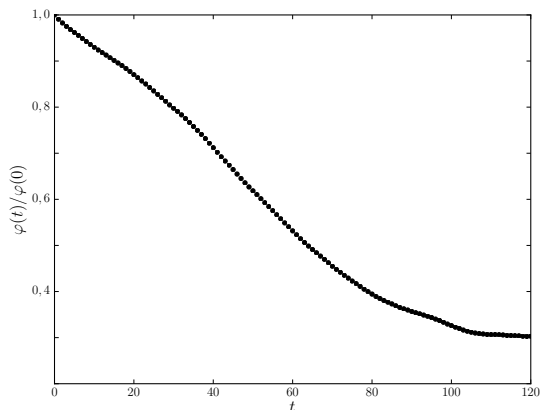


Figura 9 – Gráfico função de correlação $\varphi(t)/\varphi(0)$ em função de t para o modelo de Potts de 3 estados de uma rede linear de tamanho $L=25000$.

(NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Dessa forma, primeiramente é determinado o tempo que o sistema leva para chegar ao equilíbrio, as simulações contidas nessa região são descartadas, apenas com o restante dos dados após o equilíbrio que se determina o valor de τ . Os valores obtidos pela energia e pela magnetização do sistema são coletados a cada 2τ para então realizar o tratamento dos dados que será abordado a seguir ao utilizar os métodos de histogramas no caso homogêneo e diluído.

3.2 Métodos de histograma

Através dos dados obtidos pelo método de Monte Carlo, os métodos dos histogramas, simples e múltiplo, são uma útil ferramenta para tratar os dados e fornecer valores precisos de grandezas de interesse, dentro de um intervalo de temperatura próximo das temperaturas simuladas. Estes métodos são baseados na ideia de (VALLEAU, 1972)

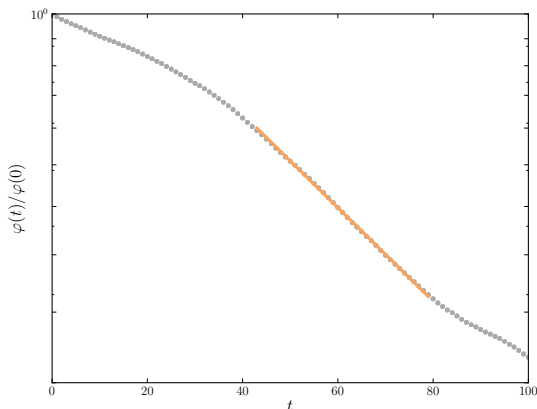


Figura 10 – Gráfico semi-log da função de correlação $\varphi(t)$ em função de t para o modelo de Potts de 3 estados de uma rede linear de tamanho $L=25000$. O valor de τ é obtido pelo inverso da inclinação da reta (laranja).

e (FERRENBURG; SWENDSEN, 1989) que serão abordadas a seguir.

3.2.1 Método do histograma simples

O método do histograma simples permite extrapolar, com apenas uma temperatura simulada, resultados para outras temperaturas próximas da temperatura original.

Dessa forma, utilizar o método do histograma simples requer um tempo computacional muito inferior comparado a simular em diferentes temperaturas. Para uma grandeza de interesse, o valor médio de Q na temperatura T_0 é dada por

$$\langle Q \rangle_{T_0} = \frac{\sum_{\{s\}} Q e^{-E/T_0}}{\sum_{\{s\}} e^{-E/T_0}}, \quad (3.27)$$

o valor médio do mesmo observável em outra temperatura T é dado

por

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_{\{s\}} Q e^{-E/T}}{\sum_{\{s\}} e^{-E/T}}, \quad (3.28)$$

que pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_T &= \frac{\sum_{\{s\}} Q e^{-(1/T+1/T_0-1/T_0)E}}{\sum_{\{s\}} e^{-(1/T+1/T_0-1/T_0)E}} \\ &= \frac{\sum_{\{s\}} [Q e^{-(\Delta K)E}] e^{-E/T_0}}{\sum_{\{s\}} [e^{-\Delta KE}] e^{-E/T_0}} = \frac{\langle Q e^{-\Delta KE} \rangle_{T_0}}{\langle e^{-\Delta KE} \rangle_{T_0}}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde $\Delta K = (1/T - 1/T_0)$. Suponha que são obtidos, através de simulações de Monte Carlo, n medidas de uma grandeza Q . Para esse conjunto de n estados estatisticamente independentes, pode-se estimar a média do observável Q dada por

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_i. \quad (3.30)$$

Assim, a equação (3.29) pode ser reescrita, na forma aproximada, por

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_{i=1}^n Q_i e^{-\Delta KE_i}}{\sum_{i=1}^n e^{-\Delta KE_i}}, \quad (3.31)$$

em que Q_i e E_i são valores obtidos para o estado i pela simulação de Monte Carlo à temperatura T_0 . Essa equação (3.31) permite obter o valor médio de alguma grandeza Q na temperatura T próxima de T_0 . A equação (3.31) é uma aproximação, e a estimativa de $\langle Q \rangle_T$ pode ser boa dependendo do valor de T e também da quantidade de dados da simulação. À medida que T difere de T_0 a qualidade de $\langle Q \rangle_T$ é afetada. Pode-se ainda escrever (3.31) em termos da quantidade $N(Q, E)$, que é o número de vezes que é obtido um estado com valor Q e energia E na simulação, de forma que

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_{\{Q, E\}} Q N(Q, E) e^{-\Delta KE}}{\sum_{\{Q, E\}} N(Q, E) e^{-\Delta KE}}. \quad (3.32)$$

Essa equação ainda pode ser escrita na forma

$$\langle Q \rangle_T = \sum_{\{Q, E\}} Q W_T(Q, E) \quad (3.33)$$

onde

$$W_T(Q, E) = \frac{N(Q, E)e^{-\Delta KE}}{\sum_{\{Q, E\}} N(Q, E)e^{-\Delta KE}} \quad (3.34)$$

é a estimativa da probabilidade do estado possuir o valor Q e energia E na temperatura T . Em nosso trabalho, temos interesse no caso em que $Q = E$, para determinar as distribuições das energias para verificar qual a ordem da transição no caso sem e com diluição.

Com o histograma de E , a partir de uma temperatura simulada T_0 , é possível estimar qual o valor do intervalo $\Delta T \equiv |T - T_0|$ em que pode-se empregar o histograma simples obtendo um resultado confiável. Para isso, considera-se a distribuição $W(E)$ centrada em $\langle E \rangle$. Se representarmos o intervalo permitido pelo desvio padrão σ_E , então o critério é dado por

$$|\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0}| \leq \sigma_E. \quad (3.35)$$

O valor σ_E^2 da largura do histograma é proporcional ao calor específico c na temperatura T_0 (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999), de forma que o critério pode ser reescrito na forma

$$[\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0}]^2 \leq T_0^2 c(T_0). \quad (3.36)$$

Fazendo a aproximação de que

$$\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0} \simeq \left. \frac{dE}{dT} \right|_{T_0} (T - T_0) = c(T_0) \Delta T \quad (3.37)$$

e combinando as equações (3.36) e (3.37), o valor confiável de ΔT que se pode considerar é obtido pela equação

$$\Delta T = \frac{T_0}{\sqrt{c(T_0)}}. \quad (3.38)$$

Dessa forma, a partir de T_0 , determina-se o valor limite de T que pode ser utilizado para a aplicação do método do histograma.

3.2.2 Múltiplo histograma

O método do histograma simples é uma ferramenta que não demanda muito processamento computacional quando se considera o caso de $Q = E$. Contudo, a precisão do histograma simples nos extremos do intervalo considerado diminui e, se estamos interessados em obter o valor de T_c para várias grandezas com uma precisão melhor, o método tem suas limitações. Dessa forma, para se obter resultados dos valores de $T_c(L)$ em várias grandezas termodinâmicas, e outros parâmetros desejados, o método do múltiplo histograma é indicado.

A ideia do múltiplo histograma é trabalhar com várias simulações realizadas em diferentes temperaturas, para gerar um intervalo “contínuo” de uma determinada grandeza de interesse (em função da temperatura, por exemplo).

