

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Ronaldo Givisiez Melo Rodrigues

**Zeros da Função Geradora dos Momentos: Uma nova
abordagem para os zeros da função de partição**

BELO HORIZONTE
2021

Ronaldo Givisiez Melo Rodrigues

Zeros da Função Geradora dos Momentos: Uma nova abordagem para os zeros da função de partição

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól
Coorientador: Bismarck Vaz da Costa

Belo Horizonte

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

R696z Rodrigues, Ronaldo Givisiez Melo.

Zeros da função geradora dos momentos: uma nova abordagem para os zeros da função de partição / Ronaldo Givisiez Melo Rodrigues. – 2021. 94f., enc. : il.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól.

Coorientador: Bismarck Vaz da Costa.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

Bibliografia: f. 89-94.

1. Transição de fase. 2. Modelo de Ising. 3. Probabilidades.
I. Título. II. Mól, Lucas Alvares da Silva. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 531.19 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Zeros da Função Geradora de Momentos: Uma nova abordagem para os zeros da função de partição**". de autoria de **RONALDO GIVISIEZ MELO RODRIGUES** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOCTOR EM CIÊNCIAS**, em dez de dezembro de 2021.

Belo Horizonte, 10 de dezembro de 2021.

Prof. Lucas Álvares da Silva Mol

Orientador do estudante

Departamento de Física/UFMG

Prof. Bismarck Vaz da Costa

Coorientador do estudante

Departamento de Física/UFMG

Prof. João Antônio Plascak

Departamento de Física/UFMG

Prof. Ronald Dickman

Departamento de Física/UFMG

Prof. Julio Cesar Siqueira Rocha

Departamento de Física/UFOP

Prof. Leandro Gutierrez Rizzi

Departamento de Física/UFV



Documento assinado eletronicamente por **Leandro Gutierrez Rizzi, Usuário Externo**, em 13/12/2021, às 08:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 13/12/2021, às 13:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Antonio Plascak, Membro**, em 13/12/2021, às 13:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman, Professor do Magistério Superior**, em 13/12/2021, às 13:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Bismarck Vaz da Costa, Diretor(a)**, em 14/12/2021, às 20:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Julio Cesar Siqueira Rocha, Usuário Externo**, em 16/12/2021, às 14:04, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1141491** e o código CRC **3A9F0204**.

Agradecimentos

Sou muito grato a toda a minha família pelo apoio incondicional que me deram por todos esses anos. Em especial aos meus pais, Elaine e Romero, sem o apoio deles seria impossível alcançar o meu sonho de ter um doutorado. Não posso deixar de agradecer também o meu irmão pelos momentos de descontração e risadas que sempre aliviavam o peso dos dias mais estressantes.

Aos meus amigos, agradeço por compartilharem os momentos bons e ruins durante todos os anos do doutorado, pelas risadas nas mesas de bar e por sempre estarem dispostos a me ajudar quando precisei. Em especial, ao pessoal da física, por tirarem minhas dúvidas e pelas discussões divertidas na hora do café.

Não posso deixar de agradecer também ao pessoal do laboratório e aos professores Lucas e Bismarck, pelas discussões e orientações durante o trabalho.

Por último, agradeço a CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

O método dos zeros de Fisher é usado para identificar transições de fase, não sendo necessário estimar grandezas termodinâmicas em diversas temperaturas ou definir um parâmetro de ordem. Entretanto, essa abordagem é difícil de ser aplicada na prática, pois é necessário resolver um polinômio de grau elevadíssimo cujos coeficientes são dados pela densidade de estados. Além disso, tanto os valores da densidade de estados quanto o grau do polinômio crescem muito rapidamente com o tamanho do sistema. Nestas condições, até mesmo algoritmos no estado da arte encontram dificuldades para encontrar as raízes do polinômio. Visando resolver estes problemas, o método dos zeros da distribuição de probabilidade da energia (EPD) foi criado. De fato, os zeros EPD são capazes de determinar o expoente crítico e a temperatura de transição como os zeros de Fisher, porém sem a maioria dos seus problemas. Um problema que ainda encontramos é o crescimento rápido do grau do polinômio com o tamanho do sistema. Desta forma, para amenizar estes problemas e também ampliar as possíveis aplicação dos zeros Fisher, nós propomos um novo método que usa os zeros da função geradora dos momentos (MGF). Os zeros da MGF, possuem a mesma informação termodinâmica que os zeros de Fisher, mas seu polinômio é ainda mais simples de ser resolvido que o polinômio dos zeros EPD. Além disso, o grau do polinômio dos zeros da MGF cresce mais lentamente com o tamanho do sistema. Sendo assim, este novo método é mais adequado para ser utilizado que os zeros Fisher e os zeros EPD. Nesta tese, nós mostramos em detalhes o desenvolvimento do método dos zeros da MGF, sua relação com os zeros da distribuição de probabilidade da energia (EPD) e sua relação com o método dos cumulantes. Além disso, usando os modelos de Potts com 6-estados e o modelo de Ising em 2 e 3 dimensões, nós mostramos que os zeros da MGF obtêm resultados equivalentes aos zeros EPD e ao método dos cumulantes. Porém, ao ser comparado com os zeros EPD, os zeros da MGF são mais rápidos e utilizam menos recursos computacionais, principalmente em sistemas grandes ou que passem por transições de fase descontínuas. Além disso, quando comparado ao método dos cumulantes, os zeros da MGF apresentam a vantagem de conseguir obter mais de uma estimativa para os expoentes críticos. Desta forma, mostramos que o método dos zeros da MGF marca um avanço importante para os zeros da função de partição.

Palavras-chave: Transições de fase, Zeros da função de partição, Zeros da MGF, Zeros EPD, Modelo de Ising, Modelo de Potts

Abstract

The method of Fisher zeros is used to identify phase transitions without the need to estimate thermodynamic quantities at various temperatures or define an order parameter. However, this method is difficult to apply in practice because it requires solving a high-degree polynomial with coefficients given by the density of states. Furthermore, the values of the density of states and the degree of the polynomial both increase rapidly with system size. These conditions imply that even state-of-the-art root finder algorithms suffer from numerical instabilities, especially for large system sizes. Aiming to solve the Fisher zeros problems, the zeros of the energy probability distribution (EPD) was created. In fact, it is known that the EPD zeros reproduce the results of the Fisher zeros but without some of its problems. The EPD zeros still have one problem, that is, the fast growth of the degree of the polynomial with the system size. To alleviate this problem and to expand the method's applicability, we proposed a new method that uses the moment-generating function zeros (MGF). It is easy to show that the MGF zeros contain the same information as the Fisher zeros, but with the benefit of a polynomial that is simpler to solve, compared to the EPD zeros method. In addition to that, the MGF zeros polynomial has a low degree that increases slowly as the system size grows. Therefore, this new method is more suitable to be used than the Fisher zeros and the EPD zeros. In this dissertation, we show in detail the development of the MGF zeros method, its relation with the energy probability distribution zeros (EPD), and the relation with a cumulant method. Moreover, using the six-state Potts model and the Ising model in 2 and 3 dimensions, we showed that the MGF zeros yield results statistically equivalent to those of the EPD zeros and the cumulant method. However, when compared to the EPD zeros, the MGF zeros are shown to be computationally cheaper and faster, especially in systems that undergo discontinuous phase transition or that have big lattice sizes. Furthermore, when compared to the cumulant method, the MGF zeros have the advantage of finding more estimates for the critical exponent. Thus, the MGF zeros are an important advance over the partition function zeros.

Keywords: Function partition zeros, EPD zeros, MGF zeros, Phase transitions, Ising model, Potts model.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	REVISÃO DE TERMODINÂMICA DE TRANSIÇÃO DE FASE	13
2.1	Classificação de transições	13
2.2	Classe de universalidade e expoentes críticos	13
2.3	Hipótese de escala de Widom	15
2.4	Os blocos de spin de Kadanoff	16
2.5	Hipótese de escala e dados experimentais	19
2.6	Escala de tamanho finito	21
2.7	Não analiticidade da energia livre e transições de fase	24
3	ZEROS DE FISHER	27
3.1	Zeros de Fisher	27
3.2	Zeros de Fisher e a não analiticidade da energia livre	29
3.3	Problemas com os zeros de Fisher	30
4	ZEROS EPD	32
4.1	Os zeros da distribuição de probabilidade da energia	32
4.1.1	O algoritmo de convergência e a reescala dos zeros de Fisher	33
4.1.2	Estimando a temperatura e expoentes críticos	33
4.2	Descarte de estados e aproximação dos zeros EPD	33
4.3	Discussão e comparação entre os métodos	36
5	ZEROS DA MGF	37
5.1	Momentos da distribuição de probabilidade	37
5.2	Função geradora dos momentos	38
5.3	A função geradora dos momentos e o ensemble canônico	38
5.4	Os zeros da MGF	39
5.5	Escala de tamanho finito e os zeros da MGF	41
5.6	Truncando a série	42
5.7	Discussões sobre a implementação do método	42
5.7.1	Escolhendo k_{\max}	42
5.7.2	Escolhendo a equação da MGF	44
5.7.3	Controlando o valor dos coeficientes	47
5.8	Sobre a generalização do método	48
6	NÃO ANALITICIDADES DA CGF	50

6.1	Função geradora dos cumulantes	50
6.2	A função geradora dos cumulantes e o ensemble canônico	51
6.3	Cumulantes e as não analiticidades da energia livre	52
6.4	Os zeros da MGF e a não analiticidade da CGF	52
6.5	Cumulantes e o zero dominante	53
6.6	Comparando os métodos	54
7	MÉTODOS NUMÉRICOS	57
7.1	Simulação de Monte Carlo	57
7.2	Repesagem de histogramas	59
7.3	Repesagem simples de histograma	59
7.4	Repesagem de histograma múltiplo	60
8	MODELOS	62
8.1	Modelo de Ising	62
8.2	Modelo de Potts	63
9	RESULTADOS	64
9.1	Comparativo entre os zeros da MGF e os zeros EPD	64
9.2	Simulações computacionais	64
9.2.1	Modelo de Ising	65
9.2.2	Modelo de Potts com seis estados	69
9.3	Ising 3D	73
9.3.1	Simulações computacionais	73
9.3.2	Análise de dados das grandezas termodinâmicas	74
9.3.3	A eficiência dos zeros da MGF	76
9.3.4	Resultados	77
9.4	Comparativo entre os zeros da MGF e o método dos cumulantes . .	82
9.4.1	Simulações computacionais e o cálculo dos cumulantes	82
9.4.2	O algoritmo de convergência e o método dos cumulantes	83
9.4.3	Estimando a temperatura crítica e os expoentes críticos	83
9.4.4	Além do zero dominante	84
10	CONCLUSÃO	87
	REFERÊNCIAS	90

1 Introdução

Desde os trabalhos seminais de Yang-Lee [1, 2], o método dos zeros da função de partição é um tópico central nos estudos sobre transições de fase. Em seus artigos, Yang e Lee mostram que ao fazer uma extensão analítica da fugacidade, os zeros da função de partição continham a mesma informação termodinâmica que a função de partição grande canônica. Mais especificamente, eles mostram que no limite termodinâmico os zeros se acumulam próximo ao eixo real positivo indicando pontos onde uma transição de fase ocorre. Desta forma, como o método depende de poucas características do sistema para identificar pontos de transições de fase, os zeros de Yang-Lee já foram aplicados em diversos sistemas [3] e, mais recentemente, foram até mesmo observados experimentalmente ao medir a coerência quântica de uma sonda de spin acoplada a um banho do tipo Ising [4].

Inicialmente, os conceitos introduzidos por Yang-Lee foram aplicados somente ao ensemble grande canônico. Foi Fisher [5] o primeiro a perceber que ao fazer uma extensão analítica da temperatura, os conceitos dos zeros também poderiam ser aplicados à função de partição canônica. Porém, os zeros de Fisher apresentam diversos problemas de implementação. De fato, o método exige que encontremos a densidade de estados, uma grandeza difícil de ser obtida, e que resolvamos um polinômio de grau elevadíssimo. Além disso, o método é complicado de ser implementado para sistemas grandes, pois o grau do polinômio cresce muito rapidamente com o tamanho do sistema, assim como os valores de seus coeficientes. Sendo assim, apesar do método dos zeros de Fisher ser interessante para o estudo transições de fase, as dificuldades em sua implementação limitam muito o uso da técnica.

Na última década, novos métodos têm sido desenvolvidos com o intuito de aprimorar a aplicabilidade dos zeros de Fisher. Um método que chama a atenção pela sua simplicidade são os zeros da distribuição de probabilidade da energia (EPD - *Energy Probability Distribution*) [6]. Este método é mais fácil de ser implementado que os zeros de Fisher, pois só é necessário obter a distribuição de probabilidade da energia e resolver um polinômio de grau baixo. Além disso, os zeros EPD reproduzem os mesmos resultados que os zeros de Fisher. Desta forma, o método dos zeros EPD de fato consegue contornar os principais problemas apresentados pelos zeros de Fisher. Existe, entretanto, um único problema que os zeros EPD não conseguem contornar, o rápido crescimento do grau do polinômio com o tamanho do sistema. Apesar dos zeros EPD serem um opção melhor do que a formulação dos zeros de Fisher, ainda há espaço para melhorias.

Nesta tese apresentamos um novo método, os zeros da função geradora dos momentos (MGF - *Moment Generating Function*) [7]. Estes novos zeros possuem a mesma

informação contida nos zeros de Fisher, mas são tão fáceis de serem implementados como os zeros EPD. Além disso, o método apresenta outras vantagens como um polinômio de grau reduzido, mesmo se comparado com os zeros EPD, que cresce devagar com o tamanho do sistema. O método também não apresenta nenhum problema em transições de fase descontínuas, ao contrário dos zeros EPD. Estas vantagens são suficientes para mostrar que o método pode ser utilizado como alternativa aos zeros de Fisher e aos zeros EPD. Além disso, os zeros da MGF abrem também a possibilidade para novas abordagens numéricas, teóricas e até mesmo experimentais, já que para implementar o método só é preciso obter médias termodinâmicas.

No que se segue, no capítulo 2, iremos fazer uma revisão de conceitos importantes sobre a termodinâmica e transições de fase. Apresentaremos o método dos zeros de Fisher e dos zeros EPD nos capítulos 3 e 4, respectivamente. Em seguida, no capítulo 5, será introduzido o tema principal da tese, os zeros da MGF, onde descrevemos sua relação com os zeros EPD, suas vantagens e algumas nuances sobre a implementação do método. No capítulo 6, fazemos uma digressão e apresentamos o método dos cumulantes que possui relação direta com os zeros da MGF. Por fim, no capítulo 9, comparamos os resultados obtidos pelos zeros da MGF com os métodos dos zeros EPD e dos cumulantes, mostrando que os zeros da MGF obtêm resultados estatisticamente equivalentes a esses métodos. Além disso, destacamos as vantagens dos zeros da MGF sobre estes outros métodos, onde mostramos que os zeros da MGF são mais eficientes que os zeros EPD, em certas situações, e conseguem obter estimativas melhores para os expoente críticos que o método dos cumulantes. No capítulo 10, apresentamos um resumo geral da tese e as conclusões finais sobre os resultados.

2 Revisão de termodinâmica de transição de fase

Neste capítulo, iremos revisar alguns conceitos importantes para a teoria de transições de fase. Alguns desses conceitos serão importantes para compreendermos os novos métodos dos zeros da função de partição, tema central da tese que será apresentado nos capítulos posteriores.

2.1 Classificação de transições

Transições de fase são fenômenos que causam mudanças bruscas nas propriedades do material e são indicadas pela presença de descontinuidades ou divergências em grandezas termodinâmicas. Essas transições foram inicialmente classificadas por Ehrenfest [8] como sendo de n -ésima ordem, onde n é ordem da derivada na qual a energia livre do sistema apresenta uma descontinuidade. Essa classificação se mostrou errada, pois não levava em consideração transições de fase sinalizadas por divergências em grandezas termodinâmicas. Esse erro foi causado pelo uso dos conceitos de campo médio, onde são desconsideradas as correlações entre os entes do sistema, suprimindo assim quaisquer manifestações de divergências em grandezas termodinâmicas. Uma classificação mais atual foi cunhada por Fisher [8], onde classificamos as transições como:

- 1) **Descontínua ou de primeira ordem:** Se a primeira derivada da energia livre apresenta uma descontinuidade no ponto de transição.
- 2) **Contínua:** Se primeira derivada da energia livre é contínua, enquanto a segunda derivada da energia livre apresenta descontinuidade ou divergência no ponto de transição.

2.2 Classe de universalidade e expoentes críticos

Sistemas que passam por transições de fase, possuem diversas características em comum. Uma delas é o parâmetro de ordem, uma grandeza que possui valor não nulo na fase ordenada e valor nulo na fase desordenada. Este conceito foi introduzido por Lev Landau [9] e, assim como divergências e descontinuidades em grandezas termodinâmicas, pode ser utilizado para identificar pontos onde a transição de fase ocorre. Porém, o parâmetro de ordem nem sempre é trivial de ser definido, podendo ser representado por

grandezas escalares, vetores e até mesmo números complexos [9]. Além disso, eles não são necessariamente únicos em cada sistema.

Outra característica, mais específica de sistemas que passam por transições de fase contínuas, são os expoentes críticos. Próximo à transição de fase, grandezas termodinâmicas seguem leis de potência simples

$$\mathcal{O}(t) \sim t^\lambda, \quad (2.1)$$

e são descritas por um expoente crítico,

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln \mathcal{O}(t)}{\ln t}, \quad (2.2)$$

onde λ é um expoente crítico, $\mathcal{O}(t)$ é uma grandeza termodinâmica qualquer e t é um parâmetro que mede a distância até o ponto de transição de fase. De fato, este comportamento é observado experimentalmente perto da transição de fase, onde grandezas como o calor específico C_v , susceptibilidade χ , magnetização m , comprimento de correlação ξ e função de correlação G [10] de sistemas magnéticos seguem as leis de escala dadas por,

$$m(t, h = 0) \sim |t|^\beta, \quad (2.3a)$$

$$\chi(t, h = 0) \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.3b)$$

$$m(t = 0, h)^1 \sim H^{1/\delta}, \quad (2.3c)$$

$$C(t, h = 0) \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.3d)$$

$$\xi(t, h = 0) \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.3e)$$

$$G(r, t = 0, h = 0) \sim r^{-(d-2+\eta)}, \quad (2.3f)$$

onde $\beta, \gamma, \alpha, \delta, \nu$ e η são os expoentes críticos relacionados a cada grandeza, $r = |r_i - r_j|$ é a magnitude de separação entre os entes do sistema, $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida, T_c é a temperatura crítica, $h = \mu H/k_B T_c$ é o campo magnético reduzido, H é o campo magnético, μ é o momento magnético e k_B é a constante de Boltzmann. Os expoentes críticos dependem de poucas características do sistema como sua dimensão, o grupo de simetria da Hamiltoniana e o tipo de interação (interação de curto ou de longo alcance). Sendo assim, diversos sistemas compartilham os mesmos valores de expoentes e podem ser agrupados no que chamamos de classes de universalidade. A tabela 1 mostra algumas classes de universalidade e seus respectivos valores para os expoentes.

A física por trás das classes de universalidade e das leis de escala das transições de fase contínuas, se mostrou muito rica. A busca por entender o comportamento desses sistemas gerou diversos avanços teóricos como a hipótese de escala, a teoria de escala de sistema finitos e o grupo de renormalização (RG) [14]. Nas próximas seções, iremos mostrar as ideias básicas sobre a física do problema usando a hipótese de escala de Widom e os blocos de spin de Kadanoff.

¹ Específico para sistema ferromagnéticos ($J > 0$ no modelo de Ising).

Universalidade	d	n	α	β	ν
Campo Médio [11]	todas	todas	0	1/2	1/2
Ising [11]	2	1	0(ln)	1/8	1
Ising [12]	3	1	0.11026(26)	0.221654626(5)	0.629912(86)
XY [13]	3	2	-0.007(6)	0.3455(20)	0.669(2)

Tabela 1 – Valores dos expoentes críticos para algumas classes de Universalidade, onde d é a dimensão do sistema e n é a dimensionalidade do parâmetro de ordem.

2.3 Hipótese de escala de Widom

A classe de universalidade, as leis de escala e por fim as transições de fase contínuas como um todo, começaram a ser compreendidas com a hipótese de escala (estática) de Widom [15] e a proposta de Kadanoff [16] sobre os blocos de spins, esta última culminou na criação do grupo de renormalização (RG) por Wilson [14]. Iremos apresentar a seguir, as ideias de Widom e de Kadanoff de forma simplificada, porém não iremos abordar o grupo de renormalização, já que sua complexidade não iria acrescentar muito às discussões feitas nesta tese.

A hipótese de escala de Widom sugere que a energia livre pode ser dividida em uma parte singular, f_s , e uma parte regular, f_r ,

$$f(t, h) = f_r(t, h) + f_s(t, h), \quad (2.4)$$

onde todo o comportamento não analítico da energia livre está contido na parte singular e as variáveis t e h são parâmetros do sistema. Sendo mais específico, o termo f_s é responsável por causar as divergências e descontinuidades nas grandezas termodinâmicas. Além disso, Widom assume que a energia livre é uma função homogênea generalizada de suas variáveis, ou seja, f_s pode ser escrita como,

$$f_s(t, h) = \lambda^{-d} f_s(t\lambda^{y_t}, h\lambda^{y_h}), \quad (2.5)$$

onde λ , d , y_t e y_h , são parâmetros não especificados. Essas ideias, apesar de serem simples, nos permitem tirar informações importantes acerca dos expoentes críticos sem a necessidade de conhecermos a forma de f .

Como exemplo, ao derivarmos a equação 2.5 de forma apropriada, obtemos,

$$m(t, h) = \lambda^{(y_h - d)} m(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h), \quad (2.6a)$$

$$\chi(t, h) = \lambda^{(2y_h - d)} \chi(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h), \quad (2.6b)$$

$$C_h(t, h) = \lambda^{(2y_t - d)} C_h(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h). \quad (2.6c)$$

Comparando essas equações com as leis de escala em 2.3 e considerando que as relações valem para qualquer valor de λ , ao escolhermos o caso especial onde $h = 0$ e $\lambda = |t|^{-1/y_t}$,

obtemos as relações,

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} , \quad (2.7a)$$

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} , \quad (2.7b)$$

$$\alpha = \frac{2y_t - d}{y_t} . \quad (2.7c)$$

Da mesma forma, ao fazermos $t = 0$ e $\lambda = |h|^{-1/y_h}$, obtemos,

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} . \quad (2.8)$$

Observe que todos os expoentes só dependem de y_t e y_h , sendo possível relacioná-los e obter as equações,

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 , \quad (2.9a)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) . \quad (2.9b)$$

Ao usarmos a hipótese de escala de Widom, conseguimos obter relações entre os expoentes que podem ser checadas por experimentos. Porém, a hipótese de escala de Widom não nos diz nada sobre os expoentes relacionados ao comprimento de correlação ou a correlação. Para obter as relações entre estes expoentes, será necessário entender os blocos de spin de Kadanoff.

A hipótese de escala, na época em que foi desenvolvida, mostrou-se condizente com outros resultados [16], sendo essencial para o desenvolvimento de teorias posteriores como os blocos de spin de Kadanoff e grupo de renormalização (RG) [17]. De fato, a hipótese de escala surge naturalmente usando RG e com alguns argumentos partindo dos blocos de spin de Kadanoff.

2.4 Os blocos de spin de Kadanoff

Apesar da importância da hipótese de escala de Widom, ela não nos diz nada sobre a física por trás do problema. O primeiro a ter a intuição sobre o que acontecia nas transições de fase contínuas foi Kadanoff. Utilizando o modelo de Ising, cujo o comprimento de correlação diverge na transição de fase, ele conseguiu mostrar que existe uma relação entre diversas grandezas termodinâmicas do sistema e um comprimento de escala l arbitrário. Nesta seção irei discutir brevemente os argumentos utilizados por Kadanoff, um desenvolvimento mais rigoroso pode ser encontrado em [11, 18, 19].

Para estudar o que ocorria durante a transição de fase, Kadanoff considerou o modelo de Ising em uma rede com d -dimensões, onde os spins possuem valores ± 1 , interagem com os primeiros vizinhos com uma magnitude $J = 1$ e com um campo

magnético H , mais detalhes sobre o modelo serão discutidos na seção 8.1. Este modelo, passa por uma transição de fase de segunda ordem em $T_c = 2.0/\ln(1 + \sqrt{2})$, apresentando uma divergência no calor específico ($C_v = T\partial_T^2 f$). Além disso, perto da transição de fase, os spins estão altamente correlacionados e tendem a formar blocos com spins de mesmo valor. A primeira imagem da figura 1, mostra um exemplo de uma rede quadrada do modelo de Ising próximo a transição de fase.

Com esse modelo em mente, dividimos a rede em blocos com l^d spins, sendo $l \ll \xi$ um número arbitrário muito menor que o comprimento de correlação ξ . Agora, considerando somente temperaturas próximas de T_c , podemos assumir que todos os spins em um mesmo bloco tendem a possuir o mesmo valor $+1$ ou -1 , já que a correlação entre eles é alta. Desta forma, podemos considerar cada bloco de spin como um único spin. Este procedimento é chamado de transformação de bloco de spins e foi introduzido por Kadanoff, a figura 1 mostra o efeito de aplicarmos duas vezes essa transformação.

Após cada transformação de bloco, o valor do spin de cada bloco I é dado por,

$$\sigma_I = \frac{1}{|m_l|} \frac{1}{l^d} \sum_{i \in I} \sigma_i, \quad (2.10)$$

onde m_l é a magnetização média do bloco. Desta forma, o efeito da transformação de bloco faz com que os parâmetros da Hamiltoniana passem a depender do comprimento do sistema. Por exemplo, considerando o termo que acompanha o campo magnético na Hamiltoniana do modelo de Ising, temos que,

$$H' \sum_i \sigma_i = H' |m_l| l^d \sum_I \sigma_I = H_l \sum_I \sigma_I, \quad (2.11)$$

onde $H' = \mu H$, μ é o momento magnético e $H_l = H' |m_l| l^d$. Sendo assim, vemos que a transformação de bloco do sistema cria uma dependência em l nos parâmetros da Hamiltoniana. De forma mais específica, a divergência no comprimento de correlação do sistema implica na existência de uma relação entre o comprimento l e os parâmetros da Hamiltoniana J e H , de tal forma que, ao fazermos uma transformação de bloco encontramos uma Hamiltoniana efetiva \mathcal{H}_l que depende de l .

Seguindo os argumentos de Kadanoff, assumimos de forma mais geral que a Hamiltoniana do sistema após a transformação de bloco tem a mesma estrutura que a Hamiltoniana original, exceto pelos parâmetros $J_l = J l^{y_t}$ e $H_l = H' l^{y_h}$, que passam a depender do comprimento l elevado a alguma potência. Desta forma, como a estrutura da Hamiltoniana permanece a mesma, podemos argumentar que as funções termodinâmicas também devem manter a mesma estrutura, tendo como única diferença a dependência em l dos parâmetros. Após esses argumentos, é possível encontrar as equações para a parte

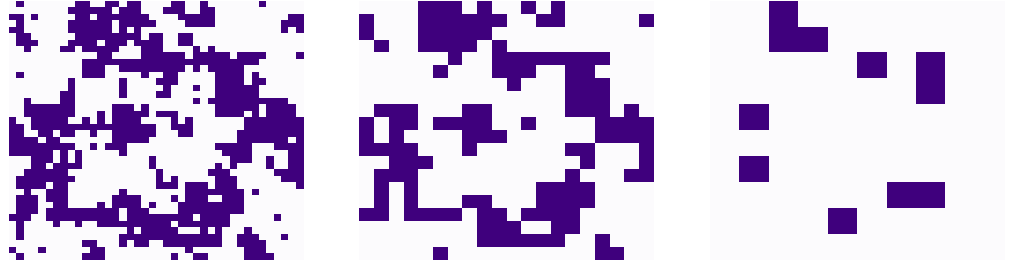


Figura 1 – Sequência de transformações de bloco, aplicada da esquerda para a direita. Consideramos uma configuração do modelo de Ising obtida em uma rede de tamanho $L = 40$ e a temperatura $T = 2.25$. Inicialmente, aplicamos a transformação usando 20×20 blocos e a cada passo diminuimos o número de blocos pela metade. A cada transformação, o valor de cada bloco é substituído pelo valor da maioria dos spins presentes no bloco, esta regra é conhecida como regra da maioria.

singular da energia livre f , comprimento de correlação ξ e correlação G , dadas por,

$$f_s(t, h) = l^{-d} f_s(tl^{y_t}, hl^{y_h}), \quad (2.12a)$$

$$\xi(t, h) = l \xi(tl^{y_t}, hl^{y_h}), \quad (2.12b)$$

$$G(r, t, h) = l^{-2(d-y_h)} G(r/l, tl^{y_t}, hl^{y_h}), \quad (2.12c)$$

onde t é a temperatura reduzida, $h = \mu H/k_B T$, μ é o momento magnético, H é o campo magnético, d é a dimensão do sistema e os expoentes y_h e y_t não são especificados. Como já discutido, a homogeneidade da energia livre aparece como consequência das considerações feitas por Kadanoff. Porém, agora sabemos mais sobre a física por trás da homogeneidade da energia livre, ela é uma consequência de o sistema estar altamente correlacionado.

Para encontrar as relações entre os expoentes críticos da correlação e do comprimento de correlação, fazemos $l = |t|^{-1/y_t}$ e $l = r$ nas equações 2.12b e 2.12c, respectivamente, e comparamos com as equações 2.3. Sendo assim, encontramos as relações,

$$1/y_t = \nu, \quad (2.13a)$$

$$-2(d - y_h) = -(d - 2 + \eta), \quad (2.13b)$$

e também as relações entre os expoentes críticos,

$$d\nu + \alpha = 2, \quad (2.14a)$$

$$\nu(2 - \eta) = \gamma. \quad (2.14b)$$

Note que, além dos expoentes definirem a classe de universalidade de diversos modelos e dependerem de poucas características do sistema, ao obtermos o valor de dois expoentes quaisquer podemos usar as relações 2.9 e 2.14 para obtermos os valores de todos os outros.

Com as ideias de Kadanoff, sabemos mais sobre a física do problema e o motivo da hipótese de escala de Widom funcionar. Sabemos que a hipótese de escala da energia livre

é obtida por termos um comprimento de correlação divergente perto da transição de fase. Apesar disso, com a formulação de Kadanoff não conseguimos obter estimativas teóricas para os expoentes críticos e também não podemos dizer nada sobre a forma das funções de escala de $\bar{O}(tl^{y_t}, hl^{y_h})$ de cada grandeza termodinâmica. Estas questões só puderam ser abordadas após a introdução do grupo de renormalização por Wilson.

O grupo de renormalização foi criado para generalizar e corrigir algumas das ideias de Kadanoff. Na forma como foi apresentada, os blocos de spins de Kadanoff só são aplicados a modelos de spins simples como o modelo Ising. Além disso, a imposição de que a Hamiltoniana tenha a mesma forma independente da transformação de bloco feita, é uma restrição muito forte e em geral não funciona. Somente com o grupo de renormalização as ideias de Kadanoff puderam ser generalizadas, não sendo mais necessário a restrição na forma da Hamiltoniana.

