

Alexandre de Aquino Soares

*Estudo computacional estático e dinâmico
do modelo clássico de Heisenberg
ferromagnético isotrópico*

Belo Horizonte, MG

18 de abril de 2011

Alexandre de Aquino Soares

*Estudo computacional estático e dinâmico
do modelo clássico de Heisenberg
ferromagnético isotrópico*

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador:
Bismarck Vaz da Costa

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Belo Horizonte, MG

18 de abril de 2011

A Deus.

Agradecimentos

A Deus, por ser a motivação e o possibilitador desta empreitada.

Ao orientador Bismarck Vaz da Costa, pelas idéias compartilhadas, pelos atalhos e pela amizade.

Ao colega Júlio Rocha pelas ajudas computacionais, teóricas e aleatórias na caminhada.

A minha família Anisete, Carlos e Leandro Soares pelo suporte financeiro, emocional, intelectual e espiritual.

Às bibliotecárias do Departamento de Física, em especial a Maria Clarice Batista e a Shirley Maciel pela facilitação na busca das informações e pela dedicação.

Ao professor Ronald Dickman pelas disciplinas ofertadas, em particular o curso Métodos de Simulação, que me possibilitou ver de maneira mais ampla a simulação computacional em Física.

Aos colegas de laboratório Lucas Mól, Marcelo Guimarães, Manassés Ferreira e Denis da Mata, pelo coleguismo e pelas suas colaborações diretas e indiretas a este trabalho.

Ao estatístico Maurício Lila pela discussão sobre *jackknife* e pela amizade de longa data.

Aos intercambistas Elias Machava e Sipho Uaeca pela oportunidade de aprender e ensinar sobre as ciências e a vida.

Ao Prof. Anderson Barbosa pelas recomendações e pelo apoio computacional.

Aos colegas e professores de pós graduação por proporcionarem um ambiente mais propício ao aprendizado e à troca de experiências.

A minha namorada Sheilla da Silva pela presença especial e participação na minha vida.

“Faz parte da natureza da evidência passar despercebida.”

Jean Paulhan

Apresentação

A proposta inicial deste trabalho era estudar o modelo de Heisenberg estática e dinamicamente (1) com técnicas recentes de simulação. O desafio era ao mesmo tempo uma oportunidade de aprender técnicas e conceitos do *métier* através de uma linha de pesquisa fundamental e com tradição. Eventualmente o trabalho poderia ser ampliado através de novas frentes de investigação.

As disciplinas cursadas ao longo do Mestrado foram quatro obrigatórias (mecânica clássica, eletromagnetismo, mecânica quântica e mecânica estatística) e quatro optativas (modelagem quantitativa em Biologia teórica, espectroscopia laser, estado sólido e métodos de simulação).

Após cursar as disciplinas obrigatórias de pós-graduação iniciamos o estudo da parte estática do modelo com o algoritmo de Metropolis não-vetorizado. Optei pela utilização de cadernos de laboratório que servem como registro detalhado dos procedimentos e documento da pesquisa (2). Cada um deles foi dividido em: prazos, notas, arranjo experimental, pesquisa de apoio, dados, resultados, reflexões e contatos.

Logo depois dos primeiros resultados o Prof. Bismarck me ensinou os rudimentos da técnica *jackknife*, que seria essencial na obtenção de expoentes críticos sem um vício de primeira ordem ou mais. Nesta fase também foi feito o estudo esmerado da bibliografia pertinente a simulação Monte Carlo a partir de um guia de Landau e Binder (3). Foram compreendidos vários conceitos e técnicas de interesse.

Dentre os artigos pesquisados, um revelou-se de importância especial na investigação estática: o trabalho de Chen e Landau (4) chamado “O comportamento crítico estático de modelos tridimensionais de Heisenberg: um estudo de Monte Carlo de alta resolução”. Não seria exagero afirmar que este foi a linha mestra da primeira etapa.

Foi realizado então um planejamento de todo o projeto baseado em técnicas de gerenciamento de projetos (5). Muitas alterações foram feitas na história do trabalho, em boa medida provocadas por um reviravolta na investigação dinâmica do modelo. O esqueleto do projeto foi estabelecido.

Enquanto o algoritmo de Metropolis rodava para todos os tamanhos de rede escolhidos, construí rotinas para os algoritmos de Metropolis, Super-relaxação e Wolff vetorizados. Estes seriam candidatos a aumentar o número de medidas independentes por tempo computacional e melhorar a estatística.

Estudei um guia de Fortran 90 (6) para programar bem na linguagem de interesse. Isto aprimorou a qualidade da programação, a otimização de implementações e a correção de erros. Além disso aprendi a usar comandos para posterior vetorização pelo compilador (7, 8) e bandeiras (*flags*) para otimizar a compilação.

Também foram usados programas comerciais em atividades paralelas à simulação. Um destaque especial é dado ao Mathematica, utilizado na elaboração de gráficos, na obtenção de expressões algébricas de cumulantes e de matrizes de rotação para o método Wolff, para alguns cálculos e para verificação independente de resultados numéricos obtidos no Fortran 90.

Verifiquei a possibilidade de paralelizar os códigos Fortran adicionalmente à vetorização. Estudei então a linguagem OpenMP, mas a partir de discussões com colegas de laboratório e com o Prof. Dr. Anderson Barbosa concluí que a paralelização trivial com as diferentes replicatas rodando ao mesmo tempo era superior a uma paralelização no código.

Algum tempo foi gasto na obtenção de expressões adequadas para uma implementação de multi-histogramas de última geração. Muitas sutilezas estiveram envolvidas neste processo, mas o resultado foi positivo.

Durante a análise dos dados estáticos percebi que ao invés de simplesmente usar o *jackknife* para obter as grandezas básicas sem viés, esta técnica poderia ser utilizada globalmente na obtenção das quantidades de interesse como os expoentes críticos e a temperatura de transição do modelo. Essa estratégia inédita permite maior segurança nas determinações. Infelizmente a precisão não foi maior por não ter usado tamanhos de rede comparáveis ou maiores que os de Chen e Landau.

Ao iniciar o estudo dinâmico, pouco antes do fim da análise estática, notei que não havia convergência das correlações temporais dos diferentes métodos. Descobri também que os estudos de difusão de spins do mesmo modelo, na versão unidimensional (9–12), eram conflitantes em função do tempo de simulação. O Prof. Bismarck fez a ponte entre os dois fenômenos e chamou a minha atenção para a qualidade desta questão, a saber: a discordância entre as interpretações de difusão anômala podia ter sua raiz nos próprios

algoritmos de dinâmica de spins. A partir daí investi tempo no exame deste problema.

Foi encontrado um padrão interessante para comparação dos resultados de um sistema caótico. Klemm e Luban encontraram expressões analíticas para a correlação spin-spin de um sistema exato de quatro spins, que avalizaram os métodos e serviram como parâmetro para a estatística.

Os resultados da investigação dinâmica foram levados a *Conference on Computational Physics* 2010 na Noruega e ao VII Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Física em Minas Gerais. Os trabalhos estáticos e dinâmicos serão submetidos a uma análise de mérito e se necessário devidamente completados para posterior apreciação da comunidade científica também em forma de artigo.

Durante a parte final deste trabalho o laboratório recebeu os intercambistas de Moçambique Elias Machava e Siphon Uaeca. Nesta ocasião tive a oportunidade de co-orientá-los em sistemas de equações diferenciais e simulação Monte Carlo para uso posterior em Química e Ciências Contábeis.

Minha expectativa é que esta dissertação sirva como uma referência de métodos para pesquisadores e estudantes, destaque a importância dos resultados obtidos e permita sua reprodutibilidade. Além disso espero que este trabalho demonstre à banca examinadora meu domínio de ferramentas de simulação e de Física e capacidade de execução de pesquisa fundamentada suficientes para a obtenção do grau de Mestre.