Para cada simulação realizada em uma temperatura T_i , pode-se obter uma estimativa da densidade de estados associada a esta simulação através de (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999)

$$\rho_i(E) = \frac{N_i(E)}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-E/T_i}}, \quad (3.39)$$

em que n_i é o número de dados independentes obtidos na simulação i . Com os valores obtidos de $\rho_i(E)$, o interesse é tentar obter a melhor estimativa de $\rho(E)$ onde $\rho(E)$ é a densidade de estados que depende somente do sistema em estudo e não da temperatura. Para isso, é feita uma média ponderada sobre os $\rho_i(E)$, em que o peso é dado pelo inverso da variância $\sigma_i^2(E)$ da estimativa $\rho_i(E)$, o qual minimiza $\overline{\rho(E)}$ (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999), de forma que

$$\overline{\rho(E)} = \frac{\sum_i \rho_i(E) / \sigma_i^2}{\sum_i 1 / \sigma_i^2}. \quad (3.40)$$

Considerando que as medidas obtidas da energia do sistema são independentes, o erro $\Delta N_i(E)$ do histograma dos dados de cada simulação deve ser Poissoniano (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999), de forma que

$$\Delta N_i(E) = \sqrt{N_i(E)}, \quad (3.41)$$

onde $\overline{N_i(E)}$ é a média na temperatura T_i realizada sobre infinitas medidas (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Desse modo, pode-se escrever a densidade de estados $\rho(E)$ da forma

$$\rho(E) = \frac{\overline{N_i(E)}}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-E/T_i}}. \quad (3.42)$$

Evidentemente, essa densidade seria possível de se obter ao realizar infinitas simulações em T_i , o que torna-se impraticável. Contudo, esta equação permitirá obter uma forma simplificada para o método do múltiplo histograma. O erro assumido da equação (3.39) é devido a $N_i(E)$ e pode-se escrever

$$\sigma_i = \Delta\rho_i(E) = \frac{\Delta N_i(E)}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-E/T_i}} = \frac{\sqrt{\overline{N_i(E)}}}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-E/T_i}} \quad (3.43)$$

e a variância é dada por

$$\sigma_i^2 = \frac{\overline{N_i(E)}}{n_i^2} \left[\frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-E/T_i}} \right]^2 = \frac{\rho(E)\mathcal{Z}_i}{n_i e^{-E/T_i}}. \quad (3.44)$$

Combinando (3.44) com (3.40), a melhor estimativa de $\overline{\rho(E)}$, é descrita por

$$\overline{\rho(E)} = \frac{\sum_i \left\{ \rho_i(E) \left[\frac{n_i e^{-E/T_i}}{\rho(E)\mathcal{Z}_i} \right] \right\}}{\sum_j \left[\frac{n_j e^{-E/T_j}}{\rho(E)\mathcal{Z}_j} \right]}, \quad (3.45)$$

e pela equação (3.39), a equação (3.45) se torna

$$\overline{\rho(E)} = \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{-E/T_j}}. \quad (3.46)$$

Esta última expressão ainda não é muito útil, pois não se conhece as funções de partição \mathcal{Z}_j para cada temperatura simulada T_j . Para contornar esse problema, note que a função de partição a temperatura T_k é dada por

$$\mathcal{Z}_k = \sum_E \rho(E) e^{-E/T_k} = \sum_E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(1/T_k - 1/T_j)E}}. \quad (3.47)$$

Utilizar então o múltiplo histograma implica em resolver a equação (3.47) iterativamente para a função de partição \mathcal{Z}_k na temperatura T_k . Para isso, atribui-se valores iniciais as funções de partição \mathcal{Z}_j e utiliza-se a equação (3.47) para se obter primeiramente as funções de partição \mathcal{Z}_j referentes às temperaturas simuladas. Repetindo esse processo iterativo, espera-se que ele convirja para um ponto fixo das equações, que fornece os valores corretos das funções de partição \mathcal{Z}_j . Foi considerado como condição inicial em que todos $\mathcal{Z}_j = 1$; esse valor não é importante, mas é crucial que \mathcal{Z}_j seja maior que zero (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Para o critério de convergência, foi calculado a cada iteração a fração da variação de cada \mathcal{Z}_j através do parâmetro Δ^2 definido por (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999)

$$\Delta^2 = \sum_k \left(\frac{\mathcal{Z}_j^{(m)} - \mathcal{Z}_j^{(m-1)}}{\mathcal{Z}_j^{(m)}} \right)^2, \quad (3.48)$$

onde o índice m se refere a m -ésima iteração. Neste trabalho, foi fixado $\Delta = 10^{-7}$ como critério para a convergência de cada \mathcal{Z}_j . De modo prático, para se obter os \mathcal{Z}_j a equação (3.47) pode ser escrita em termos dos valores obtidos da energia $E_{i,s}$ na i -ésima simulação e no s -ésimo estado gerado. Dessa forma, fazendo a substituição de $\sum_i \sum_E N_i(E) = \sum_i \sum_s (1)$ em (3.47), tem-se

$$\mathcal{Z}_k = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(1/T_k - 1/T_j) E_{i,s}}}. \quad (3.49)$$

Uma vez obtidos os \mathcal{Z}_j referentes a cada simulação, pode-se determinar a função de partição para outros valores de temperatura T . Assim, a equação que determina $\mathcal{Z}(T)$ é dada por

$$\mathcal{Z}(T) = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(1/T - 1/T_j) E_{i,s}}}. \quad (3.50)$$

Com a função de partição $\mathcal{Z}(T)$ determinada, pode-se também obter o valor médio de grandezas termodinâmicas de interesse na

temperatura T , dado pela seguinte equação

$$\langle Q \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}(T)} \sum_{i,s} \frac{Q_{is}}{\sum_j \mathcal{Z}_j^{-1} n_j e^{(1/T-1/T_j)E_{is}}}. \quad (3.51)$$

A figura 11 mostra os gráficos obtidos utilizando o múltiplo histograma para a construção da curva do calor específico c e da susceptibilidade magnética χ . O método dos múltiplos histogramas utiliza uma função contínua, mas para gerar os gráficos, a aplicação do método requer que sejam utilizados valores discretos de temperatura. Nas figuras em que aparecem gráficos utilizando o múltiplo histograma, os valores de T utilizados são muito próximos, formando a curva visivelmente contínua.

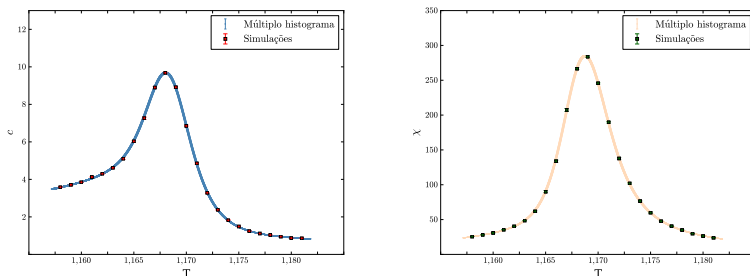
Para a determinação da barra de erro, foi utilizado no cálculos dos erros das grandezas o método dos blocos (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Ele consiste em dividir cada tabela obtida das simulações para a energia E e magnetização m em blocos de mesmo tamanho (cada bloco contém o mesmo número de dados). Dessa forma, para cada bloco, implementa-se o método do múltiplos histogramas e em seguida o erro relativo a uma determinada grandeza é determinado por

$$\Delta Q_{n_b} = \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle_{n_b} - \langle Q \rangle_{n_b}^2}{n_b - 1}}, \quad (3.52)$$

em que n_b é o número de blocos utilizados, $\langle Q \rangle_{n_b} = \sum_{i=1}^{n_b} Q_i / n_b$ e $\langle Q^2 \rangle_{n_b} = \sum_{i=1}^{n_b} Q_i^2 / n_b$. No caso homogêneo, a equação (3.52) fornece a barra de erro das grandezas consideradas. Já no caso diluído, devemos levar em conta dois tipos de erros: o erro de cada amostra e o erro sobre as amostras consideradas. Neste caso, executamos o método dos múltiplos histogramas para cada amostra e em seguida, o erro total ΔQ associado a uma grandeza Q , é determinado por

$$\Delta Q = \text{máx}(\Delta Q)_{n_b} + \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle_{n_a} - \langle Q \rangle_{n_a}^2}{n_a - 1}}, \quad (3.53)$$

em que n_a é o número de amostras consideradas no caso diluído, e $\text{máx}(Q)_{n_b}$ é o maior erro obtido utilizando o método dos blocos nas amostras.



- (a) Gráfico do calor específico em função da temperatura T , numa rede linear de tamanho $L = 30000$.
 (b) Gráfico da susceptibilidade em função da temperatura T , numa rede linear de tamanho $L = 30000$.

Figura 11 – Resultados obtidos pelas simulações (quadrado) realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$. As curvas representam os valores obtidos pelo método dos múltiplos histogramas

3.2.3 Derivadas de grandezas termodinâmicas

Para a determinação dos expoentes críticos, ou também para a determinação da temperatura de transição, é necessário obter derivadas de algumas grandezas termodinâmicas. Para isso, com o auxílio do método do múltiplos histogramas, pode-se obter as derivadas dessas grandezas através da expressão

$$\frac{d\langle Q \rangle_K}{dK} = \frac{d}{dK} \left[\frac{\text{Tr} (Q e^{-KE})}{\text{Tr} (e^{-KE})} \right] = \langle E \rangle_K \langle Q \rangle_K - \langle EQ \rangle_K. \quad (3.54)$$

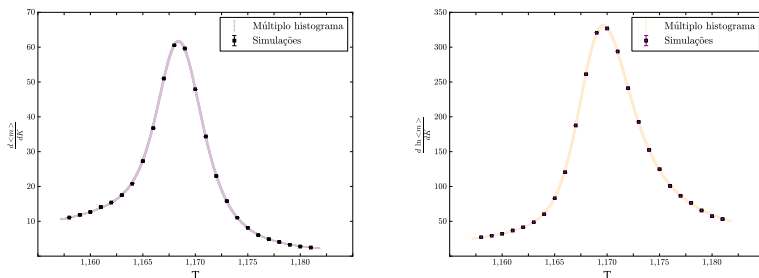
em que Tr representa a soma sobre todos os estados do sistema e $K = 1/k_b T$. Por exemplo, utilizando (3.54) a derivada de $G = \ln \langle m \rangle$