2.5 Hipótese de escala e dados experimentais

Nas seções anteriores discutimos sobre as escalas das grandezas termodinâmicas de forma teórica. Agora iremos mostrar brevemente como podemos verificar experimentalmente se essas escalas estão corretas.

Considere um sistema magnético que passe por uma transição de fase contínua. Desta forma, usando as equações 2.3a, 2.6a e 2.7a, encontramos a forma de escala para a magnetização,

$$M(t, h) = |t|^\beta M_o(\pm 1, h/|t|^\Delta), \quad (2.15)$$

onde fizemos $l = |t|^{-1/y_t}$ e $\Delta = y_h/y_t$, $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida, T_c é a temperatura crítica, $h = \mu H/k_B T$ é o campo magnético reduzido, μ é o momento magnético e H é o campo magnético. Essa equação nos diz que se fizermos um gráfico de $M(t, h)$ por t teríamos curvas diferentes para cada valor do campo magnético reduzido h . Agora, ao considerarmos a magnetização reescalada,

$$m = M_o(\pm 1, h_o), \quad (2.16)$$

onde $m = M(t, h)/|t|^\beta$ é a magnetização reescalada e $h_o = h/|t|^\Delta$ é o campo magnético reescalado. Ao montarmos o gráfico de m por h_o , as curvas colapsam em duas curvas, uma em $T > T_c$ e outra em $T < T_c$, vide figura 2.

Diversos experimentos já foram feitos para testar a validade da escala das grandezas termodinâmicas. A figura 2, mostra o gráfico da equação reescalada da magnetização pelo campo magnético reescalado 2.16, exatamente como foi discutida nesta seção. De fato, os experimentos corroboram as previsões teóricas obtidas pelas relações de escala, além de conseguirem estimar valores para os expoentes.

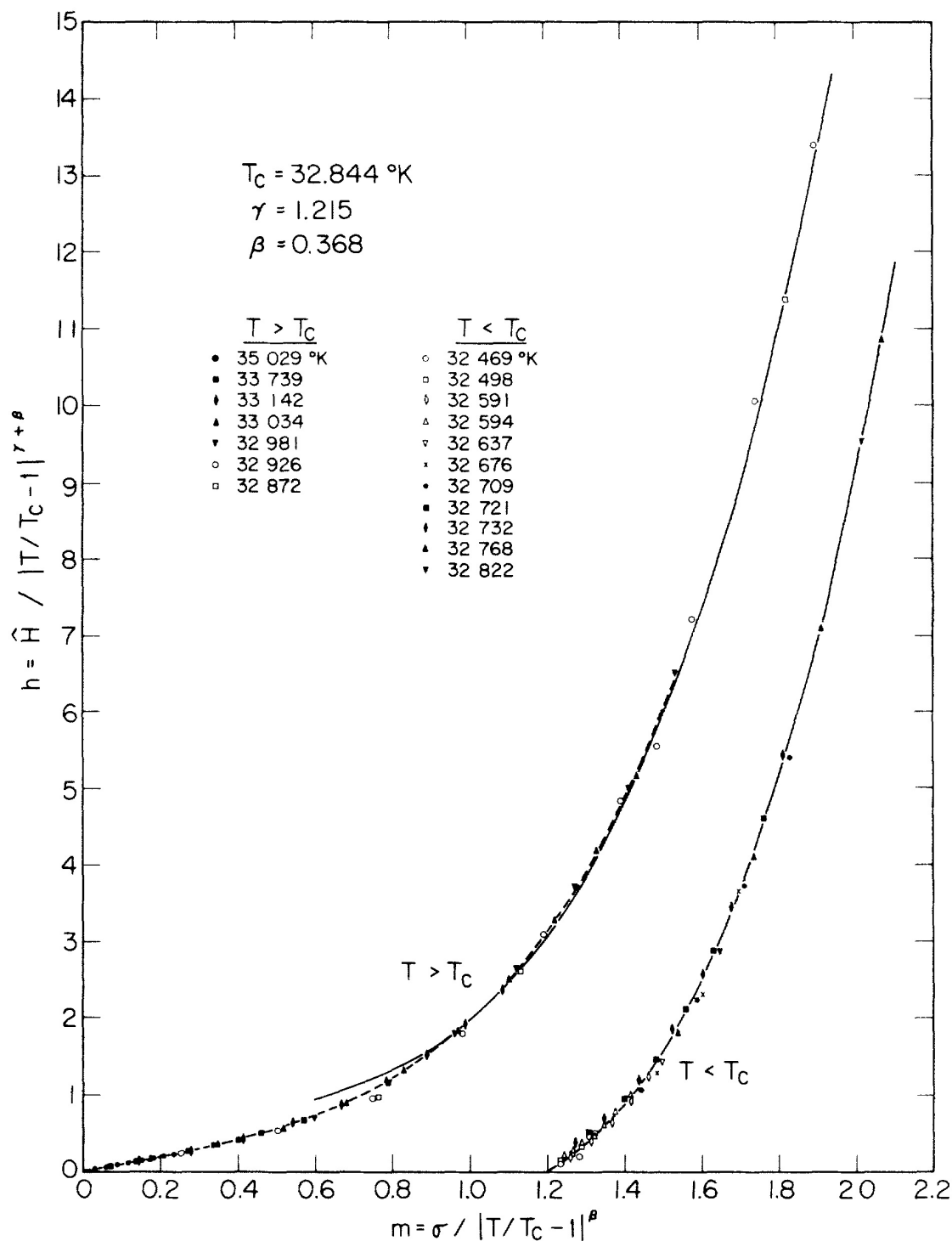


Figura 2 – Gráfico do campo magnético e da magnetização, ambos reescalados, para diversas isotermas com temperaturas entre $T_c - 0.9K < T < T_c + 6.7K$, onde \hat{H} é o campo magnético adimensional, $\sigma = M/M(0^\circ K)$ é a magnetização reduzida e $T_c = 32.844K$. As medidas foram feitas perto da transição de fase ($t \rightarrow 0$) em um sistema ferromagnético de $CrBr_3$. Figura retirada de [20]

2.6 Escala de tamanho finito

Nas seções anteriores, discutimos sobre as escalas das grandezas termodinâmicas, validas próximas a transição de fase e em sistemas no limite termodinâmico (sistemas infinitos). Porém, ao utilizarmos métodos numéricos, estamos limitados a sistemas finitos. Nesta situação, nenhuma grandeza termodinâmica apresenta divergências ou descontinuidades. Na verdade, no ponto crítico as grandezas apresentam máximos arredondados, em vez de divergências, e uma "função degrau suavizada", em vez de descontinuidades. Sendo assim, temos que generalizar as discussões já feitas sobre a escala de grandezas termodinâmicas para acomodar também sistemas finitos.

Uma discussão mais detalhada sobre a escala de tamanho finito [21,22] é necessária, pois essas ideias são cruciais para análises numéricas e serão muito utilizadas nos próximos capítulos. Sendo assim, partindo da equação homogênea da energia livre, vamos discutir as características das funções de escala após uma transformação e, na sequência, utilizá-las para encontrar os expoentes críticos e a temperatura crítica do sistema no limite termodinâmico.

Tomando a parte singular da energia livre, onde também consideramos como variável o tamanho da rede L [19], temos que,

$$f_s(t, h, L^{-1}) = l^{-d} f_s(tl^{y_t}, hl^{y_h}, l^{y_L} L^{-1}), \quad (2.17)$$

fazendo $l = |t|^{-1/y_t}$, $y_L = 1$, $\nu = 1/y_t$, $\Delta = y_h/y_t$ e usando $d\nu = 2 - \alpha$, encontramos,

$$f_s(t, h, L^{-1}) = |t|^{2-\alpha} f_s(1, h|t|^{-\Delta}, |t|^{-\nu} L^{-1}). \quad (2.18)$$

Desta forma, para encontrar as equações homogêneas de cada grandeza física, comparamos as equações 2.3 com as respectivas derivadas da energia livre f_s . Como exemplo, encontramos as relações para a susceptibilidade magnética χ , a magnetização m e o calor específico C_v , dadas por,

$$m(t, h = 0, L^{-1}) = |t|^\beta m_o(|t|^{-\nu} L^{-1}), \quad (2.19a)$$

$$\chi(t, h = 0, L^{-1}) = |t|^{-\gamma} \chi_o(|t|^{-\nu} L^{-1}), \quad (2.19b)$$

$$C_v(t, h = 0, L^{-1}) = |t|^{-\alpha} C_o(|t|^{-\nu} L^{-1}). \quad (2.19c)$$

A partir destas equações, fazemos a seguinte mudança na função de escala de cada uma das grandezas termodinâmicas [19,21],

$$\bar{\mathcal{O}}_o(x) = x^{y_o} \mathcal{O}_o(x^{-\nu}), \quad (2.20)$$

onde $x = |t|L^{1/\nu}$, y_o é o expoente que acompanha $|t|$, \mathcal{O} é uma grandeza termodinâmica qualquer e \mathcal{O}_o é a função de escala encontrada após tomarmos as derivadas de f . Desta

forma, obtemos as equações dadas por,

$$m(t, h = 0, L^{-1}) = L^{-\beta/\nu} \overline{m}_o(x), \quad (2.21a)$$

$$\chi(t, h = 0, L^{-1}) = L^{\gamma/\nu} \overline{\chi}_o(x), \quad (2.21b)$$

$$C_v(t, h = 0, L^{-1}) = L^{\alpha/\nu} \overline{C}_o(x). \quad (2.21c)$$

Essas equações descrevem explicitamente como as grandezas termodinâmicas variam de acordo com L para temperaturas próximas a temperatura crítica, onde $t \approx 0$ e $x \approx 0$. A discussão sobre essas equações e suas consequências são feitas a seguir.

As funções de escala nas equações 2.21 são todas independentes do tamanho do sistema perto da transição de fase. Desta forma, ao considerarmos sistemas grandes e próximos a temperatura crítica, as curvas das funções de escala $\overline{\mathcal{O}}_o(x)$ devem colapsar independentemente do tamanho do sistema. A figura 3 mostra o colapso da curva para o modulo da magnetização e para a susceptibilidade magnética.

O intuito de discutirmos as funções de escala em sistemas finitos é o de estender os resultados para o limite termodinâmico e obter estimativas para os expoentes críticos e para a temperatura crítica. Sendo assim, na sequência, iremos fazer algumas considerações sobre as relações de escalas obtidas nesta seção e mostrar como elas podem ser utilizadas para estimar os expoentes críticos e a temperatura crítica.

Considerando que as funções de escala colapsam e são independentes do tamanho do sistema, então o máximo de $\overline{\mathcal{O}}_{\text{máx}}$ ocorre no mesmo ponto x_c independentemente do tamanho da rede, vide figura 3b. Além disso, note que o máximo $\overline{\mathcal{O}}_{\text{máx}}$ é um valor constante independente de L , assim como o ponto x_c onde ocorre. Desta forma, sabendo que x_c é constante, obtemos a relação que envolve a temperatura pseudo crítica $T_c(L)$, dada por,

$$x_c = t_c L^{1/\nu}, \text{ com } t_c = \frac{T_c(L) - T_c}{T_c}, \quad (2.22)$$

onde $T_c(L)$ é a temperatura na qual o máximo da grandeza $\mathcal{O}(L)$ ocorre. Ao reorganizarmos os termos, encontramos uma equação que relaciona a temperatura pseudo crítica em cada tamanho de rede com a própria temperatura crítica, dada por,

$$T_c(L) = T_c + x'_c L^{-1/\nu}, \quad (2.23)$$

onde $x'_c = x_c T_c$ é uma constante. Desta forma, é possível estimar tanto T_c quanto ν por meio de uma regressão linear. Note que, como x_c é uma constante que depende da grandeza termodinâmica escolhida, iremos obter estimativas diferentes para T_c de cada uma das grandezas consideradas. Porém, independente da grandeza considerada, no limite termodinâmico todas elas devem indicar o mesmo valor para T_c . Na seção de resultados 9.3.4, será apresentado na figura 27 um bom exemplo de como diversas grandezas diferentes indicam o mesmo T_c para $L \rightarrow \infty$.

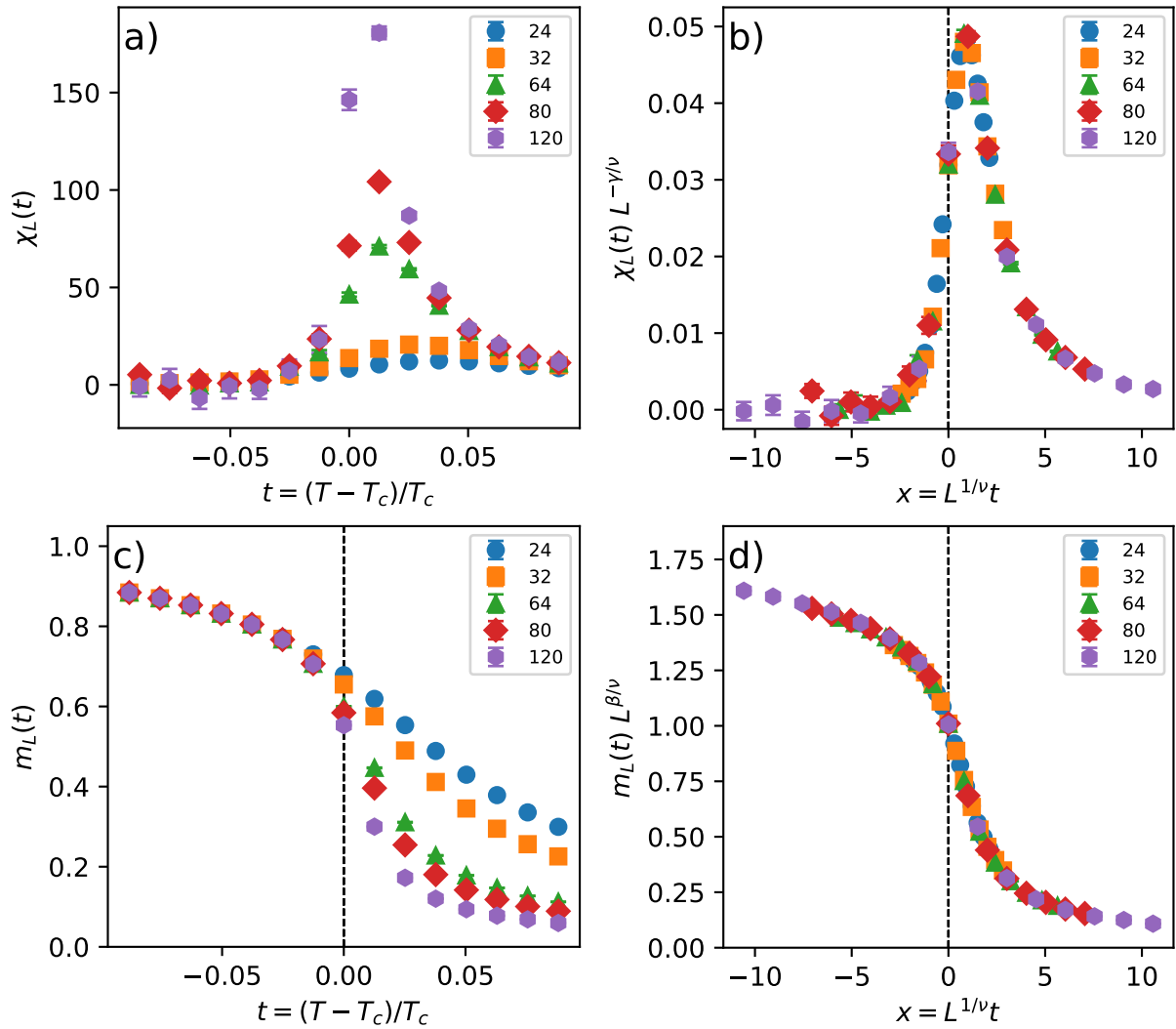


Figura 3 – Gráfico das grandezas termodinâmicas a) susceptibilidade magnética, b) susceptibilidade magnética reescalada c) magnetização e d) magnetização reescalada, todas em função de x para diversos tamanhos de rede do modelo de Ising 2D. Perto da temperatura crítica ($t = 0$), as curvas das grandezas termodinâmicas reescaladas colapsam em uma única curva como previsto pela teoria. Para obter a reescala, usamos os valores exatos dos expoentes críticos, tabela 1, e da temperatura crítica $T_c = 2.0/\ln(1 + \sqrt{2})$.

Existe uma outra forma para a relação de escala da temperatura crítica que pode ser conveniente em algumas análises, podendo ser utilizada também para estimar T_c e ν . A relação é dada por,

$$\beta_c(L) = \beta_c + x'_{co} L^{-1/\nu}, \quad (2.24)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e x'_{co} é uma constante.

Após usarmos as relações anteriores para estimar o valor de ν , podemos utilizar o colapso das curvas de outras grandezas termodinâmicas, como as mostradas nas equações 2.21a-c, para obter outros expoentes críticos. Sendo assim, considerando que o valor do máximo de uma grandeza termodinâmica $\bar{\mathcal{O}}_{\text{máx}}(x_c)$ é constante e sabendo como a grandeza termodinâmica escala com L , equações 2.21a-c. Então, as grandezas termodinâmicas devem seguir a equação dada por,

$$\mathcal{O}_{\text{máx}}(L) = L^{w_o} \bar{\mathcal{O}}_{\text{máx}}(x_c), \quad (2.25)$$

onde w_o é o expoente relacionado com a grandeza e $\bar{\mathcal{O}}_{\text{máx}}(x_c)$ é uma constante. Desta forma, podemos encontrar o valor de qualquer expoente w_o fazendo uma regressão linear utilizando a equação,

$$\ln \mathcal{O}_{\text{máx}}(L) = w_o \ln(L) + C, \quad (2.26)$$

onde $C = \bar{\mathcal{O}}_{\text{máx}}(x_c)$ é uma constante. Tomando como exemplo a susceptibilidade magnética, equação 2.21b, temos que,

$$\chi_{\text{máx}}(L) = L^{\gamma/\nu} \bar{\chi}_{\text{máx}}(x_c). \quad (2.27)$$

Desta forma, obtemos o valor de γ/ν ao fazermos uma regressão linear utilizando a equação,

$$\ln \chi_{\text{máx}}(L) = \frac{\gamma}{\nu} \ln(L) + C, \quad (2.28)$$

onde $C = \bar{\chi}_{\text{máx}}(x_c)$ é uma constante.

Nesta seção, apresentamos a técnica de escala de tamanho finito, a qual nos permite usar sistemas finitos para estimar os expoentes críticos e a temperatura crítica de sistemas no limite termodinâmico. Para isso, basta obtermos os pontos de máximo de diversas grandezas termodinâmicas em tamanhos de rede diferentes e fazer uma regressão linear utilizando as equações 2.23 e 2.26. Este método será muito utilizado durante a tese, já que lidamos exclusivamente com simulações computacionais.

2.7 Não analiticidade da energia livre e transições de fase

Nos pontos onde transições de fase ocorrem, a energia livre apresenta uma não analiticidade. Essa característica possui relação direta com as divergências e descontinuidades apresentadas por grandezas termodinâmicas. Para entender esta relação, considere a definição de uma função não analítica:

Uma função analítica é definida como infinitamente diferenciável em todos os pontos do domínio de forma que a série de Taylor da função é dada por,

$$Q(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{Q^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n, \quad (2.29)$$

e esta converge para $Q(x)$ dentro de seu raio de convergência.

Desta forma, considerando que a energia livre é dada por,

$$f(T) = f(T_c) + (T - T_c) \left. \frac{df}{dT} \right|_{T=T_c} + \frac{(T - T_c)^2}{2} \left. \frac{d^2f}{dT^2} \right|_{T=T_c} + \mathcal{O}(T^3), \quad (2.30)$$

vemos que, quando grandezas como o calor específico $c_v = -T \frac{d^2f}{dT^2}$ apresentam descontinuidades ou divergências em algum ponto, a energia livre se torna não analítica neste mesmo ponto, pois uma de suas derivadas não é bem definida. Com isso, percebemos que a não analiticidade da energia livre está intimamente relacionada aos pontos de transições de fase.

Um ponto importante, destacado por Fisher ao falar sobre a não analiticidade da energia livre [5], é reproduzido na citação:

“Nonanalytic means that the function cannot be expressed by a Taylor series expansion about the point in question which converges in every neighborhood of the point. It is not necessary that any particular derivative of $F(\beta)$ display a discontinuity or become infinite.”

Ou seja, não é necessário que as derivadas apresentem divergências ou descontinuidades para que f não seja analítica, isso é uma condição suficiente, mas não necessária. Este é um ponto muito interessante, pois existem transições de fase onde nenhuma das derivadas de f apresentam descontinuidades ou divergências [23]. Um exemplo desse tipo de transição, chamada de transição KT, é apresentado pelo modelo XY bidimensional. Neste modelo, C_v apresenta um pico, assim como em transições de fase contínuas. Porém, no limite termodinâmico C_v não diverge e não pode ser utilizada para identificar a temperatura crítica [24]. Nestas condições, apesar de não podermos confiar nas divergências e descontinuidades das grandezas termodinâmicas, a informação sobre a transição de fase ainda poderia ser capturada pela não analiticidade da energia livre, já que divergências e descontinuidades são uma condição suficiente, mas não necessária, para que f se torne não analítica.

Nos próximos capítulos, apresentaremos diversos métodos que conseguem capturar a informação sobre a não analiticidade da energia livre e identificar pontos de transição de fase. Mais especificamente, mostraremos usando os conceitos dos zeros da função de partição que, pontos onde transições de fase ocorrem correspondem a singularidades na energia livre e em suas derivadas. No que se segue, iremos introduzir o conceito dos zeros

da função de partição canônica no capítulo 3, o qual servirá de base para apresentarmos novos métodos desenvolvidos pelo nosso grupo de pesquisa nos capítulos 4 e 5.

3 Zeros de Fisher

Neste capítulo será introduzido o conceito dos zeros da função de partição canônica, mais conhecidos como zeros de Fisher [5]. Estes conceitos serão utilizados durante toda a tese, principalmente ao apresentarmos os novos métodos nos capítulos 4, 5 e 6. Sendo assim, com o intuito de apresentar os métodos, comparar os resultados e mostrar a relação entre eles, iremos utilizar o modelo de Ising em uma rede quadrada como exemplo. Mais especificamente, iremos utilizar a densidade de estados exatas do modelo Ising para redes de tamanho $L = 24, 32, 64, 150$ [25]. Desta forma, não será necessário nos preocuparmos com imprecisões numéricas e flutuações estatísticas, características de métodos numéricos como Monte Carlo. No que se segue, apresentaremos o método dos zeros de Fisher, a sua ligação com a não analiticidade da energia livre e, por fim, a motivação para a busca de novos métodos.

3.1 Zeros de Fisher

Em seu artigo seminal [1, 2], Yang-Lee apresentam o conceito dos zeros da função de partição grande canônica. Eles mostraram que ao fazer uma extensão analítica da fugacidade, a densidade de zeros da função de partição contém toda a informação sobre a termodinâmica do sistema. Além disso, eles mostram que a densidade de zeros se acumulam próximo ao eixo real positivo, indicando pontos onde transições de fase ocorrem. Esse método foi posteriormente estendido para o ensemble canônico por Fisher, onde são conhecidos como zeros de Fisher. Tanto os zeros de Fisher quanto os zeros de Yang-Lee foram utilizados para estudar diversos tópicos e sistemas como a condensação de Bose-Einstein [26], percolação [27], polímeros [28], modelos de spins em diversas redes [3, 29, 30], e transições de fase dinâmicas em sistemas quânticos [31]. Além disso, recentemente, foram até mesmo medidos experimentalmente [4, 32, 33].

Para introduzir os zeros de Fisher, considere a função de partição canônica dada pela equação,

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \quad (3.1)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados, $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura T , k_B é a constante de Boltzmann e E são as energias de cada estado. Ao fazermos uma extensão analítica da temperatura e discretizarmos a energia seguindo $E_n = \varepsilon_o + n\varepsilon$ [28, 34], onde $n \in \mathbb{N}$, ε_o é a menor energia do sistema e ε é uma constante arbitrária relacionada à discretização da energia, a função de partição é reescrita como um polinômio em $z = e^{-\beta\varepsilon}$

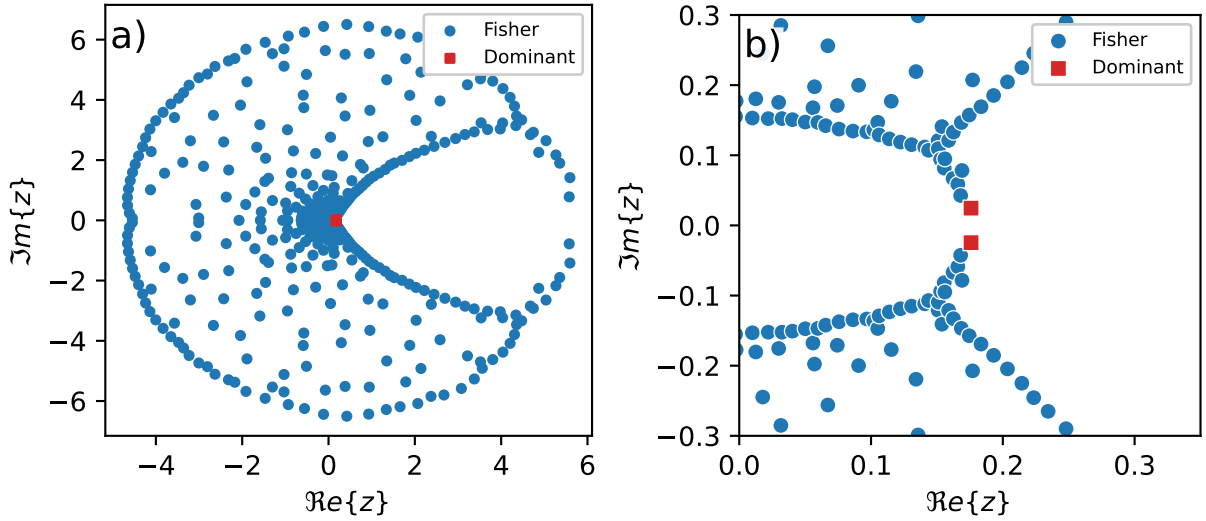


Figura 4 – *a*) Mapa dos zeros de Fisher para o modelo de Ising em uma rede quadrada de tamanho $L = 24$, onde foi usado densidade de estados exata [25]. *b*) Destaque da região próxima ao zero dominante (quadrado). Ao todo são 576 zeros e o zero dominante indica como temperatura pseudo crítica $T_c(L) = 2.3016$.

dado por,

$$Z = e^{-\beta\varepsilon_0} \sum_{n=0}^{N-1} g_n z^n, \quad (3.2)$$

onde N é o número total de energias discretas. Dado que $g(E_n) \geq 0$, as raízes (zeros) desse polinômio são complexas conjugadas e qualquer raiz real é negativa. Além disso, as transições de fase são sinalizadas por zeros que se aproximam do eixo real positivo no limite termodinâmico, estes zeros são chamados de zeros dominantes. Para sistemas finitos, eles são os zeros com a menor parte imaginária perto do eixo real positivo. A figura 4, mostra um exemplo típico dos zeros de Fisher, onde vemos em destaque o zero dominante próximo ao eixo real.

Em sistemas finitos, utilizamos a posição dos zeros dominantes em conjunto com as equações de escala de tamanho finito, seção (2.6), para obter a temperatura crítica e o expoente crítico ν . Sendo assim, ao localizarmos o zero dominante, obtemos o inverso da temperatura de pseudo transição de fase usando a equação,

$$\beta_c(L) = -\frac{\ln \Re\{z_c(L)\}}{\varepsilon}, \quad (3.3)$$

onde $z_c(L)$ é o zero dominante e $\beta_c(L) = 1/k_B T_c(L)$ é o inverso da temperatura crítica $T_c(L)$, ambos para um sistema de tamanho L . Com isso, obtemos a temperatura de transição de fase T_c e o expoente crítico ν , utilizando a equação de escala de tamanho finito dada por,

$$\beta_c(L) = \beta_c + x_o L^{-1/\nu}. \quad (3.4)$$

Note que é necessário fazer uma regressão utilizando 3 variáveis ao mesmo tempo, β_c , x_o e ν . Apesar de não ser algo complicado, isso aumenta a incerteza nas estimativas.

Dito isso, os métodos que serão apresentados nos próximos capítulos conseguem estimar tanto β_c quanto ν utilizando equações separadas, diminuindo assim a incerteza e facilitando a regressão linear.

3.2 Zeros de Fisher e a não analiticidade da energia livre

Os zeros dominantes, ao se aproximarem do eixo real positivo no limite termodinâmico, sinalizam os pontos nos quais transições de fase ocorrem e refletem a não analiticidade da energia livre. Sendo assim, vamos relacionar as derivadas da energia livre com os zeros de Fisher e mostrar que a condição de não analiticidade é recuperada pelo zero dominante tocando o eixo real positivo.

Como foi discutido na seção 2.7 é suficiente que a energia livre F não seja infinitamente derivável para dizermos que a função não é analítica no ponto ¹. Sendo assim, no que segue, vamos reescrever as derivadas da energia livre em função dos zeros de Fisher e observar seu comportamento no limite termodinâmico.

Reescrevendo a função de partição em função das suas raízes, temos que,

$$Z = C \prod_{i=0}^{N-1} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (3.5)$$

onde C é uma constante e foi utilizado o teorema de fatorização de Weierstrass [36]. Ao substituírmos Z na equação da energia livre $F = -\beta^{-1} \ln Z$, obtemos a equação,

$$-\beta F = \ln C + \sum_{i=0}^{N-1} \ln \left(\frac{z_i - z}{z_i}\right). \quad (3.6)$$

Desta forma, ao tomarmos as derivadas da energia livre no ponto de transição de fase, encontramos,

$$\partial_T F(T)|_{T=T_c} = -k_B \ln C - k_B \sum_{i=0}^{N-1} \ln \left(1 - \frac{z_c}{z_i}\right) + \frac{\varepsilon}{T_c} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{z_c}{(z_i - z_c)}, \quad (3.7a)$$

$$\partial_T^2 F(T)|_{T=T_c} = \frac{1}{T_c} \left[k_B z_c (\ln z_c)^2 \sum_{i=0}^{N-1} \frac{z_i}{(z_i - z_c)^2} \right] = \frac{-C_v(T_c)}{T_c}, \quad (3.7b)$$

onde $z_c = e^{-\varepsilon/k_B T_c} \in \mathcal{R}$ no limite termodinâmico. Note que, como pode ser visto pelas derivadas, tanto a não analiticidade de F quanto as divergências e descontinuidades de grandezas termodinâmicas, são geradas pela presença de um zero z_i na posição z_c .

¹ Apesar de agora estarmos lidando com números complexos, a definição de não analiticidade é similar a descrita na seção 2.7, sendo suficiente que F não seja infinitamente derivável. Maiores explicações são encontradas em [35].