Resumo

Estudamos a energia, a magnetização e cumulantes na região de transição de fase do modelo de Heisenberg tridimensional isotrópico por Monte Carlo, usando o algoritmo de Metropolis. Na temperatura crítica T_c implementamos os algoritmos vetorizados de Metropolis, Metropolis hibridizado com Super-relaxação e de Wolff segundo a prescrição de Chen *et al.* (4). Escolhemos Metropolis:Super-relaxação 1:4 por ser o de maior número medidas independentes por segundo. Implementamos a técnica de multi-histogramas otimizada de Berau e Swendsen (13) para esse estudo. Obtivemos por escala de tamanho finito os expoentes críticos $\alpha = -0,0709 \pm 0,0099$, $\beta = 0,3499 \pm 0,0076$, $\gamma = 1,3880 \pm 0,060$ e $\nu = 0,6903 \pm 0,0034$, o inverso da temperatura crítica $K_c = 0,69314 \pm 0,00032$ (com $k_B = 1$), e o parâmetro universal cumulante de Binder para a rede infinita na temperatura crítica $U_{4B}^* = 0,62178 \pm 0,00049$ por meio de uma estratégia envolvendo o uso de *jackknife* para minimizar o vício. Os expoentes concordam com determinações experimentais, teóricas e simulacionais da literatura. Examinamos também as autocorrelações temporais de energia e de spin em redes unidimensionais (um sistema exato unidimensional $L = 4$ e um caótico $L = 18$), obtidas pelos métodos Runge-Kutta, Predictor-Corretor, Suzuki-Trotter e Forest-Ruth otimizado, todos de quarta ordem. Verificamos que o uso de precisão quádrupla, com passos da ordem de 10^{-6} , amostras da ordem de $N = 10^6$, e cadeias de spin longas pode ser suficiente para elucidar se esta difusão de spins é anômala ou não. As diferentes implementações dos algoritmos podem corresponder a diferentes operadores temporais no caso caótico.

Abstract

We studied the energy, the magnetization and cumulants of the three-dimensional isotropic Heisenberg model in the phase transition region by using Metropolis algorithm. In order to study the critical temperature we implemented the vectorized Metropolis, hybrid Metropolis and Wolff (the latter one as prescribed by Chen *et al* (4)). We chose Metropolis:Overrelaxation 1:4 for its fastest independent measurements yield. We implemented Berau and Swendsen's optimized multi-histogram technique (13) for this study. We obtained through finite size scaling the critical exponents $\alpha = -0,0709 \pm 0,0099$, $\beta = 0,3499 \pm 0,0076$, $\gamma = 1,3880 \pm 0,0066$ and $\nu = 0,6903 \pm 0,0034$, the inverse critical temperature $K_c = 0,69314 \pm 0,00032$, and the universal parameter Binder cumulant for an infinite lattice at critical temperature $U_{4B}^* = 0,62178 \pm 0,00049$ by means of a strategy involving jackknife to reduce bias. These exponents agree with experimental, theoretical and simulational determinations from literature. We also investigated energy and spin time autocorrelations in unidimensional lattices (an integrable $L = 4$ system and a non-integrable $L = 18$ system), by integration with fourth order Runge-Kutta, Predictor-Corrector, Suzuki-Trotter and optimized Forest-Ruth methods. We found that the use of quad precision, an integration step of approximately 10^{-6} , $N = 10^6$ sampling, and long spin chains may be sufficient to discriminate between an expected and an anomalous spin diffusion. Besides, each algorithm implementation may correspond to a different time operator for the non-integrable system.

Sumário

Agradecimentos	p. iii
Apresentação	p. v
Lista de Figuras	p. xiv
Lista de Tabelas	p. xviii
1 Introdução	p. 1
1.1 O modelo de Heisenberg	p. 1
1.2 Simulação	p. 3
1.3 Algumas considerações	p. 4
2 Objetivos	p. 5
2.1 Objetivo geral	p. 5
2.2 Objetivos específicos	p. 5
3 Sorteios de números e spins	p. 7
3.1 Sorteio de números	p. 7
3.1.1 <i>ran</i>	p. 8
3.1.1.1 <i>Parking lot</i>	p. 8
3.1.1.2 Uniformidade	p. 8
3.1.1.3 <i>Noise sphere</i>	p. 12
3.1.1.4 Bateria de testes do NIST	p. 12
3.1.2 <i>ran2</i>	p. 15

3.1.2.1	Parking lot	p. 15
3.1.2.2	Uniformidade	p. 16
3.1.2.3	Noise sphere	p. 16
3.1.2.4	Bateria de testes do NIST	p. 16
3.1.3	<i>ran1</i>	p. 16
3.1.3.1	Parking lot	p. 16
3.1.3.2	Uniformidade	p. 17
3.1.3.3	Noise sphere	p. 17
3.1.3.4	Bateria de testes do NIST	p. 18
3.2	Sorteio de spin	p. 18
3.2.1	Trivial	p. 19
3.2.2	Tradicional	p. 19
3.2.3	Marsaglia	p. 20
3.2.4	Cook	p. 20
3.2.5	Vetorização do sorteio de spins	p. 22
4	Termodinâmica do modelo de Heisenberg 3D	p. 24
4.1	Transição de fases	p. 24
4.2	Monte Carlo	p. 27
4.3	Metropolis	p. 29
4.4	Exploração inicial	p. 34
4.5	<i>Jackknife</i>	p. 48
4.6	Estratégia	p. 49
4.7	Multi-histogramas	p. 50
4.7.1	Determinação das energias livres f	p. 52
4.7.2	Construção de histogramas de potências de energia e magnetização	p. 54
4.7.3	Testes da implementação	p. 56

4.8	Localização de picos	p. 56
	4.8.0.1 Brent	p. 58
	4.8.0.2 Pégaso	p. 58
4.9	Modelagem de dados	p. 58
	4.9.1 Regressão linear simples	p. 59
	4.9.2 Regressão linear múltipla com coeficiente linear compartilhado	p. 60
	4.9.3 Regressão linear múltipla com coeficiente angular compartilhado	p. 60
4.10	Expoente crítico ν e temperatura crítica T_c	p. 61
4.11	Escolha do algoritmo para simulação na T_c	p. 62
	4.11.1 Metropolis vetorizado	p. 65
	4.11.2 Super-relaxação	p. 66
	4.11.3 Wolff	p. 66
	4.11.3.1 Escolha de sistema de coordenadas aleatório	p. 69
	4.11.3.2 Crescimento de <i>clusters</i>	p. 70
	4.11.4 Comparação entre os algoritmos	p. 71
4.12	Expoentes críticos α , β e γ	p. 72
4.13	Parâmetro universal U_{4B}^*	p. 80
5	Dinâmica do modelo de Heisenberg 1D	p. 84
5.1	Difusão de spins	p. 84
5.2	Difusão anômala de spins	p. 87
5.3	Equações de movimento	p. 88
5.4	Integradores das equações de movimento	p. 89
	5.4.1 Runge-Kutta de quarta ordem	p. 89
	5.4.2 Preditor-Corretor de quarta ordem	p. 90
	5.4.3 Métodos simpléticos	p. 90
	5.4.3.1 Suzuki-Trotter	p. 91

5.4.3.2	Forest-Ruth otimizado	p. 91
5.5	Grandezas dinâmicas	p. 93
5.5.1	Correlação energia-energia	p. 93
5.5.2	Correlação spin-spin	p. 93
5.5.3	Solução analítica	p. 93
5.6	Parâmetros do método OFR	p. 94
5.7	Sistema integrável	p. 94
5.7.1	Autocorrelações típicas de um sistema integrável	p. 94
5.7.2	Efeito de variáveis sobre dinâmica de um sistema integrável	p. 96
5.7.3	Convergência de dinâmica para a solução exata	p. 96
5.8	Sistema não-integrável	p. 100
5.8.1	Autocorrelações típicas de um sistema não-integrável	p. 100
5.8.2	Efeito de variáveis sobre dinâmica de um sistema não-integrável	p. 100
5.8.2.1	Efeito do passo	p. 100
5.8.2.2	Efeito da precisão	p. 103
5.8.2.3	Efeito do método	p. 106
5.8.2.4	Efeito da implementação	p. 106
5.8.3	Métodos e amostra de dinâmica de um sistema não-integrável	p. 109
5.8.4	Origem das diferenças entre trajetórias	p. 109
6	Conclusões	p. 113
	Referências	p. 114