é dada por

$$\begin{aligned}
 \frac{d \ln \langle m \rangle_K}{dK} &= \frac{1}{\langle m \rangle_K} \frac{d \langle m \rangle_K}{dK} \\
 &= \frac{1}{\langle m \rangle_K} [\langle E \rangle_K \langle m \rangle_K - \langle Em \rangle_K] \\
 &= \langle E \rangle_K - \frac{\langle Em \rangle_K}{\langle m \rangle_K}. \tag{3.55}
 \end{aligned}$$

Além de derivadas de primeira ordem obtidas pela equação (3.54), pode-se também obter derivadas de segunda ordem, utilizando o mesmo processo realizado em (3.54). Isso é útil quando há interesse em se obter a temperatura de transição. No que se refere ao calor específico e a susceptibilidade, por exemplo, para estimar a temperatura de transição, basta calcular a derivada primeira dessas grandezas e determinar qual valor de K tal que $\left. \frac{d \langle Q \rangle_K}{dK} \right|_K = 0$. Já para $\ln \langle m \rangle$, $\langle m \rangle$ e o cumulante de Binder definido por $U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}$, por exemplo, é necessário obter a segunda derivada para se estimar a temperatura de transição. A figura 12 mostra o gráfico das derivadas de $\langle m \rangle$ e de $\ln \langle m \rangle$ em função de T , construídas pelo método dos múltiplos histogramas. Para determinar o pico, que corresponde ao valor da temperatura de transição, foi utilizado o método da bisseção. A única condição para se utilizar esse método é que a temperatura esteja dentro do intervalo das temperaturas simuladas. Esse método da bisseção é realizado em conjunto com o método do múltiplo histograma, e o erro relativo a cada iteração é determinado pela diferença entre a temperatura obtida na n -ésima iteração com a iteração anterior, dado pelo fator $\varepsilon = \frac{T^n - T^{n-1}}{T^n}$. Como critério de convergência, foi utilizado $\varepsilon < 10^{-7}$ para todas as grandezas termodinâmicas consideradas.

Dessa forma, é possível determinar as temperaturas de transição $T_c(L)$ de cada grandeza termodinâmica de interesse. Deve-se observar que, por tratarmos de tamanhos finitos de redes, os valores dessas temperaturas para diferentes grandezas não serão iguais, porém são próximos. À medida que se aumenta o tamanho da rede, essa diferença das temperaturas para diferentes grandezas tende a se reduzir,



- (a) Gráfico da derivada de $\langle m \rangle$ em relação a K em função da temperatura T , numa rede linear de tamanho 30000. (b) Gráfico da derivada de $\ln \langle m \rangle$ em relação a K em função da temperatura T , numa rede linear de tamanho 30000.

Figura 12 – Resultados obtidos pelas simulações (quadrado) realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$. As curvas, representam os valores obtidos pelo método dos múltiplos histogramas

aproximando o valor entre elas.

3.3 Resultados

Neste trabalho, foram realizadas simulações para os casos de 2 e 3 estados no modelo de Potts com interações de longo alcance. Para realizar as simulações, foi utilizado como gerador de números pseudo-aleatórios o “Mersenne – Twister” (MATSUMOTO; NISHIMURA, 1998). Todas as simulações foram realizadas utilizando condições de contorno periódicas e como condição inicial foi estabelecida $s_i=0$ em todas as redes.

O primeiro caso considerado foi de $q = 3$ e o valor de σ utilizado foi de $\sigma = 0,5$. Nesta situação, o caso de $p = 1$ (sem diluição) trata-se de uma transição de primeira ordem. Com a inclusão da diluição, o interesse é verificar se há uma mudança na ordem da transição e, se houver, qual será a nova classe de universalidade obtida.

Outro caso considerado foi o modelo de Potts de 2 estados.

Nesta situação, para valores de σ com $0 < \sigma < 1$, a transição de fase é de segunda ordem. Neste caso, foram realizadas simulações no caso homogêneo e diluído com $\sigma = 0,7$ para verificar se a inclusão da diluição causa uma mudança na classe de universalidade do sistema.

3.3.1 Determinando a ordem da transição

Nesse modelo de estudo, um modo para se determinar a ordem da transição de fase é utilizar o método desenvolvido por (CHALLA; LANDAU; BINDER, 1986). Esse método consiste em analisar os dados obtidos pelas simulações sobre a energia do sistema. A cada tamanho de rede, realizam-se simulações em diferentes temperaturas e a energia associada a cada simulação obedece uma distribuição de energia $P_L(E)$, que é considerada da forma

$$P_L(E) = \frac{a}{\sqrt{c}} \exp \left[-\frac{(E - \bar{E})^2 L^d}{2k_B T^2 c} \right], \quad (3.56)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, d é a dimensão do sistema, c o calor específico, a é o fator de normalização, L é o tamanho da rede e \bar{E} é o valor da energia média da rede infinita. Quando se trata de transições contínuas (de segunda ordem), a distribuição de $P_L(E)$ possui um pico apenas, pois a passagem da fase ordenada para a fase desordenada ocorre de forma contínua. Já para transições de primeira ordem, o sistema apresenta coexistências de fases e não há mais essa passagem contínua durante a transição. Neste caso, a distribuição de probabilidade apresenta dois picos correspondendo ao estado ordenado e desordenado. Dessa forma, $P_L(E)$ pode ser escrita como a soma de duas Gaussianas

$$P_L(E) = \frac{a_o}{\sqrt{c_o}} \exp \left\{ -\frac{[E - (E_o + c_o \Delta T)]^2 L^d}{2k_B T^2 c_o} \right\} + \frac{a_d}{\sqrt{c_d}} \exp \left\{ -\frac{[E - (E_d + c_d \Delta T)]^2 L^d}{2k_B T^2 c_o} \right\}, \quad (3.57)$$

onde E_o representa a energia do sistema no caso ordenado, E_d a energia no caso desordenado, a_o e a_d as constantes de normalização e c_o e c_d o calor específico dos casos ordenado e desordenado respectivamente.

Com o aumento da rede L , Lee e Kosterlitz (LEE; KOSTERLITZ, 1990) consideraram que a energia livre em função de E dependia do tamanho da rede, e definiram a grandeza

$$F_L(E) = -\ln P_L(E). \quad (3.58)$$

Dessa forma, uma maneira de saber se a transição é de primeira ou segunda ordem, para $L \gg \xi$, em que ξ é o comprimento de correlação do sistema, $F_L(E)$ apresenta dois mínimos e um máximo que separa os mínimos, indicando ser uma transição de primeira ordem. Já para a distribuição de energia, haverá dois máximos com um mínimo entre os máximos.

A figura 13 mostra o caso homogêneo, obtido para diferentes tamanhos de redes lineares utilizadas. Primeiramente, para cada tamanho de rede, foram realizadas simulações próximas à temperatura de transição e depois estimado o valor da temperatura de transição pelo método dos múltiplos histogramas (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999). Após isso, uma nova simulação foi realizada utilizando este valor da temperatura estimada. Feito esta simulação, foi utilizado o método do histograma simples (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999) para se obter um ajuste que forneça os picos de mesma altura. À medida que os tamanhos das redes são aumentados, a distância desses picos em relação a seu respectivo mínimo aumenta, caracterizando uma transição de primeira ordem.

Já a figura 14 mostra o caso diluído, para diferentes redes lineares consideradas para uma configuração de desordem. Note que para o menor tamanho de rede considerada não há mais o padrão de duas Gaussianas como do caso homogêneo, há dois picos muito próximos e o padrão de duas Gaussianas já não se torna tão evidente. Mesmo para outros tamanhos de redes utilizados os picos que aparecem são muito próximos e não aumentam em relação ao mínimo entre eles. Neste caso, a inclusão da diluição muda de forma significativa já em redes menores, levando o sistema a uma transição contínua.

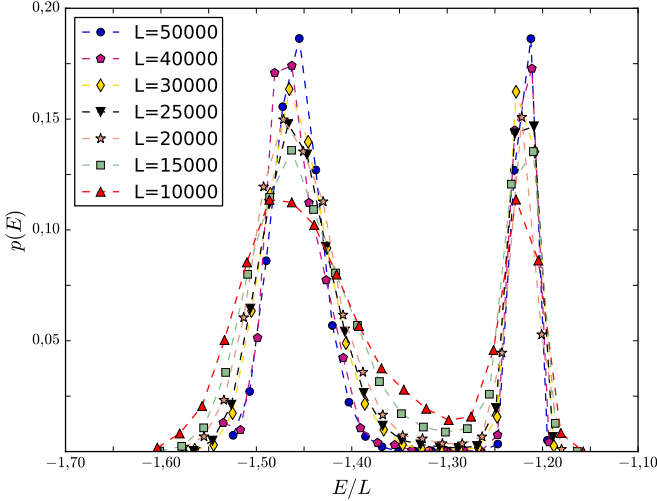


Figura 13 – Gráfico da distribuição da energia para redes lineares no caso homogêneo ($p=1$), obtido pelas simulações no modelo de Potts de 3 estados para $\sigma = 0,5$.

Portanto, considera-se que quando os dois máximos possuem a mesma amplitude, o sistema encontra-se na temperatura de transição $T_c(L)$. A partir disto, define-se ΔF como a razão entre o máximo e o mínimo obtidos de $P_L(E)$, ou seja,

$$\Delta F = \ln \left[\frac{P_L(E_{máx})}{P_L(E_{mín})} \right]. \quad (3.59)$$

Para o caso em que ΔF aumenta com o aumento da rede L , trata-se de uma transição de primeira ordem; caso contrário, a transição será de segunda ordem.