3.3 Problemas com os zeros de Fisher

Nas seções anteriores, vimos que o zero dominante possui relação direta com a não analiticidade da energia livre, sendo capaz de indicar o ponto onde a transição de fase ocorre. Além disso, sabemos que ao estimarmos a posição do zero dominante $z_c(L)$, conseguimos obter tanto o expoente crítico ν , quanto a temperatura de transição de fase. Tudo isso é possível sem a necessidade de definirmos o parâmetro de ordem do sistema ou procurarmos por divergências e descontinuidades em grandezas termodinâmicas. Porém, apesar de todas essas vantagens, os zeros de Fisher são difíceis de serem utilizados na prática.

O principal problema do método é a necessidade de encontrar a densidade de estados $g(E)$. Esta grandeza é conhecida de forma exata para poucos sistemas, sendo difícil de obtê-la até mesmo com o uso de métodos numéricos. Além disso, para encontrar as raízes do polinômio de Z , os algoritmos têm que lidar com os valores de $g(E)$ que podem ultrapassar várias ordens de grandeza, além de resolver um polinômio de grau elevado. Nestas condições, até mesmo algoritmos no estado da arte apresentam problemas numéricos. Como exemplo, o artigo [6] cita que as raízes encontradas pelo Mathematica® [37] não são todas complexas conjugadas como deveriam ser.

Para descrever melhor os problemas encontrados pelos zeros de Fisher, vamos considerar o modelo de Ising em redes quadradas de tamanhos $L = 24, 32, 64, 150$. A tabela 2, mostra o valor máximo e mínimo da densidade de estados, assim como o grau do polinômio a ser resolvido para cada tamanho de rede. Note que os valores da densidade de estados ultrapassam facilmente a precisão dupla dos computadores modernos, sendo que até mesmo a quádrupla precisão não é suficiente para conter o valor máximo da densidade de estados para $L = 150$. Além disso, o grau do polinômio é muito elevado e cresce com o tamanho da rede. Em algoritmos que usam a deflação, processo que gera um novo polinômio com as mesmas raízes do original retirando as que já foram encontradas, isso é um problema, já que os erros numéricos podem se propagar ao retirarmos as raízes encontradas [38]. Nessas condições, é esperado encontrar erros numéricos graves, até mesmo em sistemas simples como o modelo de Ising.

L	$g_{\min}(E)$	$g_{\max}(E)$	Zeros
24	2	10^{172}	576
32	2	10^{306}	1024
64	2	10^{1231}	4096
150	2	10^{6771}	22500

Tabela 2 – Comparativo de valores encontrados para a densidade de estados $g(E)$ e o número de zeros para diversos tamanhos de rede L do modelo de Ising. Note que a biblioteca de quadrupla precisão do Fortran (*GCC libquadmath*) aceita como maior valor números na ordem de 10^{4932} , a rede de tamanho $L = 150$ ultrapassa facilmente esse valor.

4 Zeros EPD

No capítulo anterior, foi apresentado o método dos zeros de Fisher e os problemas numéricos encontrados ao utilizá-lo. Neste capítulo, vamos apresentar os zeros da distribuição de probabilidade da energia (EPD) [6], um método capaz de resolver a maioria dos problemas encontrados pelos zeros de Fisher. A seguir, iremos apresentar o método e depois compará-lo com o método dos zeros de Fisher.

4.1 Os zeros da distribuição de probabilidade da energia

Com o método dos zeros EPD, o grau do polinômio a ser resolvido é drasticamente reduzido, além de restringirmos os valores dos coeficientes do polinômio ao intervalo $(0, 1]$. Nestas condições mais amenas, não temos os problemas numéricos encontrados pelos zeros de Fisher. Os zeros EPD já foram utilizados para encontrar transições de fase contínuas, descontínuas e até topológicas [6, 39, 40], se mostrando uma excelente alternativa aos zeros de Fisher.

Em essência, os zeros EPD nada mais são do que os zeros de Fisher reescalados. Para entender essa reescala e como ela consegue amenizar os problemas dos zeros de Fisher, vamos considerar novamente a função de partição Z . Ao multiplicar a função de partição por $e^{-\beta_o E} e^{\beta_o E} = 1$ e discretizarmos a energia fazendo $E_n = \varepsilon_o + n\varepsilon$ [28, 34], onde $n \in \mathbb{N}$, encontramos a equação,

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta_o E} e^{-(\beta - \beta_o)E} = e^{-\Delta\beta\varepsilon_o} \sum_n h_{\beta_o}(n) x^n, \quad (4.1)$$

onde $\beta_o = 1/k_B T_o$ é o inverso de uma temperatura arbitrária T_o , $\Delta\beta = \beta - \beta_o$, $h_{\beta_o}(n) = g_n e^{-\beta_o E_n}$ é a distribuição de probabilidade da energia não normalizada em β_o e $x = e^{-\Delta\beta\varepsilon}$. Note que como ainda não fizemos nenhuma aproximação, o conjunto de zeros $\{x_i\}$ não são nada mais do que os zeros de Fisher reescalados, $x_i = z_i / e^{-\beta_o\varepsilon}$. A aproximação é feita quando descartarmos estados com baixa probabilidade de ocorrer, i.e., definimos um limite h_t e descartamos valores de $h_{\beta_o}(n)$ que estiveram abaixo desse limite. Desta forma, como só estados sem importância para o sistema na temperatura T_o são descartados, conseguimos reduzir o grau do polinômio sem perder informação relevante sobre a termodinâmica do sistema.

Apesar de parecer trivial, o processo de reescala e o descarte de estados causam grandes mudanças nos zeros de Fisher e, a princípio, não é claro como isso afeta o método dos zeros EPD. A seguir, vamos discutir em mais detalhes as consequências do descarte de estados e da reescala dos zeros de Fisher.

4.1.1 O algoritmo de convergência e a reescala dos zeros de Fisher

Para entender como o algoritmo de convergência funciona, primeiro temos que analisar como o zero dominante z_c é reescalado. Sabemos que o zero dominante $z_c = e^{-\beta_c \varepsilon}$ é reescalado para a posição $x_o = z_c / e^{-\beta_o \varepsilon}$, onde β_o é um valor arbitrário. Desta forma, ao escolhermos $\beta_o = \beta_c$ o zero dominante x_c tem que estar próximo ao ponto $(1, 0)$ em sistemas finitos e no ponto $(1, 0)$ no limite termodinâmico. Como exemplo de reescala, a figura 5 mostra os zeros EPD para diversos valores de temperaturas, incluindo $T_c(L)$ onde o zero dominante está próximo de $(1, 0)$. Sabendo da posição do zero dominante na transição de fase, temos um critério claro para encontrar os valores de β_o nos quais transições de fase ocorrem. Ao explorarmos esse critério, o seguinte algoritmo foi proposto para aproximar de forma iterativa um $\beta_o(L)$ arbitrário de $\beta_c(L)$:

1. Construa um histograma $h_n(\beta_o^j)$ em $\beta_o^j(L)$.
2. Normalize de forma que $\max\{h_n(\beta_o^j)\} = 1$ e descarte os coeficientes menores que o limite h_t .
3. Encontre os zeros do polinômio com coeficientes dados por $h_n(\beta_o^j)$ após o descarte.
4. Encontre o zero dominante, $x_c^j(L)$.
 - a) Se x_c^j está próximo o suficiente do ponto $(1, 0)$, pare.
 - b) Se não, faça $\beta_o^{j+1}(L) = -\ln(\Re[x_c^j(L)]) / \varepsilon + \beta_o^j(L)$ e retorne ao item (1).

4.1.2 Estimando a temperatura e expoentes críticos

Assim como nos zeros de Fisher, conseguimos estimar a temperatura crítica e o expoente crítico ν usando diretamente o zero dominante x_c . Porém, diferente do que ocorre nos zeros de Fisher, temos duas equações separadas para estimar T_c e ν . De acordo com [6], esperamos que a parte imaginária do zero dominante escale seguindo,

$$\Im\{x_c(L)\} \sim bL^{-1/\nu}. \quad (4.2)$$

Desta forma, podemos obter ν e depois obter T_c utilizando a equação de escala dada por,

$$\beta_c(L) \sim \beta_c + aL^{-1/\nu}, \quad (4.3)$$

4.2 Descarte de estados e aproximação dos zeros EPD

Para entender como o descarte de estados afetam os zeros EPD, vamos comparar os zeros obtidos com e sem o descarte de estados para temperaturas $T_o < T_c$, $T_o = T_c$ e

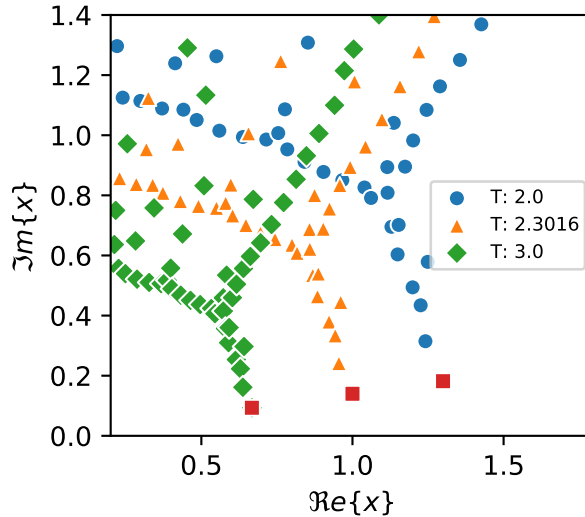


Figura 5 – Zeros EPD para o modelo de Ising em uma rede quadrada de tamanho $L = 24$, onde não foram feitas aproximações, i.e., não foi feito o descarte de estados e utilizamos a densidade de estados exata [25]. Note que, para a temperatura $T_c = 2.3016$ o zero dominante x_c (quadrado) está próximo ao ponto $(1, 0)$, esta é a mesma temperatura pseudo crítica que encontramos para os zeros de Fisher na seção anterior, mais especificamente na figura 4.

$T_o > T_c$. Então, próximo à temperatura crítica, o descarte de estados não afeta o zero dominante, i.e., conseguimos obter o mesmo zero dominante com e sem o descarte de estados, vide as figuras 6c-d. Porém, isso não acontece para temperaturas distantes de T_c . Para T_o distante de T_c , não conseguimos encontrar de fato o zero dominante, obtemos somente uma aproximação do zero dominante verdadeiro, como pode ser visto nas figuras 6a-b e 6e-f. Apesar disso, ainda conseguimos definir um zero pseudo dominante, o qual possui a menor parte imaginária e tem sua posição próxima ao zero dominante verdadeiro.

Como em temperaturas distantes de T_c só obtemos uma aproximação do zero dominante ao descartarmos estados, somos obrigados a utilizar o algoritmo de convergência para conseguirmos de forma iterativa, aproximar o zero pseudo dominante do zero dominante real em $T = T_c$. Essa é a essência do algoritmo e da aproximação que estamos fazendo, apesar de não termos a posição do zero dominante verdadeiro, ainda temos uma aproximação que melhora à medida que fazemos a iteração do algoritmo. De fato, na temperatura crítica, essa aproximação obtém exatamente o zero dominante real, sendo possível reproduzir os mesmos resultados obtidos pelos zeros de Fisher.

Uma última nota, apesar da discussão feita sobre a diferença entre o zero dominante e zero pseudo dominante, iremos abusar da notação e chamar o zero pseudo dominante de zero dominante, mesmo quando fizermos descarte de estados. Faremos isso para simplificar a discussão e manter a consistência com o que é feito na literatura.

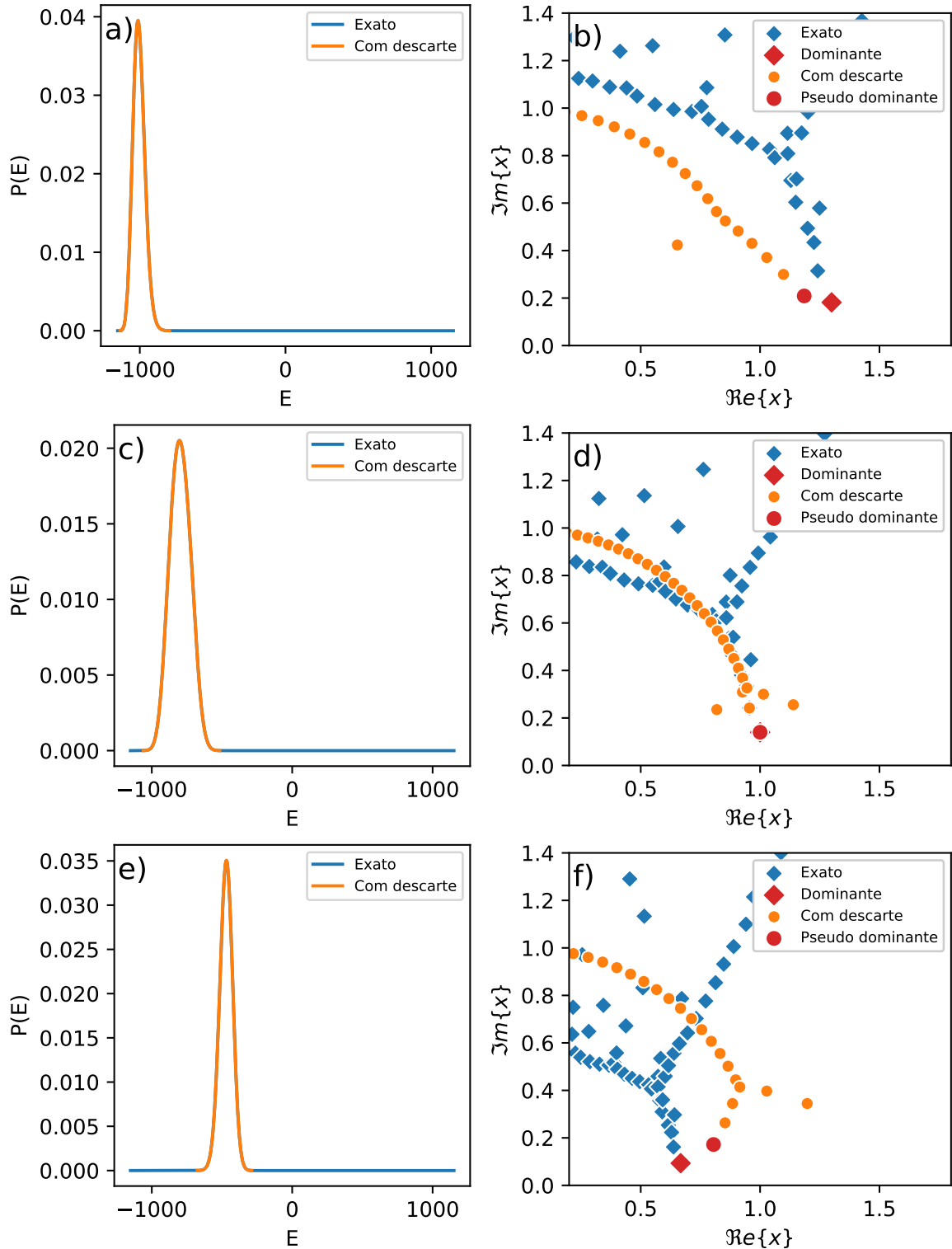


Figura 6 – A coluna da esquerda mostra a distribuição de probabilidade de Boltzmann obtida usando a $g(E)$ exata [25] com e sem o descarte de estados de $h_t = 10^{-4}$ e a coluna da direita os respectivos mapas de zeros. As temperaturas usadas para gerar os histogramas e seus respectivos mapas de zeros foram a – b) $T = 2.0$, c – d) $T_c = 2.3016$ e e – f) $T = 3.0$. Note que, próximo a c – d) T_c mesmo com o descarte de estados, obtemos o zero dominante verdadeiro. Porém, para temperaturas distantes de T_c , por causa do descarte de estados, só conseguimos obter uma aproximação para o zero dominante verdadeiro.

4.3 Discussão e comparação entre os métodos

Neste capítulo, vimos que os zeros EPD, em sua forma exata, nada mais são do que os zeros de Fisher reescalados. Também vimos que ao descartar estados reduzimos o grau do polinômio e perdemos um pouco de informação sobre o zero dominante, sendo necessário o uso do algoritmo de convergência para obtermos de fato o zero dominante e estimarmos $T_c(L)$.

Apesar da necessidade do algoritmo iterativo e de termos que fazer simulações em temperaturas diferentes até que o algoritmo convirja, ainda assim o método dos zeros EPD são superiores aos zeros de Fisher. Isso fica claro ao compararmos os dois métodos. Nos zeros de Fisher, temos que estimar a densidade de estados, uma grandeza difícil de ser encontrada até mesmo utilizando métodos numéricos, e temos que lidar com um polinômio de grau elevado cujo os valores dos coeficientes ultrapassam facilmente a precisão quadrupla dos computadores modernos. Para os zeros EPD, temos que estimar o histograma de energia em algumas temperaturas, uma medida mais simples de ser obtida do que densidade de estados, e os coeficientes do polinômio estão restritos ao intervalo $(0, 1]$, mesmo para redes grandes. Estas características já são suficientes para que os zeros EPD sejam considerados melhores que os zeros de Fisher. Porém, os zeros EPD nos permitem ainda reduzir o grau do polinômio, como pode ser visto na tabela 3. Por isso, os zeros EPD são mais simples e mais fáceis de serem aplicados do que os zeros de Fisher.

L	EPD	Fisher
24	136	576
32	193	1024
64	433	4096
150	1037	22500

Tabela 3 – Comparativo entre o número de zeros necessários ao utilizarmos os métodos dos zeros de Fisher e o método dos zeros EPD. Os valores mostrados para os zeros EPD, foram obtidos, respectivamente, usando histogramas nas temperaturas pseudo críticas $T_c(L) = 2.3016, 2.2950, 2.2832, 2.2831$ para as redes de tamanho $L = 24, 32, 64, 150$, onde foram descartados estados com valores menores que $h_t = 10^{-4}$.

5 Zeros da MGF

Na seção anterior, vimos que os zeros EPD são mais fáceis de serem utilizados que os zeros de Fisher, possuindo diversas vantagens como um polinômio de grau reduzido e coeficientes fáceis de serem tratados. De fato, esse novo método é um avanço para os zeros da função de partição canônica. Porém, ainda há espaço para melhorá-lo. Neste capítulo, iremos apresentar um novo método para os zeros da função de partição, os zeros da função geradora dos momentos (MGF) [7]. Para explicar o funcionamento do método iremos revisar os conceitos básicos sobre os momentos de uma distribuição de probabilidade e sua função geradora, traçaremos sua relação com o ensemble canônico e a distribuição de probabilidade de Boltzmann, e em seguida apresentaremos o método. Após isso, dedicamos mais algumas seções para discutir algumas nuances do método e as formas de aplicá-lo.

5.1 Momentos da distribuição de probabilidade

Os momentos de uma distribuição de probabilidade nada mais são do que uma forma alternativa de se representar a própria distribuição, sendo possível reconstruí-la inteiramente a partir de seus momentos. Porém, em alguns casos patológicos isso não é possível [41]. De toda forma, é comum, e mais fácil, usar os conceitos dos momentos e da sua função geradora para estudar distribuições de probabilidades. Nesta seção revisaremos os conceitos básicos sobre os momentos de uma distribuição de probabilidade.

Considere uma variável aleatória X e sua distribuição de probabilidade $P(X)$. O valor esperado de qualquer função $f(X)$ que siga a distribuição $P(X)$ é dado por,

$$\langle f(X) \rangle = \sum_X f(X)P(X). \quad (5.1)$$

Sendo assim, os momentos da distribuição $P(X)$ são dados pela sequência de médias,

$$m_n = \langle X^n \rangle = \sum_X X^n P(X), \text{ para } n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

Os momentos de ordem mais baixa tem significado e descrevem algumas características da distribuição como por exemplo, m_0 é a normalização da distribuição e m_1 é o valor esperado de X . Os momentos mais altos, de forma geral, não têm significado claro.

Apesar dos momentos terem uma definição simples, como médias de X^n , a maioria das vezes avaliar o somatório acima não é fácil. Por isso, quando precisamos calcular os momentos da distribuição, nos usamos a função geradora dos momentos (MGF).

5.2 Função geradora dos momentos

A função geradora dos momentos de uma variável aleatória X é dada por,

$$M_X(t) = \langle e^{tX} \rangle, \quad (5.3)$$

onde t é uma variável arbitrária e estamos assumindo que a média de e^{tX} exista. A partir dessa função é possível obter todos os momentos da distribuição de probabilidade.

Para entender melhor como obtemos os momentos, primeiro fazemos uma expansão em série de Taylor de $M_X(t)$ e, reconhecendo que $m_n = \langle X^n \rangle$, encontramos,

$$M_X(t) = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{X^n t^n}{n!} \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle X^n \rangle t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m_n t^n}{n!}. \quad (5.4)$$

Desta forma, obtemos o k -ésimo momento da distribuição de probabilidade ao derivarmos a MGF k vezes e fazermos $t = 0$. A definição formal para esse procedimento é dada pela equação,

$$m_n = \left. \frac{d^n M_X(t)}{dt^n} \right|_{t=0}. \quad (5.5)$$

Por isso $M_X(t)$ é chamada de função de geradora, pois a partir dela conseguimos extrair todos os momentos da distribuição.

5.3 A função geradora dos momentos e o ensemble canônico

Até aqui, vimos o formalismo básico sobre os momentos e a função geradora. Agora vamos relacionar os conceitos da seção anterior com o ensemble canônico e, um pouco mais adiante, com os zeros EPD.

Considerando um sistema no ensemble canônico, i.e., um sistema imerso em um banho térmico à temperatura e volume constantes, onde é permitido que a energia do sistema flutue. Quando o sistema está em equilíbrio termodinâmico, a energia flutua em torno de uma média e segue a distribuição de Boltzmann dada por,

$$P(E) = \frac{g(E)e^{-\beta E}}{Z(\beta)}, \quad (5.6)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados, $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura T , k_B é a constante de Boltzmann, E é a energia do sistema e $Z(\beta) = \sum_E g(E)e^{-\beta E}$ é a função de partição canônica. A partir dessa distribuição vamos encontrar os seus momentos de E e sua MGF.

Os conceitos sobre os momentos e a MGF apresentados nas seções anteriores são diretamente aplicados à distribuição de probabilidade de Boltzmann, já que podemos

considerar como variável aleatória a própria energia do sistema. Sendo assim, ao fazermos $X = E$ nas equações das seções anteriores, as médias termodinâmicas são dadas por,

$$\langle f(E) \rangle = \sum_E f(E)P(E), \quad (5.7)$$

e os momentos de E por,

$$m_n = \langle E^n \rangle = \sum_E E^n P(E), \text{ para } n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.8)$$

As definições para os primeiros momentos são as mesmas, m_0 é a normalização da distribuição de probabilidade, ou seja, é a própria função de partição Z , e m_1 é o valor esperado de E .

A função geradora dos momentos da distribuição de probabilidade de Boltzmann é dada por,

$$M_E(t) = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{E^n t^n}{n!} \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle E^n \rangle t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m_n t^n}{n!}. \quad (5.9)$$

E os momentos da distribuição são encontrados ao derivarmos $M_E(t)$ e fazer $t = 0$,

$$m_n = \langle E^n \rangle = \left. \frac{d^n M_E(t)}{dt^n} \right|_{t=0}. \quad (5.10)$$

Com isso, ao considerarmos a energia como uma variável aleatória, construímos uma relação direta entre os conceitos de estatística e o ensemble canônico.

Na próxima seção, irei mostrar uma nova formulação para os zeros da função de partição que possui relação direta com os zeros EPD. Porém, nesta nova forma, não iremos utilizar a distribuição de probabilidade em si, mas sim os seus momentos.

5.4 Os zeros da MGF

Com as relações entre o ensemble canônico e os conceitos de estatística bem definidos, vamos mostrar a relação entre os zeros função de partição canônica e os zeros da MGF. Para isso, multiplicamos a função de partição por $e^{-\beta_o E} e^{\beta_o E} = 1$, assim como feito para os zeros EPD na seção 4.1, mas sem discretizarmos a energia. Com isso, obtemos a equação,

$$Z = \sum_E h_{\beta_o}(E) e^{-\Delta\beta E}, \quad (5.11)$$

onde $\beta_o = 1/k_B T_o$ é o inverso de uma temperatura arbitrária, $\Delta\beta = \beta - \beta_o$ e $h_{\beta_o}(E)$ é a distribuição de probabilidade não normalizada da energia em β_o . Ao expandirmos a exponencial em uma série de Taylor e multiplicamos por $1 = Z(\beta_o)/Z(\beta_o)$, encontramos,

$$Z(\beta) = Z(\beta_o) \sum_{k=0}^{\infty} m_k(\beta_o) \frac{(-\Delta\beta)^k}{k!} = Z(\beta_o) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m_k(\beta_o)}{k!} y^k, \quad (5.12)$$

onde $Z(\beta_o)$ é uma constante dada pela função de partição em β_o , $y = -\Delta\beta$ e $m_k(\beta_o) = \langle E^k \rangle$ são os momentos da energia. Note que o somatório nada mais é do que a MGF da distribuição de probabilidade da energia (MGF da energia) com $t = y$, vide equação 5.9. Sendo assim, como Z_o é só uma constante, vemos que os zeros da função de partição e os zeros da MGF contém a mesma informação sobre a termodinâmica do sistema. Desta forma, os zeros da MGF reproduzem os mesmos resultados encontrados pelos zeros EPD e pelos zeros de Fisher, e como será visto, também precisa de um algoritmo de convergência. O método ainda possui a vantagem de não discretizar a energia, sendo útil para o estudo sistemas que apresentem energias contínuas, pois evitamos quais quer problemas gerados pela discretização de E .

Os zeros EPD e os zeros da MGF estão ligados por uma relação simples, dada por,

$$x_i = e^{-\Delta\beta\varepsilon} = e^{y_i\varepsilon} . \quad (5.13)$$

Sendo possível mapear o conjunto de zeros dos momentos $\{y_i\}$ no conjunto de zeros EPD $\{x_i\}$. Desta forma, podemos usar alguns resultados obtidos para os zeros EPD nos zeros da MGF. Por exemplo, na transição de fase, sabemos que o zero dominante dos zeros EPD está próximo do ponto $(1, 0)$. Sendo assim, usando a equação 5.13, sabemos que o zero dominante da MGF tem que estar próximo ao ponto $(0, 0)$. Com essa informação, podemos facilmente adaptar o algoritmo de convergência dos zeros EPD para os zeros da MGF, como descrito abaixo.

- 1 Encontre os momentos da energia $m_k(\beta_o^j) = \langle E^k \rangle$ em β_o^j .
- 2 Encontre os zeros do polinômio com coeficientes dados por $m_k(\beta_o^j)/k!$.
- 3 Encontre o zero dominante, $y_c^j(L)$.
 - a) Se y_c^j está próximo o suficiente de $(0, 0)$, pare.
 - b) Se não, faça $\beta_o^{j+1}(L) = \beta_o^j(L) - \Re\{y_c^j(L)\}$ e retorne ao item (1).

Repare que poderíamos usar o mesmo formalismo desenvolvido para os zeros EPD nos zeros da MGF, sendo necessário somente fazer a conversão entre o conjunto de zeros da MGF $\{y_i\}$ para o conjunto de zeros EPD $\{x_i\}$. Porém, escolhemos explorar de forma independente os zeros da MGF desenvolvendo todo o seu formalismo de forma separada. Vamos usar os zeros EPD somente como inspiração e como forma de comparar os resultados obtidos.

No que se segue, iremos apresentar a relação de escala dos zeros da MGF, assim como as relações utilizadas para obter os valores de $\beta_c(L)$ e de ν . Além disso, iremos discutir como é feita a redução no grau do polinômio dos zeros da MGF e também apresentaremos uma forma de estender o método para o ensemble grande canônico, onde os zeros são chamados de zeros de Yang-Lee.

5.5 Escala de tamanho finito e os zeros da MGF

Os zeros da MGF possuem uma relação interessante com as funções de escala discutidas na seção 2.6. Note que grandezas termodinâmicas escalam da seguinte forma,

$$\mathcal{O} = L^{y_o} \overline{\mathcal{O}}_o(x), \quad (5.14)$$

onde \mathcal{O} é uma grandeza termodinâmica qualquer, y_o está relacionado com os expoentes críticos da grandeza e $\overline{\mathcal{O}}(x)$ é uma função de escala. Relembrando a discussão feita na seção 2.6, sabemos que as funções de escala são independentes do tamanho do sistema L na transição de fase, onde $x \rightarrow 0$. Desta forma, como os coeficientes dos zeros da MGF são dados por médias termodinâmicas, podemos reescalar todos os coeficientes do polinômio da mesma forma que reescalamos a magnetização nas seções 2.5 e 2.6. O polinômio com os coeficientes reescalados passam a não depender de L na transição de fase. O desenvolvimento e as consequências dessa reescala serão discutidos a seguir.

Considere que os momentos da energia seguem a função de escala [42, 43] dada por,

$$m_k = L^{k/\nu} \overline{m}_k(x). \quad (5.15)$$

Desta forma, ao multiplicarmos o polinômio da MGF, equação 5.12, por $1 = L^{k/\nu}/L^{k/\nu}$, obtemos o polinômio reescalado dado por,

$$M_E(y) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\overline{m}_k(x)}{k!} y_s^k = C \prod_{i=0}^{\infty} (y_{s,i}(x) - y_s), \quad (5.16)$$

onde $y_s = y/L^{-1/\nu}$. Note que esse polinômio, assim como suas raízes, escala como se fossem uma grandeza termodinâmica. Sendo assim, perto da transição fase, onde $x \rightarrow 0$, o polinômio e suas raízes são independentes do tamanho do sistema. Em particular, o zero dominante tem que escalar como,

$$\frac{y_c}{L^{-1/\nu}} = \frac{\Re\{y_c\} + \Im\{y_c\}i}{L^{-1/\nu}} = \overline{g}(x) + \overline{f}(x)i, \quad (5.17)$$

onde $\overline{g}(x)$ e $\overline{f}(x)$ são funções de escala. Além disso, como $\Re\{y_c\} \approx 0$ perto da transição de fase, então a parte imaginária do zero dominante escala seguindo a equação,

$$\Im\{y_c(L)\} = L^{-1/\nu} \overline{f}(x). \quad (5.18)$$

Esse comportamento de escala é esperado, já que os zeros EPD também escalam seguindo a mesma regra. Porém, para os zeros EPD isso era só uma expectativa e nenhuma prova concreta tinha sido apresentada. Com os zeros da MGF, conseguimos demonstrar de forma apropriada a relação de escala dos zeros e podemos obter ν sem a necessidade de convertê-los para os zeros EPD.

Assim como nos zeros EPD, os zeros da MGF possuem duas equações separadas para obter ν e T_c . Obtemos ν usando a equação 5.18 e a temperatura crítica é estimada usando a relação de escala dada por,

$$\beta_c(L) \sim \beta_c + aL^{-1/\nu}. \quad (5.19)$$

Desta forma, utilizando somente os zeros da MGF, conseguimos obter as mesmas grandezas que seriam estimadas pelos zeros EPD.

5.6 Truncando a série

Os zeros da MGF, em sua forma exata, equação 5.12, possuem um número infinito de zeros. A redução do grau do polinômio é feita ao truncarmos a série de potências em um termo qualquer k_{\max} . Como consequência, após truncarmos a série os zeros da MGF passam a ser uma aproximação dos zeros EPD. Sendo assim, é interessante estudar a relação entre o valor de k_{\max} e a qualidade da aproximação obtida pelos zeros da MGF.