Lista de Figuras

1	<i>Parking lot</i> de 5000 sorteios do RNG <i>ran</i>	p. 10
2	Histograma de 50000 sorteios do RNG <i>ran</i>	p. 10
3	Histograma de 25000 sorteios de pares do RNG <i>ran</i>	p. 11
4	<i>Noise sphere</i> de 5000 (acima) e 10000 (abaixo) sorteios do RNG <i>ran</i>	p. 13
5	100 (à esquerda), 1000 (no meio) e 5000 (à direita) sorteios de spins do tipo Trivial seriado pelo RNG <i>ran</i> . As linhas mostram diferentes perspectivas dos sorteios.	p. 21
6	Sub-redes da rede cúbica com $L = 8$. Cada cor representa uma sub-rede diferente.	p. 32
7	Energia por spin e em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 35
8	Magnetização por spin m em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 37
9	Calor específico c em função da temperatura para diferentes redes. As barras de erro não são mostradas por serem muito menores que os símbolos. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 38
10	Susceptibilidade χ em função da temperatura para diferentes redes. As barras de erro não são mostradas por serem muito menores que os símbolos. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 39
11	Cumulante U_3 em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 41
12	Cumulante U_4 em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 42
13	Cumulante de Binder U_{4B} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 43

14	Cumulante D_{K_2} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 45
15	Cumulante D_{K_3} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 46
16	Cumulante D_{K_4} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 47
17	Probabilidade p em função da energia calculada diretamente das simulações (cruz) e por multi-histogramas (linha) para a rede $L = 32$, a temperaturas $T = 1,2$ (acima), $1,44$ (no meio) e $1,53$ (abaixo). O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.	p. 57
18	Determinação do inverso do expoente crítico ν a partir dos cumulantes V_1 a V_6 na temperatura crítica T_c da amostra. A rede $L = 4$ não foi considerada aqui. Não houve exclusão de simulação.	p. 63
19	Determinação do inverso da temperatura crítica T_c a partir da temperatura inversa K do pico da susceptibilidade χ e dos cumulantes U_3 , U_4 , D_{K_2} , D_{K_3} e D_{K_4} . A rede $L = 4$ não foi considerada aqui. Não houve exclusão de simulação.	p. 64
20	Precessão de um spin \vec{S} em torno de um campo efetivo local \vec{H} . Modificado de (14).	p. 67
21	Calor específico c em função do tamanho da rede $L^{\alpha/\nu}$, com $\alpha/\nu = -0,0495$. Não houve exclusão de simulação.	p. 74
22	Colapso das curvas do calor específico c com diferentes L usando o expoente crítico $\alpha = -0,0709 \pm 0,0099$ deste trabalho e os parâmetros $c_\infty = 5,70 \pm 0,12$ e $\mathcal{C}(0) = -4,89 \pm 0,11$ obtidos por Chen <i>et al.</i> (4).	p. 75
23	Logaritmo da magnetização m em função do logaritmo do tamanho da rede L . Não houve exclusão de simulação.	p. 76
24	Colapso das curvas da magnetização m com diferentes L usando o expoente crítico $\beta = 0,3499 \pm 0,0076$ deste trabalho.	p. 77
25	Logaritmo da susceptibilidade χ na temperatura crítica T_c (círculo) ou máxima obtida por multi-histogramas (quadrado) em função do logaritmo do tamanho da rede L . Não houve exclusão de simulação.	p. 78

26	Colapso das curvas de susceptibilidade χ com diferentes L usando o expoente crítico $\gamma = 1,3880 \pm 0,0066$ deste trabalho.	p. 79
27	Cumulante de Binder U_{4B} na temperatura crítica T_c (círculo), obtida por cruzamentos do cumulante entre redes diferentes (quadrado) ou na inclinação máxima em função do tamanho da rede $L^{-1/\nu}$ (diamante). Não houve exclusão de simulação.	p. 81
28	Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para cadeia de spins $L = 4$ a partir de diferentes configurações iniciais.	p. 95
29	Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para cadeia de spins $L = 4$. As autocorrelações para os diferentes métodos e passos de integração partem da mesma configuração inicial e coincidem. As precisões usadas foram a dupla e a quádrupla.	p. 97
30	Média de 10^3 , 10^5 e 10^7 autocorrelações da energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia de spins $L = 4$. No gráfico de spins há também a autocorrelação teórica. Método usado foi o RK4 com passo de integração de 1×10^{-2}	p. 98
31	Erro da média de 10^3 , 10^5 e 10^7 autocorrelações de spin em relação a sua autocorrelação teórica, para a cadeia de spins $L = 4$	p. 99
32	Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia de spins $L = 18$ a partir de diferentes configurações iniciais.	p. 101
33	Autocorrelação de energia (direita) e de spin (esquerda) com precisões dupla (acima) e quádrupla (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com diferentes passos de integração a partir de mesma configuração inicial. Método usado foi o RK4.	p. 102
34	Autocorrelação de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com precisões dupla e quádrupla, a partir de mesma configuração inicial. Método RK4. Passo de integração de 1×10^{-7}	p. 104
35	Autocorrelação de spin com precisões dupla e quádrupla para a cadeia $L = 18$, com os métodos RK4 (acima, à esquerda), PC4 (acima à direita), ST4 (abaixo, à esquerda) e OFR (abaixo, à direita), a partir de mesma configuração inicial. Os passos de integração usados foram de 1×10^{-6} e 1×10^{-7}	p. 105

36	Autocorrelação de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com os diferentes métodos, a partir de mesma configuração inicial. Passo de integração de 1×10^{-6} . Precisão dupla.	p. 107
37	Autocorrelação de spin para a cadeia $L = 18$ com diferentes implementações do método RK4. Passo de integração de 1×10^{-4} . Precisão dupla.	p. 108
38	Média de 10^5 autocorrelações de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com diferentes métodos, a partir de mesmas configurações iniciais (RK4, PC4, ST4, OFR) ou de configurações diferentes (RK4 novamente). Passo de integração de 1×10^{-4} . Precisão dupla.	p. 110
39	Autocorrelação de spin para a cadeia $L = 18$, a partir de configurações com um spin mudado de ϕ radianos. O método usado foi o RK4. Passo de integração de 1×10^{-6} . Precisão quádrupla.	p. 111

Lista de Tabelas

1	Valores de χ^2 e p para a distribuição uniforme de três amostras com 50000 sorteios simples por <i>ran1</i> cada, divididos em dez caixas.	p. 17
2	Valores de χ^2 e p para a distribuição uniforme de três amostras com 25000 pares de sorteios por <i>ran1</i> cada, divididos em dez caixas.	p. 17
3	Tempo de 10^8 sorteios seriados pelos métodos Trivial, Tradicional, Marsaglia e Cook.	p. 21
4	Determinações experimentais recentes de expoentes críticos da classe de universalidade de Heisenberg. As citações anteriores a 2003 foram encontradas por Campostrini <i>et al.</i> (15).	p. 26
5	Determinações simulacionais e teóricas recentes de expoentes críticos da classe de universalidade de Heisenberg. As citações anteriores a 2003 foram encontradas por Campostrini <i>et al.</i> (15). MC: Monte Carlo. HT: série de alta temperatura. FT: métodos <i>field-theory</i> . SFM: método <i>scaling-field</i> . RG: grupo de renormalização. CRG: grupo de renormalização contínuo.	p. 30
6	Número de medidas independentes por segundo de diferentes combinações de atualização de spins. $K_c = 0,69247, L = 32$	p. 72
7	Membros da relação de hiperescala, com expoentes críticos obtidos neste trabalho.	p. 74
8	Valores do parâmetro universal U_{4B}^* obtido na T_c , dos cruzamentos de U_{4B} e da inclinação máxima de U_{4B}	p. 80
9	Temperatura e expoentes críticos obtidos de trabalho semelhante realizado por Chen <i>et al.</i> (4) e neste trabalho. O índice (1) indica os expoentes obtidos do ν sem exclusão de redes, e o índice (2) indica os expoentes obtidos do ν com exclusão da rede $L = 4$	p. 82

10	Parâmetros ξ , λ e χ usados no método OFR na literatura e calculados neste trabalho. A tolerância usada na obtenção dos parâmetros calculados por nós é em torno de 10^{-16}	p. 94
----	---	-------

1 Introdução

Neste capítulo iremos discorrer sobre o modelo de Heisenberg e a simulação, e faremos a ponte entre esses assuntos e a presente investigação. Esperamos que ela apresente o objeto deste estudo de propriedades estáticas e dinâmicas e de forma panorâmica o modo de investigação utilizado.

1.1 O modelo de Heisenberg

O ferromagnetismo é um fenômeno coletivo, que requer campos internos muito altos. A interação eletrostática permite que se alcance tais campos, dando origem à interação de troca, que desempenha um papel essencial neste tipo de magnetismo.