A figura 15 mostra os resultados obtidos para os casos homogêneo e diluído ($p = 0,7$) no modelo de Potts de 3 estados com $\sigma = 0,5$. No limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$ ou $1/L \rightarrow 0$), pode-se

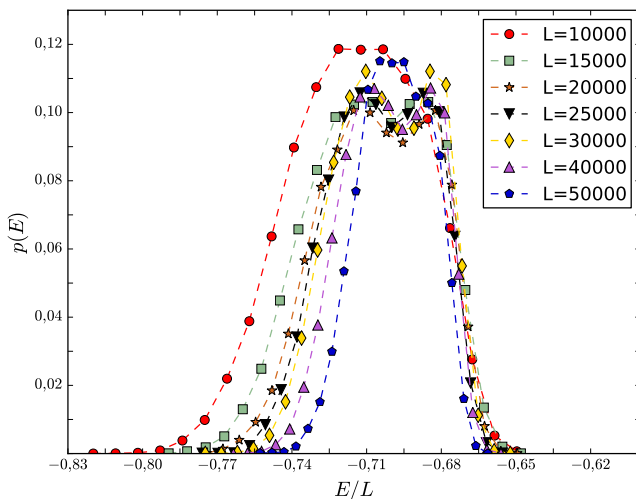


Figura 14 – Gráfico da distribuição da energia para redes lineares no caso diluído ($p=0,7$) obtidas pelas simulações no modelo de Potts de 3 estados para $\sigma = 0,5$.

notar que, no caso homogêneo, ΔF aumenta com o tamanho da rede, caracterizando uma transição de primeira ordem. A linha tracejada representa o ajuste exponencial realizado. Para o caso diluído, foram utilizadas 5 configurações de desordem e obtido um ΔF médio dessas cinco configurações. Neste caso, esta grandeza não possui um crescimento no seu valor à medida que se aumentam os tamanhos das redes, seus valores ficam muito próximos de zero, representando assim uma transição contínua.

Uma vez que foi determinada a ordem da transição, há também o interesse em obter quais os valores dos expoentes críticos para estes sistemas que apresentam transição contínua. A seguir, apresentase o método de escala de tamanho finito como ferramenta para se obter os valores dos expoentes.

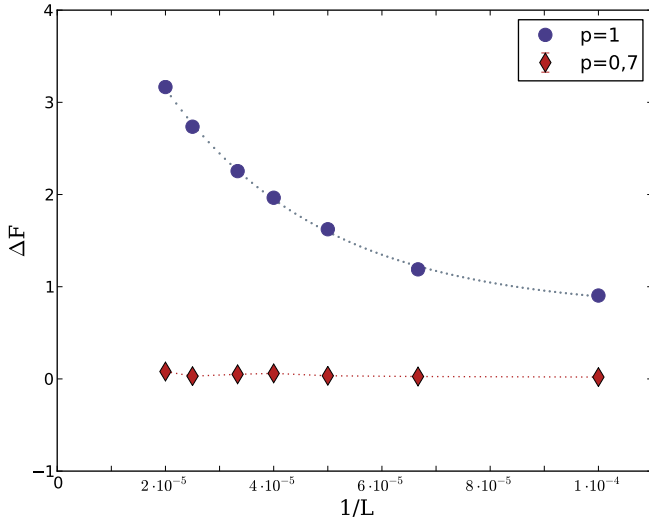


Figura 15 – Gráfico da barreira da energia ΔF em função do inverso do tamanho da rede linear $1/L$ para o modelo de Potts de 3 estados com $\sigma = 0,5$ para os casos homogêneo ($p = 1$) e diluído ($p = 0,7$). No caso diluído, as barras de erro são menores que os símbolos.

3.3.2 Escala de tamanho finito

As singularidades das funções termodinâmicas associadas ao ponto crítico ocorrem somente no limite termodinâmico e, devido à limitação de se realizarem simulações numéricas com tamanhos finitos de redes, o método de escala de tamanho finito (“*finite size scaling*”-FSS)(CARDY, 2012; NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999) é necessário a fim de fornecer uma maneira de obter os expoentes críticos no limite citado acima, partindo das propriedades de sistemas finitos. Neste método, os expoentes críticos são determinados pelos valores obtidos de grandezas termodinâmicas para diferentes tamanhos de redes lineares L , realizando simulações nas proximidades de $T_c(L)$.

Para um sistema finito de tamanho L considerado nas simulações de Monte Carlo, o comprimento de correlação não chega a divergir. Assim, a susceptibilidade por exemplo, também irá ser limitada (não diverge). Matematicamente, nas simulações de Monte Carlo, as grandezas termodinâmicas também podem ser representadas por leis de potências, de forma que na região próxima de T_c ($|t| \approx 0$), as grandezas escalam com o tamanho linear L da rede considerada. É claro que para cada tamanho de rede, é obtida uma temperatura pseudo crítica $T_c(L)$ e esta temperatura também varia de acordo com a grandeza termodinâmica utilizada. À medida que tamanhos maiores de rede são utilizados, os valores de $T_c(L)$ tendem a se aproximar do valor de T_c .

O valor de $T_c(L)$ é obtido ao localizar, por exemplo, o máximo de χ para o tamanho linear da rede L , utilizada como foi descrito anteriormente empregando o método do múltiplo histograma (figura 11b). Dessa forma, por exemplo, utilizando o valor máximo obtido para cada tamanho de rede linear L , χ escala na forma $\chi(T_c(L)) \propto L^{\gamma/\nu}$ e é realizado o ajuste para se obter os expoentes críticos. De forma similar, este processo é aplicado a outras grandezas.

As relações a seguir mostram como essas grandezas são relacionadas com os expoentes críticos obtidos pelo método de escala de tamanho finito (NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, 1999):

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (3.60)$$

$$c \propto L^{\alpha/\nu}, \quad (3.61)$$

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (3.62)$$

$$\frac{dU_4}{dK} \propto L^{1/\nu}, \quad (3.63)$$

$$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK} \propto L^{1/\nu}. \quad (3.64)$$

A seguir, determinam-se os expoentes críticos para diferentes valores de q e σ considerados aplicando o método de escala de tamanho finito.

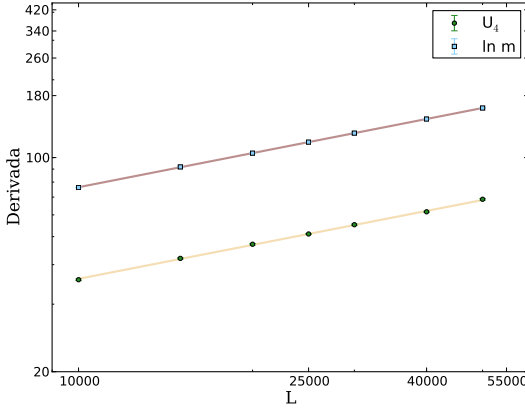


Figura 16 – Gráfico log-log dos máximos obtidos da derivada de $\log\langle m \rangle$ e de U_4 em relação a K para caso de $q = 2$ e $p = 1$.

3.3.3 Determinando os expoentes críticos: caso $q=2$, $\sigma = 0,7$ e $p=1$

Para o caso de $q = 2$ e $p = 1$ já é conhecido que as transições de fase são de segunda ordem na região de $0 < \sigma \leq 1$ (DYSON, 1969a). Inicialmente, para a obtenção do expoente ν , foi determinado o máximo da derivada em relação a $K = 1/T$ do $\ln\langle m \rangle$ e do cumulante de Binder U_4 para diferentes tamanhos de redes. O ajuste realizado para a determinação de $1/\nu$ foi feito pelas relações (3.63) e (3.64). A figura 16 mostra o ajuste linear realizado para a obtenção de ν . Combinando os valores obtidos por ν_{U_4} e $\nu_{\ln m}$ foi obtido $\nu = 1,99 \pm 0,05$ e $1/\nu = 0,50 \pm 0,01$. Este resultado está de acordo com o resultado obtido por Monte Carlo em (UZELAC; GLUMAC; ANIČIĆ, 2001): $1/\nu = 0,51 \pm 0,02$. Para a determinação do expoente β , foi utilizada a relação (3.62). Dessa forma, com $\nu = 1,99 \pm 0,05$, foi obtido $\beta = 0,269 \pm 0,009$. A figura 17 mostra o ajuste realizado para a determinação de β . Este resultado está de acordo com $\beta = 0,26$

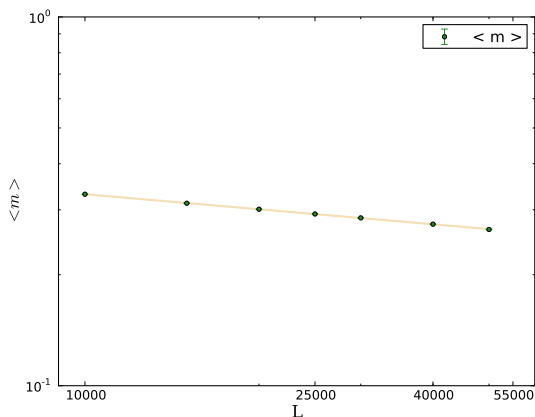


Figura 17 – Gráfico log-log de $\langle m \rangle(T_c(L))$ obtido em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$.

obtido em (NAGLE; BONNER, 1970).