Para compreender os efeitos da escolha de k_{\max} nos zeros, vamos tomar como base os zeros EPD e comparar os resultados obtidos pelos zeros da MGF para diversos valores de k_{\max} . Como pode ser visto na figura 7, os zeros da MGF se aproximam dos zeros EPD à medida que k_{\max} aumenta. Sendo que os zeros EPD próximos ao ponto $(0, 0)$ são aproximados primeiro. Desta forma, é esperado que o zero dominante seja estimado usando poucos termos da série.

O valor de k_{\max} necessário para estimar o zero dominante é ínfimo perto dos outros métodos discutidos até aqui. A tabela 4 mostra um comparativo entre os métodos. Desta forma, os zeros da MGF possibilitam obter os mesmos resultados dos zeros EPD, porém utilizando um polinômio de grau extremamente reduzido.

5.7 Discussões sobre a implementação do método

Antes de aplicarmos o método dos zeros da MGF, algumas nuances devem ser discutidas. Nas próximas seções, vamos mostrar como podemos escolher o valor de k_{\max} durante o processo de convergência, discutiremos formas alternativas para o polinômio dos zeros da MGF e por fim, apresentamos uma forma para controlar os valores dos coeficientes do polinômio.

5.7.1 Escolhendo k_{\max}

Usando o método dos zeros da MGF, o grau do polinômio além de ser reduzido, cresce devagar com o tamanho do sistema. O motivo disso ocorrer é fácil de ser entendido, pois o valor de k_{\max} necessário para estimar o zero dominante não depende significativamente

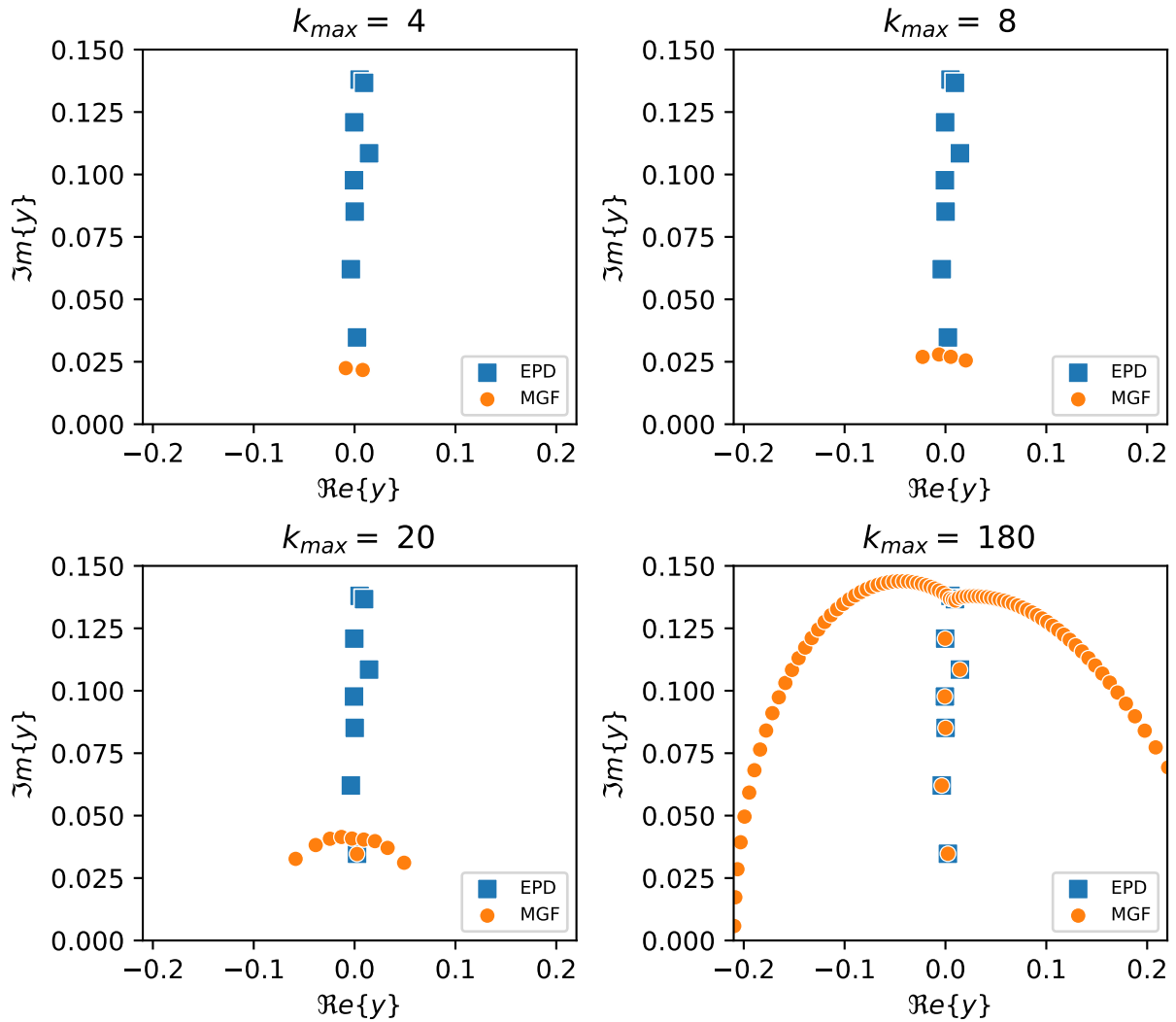


Figura 7 – Comparação entre os zeros da MGF com diferentes valores de k_{max} e os zeros EPD, ambos na mesma temperatura $T = 2.2806$. Para comparação, utilizamos a densidade de estados exata [25] para o modelo de Ising com tamanho $L = 24$. Note que o zero dominante, o zero mais próximo do ponto $(0, 0)$, é aproximado com um valor pequeno de k_{max} . Para apresentar os zeros EPD na mesma escala que os zeros MGF, utilizamos a relação $x = e^{y\varepsilon}$, onde x são os zeros EPD originais e y os zeros na escala MGF.

L	Fisher	EPD	MGF
24	576	136	35
32	1024	193	36
64	4096	433	40
150	22500	1037	49

Tabela 4 – Comparativo entre o grau do polinômio em cada um dos métodos apresentados até agora. Essa comparação foi feita usando a densidade de estados exata [25] para o modelo de Ising com redes tamanho $L = 24, 32, 64, 150$ e os histogramas usados para os zeros EPD foram obtidos para as temperaturas de pseudo transição 2.3016, 2.2950, 2.2832 e 2.2831, respectivamente. Para os zeros EPD descartamos estados com probabilidades menores que $h_t = 10^{-4}$ e não foi feito o descarte de estados para os zeros da MGF. Como será visto, existem equações diferentes para os zeros da MGF que afetam o grau do polinômio necessário para encontrar o zero dominante, neste caso utilizamos a equação 5.22. Note que o grau do polinômio dos zeros da MGF cresce muito lentamente com o tamanho do sistema.

do tamanho do sistema, mas sim da distância em que ele se encontra do ponto $(0, 0)$. Sendo assim, também é esperado que em temperaturas distantes de T_c precisemos de um valor maior de k_{\max} para encontrarmos o zero dominante. A figura 8a, mostra o valor de k_{\max} necessário para estimar o zero dominante em função da temperatura.

A figura 8a também nos mostra um critério para escolher o valor de k_{\max} durante todo o processo de convergência do algoritmo. Como temos um mínimo global perto da transição de fase, qualquer valor de k_{\max} que consiga estimar o zero dominante em uma temperatura inicial T_o será suficiente para estimar o zero dominante durante todo o processo de convergência.

Um efeito interessante acontece ao considerarmos o descarte de estados na distribuição de probabilidade, como estamos descartando estados com baixa probabilidade de ocorrerem as médias termodinâmicas não são muito afetadas. Porém, como foi visto na seção anterior, na figura 6, o efeito do descarte de estados aproxima o zero dominante do ponto $(0, 0)$ (no caso dos zeros EPD é o ponto $(1, 0)$). Sendo assim, é esperado que ao descartarmos estados, precisemos de um valor menor de k_{\max} para obter o zero dominante. Isso acontece de fato, como pode ser visto na figura 8b, onde mostramos o valor de k_{\max} necessário para estimar o zero dominante em função da temperatura. Desta forma, o descarte de estados também funciona muito bem para os zeros da MGF, sendo até mesmo aconselhável.

5.7.2 Escolhendo a equação da MGF

Como já foi dito, os zeros da MGF são uma aproximação dos zeros EPD, sendo que essa aproximação é controlada pelo valor de k_{\max} . Quanto maior é o valor de k_{\max} , maior

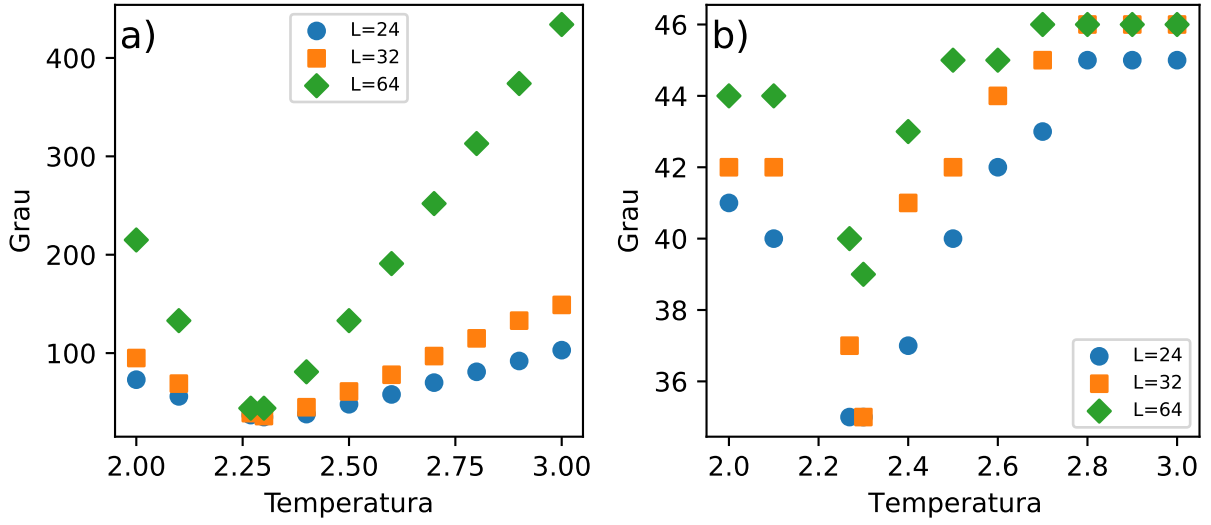


Figura 8 – Grau mínimo para estimar o zero dominante *a)* sem o descarte de estados e *b)* aplicando um descarte de $h_t = 10^{-4}$ na distribuição de probabilidade. Note que, o grau do polinômio necessário para estimar o zero dominante é sempre mínimo próximo a transição de fase. Além disso, ao descartarmos estados com baixa probabilidade de serem encontrados, reduzimos ainda mais o grau necessário para estimar y_c .

é o número de zeros EPD aproximados pelos zeros da MGF. Desta forma, é extremamente interessante que consigamos aproximar a maior quantidade possível de zeros EPD, usando o menor valor possível de k_{\max} . Para estudar essa relação, vamos utilizar formas alternativas do polinômio dos zeros da MGF.

Todas as equações que serão descritas aqui são obtidas a partir da equação 5.11, sendo que todas contém a mesma informação termodinâmica dos zeros da função de partição. Sendo assim, considere as três formulações que se seguem: a equação da MGF discreta dada por,

$$Z = e^{-\Delta\beta\varepsilon_o} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_n \frac{h_{\beta_o}(n)(\varepsilon n)^k}{k!} (-\Delta\beta)^k, \quad (5.20)$$

onde foi feita uma discretização da energia $E = \varepsilon_o + n\varepsilon$, com n inteiro. A equação da MGF já apresentada nas seções anteriores, dada por,

$$Z = Z(\beta_o) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m_k}{k!} (-\Delta\beta)^k, \quad (5.21)$$

onde $m_k = \langle E^k \rangle$ são os momentos da energia. E a equação da MGF com os momentos centrais dada por,

$$Z = e^{-\Delta\beta\langle E \rangle} Z(\beta_o) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m_k^c}{k!} (-\Delta\beta)^k, \quad (5.22)$$

onde fazemos a multiplicação por $1 = e^{-\Delta\beta\langle E \rangle} e^{\Delta\beta\langle E \rangle}$ e $m_k^c = \langle (E - \langle E \rangle)^k \rangle$ são os momentos centrais da energia. Apesar das três formulações gerarem os mesmos resultados, cada uma delas aproximam uma quantidade diferente de zeros EPD dado um mesmo valor de k_{\max} ,

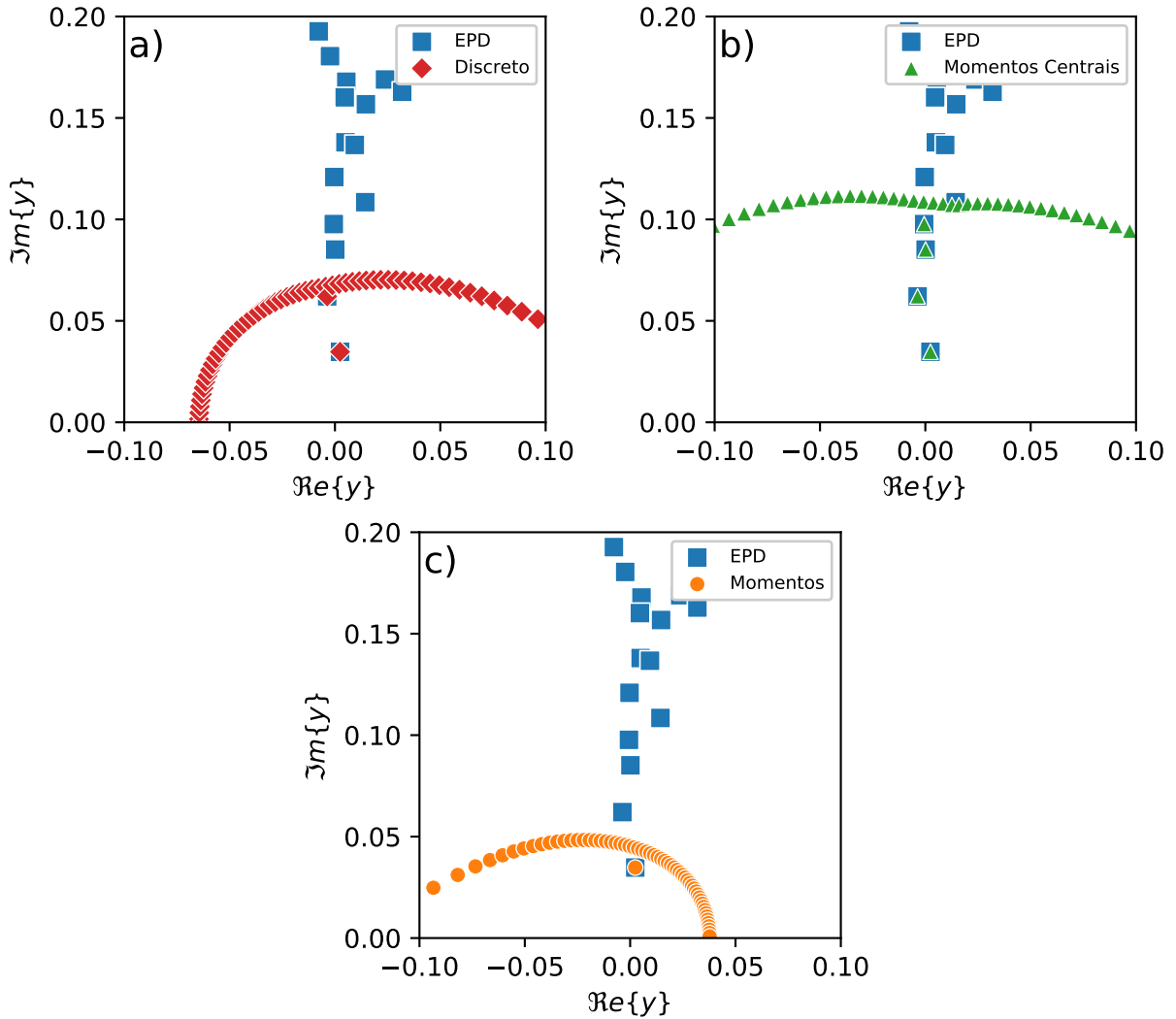


Figura 9 – Comparando as várias equações possíveis para os zeros da MGF, vemos que para o mesmo $k_{\max} = 120$ cada uma delas aproxima uma quantidade diferente de zeros EPD. A equação que utiliza os momentos centrais, equação 5.22, é a mais indicada para ser utilizada, já que ela estima um maior número de zeros EPD. Estes zeros foram obtidos utilizando a densidade de estados exata [25] do modelo de Ising em uma rede quadrada de tamanho $L = 24$.

como pode ser visto na figura 9. Note que a equação que utiliza os momentos centrais como coeficientes, equação 5.22, aproxima um número maior de zeros EPD, enquanto a equação que utiliza os momentos como coeficientes, equação 5.21, possui desempenho pior do que todas as outras equações. Sendo assim, é aconselhável utilizar a equação com os momentos centrais, pois com um polinômio de grau menor conseguimos aproximar um número maior de zeros EPD.

O real motivo pelo qual o número de zeros aproximados é diferente em cada equação ainda não é claro. A princípio todos os polinômios são equivalentes, carregando a mesma informação termodinâmica. Porém, até mesmo a equação discreta, equação 5.20, consegue aproximar uma quantidade maior de zeros do que a equação 5.21, que foi originalmente

proposta como a equação do polinômio dos zeros da MGF. A única mudança que ocorre nas três equações é o fator constante que multiplica o polinômio, mas o cálculo das raízes não depende dessa constante. Sendo assim, não temos um motivo claro para a diferença no número de zeros.

Outro ponto importante é que os coeficientes do polinômio dos zeros da MGF não são necessariamente positivos, já que são dados por médias termodinâmicas. Sendo assim, diferente do que ocorria com os zeros EPD e com os zeros de Fisher, o zero dominante y_c pode ser encontrado no segundo quadrante, ou seja, a sua parte real pode ter um valor negativo. Isto não chega a ser um problema para o método, porque o algoritmo de convergência só leva em conta a distância do zero dominante ao ponto $(0, 0)$, não fazendo diferença se o mesmo está no primeiro ou no segundo quadrante.

Com o intuito de prevenir quaisquer problemas que a presença de coeficientes negativos possam gerar, vamos descrever duas formas de corrigir esse problema. Em casos simples, onde somente os coeficientes ímpares possuem valores negativos, podemos facilmente compensar esse sinal negativo com o do termo $(-\Delta\beta)^k$, presente em todas as equações descritas nesta seção. Outra forma mais geral, é converter os zeros da MGF para o plano dos zeros EPD, onde é garantido que o zero dominante vai estar no primeiro quadrante. Utilizando qualquer uma das duas abordagens descritas, garantimos que a parte real do zero dominante vai ser sempre positiva e resolvemos quaisquer problemas gerados por coeficientes negativos.

5.7.3 Controlando o valor dos coeficientes

Os coeficientes do polinômio da MGF são dados por valores de $\langle E^k \rangle$ que tendem a divergir para k_{\max} elevado. O primeiro truque simples para controlar o valor dos coeficientes é utilizar a equação 5.22, onde os coeficientes são dados pelos momentos centrais $m_k^c = \langle (E - \langle E \rangle)^k \rangle$. Porém, um truque ainda mais simples, e que pode ser usado em conjunto com os momentos centrais, é controlar o valor dos momentos reescalando os coeficientes. A reescala é feita ao multiplicarmos a equação da MGF por $1 = \epsilon_o^k / \epsilon_o^k$, de onde obtemos,

$$Z = Z(\beta_o) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m_k \epsilon_o^k}{k!} \left(\frac{y}{\epsilon_o} \right)^k. \quad (5.23)$$

Desta forma, podemos controlar o valor dos coeficientes utilizando o parâmetro ϵ_o , sendo que a única alteração nos zeros é devido a uma reescala nos seus valores. Com isso conseguimos utilizar valores mais altos de k_{\max} sem a necessidade de aumentarmos a precisão numérica.

5.8 Sobre a generalização do método

Os zeros da MGF foram desenvolvidos com base nos zeros EPD, nos quais consideramos uma extensão analítica do parâmetro de controle β . Porém, isso é só uma restrição feita para apresentarmos o método, os zeros da MGF podem ser utilizados em outras distribuições de probabilidade com parâmetros de controle diferentes.

Como exemplo, vamos considerar o modelo de Ising em um campo magnético h . A Hamiltoniana desse sistema é dada por,

$$\mathcal{H}(J, H) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - HM, \quad (5.24)$$

onde $H = \mu h$, μ é o momento magnético e M é a magnetização total do sistema. Então, a função de partição canônica é dada por,

$$Z = \sum_{E, M} g(E, M) e^{\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j} e^{\beta HM}, \quad (5.25)$$

Ao fazermos uma extensão analítica do campo H e multiplicarmos Z por $1 = e^{-\beta H_o M} e^{\beta H_o M}$, encontramos,

$$Z = \sum_{E, M} g(E, M) e^{-\beta \mathcal{H}(J, H_o)} e^{\beta \Delta H M}, \quad (5.26)$$

onde $\Delta H = H - H_o$. Desta forma, ao expandirmos a segunda exponencial em série de Taylor e rearranjarmos os termos, encontramos a equação,

$$Z \propto \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle M^k \rangle}{k!} w^k, \quad (5.27)$$

onde $w = \beta \Delta H$, $\langle M^k \rangle$ são os momentos da distribuição de probabilidade da magnetização para (β, H_o) e o termo do somatório é a MGF da distribuição de probabilidade da magnetização (MGF da magnetização). Este polinômio pode ser utilizado para encontrar transições de fase em H da mesma forma que fizemos para β . Sendo assim, o algoritmo de convergência, levemente modificado, é dado por:

- 1 Encontre os momentos da magnetização $m_k(H_o^j) = \langle M^k \rangle$ em (β, H_o^j) .
- 2 Encontre os zeros do polinômio com coeficientes dados por $m_k(H_o^j)/k!$.
- 3 Encontre o zero dominante, $w_c^j(L)$.
 - a) Se w_c^j está próximo o suficiente de $(0, 0)$, pare.
 - b) Se não, faça $H_o^{j+1}(L) = H_o^j(L) + \Re\{w_c^j(L)\}/\beta$ e retorne ao item (1.).

Da mesma forma que foi feito anteriormente, também podemos obter a relação de escala para o zero dominante. Considerando que os momentos da magnetização seguem a relação de escala [42, 43] dada por,

$$m_k = L^{-k(B/\nu-d)} \overline{m}_k(x), \quad (5.28)$$

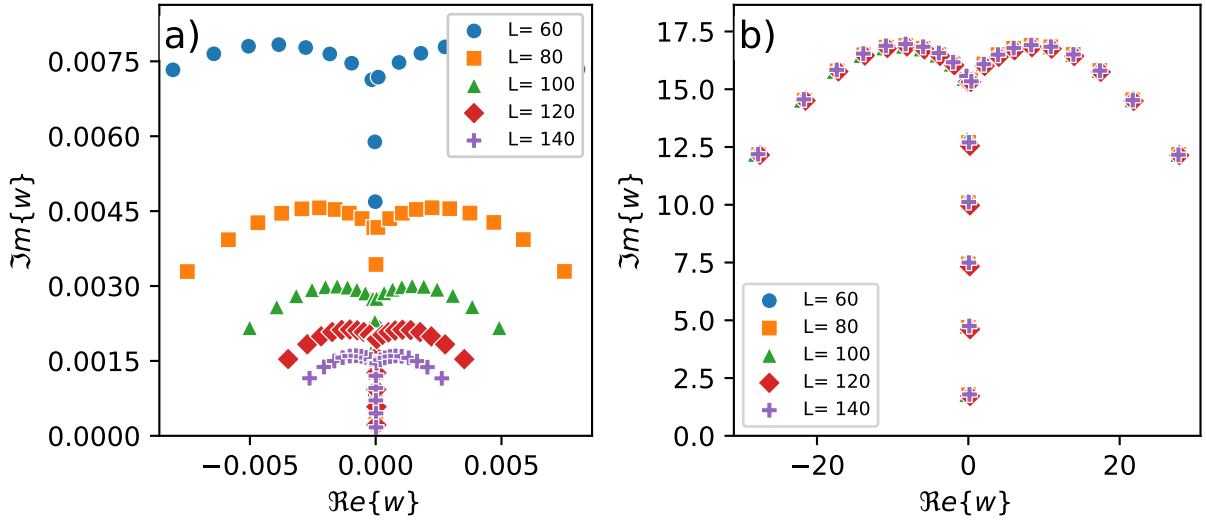


Figura 10 – Mapa de zeros da MGF da magnetização para o modelo de Ising em uma rede quadrada, onde os momentos da magnetização foram obtidos no ponto $H_o = 0$ e $\beta = 1/T_c(L)$, $T_c(L)$ é a temperatura de transição de fase indicada pelos zeros da MGF da energia. *a)* Mapa de zeros sem a reescala obtido utilizando a equação 5.27, e *b)* mapa de zeros com a reescala obtidos utilizando a equação 5.29, onde usamos $k_{\max} = 50$ e os valores exatos dos expoentes $B = 1/8$, $\nu = 1$ e $d = 2$.

onde B é o expoente relacionado com magnetização (definido como β na introdução) e $\overline{m}_k(x)$ é uma função de escala. Desta forma, ao multiplicarmos o polinômio da MGF da magnetização por $1 = L^{-k(B/\nu-d)}/L^{-k(B/\nu-d)}$, encontramos o polinômio reescalado dado por,

$$M_M(w) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\overline{m}_k(x)}{k!} w_s^k = C \prod_i (w_s^i(x) - w_s), \quad (5.29)$$

onde $w_s = w/L^{(B/\nu)-d}$. Desta forma, o polinômio e suas raízes são independente do tamanho do sistema L perto da transição de fase, a figura 10 mostra os zeros reescalados. Em particular, o zero dominante escala seguindo a equação,

$$\Im m\{w_c(L)\} = L^{B/\nu-d} \overline{f}(x), \quad (5.30)$$

onde $\overline{f}(x)$ é uma função de escala.

Com isso, vemos que os zeros da MGF é um método geral que consegue encontrar transições de fase não só na temperatura, mas também em qualquer outro parâmetro presente na Hamiltoniana.

6 Não analiticidades da CGF

No capítulo anterior, mostramos como podemos usar conceitos sobre probabilidade para aprimorar os zeros da função de partição, onde tomamos como base os zeros EPD e, usando a relação entre a distribuição de probabilidade e seus momentos, construímos os zeros da MGF. Porém, existem diversas formas de se expressar tanto a distribuição de probabilidade quanto a função geradora dos momentos. Então, a próxima questão natural é: quais outros conceitos de estatística podem ser aplicados aos zeros da função de partição?

Neste capítulo vamos fazer uma pequena digressão e mostrar um novo método que utiliza os conceitos da função geradora dos cumulantes (CGF - *Cumulant Generating Function*). Da mesma forma que fizemos anteriormente, iremos apresentar neste capítulo uma breve revisão sobre a CGF e a sua relação com o ensemble canônico. Após isso, iremos construir a conexão entre os zeros da MGF e as não analiticidades da CGF mostrando a relação entre os dois métodos. Também discutiremos brevemente as vantagens e desvantagens do método.

6.1 Função geradora dos cumulantes

Como foi dito, é mais simples descrever a distribuição de probabilidade utilizando os seus momentos e sua função geradora. Porém, existe uma forma ainda mais simples de se descrever a informação contida nos momentos e na MGF, isso é feito utilizando o conceito de cumulantes.

Para entender a relação entre a MGF e a CGF, vamos considerar novamente uma variável aleatória X e sua distribuição de probabilidade $P(X)$. Com isso, a relação entre a MGF e a CGF é dada pela equação,

$$K_X(t) = \ln M_X(t) = \ln \langle e^{tX} \rangle, \quad (6.1)$$

onde $K_X(t)$ é a CGF e t é uma variável arbitrária. Sendo assim, da mesma forma que a função geradora dos momentos, a CGF é dada pela expansão em série de Taylor,

$$K_X(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n}{n!} t^n, \quad (6.2)$$

da qual retiramos os cumulantes k_n ao tomarmos as derivadas em $t = 0$,

$$k_n = \left. \frac{d^n K_X(t)}{dt^n} \right|_{t=0}. \quad (6.3)$$

Os cumulantes de ordem mais baixa possuem significado, assim como nos momentos. Desta forma, sabendo da relação entre os cumulantes e os momentos, m_n , dada pela equação [44],

$$k_n = m_n - \sum_{j=1}^{n-1} \binom{n-1}{j-1} k_j m_{n-j}. \quad (6.4)$$

Obtemos as relações para os seis primeiros cumulantes,

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= m_1, \\ \kappa_2 &= m_2 - m_1^2, \\ \kappa_3 &= m_3 - 3m_2m_1 + 2m_1^3, \\ \kappa_4 &= m_4 - 4m_3m_1 - 3m_2^2 + 12m_2m_1^2 - 6m_1^4, \\ \kappa_5 &= m_5 - 5m_4m_1 - 10m_3m_2 + 20m_3m_1^2 + 30m_2^2m_1 - 60m_2m_1^3 + 24m_1^5, \\ \kappa_6 &= m_6 - 6m_5m_1 - 15m_4m_2 + 30m_4m_1^2 - 10m_3^2 + 120m_3m_2m_1, \\ &\quad - 120m_3m_1^3 + 30m_2^3 - 270m_2^2m_1^2 + 360m_2m_1^4 - 120m_1^6. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Sendo assim, vemos que o primeiro cumulante é o valor médio de X e o segundo cumulante é a variância da distribuição $\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$.

6.2 A função geradora dos cumulantes e o ensemble canônico

Assim como feito na seção 5.3, obtemos a relação entre a CGF e o ensemble canônico ao fazermos $X = E$ nas equações da seção anterior. Além disso, a relação direta com os zeros da MGF é obtida ao considerarmos $t = -\Delta\beta = y$. Desta forma, a equação da CGF para o ensemble canônico é dada por,

$$K_E(y) = \ln M_E(y). \quad (6.6)$$

Sua expansão em série de potências é dada por,

$$K_E(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n}{n!} y^n, \quad (6.7)$$

da qual retiramos os cumulantes k_n ao tomarmos as derivadas,

$$k_n = \left. \frac{d^n}{dy^n} K_E(y) \right|_{y=0}. \quad (6.8)$$

Como foi visto no capítulo anterior, a MGF contém a mesma informação que a função de partição canônica. De fato, a MGF é proporcional à função de partição, $Z = Z(\beta_0) M_E(y)$. Sendo assim, usando a equação 6.6, conseguimos relacionar a CGF e a energia livre

$$F = -\frac{1}{\beta} (\ln Z(\beta_0) + \ln M_E(-\Delta\beta)) = -\frac{1}{\beta} (C + K_E(y)). \quad (6.9)$$

Desta forma, vemos que a CGF é a energia livre a menos de uma constante.