Vamos mostrar a seguir a origem desta interação a partir da discussão de Dresselhaus (16). Consideremos a seguinte hamiltoniana de dois elétrons interagentes:

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (1.1)$$

onde \vec{r}_i é o vetor posição do elétron i em relação ao núcleo, r_i e p_i são a distância radial do núcleo e o momento linear do elétron i , m é a massa de cada elétron, e é a carga do elétron e Z é a carga nuclear. Definimos também

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} \\ \mathcal{H}_2 &= \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} \end{aligned}$$

O último termo da Equação 1.1 expressa a interação coulombiana entre os dois elétrons e a designaremos por V_{12} . A energia de Coulomb C_{12} pode ser encontrada aproximadamente através da teoria da perturbação, usando-se como funções de onda não-perturbadas os estados das hamiltonianas \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , que chamamos respectivamente

de $\psi_1(\vec{r}_1)$ e $\psi_2(\vec{r}_2)$. Ela pode ser aproximada por

$$C_{12} = \int \psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1.2)$$

Em relação a função de onda dos dois elétrons, o Princípio de Exclusão de Pauli requer que ela seja antissimétrica sob a troca das duas partículas. Ela pode ser simétrica na função espacial e antissimétrica na função de spin ou vice-versa. O valor esperado da energia do sistema será diferente dependendo se no cálculo de V_{12} usamos funções espaciais simétricas ou antissimétricas. A origem dessa diferença pode ser explicitada por

$$\frac{1}{2} \int [\psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2^*(\vec{r}_2) \pm \psi_1^*(\vec{r}_2)\psi_2^*(\vec{r}_1)] \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)] d^3r_1 d^3r_2 = C_{12} \pm J_{12} \quad (1.3)$$

O termo J_{12} , chamado de energia de troca, é definido por

$$J_{12} \equiv \int \psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1.4)$$

Se usamos o sinal positivo nas funções de onda na Equação 1.3 a função de onda usada é a simétrica, caso contrário antissimétrica.

A energia de troca J_{12} é igual a J_{21} . Se ela for positiva a função de onda com parte espacial antissimétrica tem energia menor. Nesse caso os spins estão alinhados, o spin total é $s = 1$ e o material é ferromagnético. Se negativa, $s = 0$.

Podemos escrever

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2,$$

de maneira que

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2,$$

uma vez que os operadores \vec{S}_1 e \vec{S}_2 comutam porque os elétrons são localizados. O último termo da equação anterior pode ser expresso por

$$2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1) = 1/2$$

para o tripleto (função espacial simétrica), onde $s = 1$, $s_1 = 1/2$ e $s_2 = 1/2$ são o spin total, o spin da partícula 1 e o spin da partícula 2 neste caso, respectivamente. Para o singleto (função espacial antissimétrica) $s = 0$, $s_1 = 1/2$, $s_2 = 1/2$ e conseqüentemente temos

$$2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -3/2.$$

Assim,

$$\frac{1}{2} + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \pm 1,$$

positiva para o tripleto e negativa para o singlete. O valor esperado de V_{12} pode dessa maneira ser escrito como

$$\langle V_{12} \rangle = \Delta E = C_{12} - \left(\frac{1}{2} + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right) J_{12} = C_{12} - \left(\frac{1}{2} \right) J_{12} - 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 J_{12}. \quad (1.5)$$

O último termo da Equação 1.5 é chamado de hamiltoniana de Heisenberg.

O modelo de Heisenberg em que estamos interessados é o ferromagnético isotrópico

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.6)$$

onde o spin \vec{S}_i tem simetria $O(3)$. A energia de troca J deve ser positiva para interações ferromagnéticas. Por simplicidade fazemos J igual a unidade.

A família de modelos de Heisenberg são importantes no estudo de compostos como o níquel, o ferro e o EuO (15) e tem permitido uma compreensão considerável da transição de fase magnética (17). Além disso acredita-se que ele é o modelo mais adequado para os precursores não dopados dos cupratos, onde se descobriu supercondutividade a altas temperaturas (18).

1.2 Simulação

A simulação pode ser definida como a “imitação de alguma coisa real, o estado das coisas ou processo” (19). Sua utilidade é a de reproduzir uma situação realista, estudar condições alternativas, examinar o efeito de variáveis que poderiam ou não ser ajustadas fisicamente, pesquisar situações perigosas ou inviáveis de se reproduzir, ou investigar situações que simplesmente não existam fisicamente.

Na simulação computacional o estudo do modelo é feito com o auxílio de computadores, e é uma ferramenta importante nas ciências. Ela permite aos físicos inventar novos modelos e estudá-los sem grandes simplificações. Em algumas circunstâncias fornece as bases teóricas para experimentos, e em outras ela fornece os dados para a exploração teórica.

1.3 Algumas considerações

Neste trabalho usaremos a simulação computacional como meio de estudo do modelo de Heisenberg ferromagnético isotrópico. Para essa finalidade tomaremos algumas medidas. Garantiremos a qualidade dos sorteios de números e de spins, exploraremos a região de transição de fase do modelo de Heisenberg isotrópico tridimensional, e obteremos os expoentes críticos e o parâmetro crítico universal U_{4B}^* de uma rede cúbica simples de uma maneira segura e minimizando vícios através da técnica estatística *jackknife*. Estudaremos também a correlação dinâmica de uma rede de spins unidimensional, que é mais fácil de ser estudada, e discutiremos a relação destes resultados com a difusão de spins.

2 *Objetivos*

2.1 Objetivo geral

Investigar propriedades estáticas e dinâmicas do modelo de spins Heisenberg isotrópico através de técnicas modernas de simulação.

2.2 Objetivos específicos

- Garantir o uso de bons geradores de números aleatórios para Monte Carlo;
- Garantir o eficiente sorteio de spins;
- Explorar o modelo na região de transição;
- Implementar o algoritmo de multi-histogramas otimizado;
- Determinar a temperatura crítica e o expoente crítico ν com o mínimo de vício;
- Escolher o algoritmo vetorizado Metropolis, Metropolis híbrido ou Wolff para explorar o modelo na temperatura crítica;
- Determinar os expoentes críticos α , β , e γ com o mínimo de vício;
- Determinar os parâmetros c_∞ e $c(0)$ do calor específico com o mínimo de vício;
- Determinar o parâmetro universal U_4^* com o mínimo de vício;
- Estabelecer os métodos de dinâmica de spins a serem usados;
- Examinar o efeito de variáveis sobre a dinâmica de um sistema integrável;
- Examinar a convergência para uma solução analítica com o aumento do tamanho da amostra em um sistema exato;

- Examinar o efeito de variáveis sobre a dinâmica de um sistema não-integrável;
- Examinar a dinâmica de uma amostra em um sistema caótico com diferentes métodos;
- Investigar a origem das diferenças entre diferentes trajetórias em um sistema não-integrável.

3 *Sorteios de números e spins*

O sorteio é importante tanto no estudo da termodinâmica como da dinâmica de spins do modelo de Heisenberg. Ele foi usado nos algoritmos de Monte Carlo e para gerar configurações da rede, seja através do sorteio de números ou de vetores tridimensionais que representavam spins clássicos.

Existem testes próprios para cada tipo de sorteio, a fim de que seja assegurada a qualidade do algoritmo e de sua implementação, e a eliminação de uma possível causa de erro sistemático. Neste capítulo apresentamos os testes aplicados e seus resultados, que servem como alicerce para os experimentos seguintes.

3.1 Sorteio de números

Usualmente os números sorteados são obtidos deterministicamente, por geradores de números aleatórios (RNG) que permitem a uniformidade do sorteio, a minimização da correlação entre os números gerados e um período longo até que a seqüência dos números gerados se repita (3). A qualidade da aleatoriedade destes números pode comprometer com facilidade experimentos computacionais.

Escolhemos para nossas simulações três RNG: os geradores *ran* e *ran2* para o algoritmo Metropolis seriado, e o *ran1* para os demais algoritmos (20, 21). Os dois primeiros foram combinados visando-se a redução da correlação entre os números gerados. O último é ideal para códigos vetorizados.

Os testes objetivaram a verificação da qualidade das implementações, uma vez que os algoritmos em si já haviam sido atestados pela literatura. Os testes usados foram o de *parking lot*, uniformidade, *noise sphere* e a bateria de testes da *National Institute of Standards and Technology* (NIST).

3.1.1 *ran*

O RNG *ran* é um algoritmo seriado rápido para Fortran 90 em que se combina o RNG mínimo de Park e Miller (20) com uma seqüência de deslocamentos de bits proposta por Marsaglia (21). Seu período é de cerca de $3,1 \times 10^{18}$.