Para o expoente γ , foi feito o ajuste pela relação (3.60) para os diferentes tamanhos de redes. A figura 18 mostra o ajuste realizado fazendo uso de $\nu = 1,99 \pm 0,05$. O valor obtido de γ foi $\gamma = 1,42 \pm 0,04$. Este resultado também está de acordo com $\gamma = 1,42$ obtido em (NAGLE; BONNER, 1970).

Para a determinação de α , foi realizado o ajuste com o máximo do calor específico obtido para cada tamanho de rede através da relação (3.61). A figura 19 mostra o ajuste realizado para a obtenção de α , com $\nu = 1,99$ utilizado, de forma que foi obtido $\alpha = 0,157 \pm 0,007$. Pela relação de Rushbrooke, encontramos $\alpha + 2\beta + \gamma = 2,12 \pm 0,07$ e a combinação das relações de Rushbrooke com a de Josephson, $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d$, nos fornece $\frac{\gamma}{\nu} + 2\frac{\beta}{\nu} = 0,98 \pm 0,05$, indicando que o valor de α apresenta ser o expoente mais sensível em se obter com melhor exatidão.

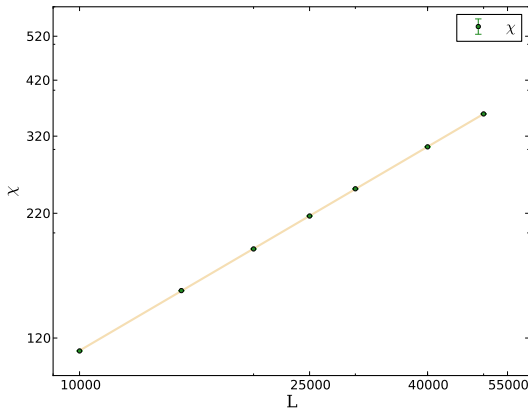


Figura 18 – Gráfico log-log dos máximos obtidos da susceptibilidade χ em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$.

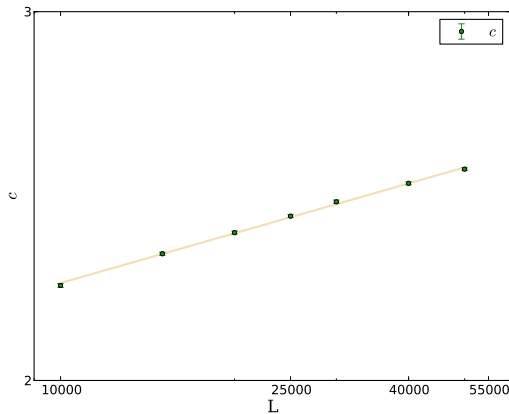


Figura 19 – Gráfico log-log dos máximos obtidos do calor específico em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 2$ e $p = 1$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,99 \pm 0,05$.

3.3.4 Determinando os expoentes críticos: caso $q=2$, $\sigma = 0,7$ e $p = 0,7$

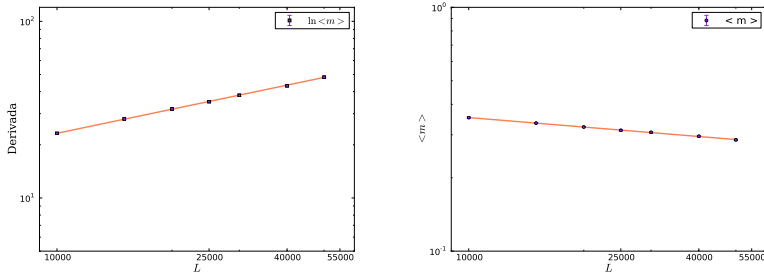
Para a determinação dos expoentes críticos no caso diluído, o procedimento realizado foi semelhante ao caso homogêneo. Porém, foram considerados 20 configurações de desordem para cada tamanho de rede linear utilizada para a determinação dos erros das grandezas obtidos pela equação (3.53). Primeiramente, foi determinado o valor de ν com o ajuste realizado pelo máximo obtido de $\log\langle m \rangle$ para cada tamanho de rede linear utilizada como mostra a figura 20a. O valor de ν determinado foi $\nu = 2,21 \pm 0,09$. Este valor apresentou ser maior do que para o caso puro ($p = 1$).

Para o expoente β , foi estimado o valor de $T_c(L)$ ao determinar o máximo da derivada de $\langle m \rangle$ em relação a $K = 1/T$. O ajuste linear é mostrado na figura 20b, onde encontramos $\beta = 0,29 \pm 0,03$.

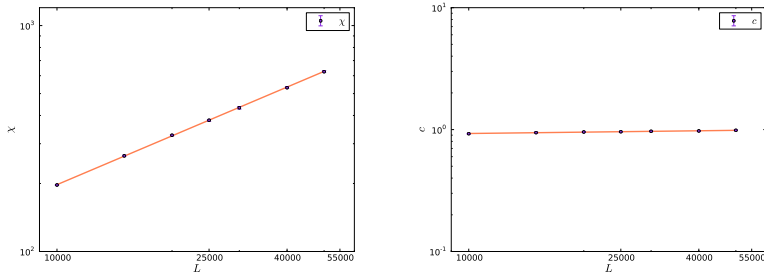
Para o expoente γ , pela relação (3.60), foi realizado o ajuste considerando redes lineares variando de tamanho 10000 até 50000. O valor obtido foi $\gamma = 1,59 \pm 0,07$. A figura 20c mostra os valores obtidos para os máximos da susceptibilidade e também o ajuste linear realizado.

Para o expoente α , realizando o ajuste linear com os tamanhos das redes lineares consideradas utilizando o máximo do calor específico obtido para cada rede pela relação (3.61), foi obtido $\alpha = 0,08 \pm 0,03$. Pela relação de Rushbrooke, encontramos $\alpha = 2 - \gamma - 2\beta = -0,17 \pm 0,09$ e a relação de Josephson nos fornece $\alpha = 2 - \nu d = -0,21 \pm 0,09$. Esses valores negativos obtidos por essas relações são mais consistentes com a teoria do grupo de renormalização, indicando novamente que α apresenta ser o expoente menos preciso de se obter.

A tabela 16 mostra a comparação entre os expoentes obtidos no caso homogêneo e diluído no modelo de Potts de dois estados. Pode-se notar que os expoentes γ e ν mudam ao incluir diluição. Já o expoente β ainda possui valor próximo do caso homogêneo e o expoente α sofre alteração com a inclusão da diluição. Deste modo, o sistema



(a) Gráfico log-log dos máximos obtidos da derivada de $\log(m)$ em relação a K obtidos em função do tamanho linear da rede L . (b) Gráfico log-log de $\langle m \rangle(T_c(L))$ obtidos em função do tamanho linear da rede L . O valor de ν utilizado foi $\nu = 2, 21$.



(c) Gráfico log-log dos máximos obtidos da susceptibilidade χ em função do tamanho linear da rede L . O valor de ν utilizado foi $\nu = 2, 21$. (d) Gráfico log-log dos máximos obtidos do calor específico em função do tamanho linear da rede L . O valor de ν utilizado foi $\nu = 2, 21$.

Figura 20 – Resultados dos expoentes obtidos pelas simulações realizadas para o caso diluído $p = 0, 7$ de $q = 2$ com $\sigma = 0, 7$.

diluído apresenta possuir uma nova classe de universalidade. Contudo, o valor de α apresenta ser um desafio em se obter de forma precisa pelo método utilizado.

Note ainda que, se o panorama obtido com o grupo de renormalização de campo médio está correto (isto é, o mesmo valor de y_h para os modelos puro e diluído e y_t diferente), os expoentes da versão

desordenada seriam diversos dos do caso puro, mas β/γ seria o mesmo para ambas as versões. Aqui obtemos $\beta/\gamma = 0,19 \pm 0,01$ para o caso puro e $\beta/\gamma = 0,18 \pm 0,03$ para o caso diluído (com $p = 0,7$), que é consistente com o que foi encontrado com o grupo de renormalização de campo médio.

Tabela 16 – Comparação dos expoentes obtidos no caso homogêneo e diluído no modelo de Potts de dois estados com $\sigma = 0,7$.

p	α	β	γ	ν
1	$0,157 \pm 0,007$	$0,269 \pm 0,009$	$1,42 \pm 0,04$	$1,99 \pm 0,05$
0,7	$0,08 \pm 0,03$	$0,29 \pm 0,03$	$1,59 \pm 0,07$	$2,21 \pm 0,09$

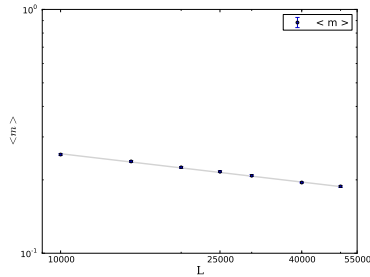
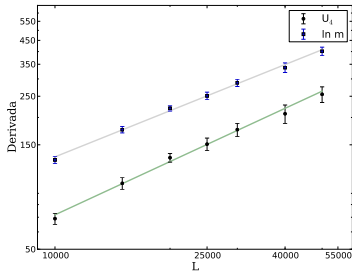
3.3.5 Determinando os expoentes críticos: caso $q = 3$, $\sigma = 0,5$ e $p = 0,7$

Como verificado na seção 3.3.1, este caso apresenta transição contínua e o primeiro expoente a ser obtido foi ν , que foi determinado com o máximo da derivada em relação a $K = 1/T$ do $\ln\langle m \rangle$ e do cumulante de Binder U_4 para diferentes tamanhos de redes. O ajuste realizado para a determinação de $1/\nu$ foi feito pelas relações (3.63) e (3.64). A figura 21a mostra o ajuste linear realizado para a obtenção de ν . Combinando os valores obtidos de ν para $\ln\langle m \rangle$ e U_4 foi obtido $\nu = 1,3 \pm 0,2$.