6.3 Cumulantes e as não analiticidades da energia livre

Nesta seção vamos mostrar que a CGF mimetiza o comportamento da energia livre perto da transição de fase, ou seja, suas derivadas também possuem relação com grandezas termodinâmicas e, próximo à transição de fase, $K_E(y)$ desenvolve uma não analiticidade.

Na seção 2.7, mostramos que a não analiticidade da energia livre pode ser relacionada com grandezas termodinâmicas as quais apresentam divergências e descontinuidades na transição de fase. De forma mais específica, relacionamos o calor específico com a segunda derivada da energia livre, dada por,

$$C_v = -T \frac{d^2 F}{dT^2}, \quad (6.10)$$

e vimos que uma divergência em C_v era suficiente para tornar a energia livre não analítica. Agora, vamos mostrar que a CGF apresenta o mesmo comportamento.

Para isso, considere as derivadas da CGF dadas por,

$$\partial_y K_E(y)|_{y=0} = \partial_\beta(-\beta F)|_{\beta=\beta_c} = -k_1(\beta_c), \quad (6.11)$$

$$\partial_y^2 K_E(y)|_{y=0} = \partial_\beta^2(-\beta F)|_{\beta=\beta_c} = k_2(\beta_c), \quad (6.12)$$

onde usamos a relação $\partial_y^n = (-1)^n \partial_\beta^n$. Sendo assim, da mesma forma que a energia livre, a segunda derivada da CGF se relaciona com o calor específico, dado que,

$$k_2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = k_B T^2 C_v. \quad (6.13)$$

Desta forma, uma divergência no calor específico também causa uma não analiticidade na CGF, assim como em F .

6.4 Os zeros da MGF e a não analiticidade da CGF

Outra relação importante, discutida na seção 3.2, se dá entre os zeros de Fisher e a energia livre. Foi mostrado que a informação sobre a não analiticidade da energia livre é capturada pela presença de uma singularidade (zero) próxima ao eixo real positivo. Desta forma, vamos mostrar que a não analiticidade da CGF é causada pela presença do zero dominante da MGF tocando o eixo real no ponto $(0, 0)$.

Para demonstrar isso, vamos reescrever as derivadas da CGF em função dos zeros da MGF. Considerando que a equação do k -ésimo cumulante é dada por,

$$k_n = \left. \frac{d^n}{dy^n} K_E(y) \right|_{y=0} = \left. \frac{d^n}{dy^n} \ln M_E(y) \right|_{y=0}. \quad (6.14)$$

Ao reescrever $M_E(y)$ em função de seus zeros, temos que,

$$k_n = \partial_y^n \ln \left[C \prod_{i=0}^{\infty} \left(1 - \frac{y}{y_i} \right) \right] \Big|_{y=0}. \quad (6.15)$$

onde foi usado o teorema de fatorização de Weierstrass [36]. Sendo assim, para $n > 1$, temos que,

$$k_n = -(n-1)! \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{y_i^n}. \quad (6.16)$$

Desta forma, vemos que a informação sobre a não analiticidade da CGF é capturada pelo zero dominante da MGF y_c , o qual, no limite termodinâmico, toca o eixo real no ponto $(0, 0)$. Mais ainda, vemos também que para $n = 2$, o zero dominante da MGF também está relacionado a divergências e descontinuidades em grandezas termodinâmicas dado que,

$$k_2 = k_B T^2 C_v = - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{y_i^2}. \quad (6.17)$$

As relações desenvolvidas até aqui, mostraram que os zeros da MGF e a não analiticidade da CGF contém a mesma informação que os zeros de Z e a não analiticidade de F . Porém, ao utilizarmos os conceitos da CGF e da MGF, conseguimos descrever estes comportamentos de forma mais simples. Na próxima seção, iremos mostrar como podemos utilizar a CGF para obter o zero dominante da MGF de forma direta, sem a necessidade de calcularmos as raízes de um polinômio.

6.5 Cumulantes e o zero dominante

O método que será apresentado nesta seção foi recentemente aplicado em diversos sistemas [42, 43, 45–47], sendo um método tão geral quanto os zeros da MGF. Na sequência, iremos refazer a dedução apresentada no artigo [47], no qual os zeros da MGF não foram utilizados de forma explícita.

Considere a equação dos cumulantes, dada por,

$$k_n = -(n-1)! \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{y_i^n}, \quad (6.18)$$

onde $n > 1$. Dado que o zero dominante é o responsável pela não analiticidade da CGF, e que no limite termodinâmico ele converge para o ponto $(0, 0)$, é fácil de ver que o zero dominante dá a maior contribuição para o valor de k_n . Sendo assim, considerando somente o par conjugado de zeros dominantes, temos que,

$$k_n \approx -(n-1)! \left(\frac{1}{y_c^n} + \frac{1}{y_c^{*n}} \right) = -(n-1)! \frac{(y_c^*)^n + y_c^n}{|y_c|^{2n}} \quad (6.19)$$

$$k_n \approx -(n-1)! \frac{2 \cos(n\theta)}{|y_c|^n}. \quad (6.20)$$

Com a equação 6.20, percebemos que é possível estimar o zero dominante y_c a partir de sua relação com o n -ésimo cumulante. Sendo assim, considerando as relações entre os cumulantes dadas por,

$$\begin{aligned} K_n^+ &= \frac{k_{n+1}}{k_n} = \frac{n \cos[(n+1)\theta]}{|y_c| \cos[n\theta]}, \\ K_n^- &= \frac{k_{n-1}}{k_n} = \frac{|y_c| \cos[(n-1)\theta]}{(n-1) \cos[n\theta]}, \\ K_{n+1}^+ &= \frac{k_{n+2}}{k_{n+1}} = \frac{(n+1) \cos[(n+2)\theta]}{|y_c| \cos[(n+1)\theta]}, \\ K_{n+1}^- &= \frac{k_n}{k_{n+1}} = \frac{1}{K_n^+}. \end{aligned} \tag{6.21}$$

Ao fazermos $n \gg 1$, podemos reescrever as relações entre os cumulantes e o zero dominante como uma sistema de equações e garantir que a equação 6.20 é uma boa aproximação. Desta forma, encontramos o sistema dado por,

$$\begin{bmatrix} 2\Re[y_c] \\ |y_c|^2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 & -\frac{K_n^+}{n} \\ 1 & -\frac{K_{n+1}^+}{n+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (n-1)K_n^- \\ nK_{n+1}^- \end{bmatrix} \tag{6.22}$$

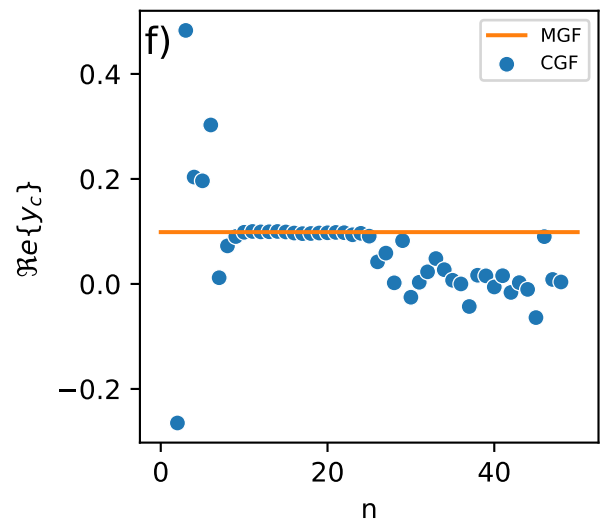
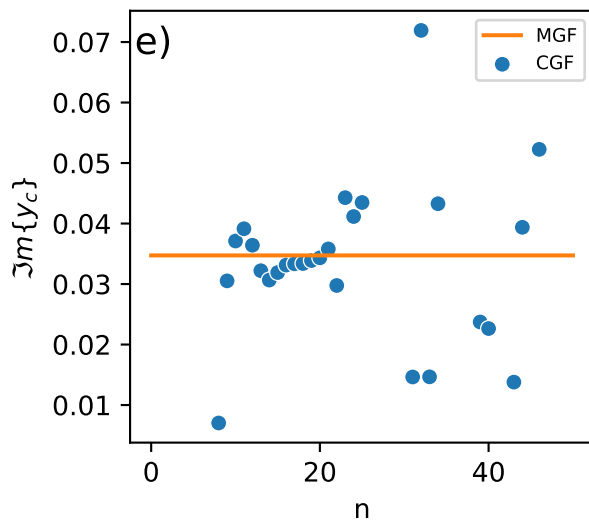
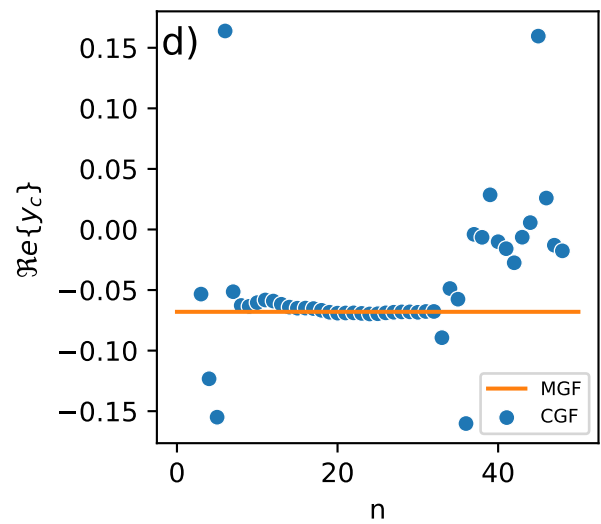
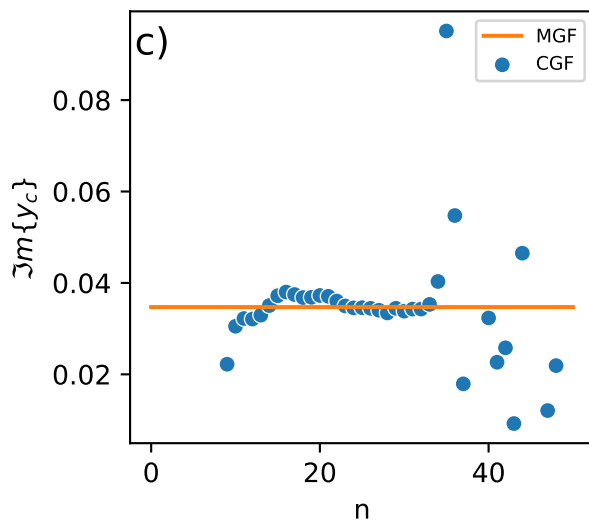
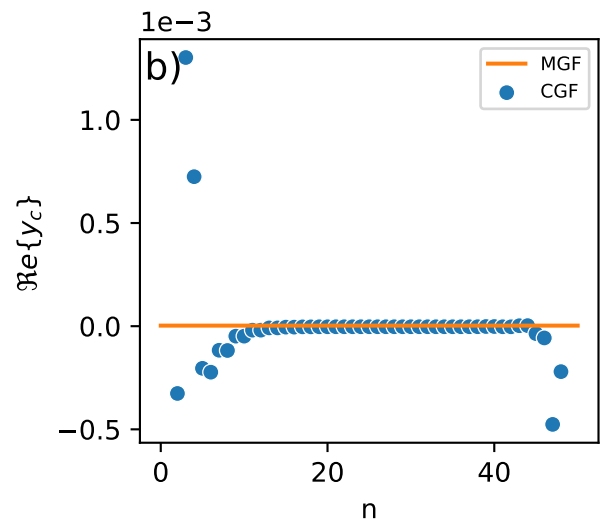
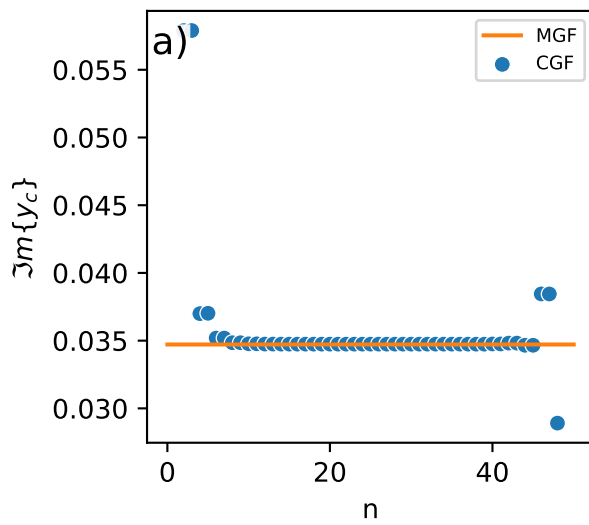
Ao resolvermos este sistema, conseguimos estimar o zero dominante diretamente usando somente os valores dos cumulantes em uma temperatura arbitrária β_o . Note que os valores dos cumulantes podem ser obtidos a partir de sua relação com os momentos, equação 6.5, e a parte imaginária de y_c pode ser obtida pela equação $|y_c|^2 = \Re\{y_c\}^2 + \Im\{y_c\}^2$.

Assim como nos zeros da MGF, o método dos cumulantes não está limitado a ser usado somente com os momentos da energia. De fato, ao utilizarmos os cumulantes da magnetização para resolver o sistema 6.22 obtemos o zero dominante w_c , o qual está relacionado com a MGF da magnetização.

6.6 Comparando os métodos

Como desenvolvemos a teoria utilizando os zeros da MGF, podemos facilmente usá-los para comparar os resultados obtidos pelos cumulantes. Desta forma, vamos utilizar o modelo de Ising em uma rede quadrada de tamanho $L = 24$, resolver o sistema 6.22 para valores de $n = [2, \dots, 45]$ e comparar os resultados com o zero dominante encontrado pela MGF. Isto é feito para diversos valores de β_o .

Para $\beta_o = \beta_c$, os valores do zero dominante obtidos pela MGF e pelos cumulantes são iguais, como pode ser visto nas figuras 11a e 11b. Porém, à medida que nos afastando da temperatura crítica, as estimativas obtidas pelo sistema não são tão precisas, como pode ser visto nas figuras 11e até 11h. Apesar de ser necessário mais análises, o desvio apresentado para temperaturas distantes da temperatura crítica parece ser causado por imprecisões numéricas no cálculo dos cumulantes. Sendo assim, o método dos cumulantes



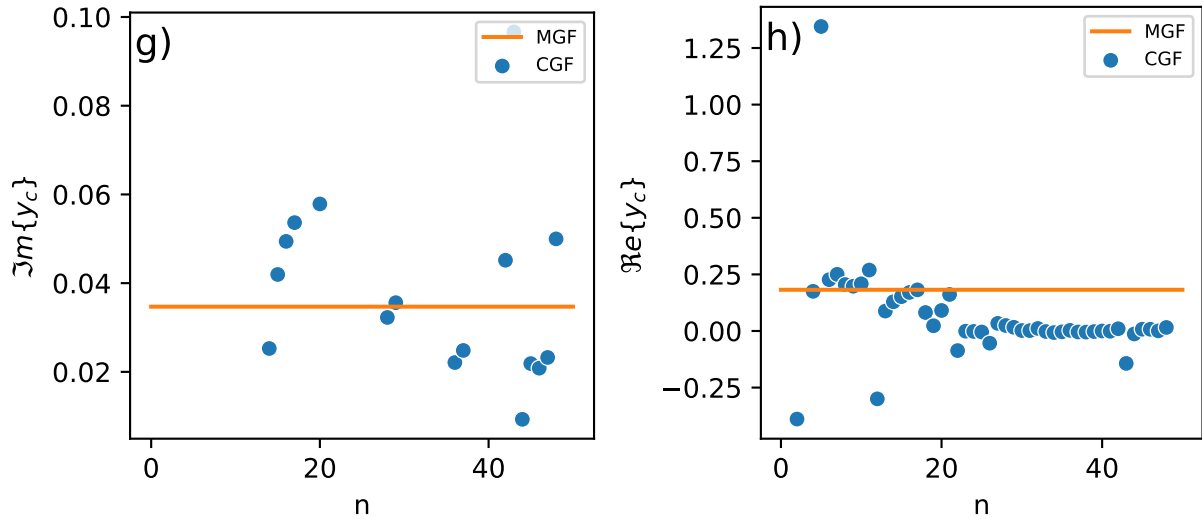


Figura 11 – Utilizamos o modelo de Ising em uma rede quadrada de tamanho $L = 24$ para comparar o zero dominante encontrado pela MGF e o zero dominante encontrado pelos cumulantes. Em temperaturas próximas da temperatura crítica, a-b) $T = 2.3016$ e c-d) $T = 2.0$, encontramos uma boa aproximação para y_c . A medida que nos afastamos da temperatura crítica, a qualidade da aproximação de y_c degrada, e-f) $T = 3.0$ e g-h) $T = 4.0$. Utilizamos o Mathematica[®] [37] e a densidade de estados exata para calcular os cumulantes.

deve ser capaz de gerar os mesmos resultados dos zeros da MGF, dado que sejam capazes de melhorar a precisão numérica.

Outro ponto importante, não discutido pelo autor do método dos cumulantes, é a necessidade do algoritmo de convergência. Sem este algoritmo não é possível obter a temperatura crítica de forma precisa a partir de qualquer β_o . A necessidade de um algoritmo de convergência foi discutida na seção 4.2 com os zeros EPD e estendido posteriormente para os zeros da MGF. Desta forma, o mesmo algoritmo de convergência utilizado pelos zeros da MGF se faz necessário ao usarmos o método dos cumulantes.

7 Métodos numéricos

Neste capítulo, descrevemos os principais métodos computacionais utilizados para fazer as simulações dos modelos de Ising e de Potts. Além disso, apresentamos técnicas de repesagem de histograma, que são extremamente úteis ao utilizarmos os novos métodos apresentados nos capítulos anteriores.

7.1 Simulação de Monte Carlo

No ensemble canônico, o sistema a ser estudado está em equilíbrio com um banho térmico a uma temperatura fixa T , sendo permitido a troca de energia entre o sistema de interesse e o banho térmico. Dado um tempo suficiente grande, o sistema passa por todas as configurações possíveis $\{\sigma\}$ com energia E_σ . Sendo assim, as médias de uma grandeza termodinâmica qualquer $\langle \mathcal{O} \rangle$ são dadas pela equação,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O}_\sigma P_\sigma, \quad (7.1)$$

onde $\{\sigma\}$ é o conjunto de todos os estados acessíveis ao sistema, \mathcal{O}_σ é o valor da grandeza termodinâmica no estado σ e P_σ é a probabilidade do estado σ ocorrer. Sendo que P_σ é dada pela distribuição de Boltzmann,

$$P_\sigma = \frac{e^{-\beta E_\sigma}}{Z}, \quad (7.2)$$

onde E_σ é a energia do estado σ , $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura, k_B é a constante de Boltzmann e $Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_\sigma}$ é a função de partição, definida como a normalização da distribuição de probabilidade.

A ideia da simulação de Monte Carlo é amostrar estatisticamente a distribuição de Boltzmann, i.e., gerar estados de forma estocástica que sigam a distribuição P_σ . Desta forma, qualquer média termodinâmica $\langle \mathcal{O} \rangle$ será dada por uma média simples,

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_i^N \mathcal{O}_i, \quad (7.3)$$

onde N é o número de estados gerados e \mathcal{O}_i é o valor da grandeza \mathcal{O} no i -ésimo estado. Para $N \rightarrow \infty$ a média de \mathcal{O} se torna o valor exato.

Existem diversos algoritmos capazes de gerar uma sequência de estados que sigam a distribuição de Boltzmann. Esses algoritmos usam o que chamamos de processo de Markov para gerar novos estados a partir de um estado inicial qualquer, sendo que uma cadeia de estados geradas por esses algoritmos são chamadas de cadeia de Markov. Para que a cadeia

de Markov siga a distribuição de probabilidade de Boltzmann, devemos garantir que a probabilidade de transição de um estado μ para um estado ν , siga as seguintes regras:

- 1) A taxa de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$ não deve variar com o tempo.
- 2) O estado gerado ν só depende do estado anterior μ .
- 3) Deve seguir a equação $\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$.

Além disso, temos que garantir que os estados gerados tenham as seguintes propriedades:

- 4) Ergodicidade: Todos os estados do sistema podem ser acessados desde que tenha tempo suficiente para isso.
- 5) Balanço detalhado: O fluxo de probabilidade indo do estado $\mu \rightarrow \nu$ é o mesmo que o do estado $\nu \rightarrow \mu$, ou seja, em média o sistema deve ir do estado $\mu \rightarrow \nu$ com a mesma frequência com que vai do estado $\nu \rightarrow \mu$.

Seguindo essas regras, geramos uma cadeia de estados que, independentemente da configuração inicial, seguem a distribuição de Boltzmann após um certo transiente. Esse transiente é chamado de termalização, sendo composto por estados gerados que não seguem a distribuição de Boltzmann e não devem ser considerados para o cálculo das médias termodinâmicas.

A forma como geramos a cadeia de Markov influencia na eficiência do algoritmo. Para os sistemas magnéticos abordados nesta tese, iremos utilizar o algoritmo de Metropolis [21] e o algoritmo de Wolff [48]. Sendo assim, considere o algoritmo de Metropolis [21] descrito abaixo:

- 1) Selecione um spin aleatório na rede.
- 2) Inverta a direção deste spin na rede.
- 3) Calcule a diferença de energia antes e depois da inversão ($\Delta E = E_f - E_i$).
- 4) Gere um número aleatório r no intervalo de $[0, 1)$.
 - a) Se $r < e^{-\beta\Delta E}$, aceite a nova configuração de spin.
 - b) Se $r > e^{-\beta\Delta E}$, rejeite a nova configuração de spin e conte a atual novamente.
- 5) Escolha um novo sítio e volte para **2**).

Para cada L^d vezes que esse algoritmo é executado, dizemos que um passo de Monte Carlo foi dado, onde L é o tamanho do sistema e d é a sua dimensão. A cada passo de Monte Carlo dizemos que um único estado da cadeia de Markov foi gerado. Desta forma,

após a termalização, conseguimos obter uma cadeia de Markov que segue a distribuição de Boltzmann.

O algoritmo de Metropolis, apesar de muito utilizado em sistemas como o modelo de Ising, sofre com o que chamamos de *critical slowing down* [21]. Este efeito é característico de pontos onde o sistema é altamente correlacionado, fazendo com que o tempo de correlação τ entre os estados gerados seja grande [49], i.e., grande parte dos estados gerados na cadeia vão estar correlacionados e a condição 2) descrita anteriormente é quebrada. Como foi visto anteriormente, isso é uma característica comum em pontos de transições de fase contínuas. Desta forma, se faz necessário o uso de outro tipo de algoritmo capaz de reduzir o tempo de correlação entre os estados gerados.

O algoritmo de Wolff [48] explora a alta correlação do sistema para amostrar de forma eficiente os estados do sistema e reduzir o tempo de correlação. Para isso, o algoritmo considera um bloco inteiro de spins (*cluster*), diferente do algoritmo de Metropolis que considera um único spin. Desta forma, o algoritmo de Wolff sofre menos com o problema de *critical slowing down*. Existem outros algoritmos capazes de realizar o mesmo processo [21], mas escolhemos o algoritmo de Wolff pela simplicidade e eficiência. Sendo assim, considere o algoritmo Wolff descrito abaixo:

- 1) Escolha um spin aleatório na rede.
- 2) Olhe os seus vizinhos, se algum deles estiver apontando na mesma direção, adicione ele ao *cluster* com probabilidade $P_{\text{ad}} = 1 - e^{-2\beta J}$.
- 3) Para cada spin adicionado no último passo, refaça o passo 2. Esse passo é repetido até que não exista mais spins a serem adicionados.
- 4) Troque a direção dos spins que foram adicionados ao *cluster*.

7.2 Repesagem de histogramas

Os algoritmos apresentados na seção anterior possuem a desvantagem de termos que repetir a simulação em cada temperatura. Porém, técnicas de repesagem conseguem contornar essa limitação, pois estendem os resultados obtidos na temperatura T para temperaturas próximas.

7.3 Repesagem simples de histograma

Para entender como o método funciona, considere a distribuição de probabilidade da energia para um sistema no ensemble canônico, dada por,

$$P_{\beta}(E) = \frac{g(E)e^{-\beta E}}{Z(\beta)} \quad (7.4)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados, E é a energia, $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura T , k_B é a constante de Boltzmann e $Z(\beta) = \sum_E g(E)e^{-\beta E}$ é a função de partição em β . Ao fazermos uma simulação de Monte Carlo, como as descritas anteriormente, criamos uma cadeia de Markov com M estados, os quais seguem a distribuição de probabilidade $P_\beta(E)$. Sendo assim, podemos dizer que o conjunto de estados $\{M\}$ é uma estimativa para a distribuição de probabilidade dada por,

$$\frac{H_\beta(E)}{M} \approx P_\beta(E), \quad (7.5)$$

onde $H_\beta(E)$ é o histograma da energia, i.e., $H_\beta(E)$ é a frequência com que o estado com energia E aparece no conjunto $\{M\}$.

A partir da estimativa obtida para $P_\beta(E)$, iremos construir outras estimativas para distribuições de probabilidade em temperatura próximas. Sendo assim, usando as equações 7.4 e 7.5, obtemos uma estimativa para a densidade de estados, dada por,

$$g(E) \approx \frac{H_\beta(E)}{M} Z(\beta) e^{\beta E}. \quad (7.6)$$

Note que a densidade de estados não depende da temperatura. Desta forma, considerando que a distribuição de probabilidade em uma temperatura T_o , próxima de T , é dada por,

$$P_{\beta_o}(E) = \frac{g(E)e^{-\beta_o E}}{\sum_E g(E)e^{-\beta_o E}}. \quad (7.7)$$

Ao substituirmos a aproximação feita para a densidade de estados, equação 7.6, nesta distribuição de probabilidade em T_o , encontramos,

$$P_{\beta_o}(E) \approx \frac{H_\beta(E)e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H_\beta(E)e^{-\Delta\beta E}}, \quad (7.8)$$

onde $\Delta\beta = \beta_o - \beta$. Sendo assim, apesar de termos estimado $H_\beta(E)$ para a temperatura T , conseguimos usá-la para estimar a distribuição de probabilidade em uma temperatura T_o próxima a T .

Com a distribuição de probabilidade em T_o , podemos estimar as médias termodinâmicas usando a equação,

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\beta_o} \approx \sum_E \mathcal{O}(E) P_{\beta_o}(E). \quad (7.9)$$

Este método é chamado de histograma simples e tem a limitação de ser válido somente para temperaturas muito próximas à T .

7.4 Repesagem de histograma múltiplo

A técnica de repesagem de histograma múltiplo combina vários histogramas em temperaturas próximas para estimar a densidade de estados, aumentando o número de temperaturas acessíveis para o método e a sua precisão.

Para entender o método, considere que foram feitas k simulações de Monte Carlo em T_k temperaturas diferentes, onde foram dados n_k passos de Monte Carlo em cada simulação. Sendo assim, é possível mostrar que a melhor estimativa para a densidade de estados [21] é dada por,

$$g(E) = \frac{\sum_i H_i(E)}{\sum_k n_k Z_k^{-1} e^{-\beta_k E}}, \quad (7.10)$$

onde Z_k é a função de partição em $\beta_k = k_B T_k$ e o histograma $H_i(E)$ é construído considerando todos os estados gerados em cada uma das simulações. Apesar de termos uma equação para a densidade de estados, ela não é muito útil, pois não sabemos os valores de cada Z_k .

Para estimarmos Z_k , utilizamos a própria definição da função de partição, dada por,

$$Z_j = \sum_E g(E) e^{-\beta_j E} = \sum_E \frac{\sum_i H_i(E)}{\sum_k n_k Z_k^{-1} e^{(\beta_j - \beta_k) E}}, \quad (7.11)$$

onde β_j é o inverso das temperaturas T_j , i.e., ele está restrito ao conjunto de temperaturas simuladas. Sendo assim, usamos a equação de forma recursiva até que os valores de Z_j converjam para um valor fixo. Obtemos com isso os valores de Z em cada temperatura simulada.

Em posse dos valores de Z_k , ao substituirmos a nossa estimativa para densidade de estados, equação 7.10, na distribuição de probabilidade a uma temperatura arbitrária T_o , equação 7.4, encontramos,

$$P_{\beta_o}(E) = \frac{\sum_i H_i(E)}{\sum_k n_k Z_k^{-1} e^{(\beta_o - \beta_k) E}}. \quad (7.12)$$

Desta forma, conseguimos obter as médias termodinâmicas utilizando a equação,

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\beta_o} \approx \sum_E \mathcal{O}(E) P_{\beta_o}(E). \quad (7.13)$$

Este método é muito mais geral que o histograma simples e consegue estimar uma quantidade muito maior de temperaturas. Porém, não é facilmente implementado, pois possui diversos problemas numéricos que devem ser levados em consideração. Para uma discussão mais abrangente sobre a implementação do algoritmo recomendo a referência [21].

8 Modelos

Neste capítulo, descrevemos brevemente os modelos nos quais aplicaremos os novos métodos dos zeros da função de partição.

8.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising é constituído de momentos magnéticos localizados e igualmente espaçados. Este modelo foi originalmente proposto por Lenz e Ising como um modelo simplificado de um material ferromagnético. Estes momentos apontam ao longo de um único eixo e podem assumir valores de ± 1 . Em uma e duas dimensões o sistema tem solução exata conhecida. A solução em 1D foi apresentada por Ernest Ising em sua tese e não apresenta transição de fase. Em 2D a solução exata foi encontrada por Onsager [50] e constitui um dos mais celebrados resultados da Mecânica Estatística por ser um dos problemas com solução exata que apresentam transição de fase. Apesar de termos a solução para 1D e 2D, o modelo de Ising 3D não tem solução exata conhecida, apesar de existirem diversos estudos analíticos e numéricos sobre o sistema.

O modelo de Ising tem sua Hamiltoniana dada pela equação,

$$\mathcal{H}(J, H) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (8.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ significa soma entre os primeiros vizinhos, J é uma constante de interação, $\sigma_i = \pm 1$ é o i -ésimo spin da rede, $H = \mu h$, μ é o momento magnético, h é um campo magnético externo aplicado ao sistema e $M = \sum_i \sigma_i$ é a magnetização total do estado. Em 2 e 3 dimensões, o sistema passa por transições de fase contínuas nas redes quadradas e cúbicas. Mais especificamente, para uma rede quadrada em 2D com $J > 0$ (ferromagnético) e a campo nulo ($H = 0$), o sistema é ferromagnético no estado fundamental apresentando uma transição de fase de ordem e desordem. Em altas temperaturas a agitação térmica do sistema previne qualquer ordem e a magnetização total do sistema é zero. Em temperaturas baixas, o sistema se alinha (quebra espontânea de simetria) passando para a fase ordenada e a magnetização assume um valor diferente de zero. Neste sistema transições de fase são comumente observadas por divergências no calor específico e na susceptibilidade, ou pelo parâmetro de ordem, a magnetização. De acordo com a solução exata encontrada por Onsager [50], a transição de fase ocorre na temperatura $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})J/k_B$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Além disso, para $J > 0$ e $T < T_c$ este modelo também passa por uma transição de fase descontínua em $H = 0$. Esta transição de fase é gerada pela inversão do campo magnético ao atravessarmos a linha $H = 0$ para $T < T_c$, pois ao trocarmos a direção do campo invertemos a direção na qual os momentos magnéticos

tendem a se alinhar, dando origem assim a transição de fase. Apesar de simples, o modelo Ising é muito rico para o estudo de transições de fase.