3.1.1.1 *Parking lot*

Neste teste os números gerados foram agrupados aos pares, na seqüência em que foram gerados. Círculos de raio fixo eram desenhados nas coordenadas dadas por eses pares. Através da figura resultante pode-se estudar se havia padrões subjacentes aos geradores que poderiam invalidá-los.

Os números aleatórios de cada um dos métodos foram gerados em Fortran 90 e as respectivas figuras foram produzidas no *Mathematica*.

Apesar de ser qualitativo na forma que foi utilizado aqui, é fácil de ser implementado e interpretado.

A inclusão deste teste segue uma recomendação do livro de Landau e Binder (3).

A Figura 1 mostra o resultado do teste *parking lot* realizado com 5000 pontos. Aparentemente os pontos não formam nenhuma estrutura, o que corrobora a boa qualidade do gerador.

3.1.1.2 Uniformidade

É esperado que os números sorteados por estes métodos tenham uma distribuição uniforme entre zero e um. Com isso, os testes de uniformidade podem recomendar ou não os RNGs.

Nos testes de uniformidade aplicados dividiu-se as regiões estudadas em partes iguais e avaliou-se visualmente a uniformidade da distribuição. Essas regiões foram o intervalo $[0, 1]$ para seqüências individuais, ou o quadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ para seqüências de pares de números gerados.

Em dois casos realizou-se o teste do χ^2 de Pearson (22). A estatística usada neste teste chama-se χ^2 e assume-se em geral que ela segue a distribuição de mesmo nome.

Em casos em que ajusta-se uma distribuição a dados experimentais, no nosso caso a

uniforme, o χ^2 é calculado como

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}$$

onde O_i e E_i são as frequências observadas e esperadas, respectivamente, e n é o número de partes estudadas. Quanto maior o χ^2 , pior é a concordância entre os dados observados e os esperados. Avaliamos a qualidade do ajuste a partir da probabilidade de se obter um χ^2 tão grande quanto o observado (23). Esta probabilidade é o valor p . Para uma distribuição χ^2 da estatística, ele é calculado de

$$p = Q(a, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_x^{\infty} e^{-t} t^{a-1} dt.$$

em que $a = g/2$ (g é o número de graus de liberdade dos dados), $x = \chi^2/2$, e $\Gamma(a)$ é a função gama, dada por

$$\Gamma(a) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{a-1} dt.$$

Nestes testes de uniformidade escolhemos o nível de significância, isto é, o valor p mínimo para que a hipótese de uniformidade dos dados seja aceita, de 0,01.

Os números foram obtidos de implementações em Fortran 90 e o restante do teste de uniformidade foi implementado e realizado no *Mathematica*.

O teste de uniformidade é quantitativo e fácil de ser implementado, apesar de exigir cuidados na sua interpretação. Este teste de uniformidade também segue recomendação de Landau e Binder (3).

A uniformidade dos sorteios pelo RNG *ran* pode ser percebida visualmente na Figura 2. A contagem em cada caixa do histograma está muito próxima de 5000, a média esperada.

O valor χ^2 correspondente foi de 14,82, e o valor p foi de 0,0958. Por ser maior que 0,01, este valor p foi considerado aceitável. A distribuição deste sorteio é portanto uniforme, como era desejado.

Também foi realizado o histograma de pares de números sorteados por *ran*, que é apresentado na Figura 3. A contagem de cada caixa parece estar próxima a 250, o valor médio esperado.

O χ^2 desta distribuição foi de 92,88, e seu valor p foi de 0,6542, novamente um valor aceitável por ser acima de 0,01. A distribuição de pares de sorteios de *ran* é tomada como uniforme.

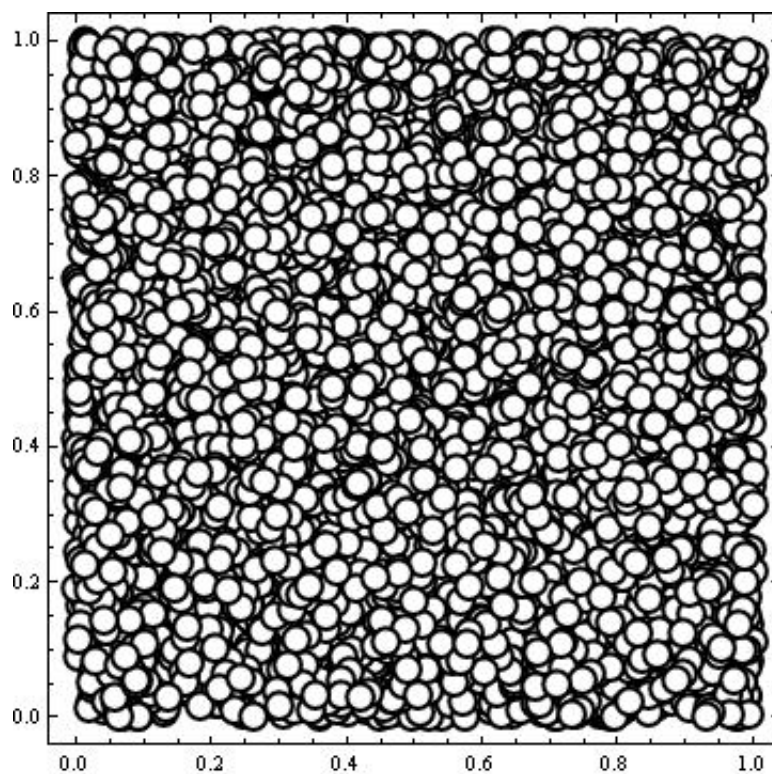


Figura 1: *Parking lot* de 5000 sorteios do RNG *ran*.

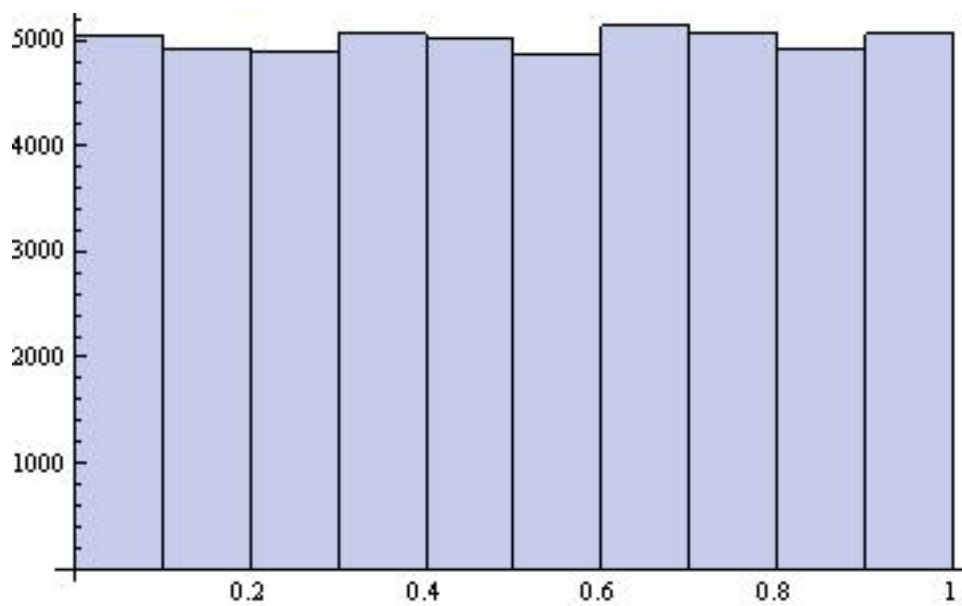


Figura 2: Histograma de 50000 sorteios do RNG *ran*.