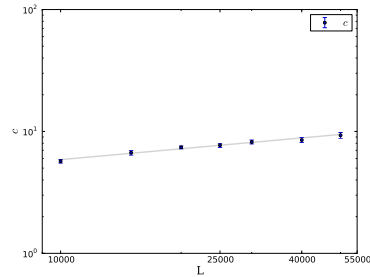
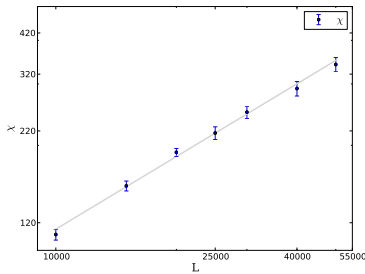
Para o expoente β , foi utilizado a relação (3.62), e obtidos os valores dos máximos de $\langle m \rangle$ na temperatura crítica estimada pelo método do múltiplo histograma. Para o conjunto de redes consideradas, foi obtido $\beta = 0,25(4)$. A figura 21b mostra os dados obtidos pelas simulações, onde foram considerados 20 configurações de desordem para cada tamanho de rede linear.

Para o expoente γ , com os máximos determinados pelo método dos múltiplos histogramas, foi utilizada a relação (3.60) para realizar o ajuste como mostra a figura 21c. O valor de γ obtido foi $\gamma = 0,9(2)$.

Utilizando a combinação das relações de Rushbrooke com a de Josephson, $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d$, com os valores dos expoentes determinados, foi obtido $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = 1,1 \pm 0,3$. Para o expoente α , foi realizado o ajuste pela relação (3.61), obtendo o valor $\alpha = 0,4 \pm 0,1$. A figura (21d) mostra o ajuste realizado considerando redes lineares de tamanho 10000 até 50000. Pela relação de Rushbrooke, encontramos $\alpha = 2 - \gamma - 2\beta = 0,6 \pm 0,2$ e pela relação de Josephson nos fornece $\alpha = 2 - \nu d = 0,7 \pm 0,2$.



(a) Gráfico log-log dos máximos obtidos da derivada de $\log \langle m \rangle$ e de U_4 em relação a K para caso de $q = 3$ e $p = 0,7$. (b) Gráfico log-log de $\langle m \rangle(T_c(L))$ obtidos em função do tamanho linear da rede L . O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,3$.



(c) Gráfico log-log dos máximos obtidos da susceptibilidade χ em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 3$ e $p = 0,7$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,3$. (d) Gráfico log-log dos máximos obtidos do calor específico em função do tamanho linear da rede L , para o caso de $q = 3$ e $p = 0,7$. O valor de ν utilizado foi $\nu = 1,3$.

Figura 21 – Resultados dos expoentes obtidos pelas simulações realizadas para o caso diluído $p = 0,7$ de $q = 3$ com $\sigma = 0,5$.

Nesta situação considerada para a obtenção dos expoentes críticos, foi verificado que os valores de q e σ afetam de modo significativo os valores do tempo de correlação. Mesmo utilizando 20 configurações de desordem, os erros dos expoentes obtidos foram maiores do que os do modelo com $q = 2$ e $\sigma = 0,7$ como foi visto anteriormente. Para tentar melhorar o erro, talvez fosse necessário utilizar redes maiores, ou até mesmo mais configurações de desordem. Contudo, os valores do tempo de correlação se mostraram bem superiores aos do caso de $q = 2$ e $\sigma = 0,7$, tanto para o caso homogêneo como diluído. Outro fato também verificado foi a necessidade de realizar simulações numa faixa maior de temperaturas para uma dada rede linear utilizada. Isso foi devido ao fato de se utilizar 20 configurações de desordem e os valores de $T_c(L)$ para uma dada grandeza de interesse apresentaram grandes variações de uma configuração de desordem para outra, ocasionando maior tempo de simulação.

4 Conclusões e Perspectivas

Nesse trabalho foi considerado o modelo de Potts com $q = 2$ e 3 unidimensional com interações de longo alcance na forma $J(r) = 1/r^{1+\sigma}$ com e sem efeitos de diluição. Para tratar este modelo, utilizou-se primeiramente o grupo de renormalização de campo médio. Desta forma, foram construídos blocos de tamanhos ímpares para se determinar a temperatura crítica e outras quantidades relevantes. Um fato observado foi que, devido à interação de longo alcance, juntamente com efeitos de diluição, o tempo computacional para os cálculos envolvidos se tornam grandes quando comparado ao caso sem diluição (caso puro).

Verificamos que para a temperatura crítica T_c em ambos os casos de $q = 2$ e $q = 3$, à medida que se aumenta a diluição ($p \rightarrow 0$), o valor de T_c decresce indo ao valor nulo (o que é esperado) em $p = 0$. Também, na análise do expoente crítico y_h em ambos os casos considerados, verificamos que não há uma alteração significativa nos valores dos expoentes do caso puro, $p = 1$, para o caso diluído, $p \neq 1$. Com relação a y_t , foi utilizado o critério de Harris para verificar se ao introduzir efeitos de diluição haveria uma mudança na classe de universalidade do sistema. Para $q = 2$, o critério de Harris indica que não há uma mudança na classe de universalidade para todos os valores de σ considerados, com possível exceção para $\sigma = 0, 7$. Já em $q = 3$, para $\sigma = 0, 7$, $\sigma = 0, 8$ e $\sigma = 0, 9$ deve haver uma mudança na classe de universalidade. Pelos resultados obtidos o expoente y_t varia com a introdução da diluição mas y_h parece permanecer no mesmo valor do caso puro.

Na segunda parte do projeto, implementamos o método de Monte Carlo para interações de longo alcance unidimensional sob o efeito de desordem aleatória. Abordamos os casos de 2 e 3 estados no

modelo de Potts variando σ e p . Primeiramente, analisou-se o caso do modelo de Potts de três estados com $\sigma = 0,5$, para determinar se a inclusão de diluição ocasionaria uma mudança na ordem da transição de fase. Para $p = 1$, foi verificado que a transição é de primeira ordem e a inclusão da diluição, onde considerou-se o valor de $p=0,7$, ocasionou uma mudança para a transição contínua. Ainda neste caso, foram determinados os valores dos expoentes críticos considerando 20 configurações de desordem para cada tamanho de rede linear. Verificamos ainda que os valores de q e σ afetam o tempo de correlação além dos cálculos dos erros dos expoentes obtidos serem maiores quando comparados ao caso de $q = 2$. Já para o caso de $q = 2$, foram analisados dois casos: o caso homogêneo ($p=1$) e o caso diluído ($p=0,7$) ambos para $\sigma = 0,7$. Ambos os casos apresentaram transição contínua com valores dos tempos de correlação próximos nos dois casos. No caso homogêneo, o valor dos expoentes ν , β e γ estão em concordância com resultados obtidos na literatura. No caso diluído, utilizamos 20 configurações de desordem a fim de manter o erro das grandezas na mesma ordem do caso homogêneo. Os resultados indicam que há uma mudança na classe de universalidade com o resultado sendo compatível com o mesmo valor de y_h que o modelo puro mas y_t mudando com a introdução de diluição.

Como perspectiva futura, uma questão interessante é considerar valores menores de σ para o modelo de Potts de três estados, como por exemplo $\sigma = 0,2$. Nesta situação o caso homogêneo exhibe transição de primeira ordem, mas para alguns valores de $p \neq 1$ também continua exibindo transição de primeira ordem, de acordo com cálculos preliminares. O interesse nesse caso, seria tentar obter um valor de p_c que descreveria a divisão da transição de primeira para a de segunda ordem. No caso considerado neste trabalho, $\sigma = 0,5$, algumas simulações foram realizadas para $p = 0,9$ e também $p = 0,99$ indicando que o sistema já apresentava transição contínua. Isto indica que qualquer valor infinitesimal de desordem já extingue a transição de primeira ordem. A diminuição de σ possibilitaria incluir diluição no

sistema e ainda manter a transição de primeira ordem até algum valor p_c . Pretendemos ainda estudar os casos $\sigma \geq 0,7$ para o modelo de Potts de 3 estados para os quais a transição é contínua e outros valores de σ ($\neq 0,7$) no modelo de Potts de 2 estados, a fim de estabelecer a validade do critério de Harris.

Referências

AIZENMAN, M. et al. Discontinuity of the magnetization in one-dimensional $1/|x-y|^2$ Ising and Potts models. *Journal of Statistical Physics*, v. 50, n. 1-2, p. 1–40, jan 1988. ISSN 0022-4715. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01022985>>. Citado na página 6.