8.2 Modelo de Potts

O modelo de Potts é uma generalização do modelo de Ising, onde os momentos magnéticos podem assumir valores discretos entre $[1, \dots, q]$. Este modelo apresenta transições de fase contínuas e descontínuas, sendo um modelo simples e muito rico para o estudo de transições de fase [51].

A Hamiltoniana do modelo é dada por,

$$\mathcal{H}(J) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j), \quad (8.2)$$

onde σ_i é o momento magnético do i -ésimo sítio que possui valores discretos entre $[1, \dots, q]$, J é uma constante de interação, δ é a delta de Kronecker, e $\langle i, j \rangle$ significa que a soma é feita entre os primeiros vizinhos. Em 2D, para uma rede quadrada com $J > 0$, esse modelo apresenta, respectivamente, transições de fase contínuas e descontínuas para $q \leq 4$ e $q > 4$. Em Especial, para $q = 2$ esse modelo pode ser mapeado no modelo de Ising. Além disso, sua temperatura crítica exata é conhecida e dada por $T_c = 1/\ln(1 + \sqrt{q})J/k_B$ [51], onde k_B é a constante de Boltzmann.

9 Resultados

Neste capítulo, iremos comparar os novos métodos apresentados com o método dos zeros da MGF, mostrando que este último consegue reproduzir resultados estatisticamente equivalentes aos zeros EPD e ao método dos cumulantes. Além disso, ao longo do capítulo mostraremos as vantagens dos zeros da MGF sobre os outros métodos. Será mostrado que, se comparado com os zeros EPD, o método dos zeros da MGF possui grande vantagem para o estudo de sistemas em redes grandes ou que passem por transições de fase descontínuas. Além disso, ao compararmos os zeros da MGF com o método dos cumulantes, mostraremos que os zeros da MGF obtêm mais de uma estimativa para os expoentes críticos. Todos os resultados que serão apresentados para os zeros da MGF foram obtidos utilizando a equação 5.22, onde utilizamos os momentos centrais como coeficientes do polinômio. Além disso, a não ser que seja dito o contrário, não consideramos nenhum descarte de estados no cálculo dos momentos.

9.1 Comparativo entre os zeros da MGF e os zeros EPD

Nesta seção vamos comparar em mais detalhes os métodos dos zeros da MGF e o método dos zeros EPD. Mostraremos que os zeros da MGF conseguem reproduzir os mesmos resultados dos zeros EPD, porém, consumindo menos recursos computacionais. Além disso, iremos mostrar que os zeros da MGF possuem uma vantagem muito significativa ao tratar modelos com transições descontínuas, como os apresentados pelo modelo de Potts de seis estados.

Para fazer estas comparações utilizamos o modelo de Ising e o modelo de Potts com seis estados. Com estes modelos podemos estudar os zeros da MGF em transições de fase contínuas e descontínuas, além de compararmos os resultados obtidos com os valores exatos. Nas próximas seções abordamos em mais detalhes a forma como as simulações foram feitas e apresentamos os resultados para cada modelo.

9.2 Simulações computacionais

As simulações foram feitas utilizando os algoritmos descritos na seção 7.1. De forma mais específica, para o modelo de Ising foi utilizado o algoritmo de Metropolis, para o qual fizemos 3 simulações em temperaturas próximas a temperatura crítica dentro do intervalo de $[2.2570, 2.2830]$. Para o modelo de Potts com $q = 6$ estados, utilizamos o algoritmo de Metropolis em conjunto com o algoritmo de Wolff, onde foram feitas 15 simulações começando pela temperatura $T_i = 0.8006$ até $T_f = 0.8146$ com um intervalo de $dt = 0.001$

entre cada temperatura. Em ambos os modelos, consideramos redes de tamanho entre $L = 90$ e $L = 180$. Além disso, para aplicar o método dos zeros EPD e dos zeros da MGF, utilizamos a técnica de repesagem de histogramas múltiplos [52], seção 7.4, em conjunto com o algoritmo de convergência.

Para estimar T_c e ν , foram feitas 5 simulações diferentes em cada temperatura para cada tamanho de rede. Desta forma, obtemos os valores médios de $T_c(L)$ e $\Im m\{x_c(L)\}$ e, utilizando as equações de escala de tamanho finito, obtemos os valores esperados de T_c e ν . As estimativas foram obtidas, para ambos os modelos, usando 10^6 passos de Monte Carlo e com os valores de descartes de estados entre $h_t = 10^{-100}$ e $h_t = 10^{-1}$.

9.2.1 Modelo de Ising

Como primeira comparação, temos o processo de convergência dos dois métodos na figura 12, onde vemos que ambos convergem para a mesma temperatura pseudo crítica. A única diferença entre os métodos está no número de iterações necessárias para a convergência, como veremos mais adiante isso vai impactar no tempo computacional do algoritmo.

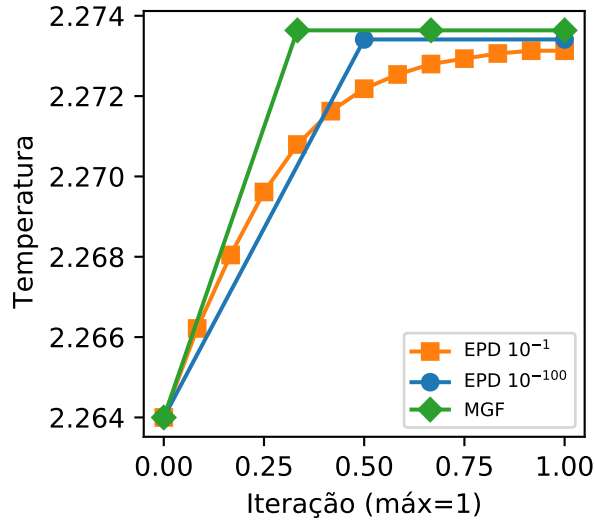


Figura 12 – Convergência dos zeros da MGF com $k_{\max} = 60$, e dos zeros EPD com os cortes de $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$, para uma rede de tamanho $L = 180$. Ambos os métodos convergem para a mesma temperatura pseudo crítica.

Usando as equações de escala de tamanho finito, descritas nas seções 4.1.1 e 5.5, obtemos para os zeros EPD com cortes de $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$ os valores de $T_c = 2.2692(9), 2.2692(5)$ e $\nu = 1.02(2), 1.07(1)$, respectivamente. Para os zeros da MGF, encontramos $T_c = 2.2687(8)$ e $\nu = 1.02(2)$, onde usamos $k_{\max} = 60$ em todos os tamanhos de rede. Ambos os métodos apresentam resultados próximos ao esperado de $\nu = 1$ e $T_c = 2.2691$, as figuras 13 e 14 mostram a regressão linear de ambos os métodos.

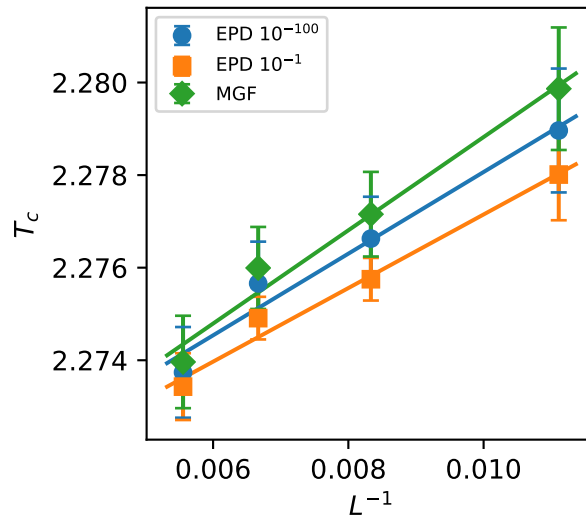


Figura 13 – Regressão linear para estimar o valor de T_c para os zeros da MGF com $k_{\max} = 60$ e para os zeros EPD com $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$. Para os zeros da MGF a estimativa da temperatura crítica é de $T_c = 2.2687(8)$ enquanto para os zeros EPD é encontrado $T_c = 2.2692(9), 2.2692(5)$ com $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$, respectivamente. Ambos os resultados estão condizentes com o valor esperado de $T_c = 2.2691$.

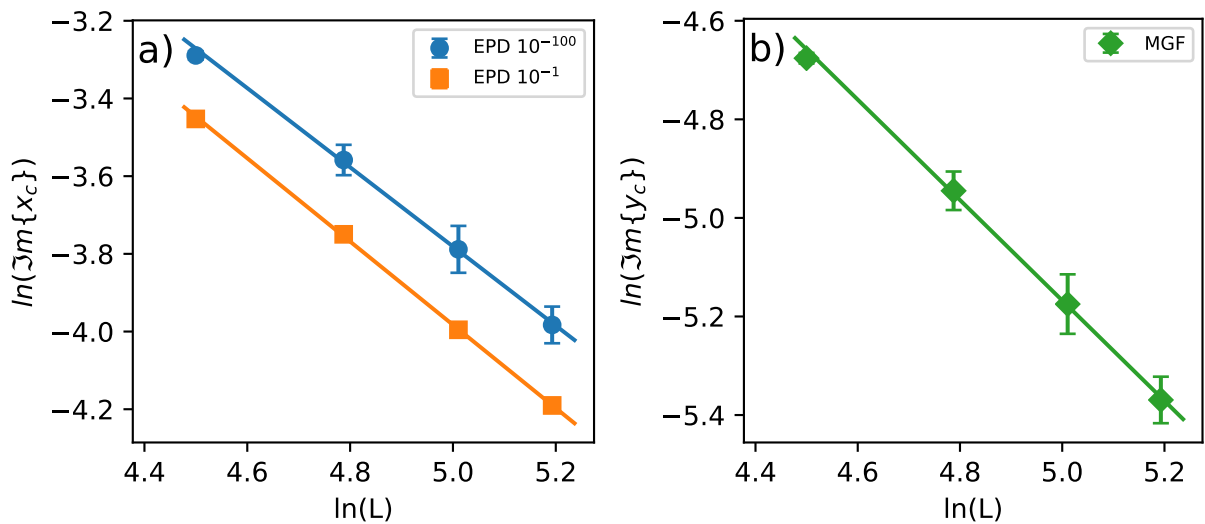


Figura 14 – Regressão linear para encontrar o expoente crítico ν a) para os zeros EPD com descarte de $h_t = 10^{-100}, 10^{-1}$, onde encontramos respectivamente $\nu = 1.02(2), 1.07(1)$, e b) para os zeros da MGF com $k_{\max} = 60$ encontramos $\nu = 1.02(2)$. Ambos os resultados estão condizentes com o valor exato de $\nu = 1$.

Como discutimos na seção 5.7.1, sabemos que perto da transição de fase o valor de k_{\max} necessário para estimar o zero dominante é mínimo, além de crescer pouco com o tamanho da rede L , como mostra a figura 15. Apesar de termos utilizado $k_{\max} = 60$ para gerar os resultados, a figura 15 mostra que poderíamos ter escolhido valores menores para $L < 180$, mas tal ajuste fino faria pouca diferença nos resultados.

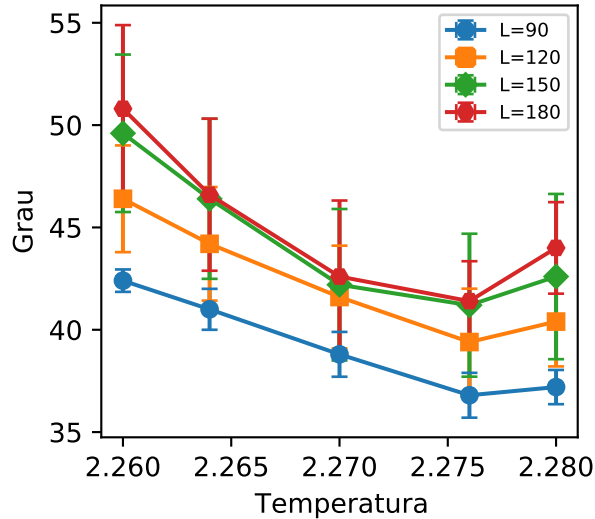


Figura 15 – Grau mínimo necessário para encontrarmos o zero dominante em cada temperatura. Note que à medida que nos aproximamos da temperatura de transição, o grau necessário para estimar o zero dominante diminui.

Observamos até agora que os dois métodos reproduzem os mesmos resultados. Porém, existe uma diferença enorme no grau do polinômio utilizado em cada método. Para os zeros da MGF o grau do polinômio foi fixado em 60, enquanto para os zeros EPD o grau cresce com o tamanho do sistema, como pode ser visto na figura 16. Essa combinação entre um polinômio de grau baixo, $k_{\max} = 60$, com o número pequeno de iterações, vide figura 12, faz com que o algoritmo dos zeros da MGF seja computacionalmente mais barato e mais rápido do que o algoritmo dos zeros EPD. A figura 17 compara o tempo estimado para a convergência até $T_c(L)$. Note que os zeros da MGF são duas ordens de grandezas mais rápidos que os zeros EPD.

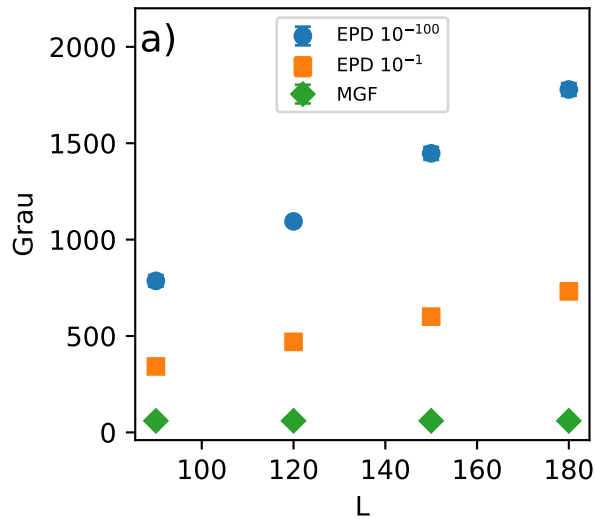


Figura 16 – Grau do polinômio utilizado em cada método em função do tamanho da rede, onde escolhemos para os zeros EPD o descarte de $h_t = 10^{-1}$, 10^{-100} e para os zeros da MGF fixamos o grau do polinômio em $k_{\max} = 60$. Essas medidas foram feitas em $T_c(L)$ indicado por cada um dos algoritmos. Note que apesar dos descartes nos zeros EPD reduzirem o grau do polinômio, eles não previnem que o mesmo cresça com tamanho da rede L .

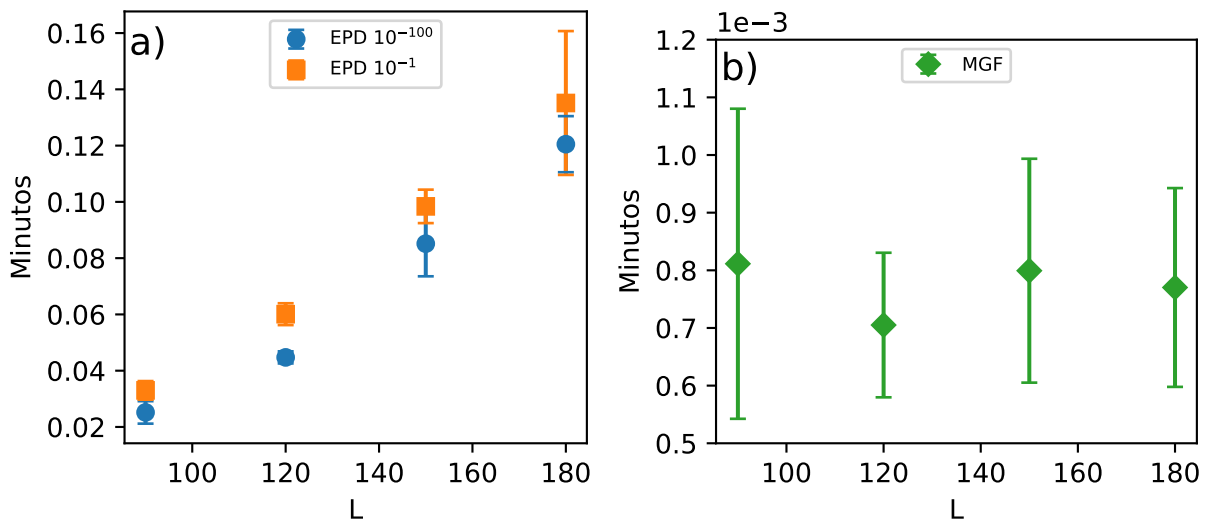


Figura 17 – Tempo computacional gasto pelo algoritmo dos a) zeros EPD e b) zeros da MGF. Note que apesar do grau do polinômio ser menor para o descarte de $h_t = 10^{-1}$, como o número de iterações são maiores para esse valor de descarte, vide figura 12, o tempo computacional aumenta. Além disso, o tempo computacional dos zeros da MGF é bem menor do que o dos zeros EPD, independente do valor de descarte escolhido.

9.2.2 Modelo de Potts com seis estados

O modelo de Potts de seis estados possui uma transição de fase primeira ordem e, diferente do modelo de Ising, se faz necessário mais cuidado ao descartar estados. Como pode ser visto na figura 18a, o histograma da energia possui dois grandes picos e, como foi descrito em [6], não podemos descartar estados entre os picos, mesmo que eles estejam abaixo do valor de descarte. Desta forma, os zeros EPD apresentam dificuldade em reduzir o grau do polinômio, mesmo ao utilizarmos cortes maiores como $h_t = 10^{-1}$. Porém, isto não é um problema que afeta os zeros da MGF, pois a redução do grau do polinômio não depende da forma do histograma, mas sim de truncarmos uma série de potências. Independente disso, os dois métodos apresentam convergência para mesma temperatura pseudo crítica, como pode ser visto na figura 18b.

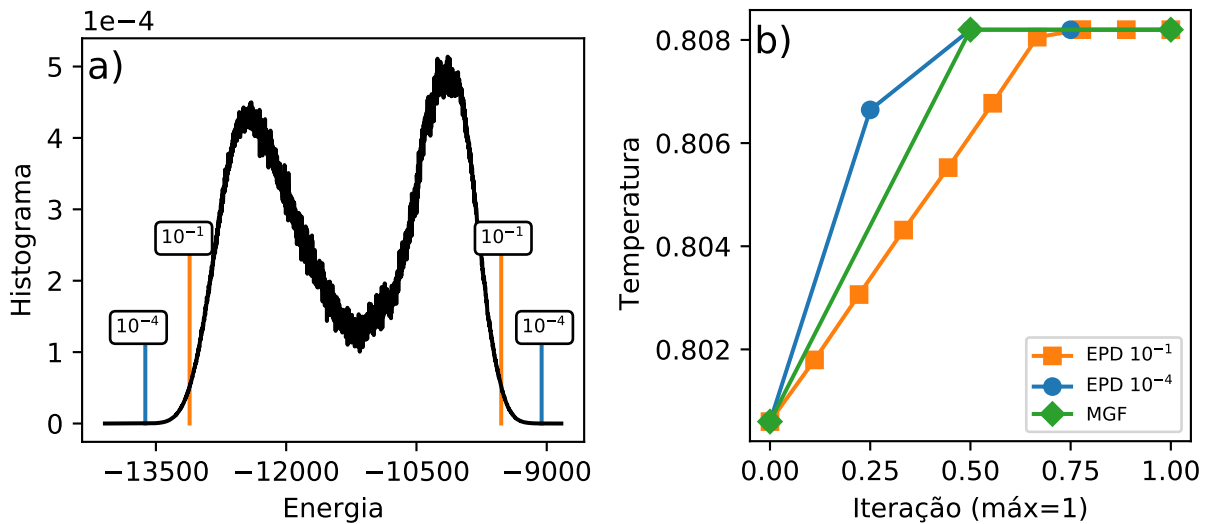


Figura 18 – a) Histograma de energia feito em $T = 0.8002$ com os pontos de descartes demarcados. Note que até mesmo para descartes maiores como $h_t = 10^{-1}$, poucos estados são descartados. b) Processo de convergência para os zeros EPD com descartes de $h_t = 10^{-1}, 10^{-4}$ e para os zeros da MGF com $k_{\max} = 220$. Ambas as figuras foram feitas usando o tamanho de rede $L = 90$.

Da mesma forma que foi feito para o modelo de Ising, escolhemos um valor fixo de $k_{\max} = 220$ durante o processo de convergência para todos os tamanhos de rede. Poderíamos ter escolhido valores menores para k_{\max} em redes menores, como pode ser visto na figura 19a. Além disso, como discutido na seção 5.7.1, podemos reduzir ainda mais o valor k_{\max} se descartarmos estados com probabilidade baixa de serem encontrados, assim como é feito nos zeros EPD, a figura 19b mostra o efeito do descarte nos valores de k_{\max} .

Para obtermos a temperatura crítica T_c , utilizamos as equações de escala de tamanho finito discutidas nas seções 4.1.1 e 5.5. Para os zeros EPD com o descarte de estados de $h_t = 10^{-1}, 10^{-4}$, obtemos $T_c = 0.80763(3)$, o mesmo resultado é obtido porque poucos estados são descartados. Da mesma forma, para os zeros da MGF, onde não foram

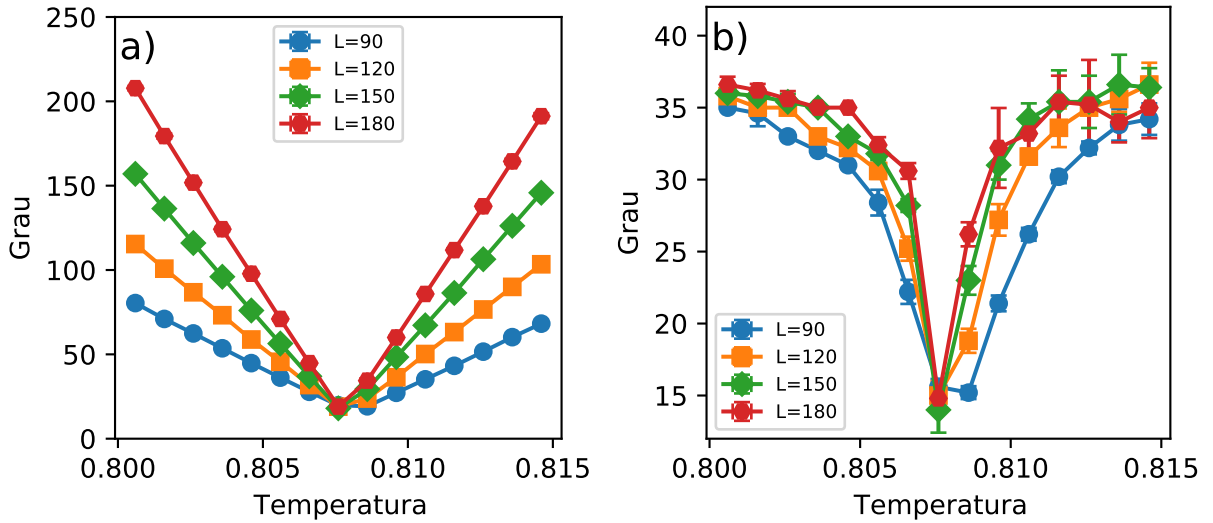


Figura 19 – Grau mínimo necessário para encontrar o zero dominante em cada temperatura, onde *a*) não foram feitos descartes de estados e *b*) com o descarte de estados de $h_t = 10^{-4}$. Note que ambas as figuras apresentam um mínimo próximo a temperatura de pseudo transição e que ao descartarmos estados, conseguimos uma redução ainda maior no grau necessário para encontrar o zero dominante.

descartados estados, obtemos $T_c = 0.80763(3)$, usando $k_{\max} = 220$. A figura 20, mostra a regressão linear feita para encontrar T_c para ambos os métodos e a figura 21 mostra a parte imaginária dos zeros dominantes indo para zero à medida que aumentamos o tamanho do sistema. Para transições de fase descontínuas as funções de escala tem que ser consideradas com mais cuidado [22], principalmente para o modelo de Potts com $q = 6$ que possui uma transição de fase descontínua fraca, onde pode ser necessário considerar correções de escala para obter melhores resultados [6, 53]. Apesar disso, as estimativas obtidas pelos dois métodos sem considerarmos correções estão condizentes com a esperada de $T_c = 0.80760$.

Como os zeros EPD apresentam problemas no descarte de estados, a diferença no grau do polinômio utilizado pelos métodos é enorme, como pode ser visto na figura 22. Enquanto os zeros EPD precisam resolver um polinômio de grau da ordem de 10^3 a 1.4×10^4 , os zeros da MGF precisam resolver um polinômio de grau 220. Essa discrepância afeta diretamente o tempo e os recursos computacionais necessários para utilizar os dois métodos. Como pode ser visto na figura 23, o tempo computacional dos zeros da MGF é ínfimo perto dos zeros EPD.

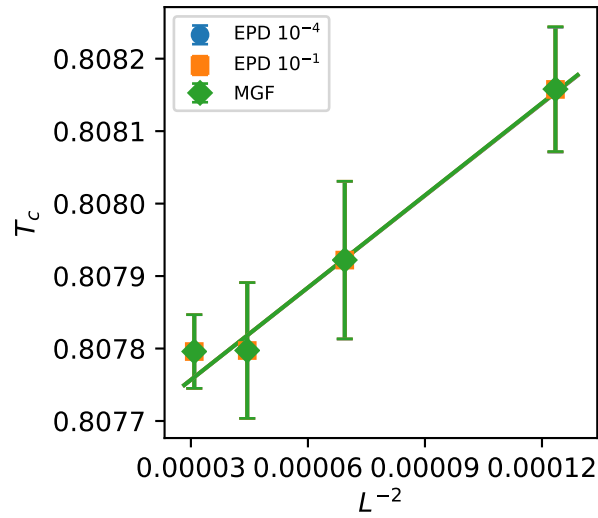


Figura 20 – Regressão linear para estimar T_c usando o método dos zeros da MGF com $k_{\max} = 220$ e os zeros EPD com o $h_t = 10^{-1}, 10^{-4}$, ambos os métodos encontram a mesma temperatura crítica de $T_c = 0.80763(3)$, valores próximos do esperado de $T_c = 0.80760$.

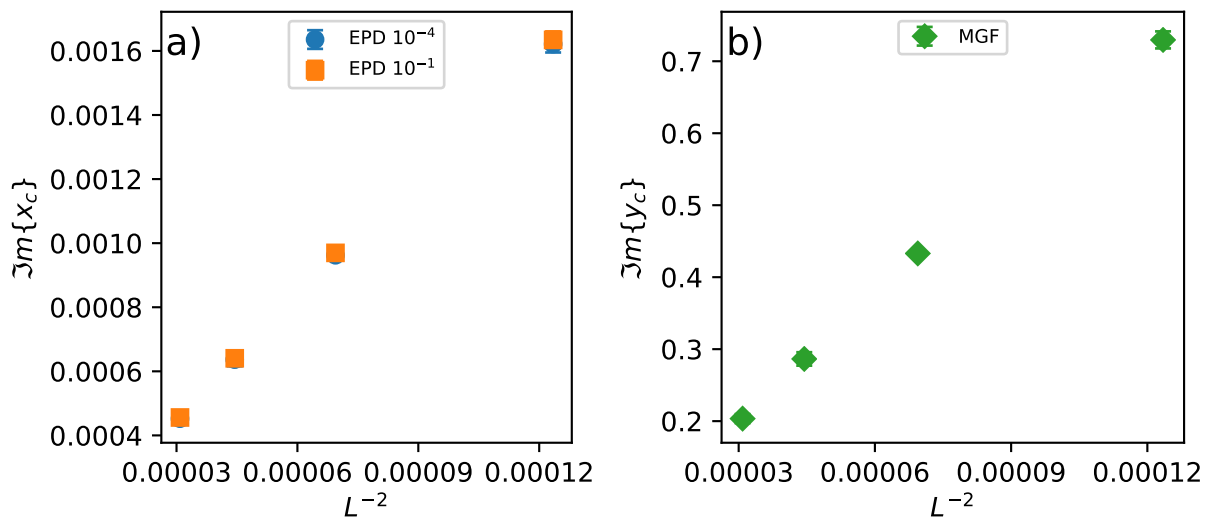


Figura 21 – Parte imaginária do zero dominante dos a) zeros EPD e dos b) zeros da MGF indo para zero à medida que o tamanho do sistema aumenta.

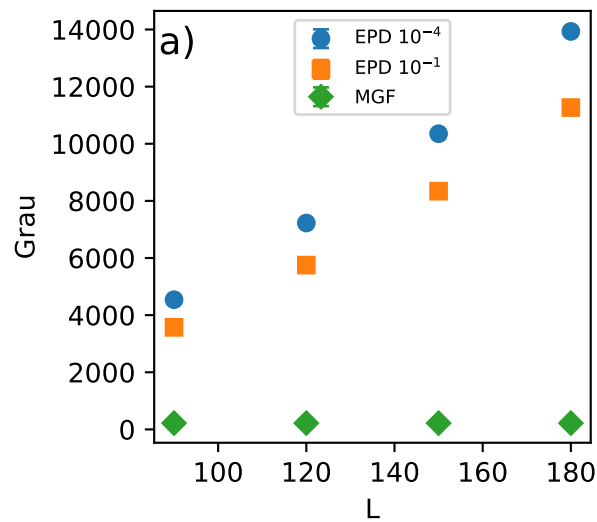


Figura 22 – a) Grao do polinômio na temperatura crítica indicada por cada método, onde usamos $k_{\max} = 220$ para os zeros da MGF e $h_t = [10^{-1}, 10^{-4}]$ para os zeros EPD.

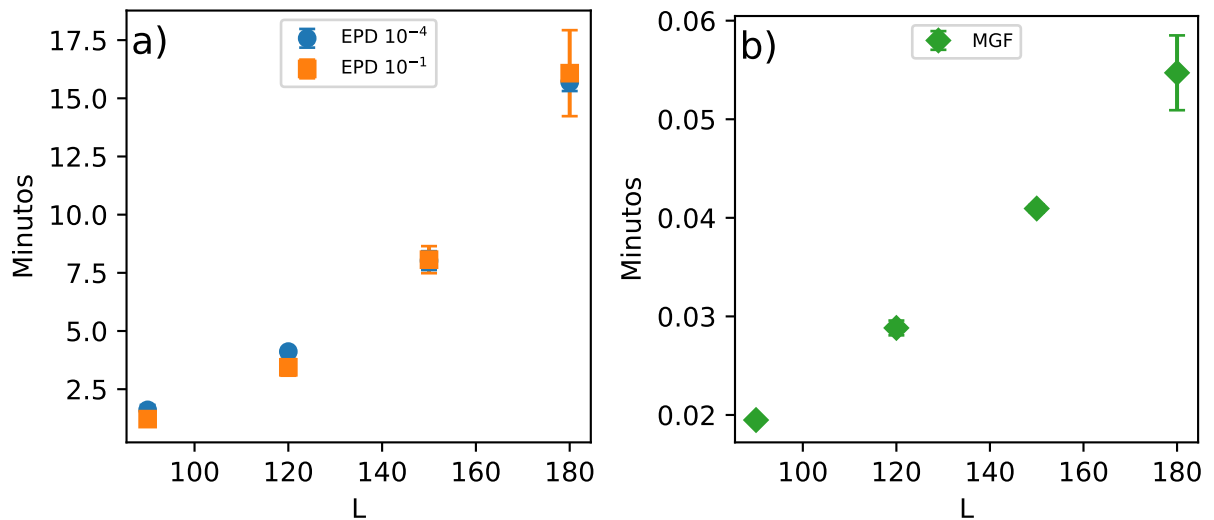


Figura 23 – Tempo computacional gasto para que o algoritmo convirja para a temperatura pseudo crítica, onde consideramos a) o método dos zeros EPD com descartes de $h_t = 10^{-1}, 10^{-4}$ e b) os zeros da MGF com $k_{\max} = 220$. A diferença entre os métodos é clara, os zeros da MGF são pelo 100 vezes mais rápidos que os zeros EPD.