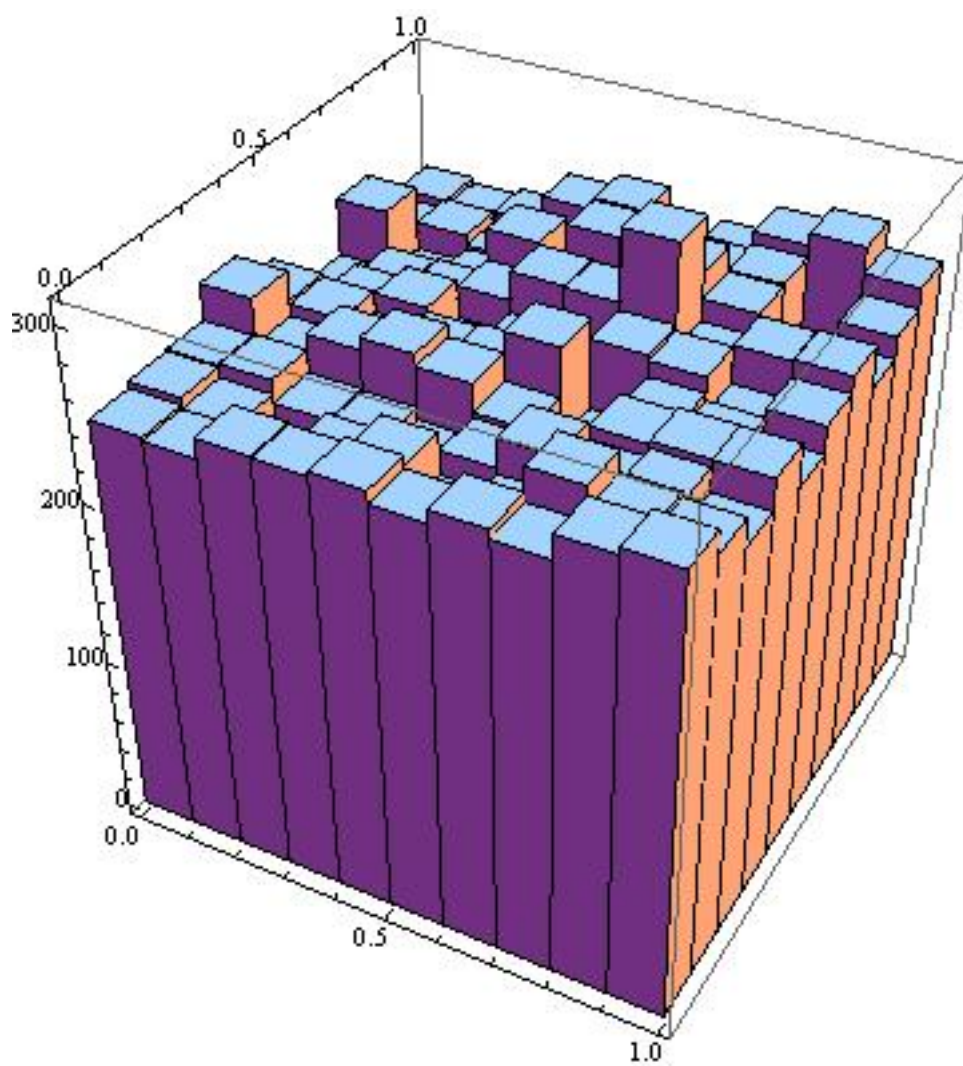


Figura 3: Histograma de 25000 sorteios de pares do RNG *ran*.

3.1.1.3 *Noise sphere*

Neste teste triplas são formadas de três sorteios de números aleatórios e transformados da seguinte forma:

$$\theta = 2\pi r \quad (3.1)$$

$$\phi = \pi r \quad (3.2)$$

$$r = \sqrt{r} \quad (3.3)$$

São desenhados pontos nas novas coordenadas esféricas. Se são detectadas estruturas além do agrupamento em torno do eixo z com o fator $\sin \phi$, os números gerados podem não ser aleatórios.

Os números foram obtidos de geradores em Fortran 90 e seu diagrama foi gerado no *Mathematica*.

À semelhança do teste *parking lot*, o teste é fácil de ser implementado e interpretado, apesar de sua motivação não ser evidente. O teste pode ser encontrado no sítio *MathWorld* (24).

A Figura 4 mostra o gráfico de *noise sphere* com 5000 e 10000 pontos. Não foi notada nenhuma estrutura em particular em qualquer um destes gráficos, a menos do acúmulo esperado em torno do eixo z . Esses gráficos reforçam a ideia de que *ran* é um bom RNG.

3.1.1.4 Bateria de testes do NIST

A bateria de testes do NIST para “geradores de números aleatórios e pseudoaleatórios para aplicações criptográficas” (25) reúne quinze testes que investigam tipos diferentes de não-aleatoriedade em seqüências binárias. Alguns dos testes podem ser decompostos em um conjunto de sub-testes. Os testes principais são:

1. O Teste da Frequência (Monobit): verifica se o número de zeros e uns são aproximadamente os mesmos que em uma seqüência aleatória. Todos os demais testes dependem do sucesso neste;
2. O Teste da Frequência em um Bloco: verifica se a proporção de uns em um bloco de M bits é aproximadamente $M/2$. Para $M = 1$ o teste degenera para o anterior;
3. O Teste de Corridas: testa se o número de corridas de zeros e uns de diferentes

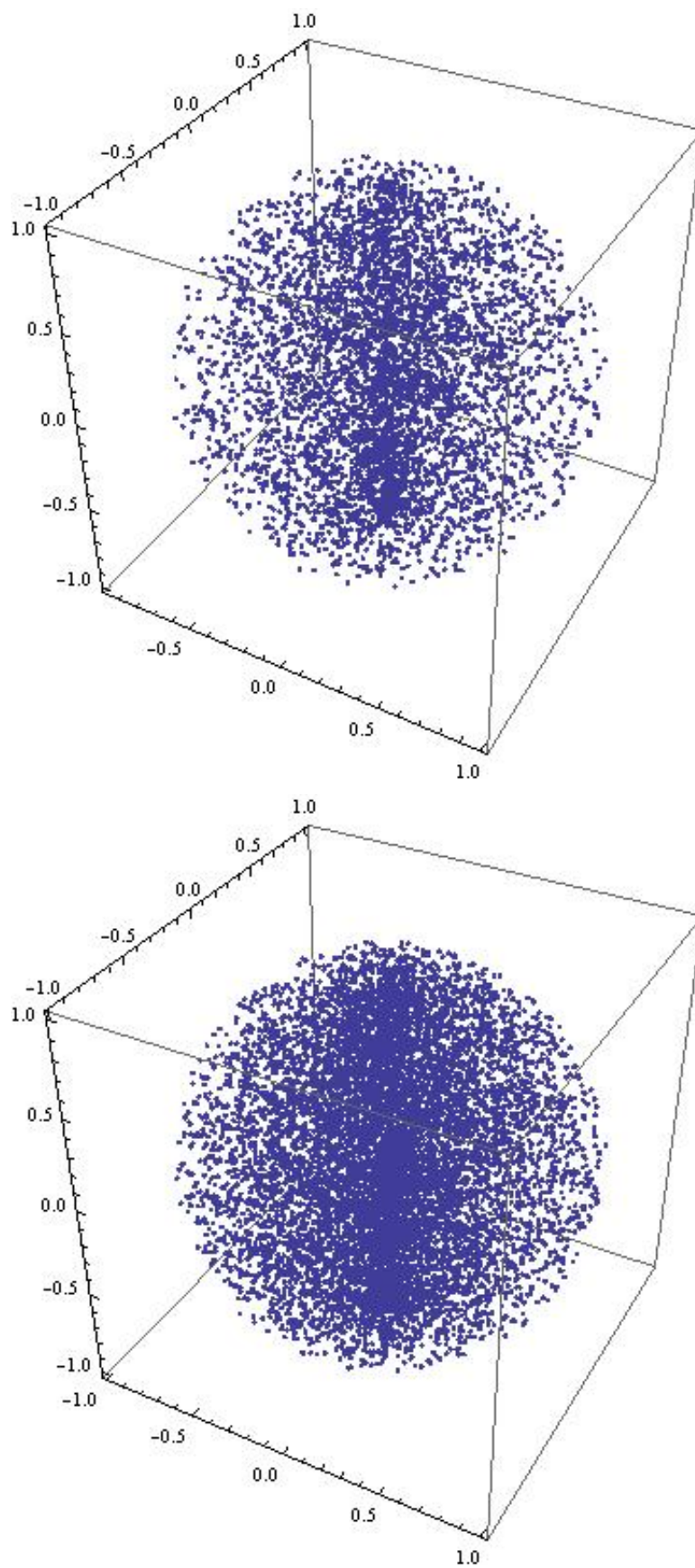


Figura 4: *Noise sphere* de 5000 (acima) e 10000 (abaixo) sorteios do RNG *ran*.

tamanhos é o esperado para uma seqüência ao acaso. A corrida é uma seqüência ininterrupta de bits idênticos;