AIZENMAN, M.; FERNÁNDEZ, R. Critical exponents for long-range interactions. *Letters in Mathematical Physics*, v. 16, n. 1, p. 39–49, jul 1988. ISSN 0377-9017. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF00398169>>. Citado na página 6.

ANDERSON, P. W.; YUVAL, G. Some numerical results on the Kondo problem and the inverse square one-dimensional Ising model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 4, n. 5, p. 607–620, apr 1971. ISSN 0022-3719. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3719/4/5/011>>. Citado na página 8.

BAXTER, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, Inc, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 5.

BAXTER, R. J.; TEMPERLEY, H. N. V.; ASHLEY, S. E. Triangular Potts Model at its Transition Temperature, and Related Models. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 358, n. 1695, p. 535–559, jan 1978. ISSN 1364-5021. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/cgi/doi/10.1098/rspa.1978.0026>>. Citado na página 5.

BAYONG, E.; DIEP, H. T.; DOTSENKO, V. Potts Model with Long-Range Interactions in One Dimension. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 83, n. 1, p. 14–17, jul 1999. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.14>>. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 28.

BERNARDES, L.; Goulart Rosa, S. Bethe lattice approximation of the one-dimensional Potts model with long-range interaction. *Physics Letters A*, v. 191, n. 1-2, p. 193–199, aug 1994. ISSN 03759601. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0375960194905843>>. Citado na página 6.

BISKUP, M.; CHAYES, L.; CRAWFORD, N. Mean-Field Driven First-Order Phase Transitions in Systems with Long-Range Interactions. *Journal of Statistical Physics*, v. 122, n. 6, p. 1139–1193, mar 2006. ISSN 0022-4715. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10955-005-8072-0>>. Citado na página 6.

BLÖTE, H.; HERINGA, J.; LUIJTEN, E. Cluster Monte Carlo: Extending the range. *Computer Physics Communications*, v. 147, n. 1-2, p. 58–63, aug 2002. ISSN 00104655. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010465502002047>>. Citado na página 7.

BREZIN, E.; ZINN-JUSTIN, J.; GUILLOU, J. C. L. Critical properties near σ dimensions for long-range interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 9, n. 9, p. L119–L121, sep 1976. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/9/9/003/meta>>. Citado na página 6.

BROECK, J.-M. V.; SCHWARTZ, L. W. A One-Parameter Family of Sequence Transformations. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, v. 10, n. 3, p. 658–666, may 1979. ISSN 0036-1410. Disponível em: <<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/0510061>>. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.

BRUSH, S. G. History of the Lenz-Ising Model. *Reviews of Modern Physics*, v. 39, n. 4, p. 883–893, 1967. ISSN 0034-6861. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.39.883>>. Citado na página 1.

BULIRSCH, R.; STOER, J. Fehlerabschätzungen und Extrapolation mit rationalen Funktionen bei Verfahren vom Richardson-Typus. *Numerische Mathematik*, v. 6, n. 1, p. 413–427, dec 1964. ISSN 0029-599X. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01386092>>. Citado na página 21.

CANNAS, S. A.; MAGALHÃES, A. C. N. de. The one-dimensional Potts model with long-range interactions: a renormalization group approach. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 30, n. 10, p. 3345–3361, may 1997. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/30/i=10/a=014>>. Citado na página 6.

CANNAS, S. A.; MAGALHÃES, A. C. N. de; TAMARIT, F. A. Evidence of exactness of the mean-field theory in the nonextensive regime of long-range classical spin models. *Physical Review B*, v. 61, n. 17, p. 11521–11528, may 2000. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.11521>>. Citado na página 6.

CARDY, J. *Finite-Size Scaling*. [S.l.]: Elsevier Science, 2012. (Current Physics - Sources and Comments). ISBN 9780444596062. Citado na página 64.

CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P.; BINDER, K. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Physical Review B*, v. 34,

n. 3, p. 1841–1852, aug 1986. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.1841>>. Citado na página 60.

CRAWFORD, D. *Gnuplot: An interactive plotting program*. 2006. Acessado em: Julho de 2014. Disponível em: <<http://www.gnuplot.info>>. Citado na página 24.

DE'BELL, K. Mean-field renormalisation group transformations for geometric phase transitions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, n. 6, p. 1279–1287, apr 1983. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/16/6/022>>. Citado na página 14.

DE'BELL, K.; LOOKMAN, T. Mean field renormalisation group calculations for directed percolation on the square lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 17, n. 13, p. 2733–2736, 1984. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/17/13/024/meta>>. Citado na página 14.

DOMB, C. Configurational studies of the Potts models. *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, v. 7, n. 11, p. 1335–1348, jul 1974. ISSN 0301-0015. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/7/11/013/meta>>. Citado na página 3.

DROZ, M.; MARITAN, A.; STELLA, A. Mean field like renormalization group for disordered systems. *Physics Letters A*, v. 92, n. 6, p. 287–292, nov 1982. ISSN 03759601. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0375960182900895>>. Citado na página 14.

DROZ, M.; PEKALSKI, A. Mean-field like renormalization group study of random two-component magnetic systems. *Physics Letters A*, v. 107, n. 2, p. 89–92, 1985. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960185902038>>. Citado na página 14.

DYSON, F. J. Existence of a phase-transition in a one-dimensional Ising ferromagnet. *Communications in Mathematical Physics*, v. 12, n. 2, p. 91–107, jun 1969. ISSN 0010-3616. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01645907>>. Citado 3 vezes nas páginas 6, 8 e 66.

DYSON, F. J. Non-existence of spontaneous magnetization in a one-dimensional Ising ferromagnet. *Communications in Mathematical Physics*, v. 12, n. 3, p. 212–215, sep 1969. ISSN 0010-3616. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01661575>>. Citado na página 6.

EVANGELISTA, L. R.; SAXENA, V. K. Two-step renormalisation group approach for randomly diluted Ising models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 18, n. 7, p. L389–L394, may 1985. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/18/7/011>>. Citado na página 14.

FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. Optimized Monte Carlo data analysis. *Physical Review Letters*, v. 63, n. 12, p. 1195–1198, 1989. ISSN 00319007. Disponível em: <<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.63.1195>>. Citado na página 50.

FISHER, M. E.; MA, S.-k.; NICKEL, B. G. Critical Exponents for Long-Range Interactions. *Physical Review Letters*, v. 29, n. 14, p. 917–920, 1972. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.29.917>>. Citado 4 vezes nas páginas 6, 7, 29 e 34.

FORD, P. J. Spin glasses. *Contemporary Physics*, v. 23, n. 2, p. 141–168, mar 1982. ISSN 0010-7514. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00107518208237073>>. Citado na página 6.

FRÖHLICH, J.; SPENCER, T. The phase transition in the one-dimensional Ising Model with $1/r^2$ interaction energy. *Communications in Mathematical Physics*, v. 84, n. 1, p. 87–101, mar 1982. ISSN 0010-3616. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01208373>>. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 8.

GIACOMIN, G.; LEBOWITZ, J. L. Exact Macroscopic Description of Phase Segregation in Model Alloys with Long Range Interactions. *Physical Review Letters*, v. 76, n. 7, p. 1094–1097, feb 1996. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.1094>>. Citado na página 6.

GIRARDI, D.; BRANCO, N. S. Influence of aperiodic modulations on first-order transitions: Numerical study of the two-dimensional Potts model. *Physical Review E*, v. 83, n. 6, p. 061127, jun 2011. ISSN 1539-3755. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.061127>>. Citado na página 4.

GLUMAC, Z.; UZELAC, K. Critical behaviour of the 1D q-state Potts model with long-range interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 26, n. 20, p. 5267, 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/26/20/013>>. Citado 9 vezes nas páginas 6, 24, 25, 26, 29, 30, 34, 35 e 36.

GLUMAC, Z.; UZELAC, K. First-order transition in the one-dimensional three-state Potts model with long-range interactions.

Physical Review E, v. 58, n. 4, p. 4372–4376, 1998. ISSN 1063-651X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.58.4372>>. Citado na página 7.

HAMER, C. J.; BARBER, M. N. Finite-lattice extrapolations for Z_3 and Z_s models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 14, n. 8, p. 2009–2025, aug 1981. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/14/8/025/meta>>. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.

HARRIS, A. B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 7, n. 9, p. 1671–1692, may 1974. ISSN 0022-3719. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/7/9/009>>. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 29.

HENKEL, M.; SCHUTZ, G. Finite-lattice extrapolation algorithms. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 21, n. 11, p. 2617–2633, jun 1988. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/21/11/019/meta>>. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 23.

HOHENBERG, P. C.; HALPERIN, B. I. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, v. 49, n. 3, p. 435–479, jul 1977. ISSN 0034-6861. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.49.435>>. Citado na página 3.

HUANG, K. *Statistical Mechanics*. Second edition. [S.l.]: New York, John Wiley & Sons, 1987. Citado na página 17.

IMBRIE, J. Z.; NEWMAN, C. M. An intermediate phase with slow decay of correlations in one dimensional $1/|x-y|^2$ percolation, Ising and Potts models. *Communications in Mathematical Physics*, v. 118, n. 2, p. 303–336, jun 1988. ISSN 0010-3616. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01218582>>. Citado na página 6.

IMRY, Y.; WORTIS, M. Influence of quenched impurities on first-order phase transitions. *Physical Review B*, v. 19, n. 7, p. 3580–3585, apr 1979. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.19.3580>>. Citado na página 9.