9.3 Ising 3D

O modelo de Ising 3D não possui solução exata conhecida, sendo necessário o uso de simulações computacionais ou métodos analíticos aproximados para obter estimativas para a temperatura crítica e expoentes críticos. Recentemente, estimativas mais precisas foram obtidas utilizando simulações de Monte Carlo [12] na qual foram consideradas redes de tamanho entre $L = 16$ e $L = 1024$, 5×10^6 passos de Monte Carlo foram usados em cada tamanho de rede e para estimar as médias termodinâmicas de 6.000 à 12.000 simulações foram feitas em $\beta = 0.221654$. No total, foram gastas 2×10^7 horas por CPU core, gerando 5TB de dados para serem analisados. De fato, é esperado que em simulações desse nível os resultados tenham uma precisão excelente. Nesta seção, iremos reproduzir em uma escala muito menor os resultados obtidos para o Ising 3D, onde também iremos incorporar e comparar os resultados obtidos pelos zeros da MGF. Também iremos discutir os motivos de não termos utilizado os zeros EPD para fazer as análises das simulações.

9.3.1 Simulações computacionais

Os dados gerados para análise foram feitos da mesma forma que no artigo [12], porém em uma escala menor. Para cada tamanho de rede $L = [24, 32, 48, 64, 80, 96, 112, 128, 144, 160, 192, 256]$ foram feitas 500 simulações em $\beta = 0.221654$, onde guardamos a energia e magnetização em cada um dos 5×10^6 passos de Monte Carlo dados, após 1.5×10^5 passos de termalização. Para guardar os valores de energia e magnetização, foram necessários 520GB ao salvarmos os arquivos sem formatação usando o GNU Fortran. Os arquivos podem ser comprimidos para 137GB usando os programas de compressão padrão presentes nas distribuições de Linux mais utilizadas ¹. Apesar do volume e do tempo que foi gasto para gerar e analisar os dados, os algoritmos utilizados para isso são bem simples.

Utilizamos para as simulações de Monte Carlo o algoritmo de Wolff, discutido na seção 7.1. Porém, para que este seja mais eficiente ao calcular a magnetização e a energia em cada passo de Monte Carlo, só consideramos as diferenças de energia e magnetização gerados pela troca dos spins dentro do *cluster*. Desta forma, não precisamos recalcular a energia e magnetização de toda a rede em cada passo de Monte Carlo. Como foi descrito em [12], a diferença na energia gerada pela troca dos spins no *cluster* é dado somente pelos spins da borda do mesmo, enquanto a diferença na magnetização está relacionada com o número de spins dentro do *cluster*. Sendo assim, é mais eficiente calcular a diferença de energia considerando somente os spins da borda e a diferença na magnetização considerando a soma do número de spins dentro do *cluster*.

¹ Se for necessário, existe um algoritmo de compressão melhor chamado Zstandard.

9.3.2 Análise de dados das grandezas termodinâmicas

Para estimarmos T_c e ν é necessário calcularmos diversas médias termodinâmicas que podem depender da energia, E , e da magnetização, M . Então, iremos descrever como as análises foram feitas e quais algoritmos foram utilizados, para depois falar explicitamente das grandezas que foram consideradas para estimar T_c e ν .

Todas as análises descritas a partir daqui foram feitas utilizando GCC *Quad-Precision Math Library*, isso evita erros de arredondamento gerados pela dupla precisão. Destacamos também que até mesmo a análise dos dados pode demorar horas, já que estamos lidando com um volume 520GB.

A partir dos dados armazenados a cada passo de Monte Carlo, podemos obter quaisquer médias termodinâmicas que dependam de E e M usando a seguinte equação,

$$\langle f(E, M) \rangle_\beta = \sum_{E, M} f(E, M) P_\beta(E, M), \quad (9.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura T , k_B é a constante de Boltzmann, $\langle f(E, M) \rangle_\beta$ é uma média termodinâmica qualquer em β e $P_\beta(E, M)$ é a distribuição de probabilidade em β . Note que $P_\beta(E, M)$ é uma distribuição bidimensional, podendo consumir uma quantidade grande de memória RAM para ser construída, principalmente em redes grandes. Uma forma mais simples para o cálculo das médias termodinâmicas é dada pela equação [54],

$$\langle G(E)F(M) \rangle_\beta = \sum_E G(E) \langle F \rangle_E P_\beta(E), \quad (9.2)$$

onde $G(E)$ é uma função qualquer de E , $F(M)$ é uma função qualquer de M , $\langle F \rangle_E$ é a média de $F(M)$ feita com E constante e $P_\beta(E)$ é a distribuição de probabilidade unidimensional de E . Desta forma, conseguimos calcular de forma mais simples as médias termodinâmicas, sem a necessidade de construirmos a distribuição $P_\beta(E, M)$. Note também que $P_\beta(E)$ pode ser obtida facilmente para outros valores de β usando as técnicas de repesagem de histograma descritas na seção 7.3. Desta forma, para obter as médias termodinâmicas que serão utilizadas mais à frente, só será necessário construir a distribuição de probabilidade $P_\beta(E)$ e calcular os valores $\langle M \rangle_E$, $\langle M^2 \rangle_E$, $\langle M^3 \rangle_E$, $\langle M^4 \rangle_E$ e $\langle M^6 \rangle_E$.

Para estimarmos os valores de T_c e ν , temos que encontrar os pontos onde as grandezas termodinâmicas são máximos, i.e., encontramos o ponto $(\mathcal{O}_{\text{máx}}(L), T_c(L))$ para cada grandeza termodinâmica $\mathcal{O}(L)$ considerada. A busca pelo extremo da função $\mathcal{O}(L)$ pode ser automatizado utilizamos o algoritmo de busca de extremos de funções *Golden-section Search* (GSS) [55] ou qualquer outro algoritmo deste tipo. Sendo que os valores de $\mathcal{O}(L)$ em temperaturas próximas às simuladas são facilmente obtidos ao combinarmos a equação 9.2 e as técnicas de repesagem de histograma simples da seção 7.3.

Sabendo calcular as médias e os pontos de máximos de grandezas termodinâmicas, vamos falar sobre quais grandezas iremos de fato levar em consideração para estimar os

valores de ν e T_c . De acordo com [12, 56], podemos estimar ν a partir de grandezas que seguem a equação de escala de tamanho finito dada por,

$$\frac{\partial \mathcal{O}_{\text{máx}}}{\partial \beta} = aL^{-1/\nu}. \quad (9.3)$$

Desta forma, iremos considerar os cumulantes da magnetização de i -ésima ordem dados por,

$$U_{2i} = 1 - \frac{\langle |M|^{2i} \rangle}{3\langle |M|^i \rangle^2}, \quad (9.4)$$

cujas derivadas podem ser utilizadas para estimar ν . Também iremos considerar as derivadas dos logaritmos da magnetização elevada a i -ésima potência, dado por,

$$\frac{\partial \ln \langle |M|^i \rangle}{\partial \beta} = \frac{1}{\langle |M|^i \rangle} \frac{\partial \langle |M|^i \rangle}{\partial \beta} = \frac{\langle |M|^i E \rangle}{\langle |M|^i \rangle} - \langle E \rangle. \quad (9.5)$$

Note que $\langle |M|^i E \rangle$ pode ser obtido usando a equação 9.2. Desta forma, ao encontramos os máximos das derivadas do cumulante e do logaritmo da magnetização, conseguimos obter estimativas para ν usando a equação 9.3. Nas análises que serão feitas, levamos em consideração somente as derivadas dos cumulantes U_2 , U_4 e U_6 e as derivadas do logaritmo de $\langle |m| \rangle$, $\langle |m|^2 \rangle$, $\langle |m|^3 \rangle$ e $\langle |m|^4 \rangle$.

Após estimarmos ν , utilizamos os valores de $T_c(L)$ obtidos dos pontos onde \mathcal{O} é máximo, para estimar a temperatura crítica T_c . Além de considerarmos os máximos das derivadas das grandezas discutidas anteriormente, equações 9.4 e 9.5, também iremos usar os valores de $T_c(L)$ indicados pelos máximos da derivada de $|m|$,

$$\frac{\partial \langle m \rangle}{\partial \beta} = \langle |m| E \rangle - \langle |m| \rangle \langle E \rangle, \quad (9.6)$$

da susceptibilidade de rede finita,

$$\chi' = \beta L^d (\langle |m|^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2), \quad (9.7)$$

e o do calor específico,

$$C_v = \beta^2 L^{-d} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (9.8)$$

Com isso obtemos diversas estimativas para T_c usando o valor de ν encontrado anteriormente.

Com a quantidade de simulações que estamos fazendo, o tamanho das redes consideradas e o número de grandezas utilizadas, é esperado gerar estimativas bem precisas para T_c e ν . Contudo, iremos ainda adicionar as estimativas obtidas a partir dos zeros da MGF, esperamos assim aprimorar ainda mais os resultados gerados.

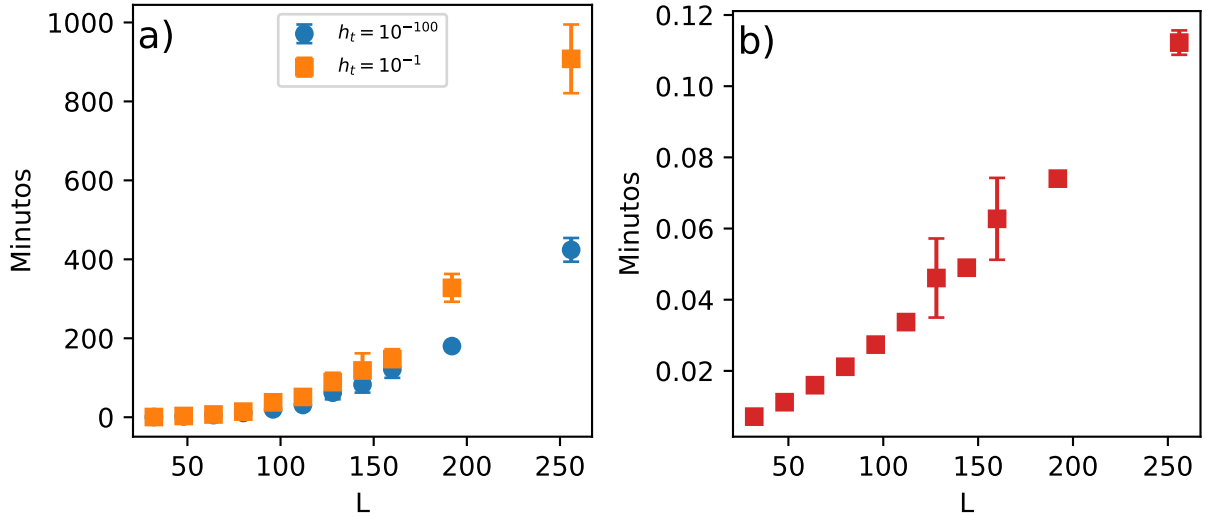


Figura 24 – Tempo computacional gasto para o algoritmo dos zeros a) EPD e b) MGF convergirem para a temperatura pseudo crítica em cada tamanho de rede L . Descartamos estados com valores menores que $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$ para os zeros EPD e utilizamos o valor de $k_{\max} = 100$ para os zeros da MGF. As médias foram feitas considerando 5 simulações diferentes em cada L . Para estimar o tempo usamos um computador com processador Intel® Core™ i7 CPU 2.80GHz, 16GB de RAM e o algoritmo de encontrar raízes do pacote MPSolve [57, 58], o qual foi configurado para utilizar os 8 cores em paralelo.

9.3.3 A eficiência dos zeros da MGF

Antes de apresentarmos os resultados, iremos justificar rapidamente o uso dos zeros da MGF em vez dos zeros EPD neste modelo.

Como estamos utilizando redes grandes, nas quais o número de spins é muito alto, o sistema pode acessar diversos estados, principalmente para a maior rede com $L = 256$. Isso ocorre mesmo utilizando o método de Monte Carlo, que amostra somente o subespaço de configurações relevantes para o sistema em β . De fato, em redes de tamanho $L = 256$, os zeros EPD precisam resolver um polinômio de grau ≈ 72.000 . Nesta situação, mesmo o tempo de convergência de uma única rede é longo. Essa situação se agrava ao considerarmos as 500 simulações feitas em cada um dos 12 tamanhos de rede.

Considerando somente 5 simulações em cada tamanho de rede, medimos o tempo necessário para a convergência dos zeros EPD e dos zeros da MGF em cada tamanho de rede. Estimamos que o algoritmo dos zeros EPD com o descarte de $h_t = 10^{-1}, 10^{-100}$ levaria, respectivamente, 591 dias e 326 dias para obter todos resultados, enquanto os zeros da MGF levam somente 4h, a figura 24 mostra o tempo gasto para atingir a convergência em cada um dos tamanhos de rede. Sendo assim, considerando o tempo que levaríamos para obter os resultados usando cada um dos métodos, escolhemos não adotar o método dos zeros EPD nestas análises.

9.3.4 Resultados

Assim como feito em [12], iremos levar em conta termos de correções para as equações de escala de tamanho finito, isso deve melhorar os resultados ao incluirmos redes pequenas. Para obter as estimativas de ν , utilizamos as equações de escala de tamanho finito para os zeros da MGF,

$$\Im\{x_c(L)\} = B_1 L^{-1/\nu} (1 + B_2 L^{-\omega_1} + B_3 L^{-\omega_2} + B_4 L^{-\omega_\nu}), \quad (9.9)$$

e as derivadas das grandezas termodinâmicas U_i e $\ln \langle |m|^i \rangle$,

$$\mathcal{O}_{\text{máx}}(L) = A_1 L^{1/\nu} (1 + A_2 L^{-\omega_1} + A_3 L^{-\omega_2} + A_4 L^{-\omega_\nu}), \quad (9.10)$$

onde $\omega_1 = 0.83$, $\omega_2 = 4$ e $\omega_\nu = 1.6$ [12] são os expoentes dos termos de correções. Note que os zeros da MGF escalam com $L^{-1/\nu}$ e as grandezas termodinâmicas escalam $L^{1/\nu}$.

As regressões das grandezas são feitas usando o seguinte procedimento: fixe um valor de ν , faça a regressão usando o método dos mínimos quadrados e calcule χ^2 [55]. Refaça esse procedimento até encontrar o valor de ν para o qual χ^2 é mínimo. Apesar de parecer pouco convencional, com essa abordagem obtemos um valor de ν que de fato lineariza a regressão, mas com esse método não obtemos o erro para o valor de ν . Para corrigir isso e obtermos o valor de $\nu \pm \Delta\nu$, consideramos para cada grandeza 5 regressões feitas utilizando diferentes tamanhos de rede. Mais especificamente, fizemos 5 regressões utilizando os intervalos $L_1 = 24, \dots, 256$, $L_2 = 32, \dots, 256$, $L_3 = 48, \dots, 256$, $L_4 = 64, \dots, 256$ e $L_5 = 80, \dots, 256$.

Com as diversas estimativas de ν , utilizamos o método de *jackknife* [21] para obter o valor de $\nu = 0.628(4)$, o qual é condizente com o valor esperado de $\nu = 0.629912(86)$ [12]. Um gráfico típico das regressões pode ser visto nas figuras 25 e 26.

Com a estimativa do valor de ν , usamos a seguinte relação de escala de tamanho finito para obtermos T_c ,

$$T_c(L) = T_c + C_0 L^{-1/\nu} (1 + C_1 L^{-\omega_1} + C_2 L^{-\omega_2} + C_3 L^{-\omega_\nu}), \quad (9.11)$$

onde $\omega_1 = 0.83$, $\omega_2 = 4$ e $\omega_\nu = 1.6$ [12]. Da mesma forma que foi feito para o ν , utilizamos intervalos de L diferentes para obter diversas estimativas de T_c e utilizamos o método de *jackknife* para obter o seu valor médio. Com isso, encontramos o valor de $T_c = 4.511535(7)$, resultado condizente com o valor esperado de $T_c = 4.511524$ [12]. A figura 27, mostra uma regressão típica de cada grandeza considerada. Note que o calor específico não foi considerado.

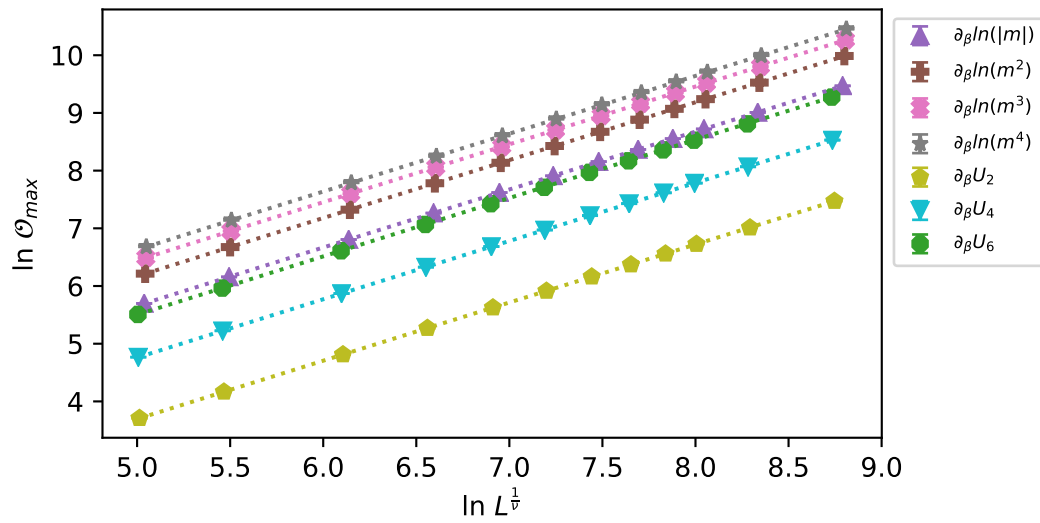


Figura 25 – Regressão das grandezas termodinâmicas para obter o valor de ν , onde utilizamos todos os tamanhos de rede L .

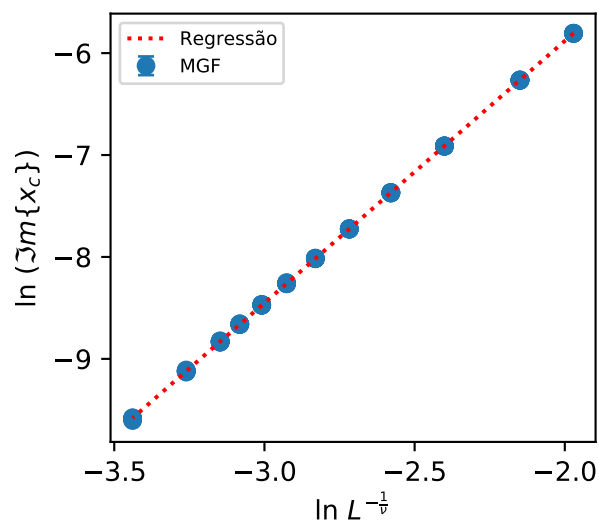


Figura 26 – Regressão para obter ν utilizando os zeros da MGF, onde consideramos todos os tamanhos de rede L .

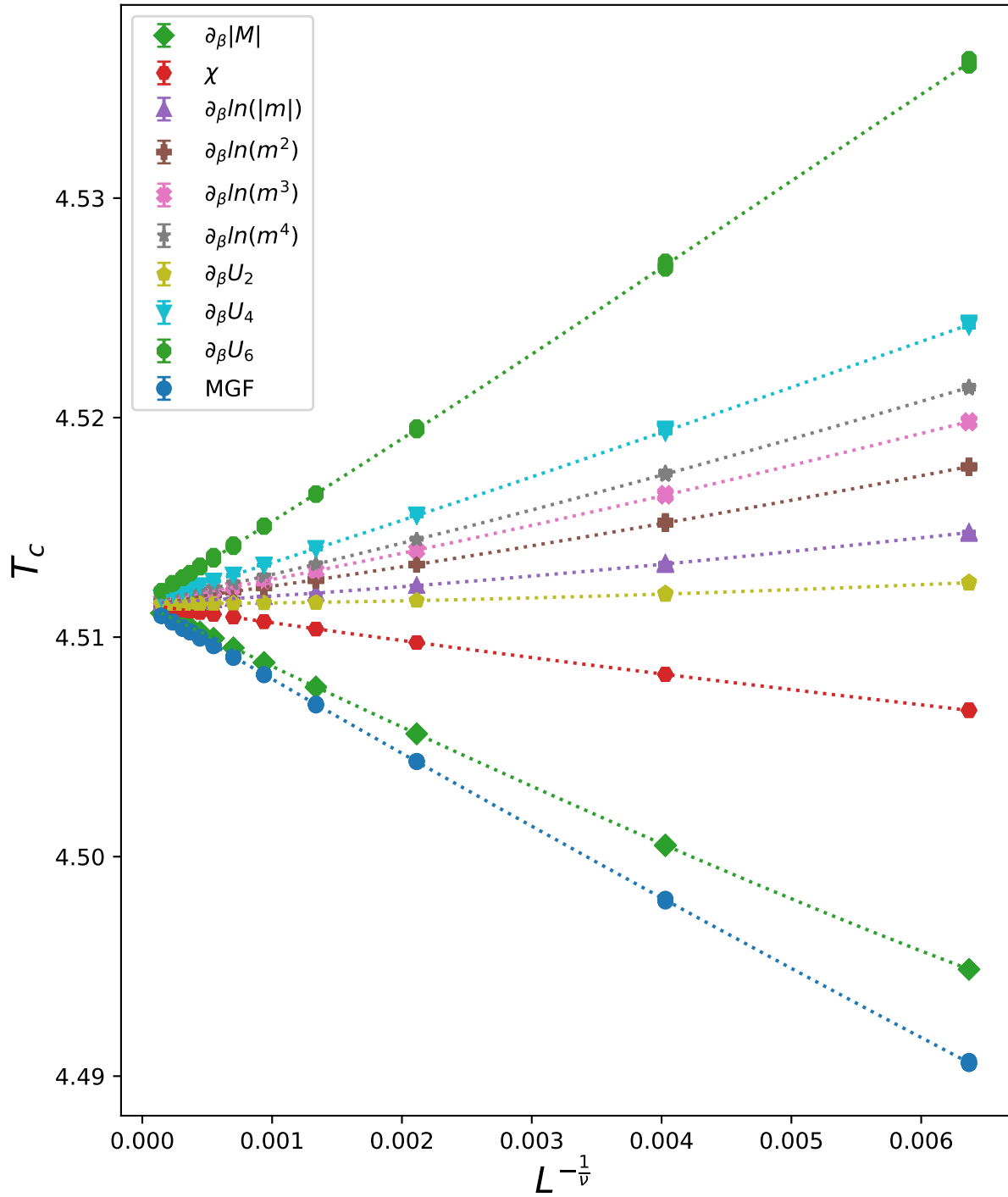


Figura 27 – Regressão linear para obter T_c para o modelo de Ising 3D, onde consideramos termos de correção dados pelas equações 9.9 e 9.11. O valor encontrado foi de $T_c = 4.511497(2)$, condizente com o esperado de $T_c = 4.511524$ [12].

Um ponto importante para obter os valores de T_c foi desconsiderar os valores obtidos para C_v . Isso foi necessário por causa da limitação da técnica de repesagem do histograma simples. Como os valores de $T_c(L)$ nos quais o máximo de C_v ocorre estão fora do limite de validade do método de repesagem, eles não devem ser considerados para análise. A figura 28 mostra o valor médio de $T_c(L)$ para cada grandeza. Observe que o calor específico e outras grandezas perto dele, como os zeros da MGF, tem barras de erros grandes. Desta forma, optamos por desconsiderar os valores de C_v na análise, mas utilizamos um truque para ainda obter estimativas para os zeros da MGF.

Considerando a técnica de repesagem de histograma simples, a distância que podemos nos afastar da temperatura simulada é de $\pm\Delta T = \sqrt{\frac{T_o^2}{C_v(T_o)}}$ [21]. Segundo [21], em alguns casos é possível estender os resultados até $\pm 2\Delta T$. Desta forma, ao analisarmos os zeros da MGF, consideramos somente os valores que não tenham ultrapassado o limite $T_c \pm \Delta T$. Isso leva a descartar muitas medidas, principalmente em redes maiores. Essas considerações foram feitas nas regressões apresentadas anteriormente para obter ν e T_c .

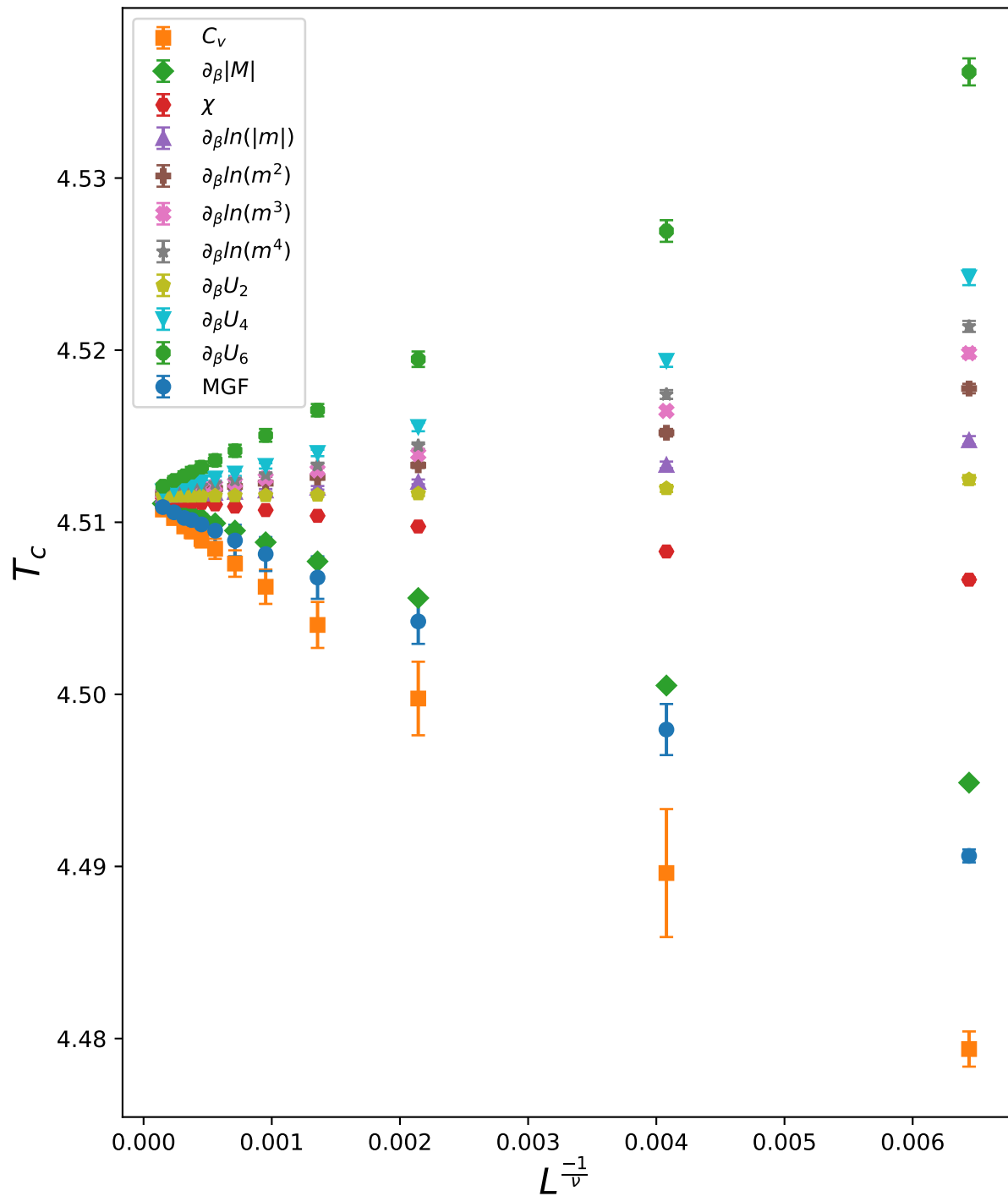


Figura 28 – Valor médio de $T_c(L)$ indicado pelos pontos de máximo das grandezas termodinâmicas, onde vemos que o calor específico e os zeros da MGF possuem barras de erro muito maiores que as outras grandezas. Isto acontece devido a limitação da técnica de repesagem do histograma simples.

9.4 Comparativo entre os zeros da MGF e o método dos cumulantes

No capítulo 6, mostramos a relação entre os zeros da MGF e as não analiticidades da CGF. Mais especificamente, vimos que o método dos cumulantes estima a posição do zero dominante dos zeros da MGF sem a necessidade de resolver nenhum polinômio. Porém, apresentamos dois problemas com o método dos cumulantes, um problema de precisão numérica em temperaturas distantes de T_c e a ausência do algoritmo de convergência. Nas próximas seções, iremos corrigir esses problemas e mostrar que o método dos cumulantes e os zeros da MGF conseguem obter as mesmas estimativas para a temperatura crítica e para os expoentes críticos. Além disso, mostraremos que, ao usarmos os zeros da MGF, é possível usar outros zeros além do zero dominante para estimarmos os expoentes críticos. Desta forma, os zeros da MGF ainda possuem certa vantagem sobre o método dos cumulantes, já que o método dos cumulantes se limita a encontrar o zero dominante e o expoente crítico relacionado a ele.

9.4.1 Simulações computacionais e o cálculo dos cumulantes

Os resultados que serão apresentados na próxima seção foram feitos usando o modelo de Ising em uma rede quadrada com $J > 0$, onde foram feitas 10 simulações com $T = 2.2755$ e $H = 0$ para cada tamanho de rede $L = 60, 80, 100, 120, 140$. Desta forma, ao usarmos o método de repesagem de histograma simples, como na seção 9.3.2, conseguimos usar os momentos e os cumulantes da energia e da magnetização para estudar a transição de fase descontínua ($T < T_c, H = 0$) e contínua ($T = T_c$).

Como foi discutido anteriormente no capítulo 6, obtemos os cumulantes através da sua relação com os momentos dada por,

$$k_n = m_n - \sum_{j=1}^{n-1} \binom{n-1}{j-1} k_j m_{n-j}, \quad (9.12)$$

onde m_n e k_n são respectivamente o n -ésimo momento e o n -ésimo cumulante. Desta forma, escolhemos o programa Mathematica[®] [37] para fazer os cálculos dos cumulantes, já que conseguimos controlar a precisão numérica mais facilmente e a relação entre os momentos e cumulantes já está implementada.