4. O Teste para a Maior-Corrída-de-Uns em um Bloco: determina se o comprimento da maior corrida de uns na seqüência testada é consistente com a de uma seqüência aleatória;
5. O Teste de *Rank* de Matriz Binária: avalia a dependência linear de sub-seqüências da seqüência original. Focaliza-se o *rank* de sub-matrizes disjuntas de toda a seqüência;
6. O Teste (Espectral) da Transformada de Fourier Discreta: detecta periodicidades na seqüência que indicam desvios da hipótese de aleatoriedade;
7. O Teste de Casamento de Molde sem Sobreposição: o foco é o número de ocorrências de seqüências pré-especificadas de m bits. Se a seqüência alvo não é encontrada, move-se um bit. Se sim, inicia-se a busca após a seqüência localizada;
8. O Teste de Casamento de Molde com Sobreposição: semelhante ao anterior, mas no caso de encontrar-se o alvo, a busca continua uma posição adiante;
9. O Teste “Estatístico Universal” de Maurer: verifica-se se a seqüência pode ser expressa em um número significativamente menor de bits sem perda de informação. Se sim, ela não é considerada aleatória;
10. O Teste de Complexidade Linear: testa o tamanho de um *linear feedback shift register* (LFSR). Mede-se se a seqüência é suficientemente complexa;
11. O Teste Seriado: determina se a freqüência de todos os padrões de m bits encontrados com sobreposição de busca corresponde à esperada para uma seqüência aleatória;
12. O Teste de Entropia Aproximada: compara-se a freqüência de sobreposição blocos de m e $m + 1$ bits com a esperada para uma seqüência aleatória;
13. O Teste de Somas Cumulativas: avalia se o máximo da soma cumulativa da seqüência com os zeros transformados em -1 é compatível com a de uma seqüência aleatória;
14. O Teste de Excursões Aleatórias: mede o número de ciclos que têm K visitas a cada uma das somas cumulativas entre -4 e 4. O ciclo é uma seqüência de -1 (no lugar de 0) e 1 que começa e termina em uma soma cumulativa nula;

15. O Teste Variante de Excursões Aleatórias: mede o número de visitas da soma cumulativa da seqüência de -1 (no lugar de 0) e 1 a cada um dos valores entre -9 e 9.

O Teste Espectral não estava funcionando adequadamente e por isso não o utilizamos.

O sucesso da bateria de testes foi avaliado por dois critérios: se o histograma dos valores p era uniforme e se a proporção de resultados para cada teste estava dentro do intervalo de confiança.

A seqüência binária testada foi gerada aplicando-se o teste se o número gerado era maior que 0,5, atribuindo-se o algarismo zero ou um de acordo com este resultado.

Foram usadas 10 amostras de 10^8 algarismos cada, o *bitstream* foi de 10^6 algarismos, $m = 10^5$ no teste da Freqüência em um Bloco, $m = 9$ no Casamento de Molde sem e com Sobreposição, $m = 10$ na Entropia Aproximada, $M = 500$ na Complexidade Linear, e $m = 16$ no Seriado.

No teste do RNG *ran*, as sementes usadas eram negativas.

As proporções de 185 testes realizados foram aprovados, e dois foram reprovados (casamento de molde com sobreposição e um sem reposição), com o nível de significância $\alpha = 0,01$. Tendo em vista a baixa quantidade de reprovações, que é esperada, o resultado foi tido como satisfatório.

Todos os testes de uniformidade tiveram valores p acima de 0,0001 (nível de significância dentro da proposta do NIST para este teste), sendo também favoráveis à boa qualidade de *ran*.

3.1.2 *ran2*

O RNG *ran2* é rápido, mas mais lento que o *ran*. Ele combina dois geradores congruenciais e retorna um número de uma lista misturada de sorteios. Press *et al.* (20) garantem um sorteio perfeito dentro dos limites de precisão de ponto flutuante. O algoritmo é seriado.

3.1.2.1 Parking lot

Não distinguimos nenhum padrão subjacente às estruturas do *parking lot*, o que é um indicador da boa qualidade de *ran2*.

3.1.2.2 Uniformidade

Todas as contagens das dez caixas do histograma simples foram muito próximas de 5000, que é a média esperada.

As contagens das caixas de pares de sorteios foram próximas de 250, a média esperada.

Estes resultados sustentam a noção de que *ran2* é um bom RNG.

3.1.2.3 Noise sphere

No teste de *noise sphere* com o RNG *ran2*, não percebemos nenhuma estrutura além da esperada em torno do eixo z . Isso indica que *ran2* é um bom RNG.

3.1.2.4 Bateria de testes do NIST

Para *ran2*, $\alpha = 0,01$ no estudo do valor p de cada teste, e $\alpha = 0,001$ no estudo das proporções aprovadas. Como no *ran* foram usadas no *ran2* 10 amostras de 10^8 algarismos cada, o *bitstream* foi de 10^6 algarismos, $m = 10^5$ no teste da Freqüência em um Bloco, $m = 9$ no Casamento de Molde sem e com Sobreposição, $m = 10$ na Entropia Aproximada, $M = 500$ na Complexidade Linear, e $m = 16$ no Seriado.

Quatro dos 187 testes aplicados não passaram no teste de proporção.

Todos os testes se mostraram com os valores p uniformemente distribuídos.

Concluimos desta bateria de testes que *ran2* é um bom RNG.

3.1.3 *ran1*

O RNG *ran1* apresentado é um algoritmo paralelizado em que cada elemento do vetor a ser sorteado possui inicializações do espaço de estados diferentes. Ele combina três geradores rápidos: dois congruenciais e uma seqüência de deslocamentos de Marsaglia. Da mesma forma que *ran2*, Press *et al.* (21) garantem que os sorteios são perfeitos dentro da precisão de ponto flutuante.

3.1.3.1 Parking lot

Nos testes *parking lot* para os dois tipos de seqüências os pontos não parecem ter nenhuma estrutura subjacente. Isso indica a boa qualidade do RNG *ran1*.

Tabela 1: Valores de χ^2 e p para a distribuição uniforme de três amostras com 50000 sorteios simples por *ran1* cada, divididos em dez caixas.

Amostra	Sorteio			
	Seriado		Em paralelo	
	χ^2	Valor p	χ^2	Valor p
1	8,51	0,4829	9,71	0,3742
2	6,07	0,7332	13,7	0,1349
3	4,33	0,8885	12,3	0,1977

Tabela 2: Valores de χ^2 e p para a distribuição uniforme de três amostras com 25000 pares de sorteios por *ran1* cada, divididos em dez caixas.

Amostra	Sorteio			
	Seriado		Em paralelo	
	χ^2	Valor p	χ^2	Valor p
1	99,2	0,4750	108	0,2479
2	82,4	0,8854	97,6	0,5191
3	86,5	0,8097	108	0,2562

3.1.3.2 Uniformidade

Tanto para a seqüência seriada como para a em paralelo os histogramas de sorteio simples parecem uniformes, As contagens das caixas estão em torno da média esperada de 5000.

A Tabela 1 mostra os valores de χ^2 e do valor p para três amostras com 50000 dados. Nenhum destes valores p foi menor que 0,01.

Os histogramas de pares de sorteios também pareceram uniformes, com contagens em torno do valor esperado de 250.

Os valores de χ^2 e de p para três amostras com 25000 pares de dados cada são mostrados na Tabela 2. Nenhum dos valores p foi menor que 0,01.

Todos esses resultados apoiam a hipótese que *ran1* é um bom RNG.

3.1.3.3 Noise sphere

O *noise sphere* das seqüências seriada e em paralelo não revelou nenhuma estrutura além da esperada para números aleatórios. Isso está de acordo com um RNG de qualidade.

3.1.3.4 Bateria de testes do NIST

No teste de *ran1* estudou-se a aleatoriedade entre os números gerados em paralelo. Aqui $n = 10^5$ e o *bitstream* foi de 100. Com essas condições foi possível apenas realizar quatro testes: Frequência, Frequência em um Bloco, Corridas e Somas Cumulativas. Para fins de conferência, testou-se *ran* em condições análogas.

Todos os testes de proporção com três vetores de 10^5 sorteios obtido por *ran1* foram satisfatórios, mas em relação ao teste de uniformidade só passaram para Frequência em um Bloco. Esses mesmos resultados se repetiram quando esperou-se 1000 sorteios de vetores a partir de uma semente já usada antes da coleta de dados, ou ao usar-se *ran* nestas mesmas condições.