INDEKEU, J. O.; MARITAN, A.; STELLA, A. L. Renormalisation group recursions by mean-field approximations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 15, n. 6, p. L291—L297, jun 1982. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/15/6/008>>. Citado na página 14.

INDEKEU, J. O.; MARITAN, A.; STELLA, A. L. Mean-field renormalization group: Unified approach to bulk and surface critical behavior. *Physical Review B*, v. 35, n. 1, p. 305–310, jan 1987. ISSN 0163-1829.

Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.305>>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 16 e 32.

ISING, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 31, n. 1, p. 253–258, feb 1925. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF02980577>>. Citado na página 1.

JONGH, L. J. de. Experiments on simple magnetic model systems. *Journal of Applied Physics*, v. 49, n. 3, p. 1305, 1978. ISSN 00218979. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/49/3/10.1063/1.325027>>. Citado na página 4.

KHOO, K. H.; SY, H. K. Mean-field renormalization group study of the long-range Ising model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 13, n. 1, p. 101–107, jan 2001. ISSN 0953-8984. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/13/1/310/meta>>. Citado 7 vezes nas páginas 23, 25, 27, 29, 30, 34 e 35.

KRECH, M.; LUIJTEN, E. Optimized energy calculation in lattice systems with long-range interactions. *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, v. 61, n. 2, p. 2058–2064, 2000. ISSN 1063-651X. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/11046497>>. Citado na página 7.

LEE, J.; KOSTERLITZ, J. M. New numerical method to study phase transitions. *Physical Review Letters*, v. 65, n. 2, p. 137–140, jul 1990. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.137>>. Citado na página 61.

LUIJTEN, E. Test of renormalization predictions for universal finite-size scaling functions. *Physical Review E*, v. 60, n. 6, p. 7558–7561, dec 1999. ISSN 1063-651X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.60.7558>>. Citado na página 7.

LUIJTEN, E. Monte Carlo Simulation of Spin Models with Long-Range Interactions. In: _____. *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XII: Proceedings of the Twelfth Workshop, Athens, GA, USA, March 8–12, 1999*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000. p. 86–99. ISBN 978-3-642-59689-6. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-59689-6_7>. Citado na página 7.

LUIJTEN, E.; BLÖTE, H. W. Monte Carlo Method for spin models with long-range interactions. *International Journal of Modern Physics C*, v. 06, n. 03, p. 359–370, jun 1995. ISSN 0129-1831. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183195000265>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 41.

LUIJTEN, E.; BLÖTE, H. W. J. Finite-Size Scaling and Universality above the Upper Critical Dimensionality. *Physical Review Letters*, v. 76, n. 10, p. 1557–1561, mar 1996. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.1557>>. Citado na página 7.

LUIJTEN, E.; BLÖTE, H. W. J. Classical critical behavior of spin models with long-range interactions. *Physical Review B*, v. 56, n. 14, p. 8945–8958, oct 1997. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.8945>>. Citado na página 7.

LUIJTEN, E.; MESSINGFELD, H. Criticality in One Dimension with Inverse Square-Law Potentials. *Physical Review Letters*, v. 86, n. 23, p. 5305–5308, jun 2001. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.5305>>. Citado na página 8.

MATSUMOTO, M.; NISHIMURA, T. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 8, n. 1, p. 3–30, 1998. ISSN 10493301. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1145/272991.272995>>. Citado na página 59.

METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, v. 44, n. 247, p. 335, sep 1949. ISSN 01621459. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2280232>>. Citado na página 39.

MONROE, J. L. Long-range one-dimensional Potts models: a cluster mean-field and extrapolation approach. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 32, n. 41, p. 7083–7091, 1999. ISSN 0305-4470. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/32/41/304>>. Citado 3 vezes nas páginas 25, 26 e 36.

NAGLE, J. F.; BONNER, J. C. Numerical studies of the Ising chain with long-range ferromagnetic interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 3, n. 2, p. 352–366, feb 1970. ISSN 0022-3719. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3719/3/i=2/a=017>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 67.

NEWMAN MARK E. J. E BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.: s.n.], 1999. ISBN 978-0-19-851797-9. Citado 13 vezes nas páginas 39, 40, 41, 48, 49, 52, 53, 54, 55, 56, 61, 64 e 65.

NIENHUIS, B.; RIEDEL, E. K.; SCHICK, M. q-state Potts model in general dimension. *Physical Review B*, v. 23, n. 11, p. 6055–6060, jun 1981. ISSN 0163-1829. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.6055>>. Citado na página 5.

ONLAGER, L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, v. 65, n. 3-4, p. 117-149, 1944. ISSN 0031-899X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>>. Citado na página 1.

PITZER, K. S.; De Lima, M. C. P.; SCHREIBER, D. R. Critical point and phase separation for an ionic system. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 89, n. 10, p. 1854-1855, may 1985. ISSN 0022-3654. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/j100256a006>>. Citado na página 6.

PLASCAK, J. a.; FIGUEIREDO, W.; GRANDI, B. C. S. Phenomenological renormalization group methods. *Brazilian Journal of Physics*, v. 29, n. 3, p. 579-596, 1999. ISSN 0103-9733. Disponível em: <<http://ref.scielo.org/kjghzv>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 32.

REYNAL, S.; DIEP, H. T. Reexamination of the long-range Potts model: A multicanonical approach. *Physical Review E*, v. 69, n. 2, p. 26109, 2004. ISSN 1539-3755. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.69.026109>>. Citado 7 vezes nas páginas 7, 8, 28, 29, 30, 35 e 36.

RIERA, J. A. Mean field-finite size scaling transformations for the Z 4 spin model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 17, n. 14, p. 2885, 1984. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/17/14/032>>. Citado na página 14.

RUELLE, D. Statistical mechanics of a one-dimensional lattice gas. *Communications in Mathematical Physics*, v. 9, n. 4, p. 267-278, dec 1968. ISSN 0010-3616. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01654281>>. Citado na página 6.

STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. [S.l.]: Oxford University Press, 1971. Citado na página 1.

STOŠIĆ, B. D.; FITTIPALDI, I. P. Pattern recognition via Ising model with long range interactions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 242, n. 3-4, p. 323-331, aug 1997. ISSN 03784371. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378437197002884>>. Citado na página 6.

THOULESS, D. J. Long-Range Order in One-Dimensional Ising Systems. *Physical Review*, v. 187, n. 2, p. 732-733, nov 1969. ISSN 0031-899X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.187.732>>. Citado na página 6.

TSALLIS, C.; MAGALHÃES, A. C. N. de. Pure and random Potts-like models: real-space renormalization-group approach. *Physics Reports*,

v. 268, n. 5-6, p. 305–430, 1996. ISSN 03701573. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/037015739500064X>>. Citado na página 5.

UZELAC, K.; GLUMAC, Z.; ANIČIĆ, A. Critical behavior of the long-range Ising chain from the largest-cluster probability distribution. *Physical Review E*, v. 63, n. 3, p. 037101, feb 2001. ISSN 1063-651X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.63.037101>>. Citado na página 66.

UZELAC, K.; GLUMAC, Z.; BARIŠIĆ, O. S. Short-time dynamics in the 1D long-range Potts model. *European Physical Journal B*, v. 63, n. 1, p. 101–108, 2008. ISSN 14346028. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2008-00201-3>>. Citado na página 7.

VALLEAU, J. P. Monte Carlo Estimation of the Free Energy by Multistage Sampling. *The Journal of Chemical Physics*, v. 57, n. 1972, p. 5457, 1972. ISSN 00219606. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/57/12/10.1063/1.1678245>>. Citado na página 49.

VASSEUR, R. et al. Phase diagram of ferroelastic systems in the presence of disorder: Analytical model and experimental verification. *Physical Review B*, v. 86, n. 18, p. 184103, nov 2012. ISSN 1098-0121. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.184103>>. Citado na página 8.

WIDOM, B. Equation of State in the Neighborhood of the Critical Point. *The Journal of Chemical Physics*, v. 43, n. 11, p. 3898, 1965. ISSN 00219606. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/43/11/10.1063/1.1696618>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 12.

WIDOM, B. Surface Tension and Molecular Correlations near the Critical Point. *Journal Of Chemical Physics*, v. 43, p. 3892, 1965. ISSN 00219606. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/43/11/10.1063/1.1696617>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 12.

WILSON, K. G. Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture. *Physical Review B*, v. 4, n. 9, p. 3174–3183, nov 1971. ISSN 0556-2805. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.4.3174>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 11.

WILSON, K. G. Renormalization Group and Critical Phenomena. II. Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior. *Physical Review B*, v. 4, n. 9, p. 3184–3205, nov 1971. ISSN 0556-2805. Disponível em:

<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.4.3184>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 11.

WOLFF, U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. *Physical Review Letters*, v. 62, n. 4, p. 361–364, jan 1989. ISSN 0031-9007. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>>. Citado na página 41.

WU, F. Y. The Potts model. *Reviews of Modern Physics*, v. 54, n. 1, p. 235–268, jan 1982. ISSN 0034-6861. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.235>>. Citado 3 vezes nas páginas 4, 5 e 19.

YEOMANS, J. *Statistical mechanics of phase transitions*. [S.l.]: Oxford University Press, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 1, 12 e 13.