Como os cumulantes apresentaram problemas de precisão numéricas para temperaturas distantes de T_c e para valores de n altos, escolhemos utilizar 212 dígitos de precisão em todas os cálculos feitos no Mathematica[®] [37]. Além disso, só consideramos cumulantes até a ordem $n = 13$, para valores maiores o programa apresentou certas instabilidades para encontrar o zero dominante.

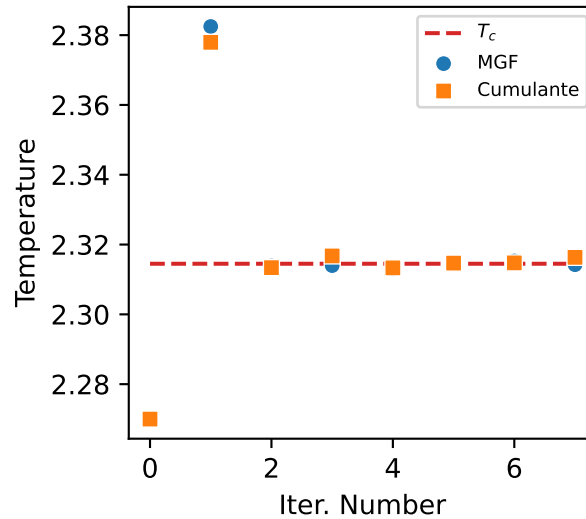


Figura 29 – Processo de convergência para os zeros da MGF e o método dos cumulantes, onde consideramos uma rede de tamanho $L = 24$ e iniciamos o algoritmo em $T_o = 2.27$. Note que ambos os métodos convergem para temperaturas próximas à temperatura crítica indicada pelos zeros de Fisher de $T_c = 2.3016$. Para obter os zeros de Fisher, utilizamos a densidade de estados exata [25].

9.4.2 O algoritmo de convergência e o método dos cumulantes

Após resolver o problema de precisão numérica do método dos cumulantes usando o Mathematica® [37], vamos mostrar a importância de utilizar o algoritmo de convergência em simulações computacionais. Como exemplo de uso do algoritmo de convergência, mostramos na figura 29 o processo de convergência para ambos os métodos partindo da temperatura inicial $T_o = 2.27$. Como pode ser visto, ao utilizarmos somente um único passo do algoritmo, como é feito pelos autores do método dos cumulantes [47], obtemos uma estimativa errada para $T_c(L) \approx 2.38$. A estimativa correta só é obtida ao continuarmos fazendo a iteração por pelo menos mais 2 passos. Desta forma, vemos que ao estimarmos os momentos e cumulantes usando simulações computacionais como as de Monte Carlo, temos que utilizar o algoritmo de convergência em ambos os métodos para obtermos estimativas corretas.

9.4.3 Estimando a temperatura crítica e os expoentes críticos

Ao aplicarmos de forma apropriada o método dos cumulantes, usando uma precisão maior para os cálculos e também o algoritmo de convergência, conseguimos comparar seus resultados com os dos zeros da MGF. Desta forma, obtemos $T_c(L)$ e os zeros dominantes da MGF da magnetização $w_c(L)$ e da MGF da energia $y_c(L)$ para cada um dos métodos fazendo o seguinte procedimento: calcule os momentos e cumulantes da energia em uma temperatura inicial qualquer e utilize o algoritmo de convergência para estimar $T_c(L)$ e $y_c(L)$. Em seguida, para obter $w_c(L)$, calcule os momentos e cumulantes da magnetização

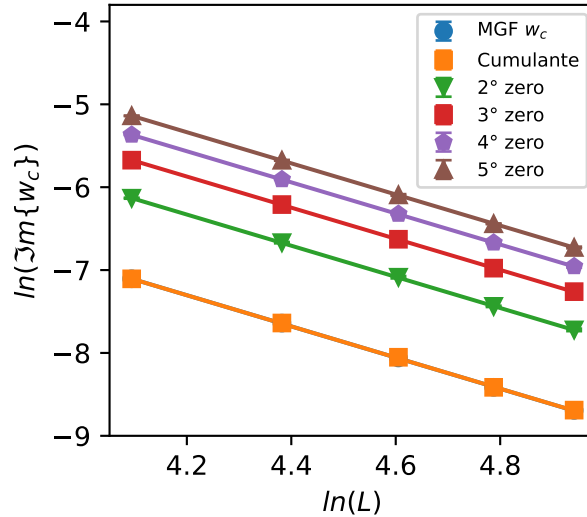


Figura 30 – Regressão para estimar o expoente B/ν , onde consideramos o zero dominante $w_c(L)$ estimados pelo método dos zeros da MGF e pelo método dos cumulantes. Note que ambos estimam os mesmos valores de $w_c(L)$. Além disso, também consideramos a escala de mais 4 zeros além do zero dominante, vide discussão na seção 9.4.4. As estimativas obtidas para B/ν de todos os zeros considerados estão na tabela 5.

em $T = T_c(L)$ e $H = 0$. Com estes valores obtenha T_c , ν e β/ν , usando as seguintes equações de escala de tamanho finito,

$$\ln \mathfrak{S}m\{y_c(L)\} \sim b - \frac{1}{\nu} \ln(L), \quad (9.13)$$

$$\ln \mathfrak{S}m\{w_c(L)\} \sim c + \left(\frac{B}{\nu} - d\right) \ln(L), \quad (9.14)$$

e

$$T_c(L) \sim T_c + aL^{-1/\nu}. \quad (9.15)$$

Usando o procedimento descrito, obtemos como resultados para os zeros da MGF $\nu = 0.989(9)$, $T_c = 2.2684(8)$ e $B/\nu = 0.119(6)$, e para o método dos cumulantes $\nu = 0.99(1)$, $T_c = 2.268(1)$ e $B/\nu = 0.120(9)$. Como pode ser visto, os dois métodos obtêm resultados próximos aos exatos de $\nu = 1$, $T_c = 2.2691$ e $B/\nu = 0.125$. A figura 30 mostra uma típica regressão linear feita para estimar o expoente β/ν .

9.4.4 Além do zero dominante

Como foi visto, os dois métodos obtêm resultados estatisticamente equivalentes. Porém, o método dos cumulantes tem a aparente vantagem de obter diretamente o zero dominante. Apesar de ser contraditório, isto não é necessariamente uma vantagem. No capítulo 5, vimos que o polinômio da MGF e suas raízes escalam como se fossem uma

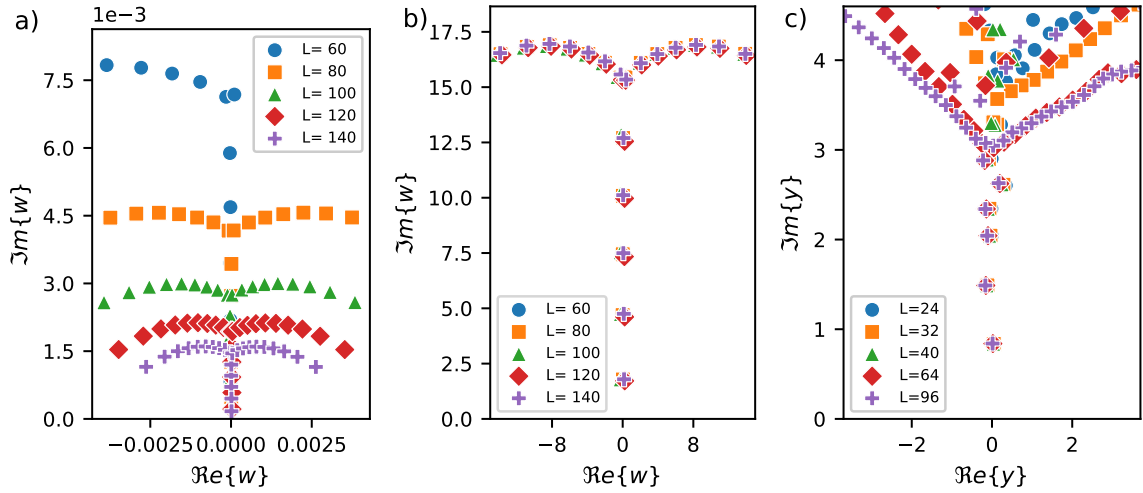


Figura 31 – Mapa de zeros para a MGF da magnetização *a)* sem escala e *b)* com a escala, onde consideramos $k_{\max} = 50$. Os momentos da magnetização foram obtidos para $H = 0$ e $T = T_c(L)$, onde $T_c(L)$ é indicado pelos zeros da MGF da energia. *c)* Mapa de zeros de Fisher convertidos para o plano dos momentos usando a equação $y_i = \ln z_i/\varepsilon + \beta_o$, com $\beta_o = \beta_c(L)$. Para encontrar os zeros de Fisher, usamos a densidade de estados exata [25]. Note que a escala dos zeros em *c)* degrada à medida que nos afastamos do ponto $(0, 0)$.

grandeza termodinâmica, i.e., próximo a transição de fase o polinômio e suas raízes são independentes do tamanho do sistema. Apesar de termos focado na escala do zero dominante, as contas indicam que a escala é válida para todas as raízes. De fato, nos observamos que mais zeros além do zero dominante seguem uma relação de escala, como pode ser visto na figura 31b-c. Sendo assim, podemos utilizar as equações 9.13 e 9.14 em outros zeros além do zero dominante e obter mais estimativas para os expoentes críticos. Note que isso só é possível ao usarmos os zeros da MGF, pois nele temos a liberdade de estimar mais zeros além do zero dominante.

A tabela 5 mostra as estimativas obtidas para os expoentes críticos usando os 5 primeiros zeros mais próximos do ponto $(0, 0)$. Como pode ser visto, todos os zeros obtêm estimativas próximas das exatas de $\nu = 1$ e $\beta/\nu = 0.125$. Desta forma, ao utilizarmos o método de *jackknife* para combinar as diversas estimativas dos expoentes, conseguimos obter uma estimativa melhorada de $\beta/\nu = 0.1215(15)$ e $\nu = 0.9978(35)$ ($g(E)$ exata). Uma regressão típica para estimar o expoente β/ν pode ser vista na figura 30. Por uma razão que será explicada a seguir, nos só consideramos a escala dos zeros da MGF da energia quando utilizamos a densidade de estados exata [25].

Como foi visto na figura 31c, ao convertemos os zeros de Fisher para os zeros da MGF, vemos que pelo menos 5 zeros seguem corretamente a relação de escala. Porém, o mesmo não ocorre ao usarmos simulações de Monte Carlo para obter os momentos da energia, como pode ser visto na figura 32 somente o zero dominante escala de forma

Zeros	β/ν	ν ($g(E)$ exata)
1°	0.119(6)	0.9943
2°	0.1204(53)	1.0008
3°	0.1221(44)	1.0
4°	0.1236(28)	1.0013
5°	0.1222(38)	0.993

Tabela 5 – Tabela com os resultados obtido para os expoentes críticos ao considerarmos a relação de escala dos 5 primeiros zeros mais próximos de $(0, 0)$, onde o primeiro zero é o zero dominante. Ao utilizarmos as 5 estimativas e o método de *jackknife* encontramos $\beta/\nu = 0.1215(15)$ e $\nu = 0.9978(35)$. Note que ao combinar as estimativas, conseguimos resultados mais próximos dos exatos, $\nu = 1$ e $\beta/\nu = 0.125$, do que seria obtido usando somente o zero dominante.

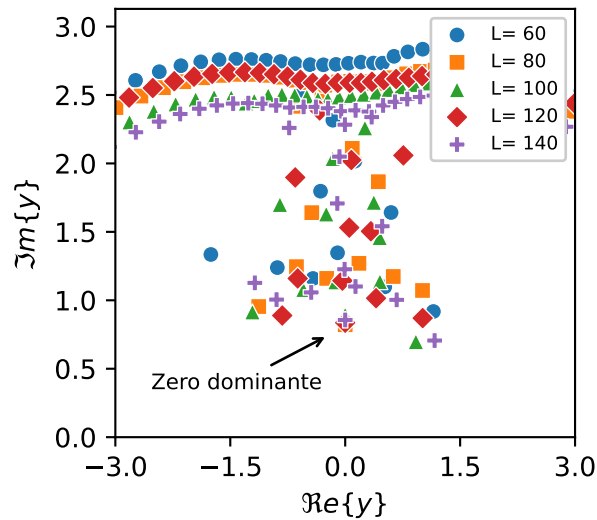


Figura 32 – Mapa de zeros da MGF da energia, onde os momentos foram estimados utilizando uma simulação de Monte Carlo. Note que somente o zero dominante segue corretamente a relação de escala.

correta. Isso ocorre porque é difícil para o método de Monte Carlo estimar a distribuição de probabilidade exata, já que o método amostra somente os estados mais relevantes em torno da temperatura simulada. Uma alternativa para obter resultados mais próximos do exato seria aumentar o número de passos de Monte Carlo. De fato, com 10^9 passos de Monte Carlo e utilizando o algoritmo de Wolff, conseguimos observar um segundo zero escalando de forma correta em uma rede pequena de tamanho $L = 24$.

10 Conclusão

No início da tese, desenvolvemos conceitos básicos sobre a física por trás das transições de fase, discutimos as primeiras ideias da hipótese de escala de Widom e desenvolvemos os blocos de spin de Kadanoff. Mais especificamente, mostramos que a divergência do comprimento de correlação, em transições de fase contínuas, faz com que as grandezas termodinâmicas sigam leis de escala. Vimos também que este comportamento de escala é corroborado por experimentos e são muito úteis em análises de sistemas finitos. Outra ideia crucial apresentada é a relação entre a não analiticidade da energia livre f e os pontos de transições de fase. Mostramos que as divergências e descontinuidades de grandezas termodinâmicas, características de pontos onde transições de fase ocorrem, estão relacionadas diretamente com a não analiticidade da energia livre.

Na sequência, mostramos que os zeros de Fisher capturam a informação sobre a não analiticidade de f quando o zero dominante toca o eixo real positivo no limite termodinâmico, sendo possível identificar e estudar pontos de transições de fase utilizando-os. Apesar disso, vimos que o método dos zeros de Fisher é difícil de ser aplicado, pois temos que obter a densidade de estados, uma grandeza difícil de ser estimada, e resolver um polinômio de grau elevadíssimo cujo os valores dos coeficientes possuem diversas ordens de grandezas. A necessidade de se encontrar a densidade de estados e resolver um polinômio difícil até mesmo para algoritmos no estado da arte, reduzem muito as possíveis aplicações deste método. Sendo assim, introduzimos os zeros EPD, os zeros da MGF e o método dos cumulantes, os quais são mais fáceis de serem aplicados e também conseguem estimar a temperatura crítica e os expoentes críticos.

No decorrer da tese, comparamos os resultados e características de cada um dos métodos apresentados com os zeros da MGF. Como foi mostrado nos resultados, a grande vantagem dos zeros da MGF sobre os zeros EPD é a forma como diminuímos o grau do polinômio. A redução no grau do polinômio dos zeros da MGF é feito ao truncarmos uma série de potências e não dependem do formato da distribuição de probabilidade, como acontece com os zeros EPD. Isto se mostrou uma grande vantagem para os zeros da MGF ao analisar o modelo de Potts de 6-estados, onde os zeros EPD apresentaram uma enorme dificuldade em reduzir o grau do polinômio. Nesta situação, o polinômio dos zeros EPD possui grau na ordem de 10^3 a 10^4 , enquanto o polinômio dos zeros da MGF possui um polinômio de grau 220, sendo que ambos os métodos obtêm resultados equivalentes. Essa redução no grau do polinômio faz com que os zeros da MGF sejam computacionalmente mais eficientes, gastando menos recursos e tempo computacional. De fato, os zeros da MGF se mostraram pelo menos 100 vezes mais rápidos que os zeros EPD, quando os métodos foram aplicados ao modelo de Ising 2D e ao modelo de Potts com 6-estados.

A diferença entre os métodos se mostrou ainda mais notável quando aplicamos ao modelo de Ising 3D, onde foram considerados redes grandes como $L = 256$. Nestas condições o sistema possui muitos estados acessíveis, o que aumenta drasticamente o grau do polinômio dos zeros EPD. O efeito de ter tantos estados é tão dramático que o grau do polinômio atinge aproximadamente 72.000. Porém, ao utilizarmos os zeros da MGF este problema é completamente resolvido, sendo necessário somente um polinômio de grau 100 para as análises. Outro ponto de destaque foi a comparação entre o tempo computacional dos dois métodos, estimamos que os zeros EPD levariam 326 dias para completar o processo de convergência em todas as redes consideradas enquanto os zeros da MGF gastariam aproximadamente algo em torno de 4h. Com uma diferença tão drástica entre os tempos computacionais, é fácil de ver a superioridade do método dos zeros da MGF em relação aos zeros EPD.

Por fim, com base na relação entre os zeros da MGF e o método dos cumulantes, mostramos que é necessário utilizar o algoritmo de convergência no método dos cumulantes. Sem o algoritmo de convergência o método dos cumulantes pode apresentar resultados errados ou imprecisos. Desta forma, conseguimos utilizar de forma correta os dois métodos e mostrar que ambos conseguem obter resultados estatisticamente equivalentes. Além disso, mostramos que mais zeros além do zero dominante seguem a relação de escala e podem ser utilizados para obter estimativas para os expoentes críticos. Isto se mostrou uma vantagem para o método dos zeros da MGF, já que o método dos cumulantes só consegue obter o zero dominante. Independente dessa vantagem dos zeros da MGF, ambos os métodos apresentam um grande avanço para os zeros da função de partição.

De forma geral, a grande diferença entre os métodos apresentados durante a tese estão nos coeficientes do polinômio. Cada avanço feito foi graças a uma modificação nos coeficientes do polinômio, tornando-os mais simples de serem encontrados e facilitando a implementação do método. Por exemplo, os zeros de Fisher não podiam ser aplicados de forma ampla, pois a densidade de estados é difícil de ser obtida. Com os zeros EPD esse problema é resolvido, pois os coeficientes são dados pela distribuição de probabilidade da energia não normalizada, o que possibilita uma redução no grau do polinômio e simplifica o processo de encontrar os coeficientes. Os zeros da MGF apresentam um avanço ainda maior, com os coeficientes do polinômio sendo dados por grandezas termodinâmicas, o método tem potencial para ser utilizado em simulações, teoria e experimentos. Isto diversifica muito as possíveis aplicações dos zeros da MGF. Como exemplo, este método pode ser aplicado em sistemas que possuem energia contínuas sem a necessidade de discretizá-las.

Uma pequena amostra dos avanços feitos pelo método dos zeros da MGF pode ser vista nas seções 5.8, 5.5 e 9.4, onde encontramos de forma simples a relação de escala dos zeros da MGF, estendemos o método para encontrar transições de fase na presença de campos externos e resolvemos alguns problemas com o método dos cumulantes. Sendo

assim, considerando que o método dos zeros da MGF é computacionalmente eficiente, gera os mesmos resultados que os zeros EPD e pode ser aplicado em uma gama maior de sistemas que não são acessíveis aos zeros EPD ou aos zeros de Fisher, concluímos que este novo método marca um avanço significativo para o método dos zeros da função de partição e na forma como identificamos pontos críticos.

Referências

- [1] Yang, C. N. e T. D. Lee: *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation*. Phys. Rev., 87:404–409, Aug 1952. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.404>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- [2] Yang, C. N. e T. D. Lee: *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model*. Phys. Rev., 87:410–419, Aug 1952. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.410>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- [3] Bena, Ioana, Michel Droz e Adam Lipowski: *Statistical mechanics of equilibrium and nonequilibrium phase transitions: the Yang–Lee formalism*. International Journal of Modern Physics B, 19(29):4269–4329, Nov 2005, ISSN 1793-6578. <http://dx.doi.org/10.1142/S0217979205032759>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- [4] Peng, Xinhua, Hui Zhou, Bo Bo Wei, Jiangyu Cui, Jiangfeng Du e Ren Bao Liu: *Experimental Observation of Lee-Yang Zeros*. Phys. Rev. Lett., 114:010601, Jan 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.010601>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- [5] Fisher, M. E.: *The Nature of Critical Points*. Em Brittin, W.E. (editor): *Lectures in Theoretical Physics*, volume 7C, capítulo 1, páginas 1–159. University of Colorado Press, Boulder, 1965. Citado 3 vezes nas páginas 11, 25 e 27.
- [6] Costa, B.V., L.A.S. Mól e J.C.S. Rocha: *Energy probability distribution zeros: A route to study phase transitions*. Computer Physics Communications, 216:77 – 83, 2017, ISSN 0010-4655. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517300796>. Citado 6 vezes nas páginas 11, 30, 32, 33, 69 e 70.
- [7] Rodrigues, R. G. M., B. V. Costa e L. A. S. Mól: *Moment-generating function zeros in the study of phase transitions*. Phys. Rev. E, 104:064103, Dec 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.104.064103>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 37.
- [8] Jaeger, Gregg: *The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution*. Archive for History of Exact Sciences, 53(1):51–81, May 1998, ISSN 1432-0657. <https://doi.org/10.1007/s004070050021>. Citado na página 13.
- [9] Hohenberg, P.C. e A.P. Krekhov: *An introduction to the Ginzburg–Landau theory of phase transitions and nonequilibrium patterns*. Physics Reports, 572:1–42,

- 2015, ISSN 0370-1573. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157315000514>, An introduction to the Ginzburg–Landau theory of phase transitions and nonequilibrium patterns. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.
- [10] Landau, David P. e Kurt Binder: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 4^a edição, 2014. Citado na página 14.
- [11] Salinas, S.R.A.: *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997, ISBN 9788531403866. <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.
- [12] Ferrenberg, Alan M., Jiahao Xu e David P. Landau: *Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model*. Phys. Rev. E, 97:043301, Apr 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.043301>. Citado 5 vezes nas páginas 15, 73, 75, 77 e 79.
- [13] Silva Mól, Lucas Alvares da: *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, 2009. Citado na página 15.
- [14] Wilson, Kenneth G.: *The renormalization group and critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., 55:583–600, Jul 1983. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.583>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 15.
- [15] Widow, B.: *Equation of state in the neighborhood of the critical point*. The Journal of Chemical Physics, 43(11):3898–3905, 1965, ISSN 00219606. Citado na página 15.
- [16] Kadanoff, Leo P.: *Scaling laws for ising models near T_c* . Physics Physique Fizika, 2:263–272, Jun 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.2.263>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.
- [17] Fisher, Michael E.: *Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics*. Rev. Mod. Phys., 70:653–681, Apr 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.653>. Citado na página 16.
- [18] Goldenfeld, Nigel: *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press, 2018. Citado na página 16.
- [19] Stanley, H.E.: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, 1987, ISBN 9780195053166. <https://books.google.com.br/books?id=C3BzcUxoaNkC>. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 21.

- [20] Ho, John T. e J. D. Litster: *Magnetic Equation of State of CrBr₃ Near the Critical Point*. Phys. Rev. Lett., 22:603–606, Mar 1969. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.22.603>. Citado na página 20.
- [21] Newman, M.E.J. e G.T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, 1999, ISBN 9780198517979. <https://books.google.de/books?id=J5aLdDN4uFwC>. Citado 6 vezes nas páginas 21, 58, 59, 61, 77 e 80.
- [22] Privman, V: *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. WORLD SCIENTIFIC, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 70.
- [23] Keesman, Rick, Jules Lamers, R A Duine e G T Barkema: *Finite-size scaling at infinite-order phase transitions*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2016(9):093201, sep 2016. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2016/09/093201>. Citado na página 25.
- [24] Van Himbergen, Johannes E. e Sudip Chakravarty: *Helicity modulus and specific heat of classical XY model in two dimensions*. Phys. Rev. B, 23:359–361, Jan 1981. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.359>. Citado na página 25.
- [25] Beale, Paul D.: *Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model*. Phys. Rev. Lett., 76:78–81, Jan 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.78>. Citado 9 vezes nas páginas 27, 28, 34, 35, 43, 44, 46, 83 e 85.
- [26] Dijk, Wytse van, Calvin Lobo, Allison MacDonald e Rajat K. Bhaduri: *Fisher zeros of a unitary Bose gas*. Canadian Journal of Physics, 93(8):830–835, 2015. <https://doi.org/10.1139/cjp-2014-0585>. Citado na página 27.
- [27] Krasnytska, M, B Berche, Yu Holovatch e R Kenna: *Partition function zeros for the Ising model on complete graphs and on annealed scale-free networks*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 49(13):135001, feb 2016. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/49/13/135001>. Citado na página 27.
- [28] Rocha, Julio C.S., Stefan Schnabel, David P. Landau e Michael Bachmann: *Leading Fisher Partition Function Zeros as Indicators of Structural Transitions in Macromolecules*. Physics Procedia, 57:94–98, 2014, ISSN 1875-3892. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1875389214002843>, Proceedings of the 27th Workshop on Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics (CSP2014). Citado 2 vezes nas páginas 27 e 32.
- [29] Fonseca, Jacyana S. M., Leandro G. Rizzi e Nelson A. Alves: *Stripe-tetragonal phase transition in the two-dimensional Ising model with dipole interactions: Partition function zeros approach*. Phys. Rev. E, 86:011103, Jul 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.011103>. Citado na página 27.

- [30] Fonseca, Jacyana Saraiva Marthes: *Zeros de Fisher e aspectos críticos do modelo de Ising dipolar*. Dissertação, Ribeirão Preto: Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Brasil, 2011. Citado na página 27.
- [31] Heyl, M., A. Polkovnikov e S. Kehrein: *Dynamical Quantum Phase Transitions in the Transverse-Field Ising Model*. Phys. Rev. Lett., 110:135704, Mar 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.135704>. Citado na página 27.
- [32] Brandner, Kay, Ville F. Maisi, Jukka P. Pekola, Juan P. Garrahan e Christian Flindt: *Experimental Determination of Dynamical Lee-Yang Zeros*. Phys. Rev. Lett., 118:180601, May 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.180601>. Citado na página 27.
- [33] Krishnan, Abijith, Markus Schmitt, Roderich Moessner e Markus Heyl: *Measuring complex-partition-function zeros of Ising models in quantum simulators*. Phys. Rev. A, 100:022125, Aug 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.100.022125>. Citado na página 27.
- [34] Rocha, Julio C. S., Stefan Schnabel, David P. Landau e Michael Bachmann: *Identifying transitions in finite systems by means of partition function zeros and microcanonical inflection-point analysis: A comparison for elastic flexible polymers*. Phys. Rev. E, 90:022601, Aug 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.022601>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 32.
- [35] Soares, M. G.: *Cálculo em uma Variável Complexa I*. Coleção matemática universitária. IMPA, 2012, ISBN 9788524401442. Citado na página 29.
- [36] Conway, J.B.: *Functions of One Complex Variable*. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, 1995, ISBN 9781461208174. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 53.
- [37] Inc., Wolfram Research,: *Mathematica, Version 12.2*. <https://www.wolfram.com/mathematica>, Champaign, IL, 2020. Citado 4 vezes nas páginas 30, 56, 82 e 83.
- [38] Wilkinson, James H: *The perfidious polynomial*. Studies in numerical analysis, 24:1–28, 1984. Citado na página 30.
- [39] Lima, A. B., L. A. S. Mól e B. V. Costa: *The Fully Frustrated XY Model Revisited: A New Universality Class*. Journal of Statistical Physics, 175(5):960–971, jun 2019, ISSN 0022-4715. <http://link.springer.com/10.1007/s10955-019-02271-x>. Citado na página 32.
- [40] Costa, B. V., L. A.S. Mól e J. C.S. Rocha: *A New Algorithm to Study the Critical Behavior of Topological Phase Transitions*. Brazilian Journal of Physics, 49(2):271–276, 2019, ISSN 16784448. <https://link.springer.com/article/10.1007/s13538-019-00636-x>. Citado na página 32.

- [41] Heyde, C. C.: *Some Remarks On The Moment Problem (I)*. The Quarterly Journal of Mathematics, 14(1):91–96, janeiro 1963, ISSN 0033-5606. <https://doi.org/10.1093/qmath/14.1.91>. Citado na página 37.
- [42] Deger, Aydin e Christian Flindt: *Lee-Yang theory of the Curie-Weiss model and its rare fluctuations*. Phys. Rev. Research, 2:033009, Jul 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.033009>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 48 e 53.
- [43] Deger, Aydin, Fredrik Brange e Christian Flindt: *Lee-Yang theory, high cumulants, and large-deviation statistics of the magnetization in the Ising model*. Phys. Rev. B, 102:174418, Nov 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.174418>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 48 e 53.
- [44] Smith, Peter J.: *A Recursive Formulation of the Old Problem of Obtaining Moments from Cumulants and Vice Versa*. The American Statistician, 49(2):217–218, 1995. <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00031305.1995.10476146>. Citado na página 51.
- [45] Deger, Aydin, Kay Brandner e Christian Flindt: *Lee-Yang zeros and large-deviation statistics of a molecular zipper*. Phys. Rev. E, 97:012115, Jan 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.012115>. Citado na página 53.
- [46] Flindt, Christian e Juan P. Garrahan: *Trajectory Phase Transitions, Lee-Yang Zeros, and High-Order Cumulants in Full Counting Statistics*. Phys. Rev. Lett., 110:050601, Jan 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.050601>. Citado na página 53.
- [47] Deger, Aydin e Christian Flindt: *Determination of universal critical exponents using Lee-Yang theory*. Phys. Rev. Research, 1:023004, Sep 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.1.023004>. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 83.
- [48] Wolff, Ulli: *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*. Phys. Rev. Lett., 62:361–364, Jan 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>. Citado 2 vezes nas páginas 58 e 59.
- [49] Gould, Harvey e Jan Tobochnik: *Overcoming Critical Slowing Down*. Computers in Physics, 3(4):82–86, 1989. <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4822858>. Citado na página 59.
- [50] Onsager, Lars: *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*. Phys. Rev., 65:117–149, Feb 1944. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>. Citado na página 62.
- [51] Wu, F. Y.: *The Potts model*. Rev. Mod. Phys., 54:235–268, Jan 1982. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.235>. Citado na página 63.

- [52] Ferrenberg, Alan M. e Robert H. Swendsen: *Optimized Monte Carlo data analysis*. Phys. Rev. Lett., 63:1195–1198, Sep 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.1195>. Citado na página 65.
- [53] Lee, Jooyoung e J. M. Kosterlitz: *Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions*. Phys. Rev. B, 43:3265–3277, Feb 1991. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3265>. Citado na página 70.
- [54] Ferrenberg, Alan M. e D. P. Landau: *Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study*. Phys. Rev. B, 44:5081–5091, Sep 1991. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.5081>. Citado na página 74.
- [55] Press, William H., Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling e Brian P. Flannery: *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, USA, 3ª edição, 2007, ISBN 0521880688. Citado 2 vezes nas páginas 74 e 77.
- [56] Binder, Kurt: *Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 43(2):119–140, 1981. Citado na página 75.
- [57] Bini, Dario Andrea e Giuseppe Fiorentino: *Design, analysis, and implementation of a multiprecision polynomial rootfinder*. Numerical Algorithms, 23(2):127–173, Jun 2000, ISSN 1572-9265. <https://doi.org/10.1023/A:1019199917103>. Citado na página 76.
- [58] Bini, Dario A. e Leonardo Robol: *Solving secular and polynomial equations: A multiprecision algorithm*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 272:276–292, 2014, ISSN 0377-0427. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037704271300232X>. Citado na página 76.