O fato de seqüências geradas em paralelo após 1000 rodadas terem apresentado o mesmo resultado indica que não se trata de um problema com a fase inicial de sorteios. Dado que o *ran* havia sido amplamente aprovado por essa bateria e que quando em situação semelhante ao *ran1* também não foi aprovado, o problema deve ser peculiar ao uso deste tipo de amostra. Provavelmente encontramos uma falha neste programa, que pode estar associada ao tamanho reduzido da seqüência binária.

A bateria de testes do NIST mostrou-se inconclusiva. Devido aos resultados dos demais testes assumimos que a implementação de *ran1* é adequada.

3.2 Sorteio de spin

Necessitamos obter spins aleatórios uniformemente distribuídos em uma esfera unitária para escolhermos configurações iniciais de spins e para atualizá-los em um processo estocástico. Um algoritmo de sorteio de spins adequado aos nossos fins é rápido e compatível com a estratégia de programação.

Testamos quatro algoritmos básicos: o Trivial, o Tradicional, o de Marsaglia e o de Cook (a designação é nossa).

A escolha do algoritmo foi o da média mais rápida de 10 medidas, com o sorteio de 10^8 spins por medida. O RNG usado foi o *ran*.

3.2.1 Trivial

O algoritmo Trivial (3) é o mais intuitivo deles. Ele consiste no sorteio de um spin inscrito e no centro de um cubo, na seleção dos spins no interior da maior esfera que pode ser inscrita no cubo (com um conseqüente descarte de 48% dos spins sorteados), e na posterior normalização do spin. Não são usadas funções trigonométricas. Ele é apresentado a seguir no Algoritmo 1.

Algoritmo 1 Sorteio Trivial

```

maxsqnorm  $\leftarrow 0.5 \times 0.5$ . {Norma ao quadrado máxima do spin antes da renormalização.}
sqnorm  $\leftarrow 2$ . {Quadrado da norma escolhido maior que maxsqnorm para iniciar escolha do spin.}
while sqnorm > maxsqnorm do {Escolha do spin}
   $x_1 \leftarrow r - 0,5$ .
   $x_2 \leftarrow r - 0,5$ .
   $x_3 \leftarrow r - 0,5$ .
  sqnorm  $\leftarrow x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ .
end while
norm  $\leftarrow \sqrt{\text{sqnorm}}$ . {Cálculo da norma.}
invnorm  $\leftarrow 1/\text{norm}$ . {Cálculo da inversa da norma.}
{Renormalização do spin}
 $s_x \leftarrow x_1 \times \text{invnorm}$ .
 $s_y \leftarrow x_2 \times \text{invnorm}$ .
 $s_z \leftarrow x_3 \times \text{invnorm}$ .

```

A Figura 5 mostra os sorteios de 100, 1000 e 5000 pontos pelo método Trivial sobre a esfera unitária. São mostrados dois pontos de vista: um mais equatorial e outro em um dos polos. Aparentemente a distribuição dos pontos sorteados é uniforme, independentemente da latitude, como desejado.

3.2.2 Tradicional

O algoritmo Tradicional exige somente duas escolhas de números aleatórios r sem descartar pontos. São usadas funções trigonométricas. O Algoritmo 2 mostra sua estrutura.

Algoritmo 2 Sorteio Tradicional

```

 $s_z \leftarrow 2r - 1$ .
 $n_{xy} \leftarrow \sqrt{1 - s_z^2}$ . {Norma do componente do spin no plano  $xy$ .}
 $\phi = 2\pi r$ .
 $s_x = n_{xy} \cos(\phi)$ .
 $s_y = n_{xy} \sin(\phi)$ .

```

Os pontos pareceram estar uniformemente distribuídos na esfera, independentemente da latitude, de acordo com o esperado de um bom sorteio de vetores 3D.

3.2.3 Marsaglia

Este algoritmo desenvolvido por Marsaglia (26) não usa funções trigonométricas, mas descarta alguns pontos. Dois números aleatórios são escolhidos por tentativa. Ele é mostrado no Algoritmo 3.

Algoritmo 3 Sorteio Marsaglia

```

sqsum  $\leftarrow$  2.
while sqsum  $\geq$  1 do
   $x_1 \leftarrow 1 - 2r$ .
   $x_2 \leftarrow 1 - 2r$ .
  sqsum  $\leftarrow x_1^2 + x_2^2$ .
end while
sqrtaux  $\leftarrow \sqrt{1 - \text{sqsum}}$ .
{Escolha do spin.}
 $s_x \leftarrow 2x_1\text{sqrtaux}$ .
 $s_y \leftarrow 2x_2\text{sqrtaux}$ .
 $s_z \leftarrow 1 - 2\text{sqsum}$ .

```

O sorteio Marsaglia também se mostrou uniforme sobre a esfera unitária, sem nenhuma dependência da distribuição com a latitude. Com isso concluímos que seu sorteio de vetores é adequado.

3.2.4 Cook

O algoritmo de Cook é uma extensão de um método de von Neumann para sortear pontos em uma esfera unitária. Não usa funções trigonométricas, mas descarta pontos e realiza quatro escolhas de números aleatórios por tentativa. Ele é apresentado no Algoritmo 4.

Das mesma maneira que os demais sorteios, o sorteio Cook apresentou-se uniformemente distribuído na esfera unitária, e conseqüentemente de boa qualidade.

Os sorteios foram cronometrados, e o resultado é mostrado na Tabela 3.

O método mais rápido foi o Marsaglia, que apesar de descartar alguns pontos faz somente dois sorteios. Além disso não usa funções trigonométricas, que pode retardar bastante algoritmos. A consideração deste algoritmo permitiu-nos uma economia no tempo de sorteios seriados de cerca de 15%.

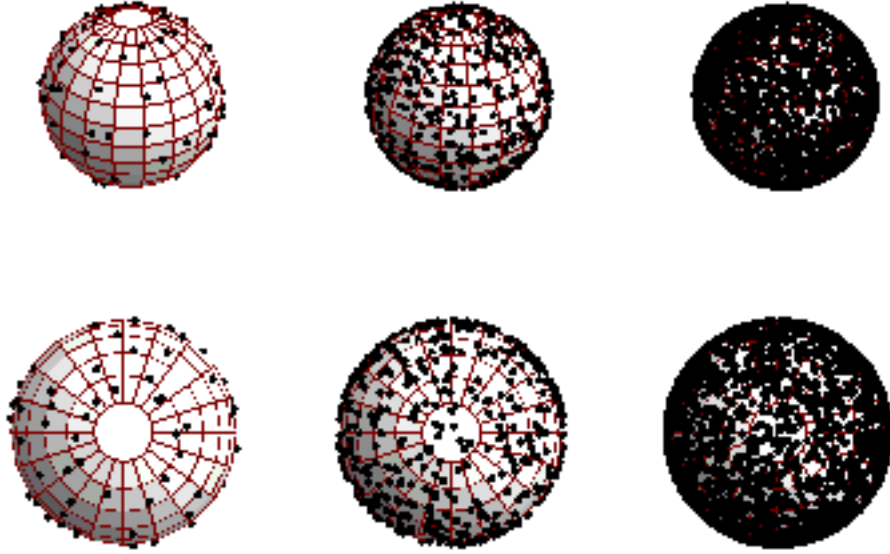


Figura 5: 100 (à esquerda), 1000 (no meio) e 5000 (à direita) sorteios de spins do tipo Trivial seriado pelo RNG *ran*. As linhas mostram diferentes perspectivas dos sorteios.

Algoritmo 4 Sorteio Cook

```

sqsum  $\leftarrow$  2
while sqsum  $\geq$  1 do
   $x_0 \leftarrow 1 - 2r$ .
   $x_1 \leftarrow 1 - 2r$ .
   $x_2 \leftarrow 1 - 2r$ .
   $x_3 \leftarrow 1 - 2r$ .
  sqsum  $\leftarrow x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ .
end while
invsqsum  $\leftarrow$  1/sqsum.
 $s_x \leftarrow 2(x_1x_3 + x_0x_2)$ invsqsum.
 $s_y \leftarrow 2(x_2x_3 - x_0x_1)$ invsqsum.
 $s_z \leftarrow (x_0^2 + x_3^2 - x_1^2 - x_2^2)$ invsqsum.
  
```

Tabela 3: Tempo de 10^8 sorteios seriados pelos métodos Trivial, Tradicional, Marsaglia e Cook.

Sorteio	Tempo (s)
Trivial	$30,09 \pm 0,15$
Tradicional	$45,25 \pm 0,15$
Marsaglia	$25,58 \pm 0,28$
Cook	$84,96 \pm 0,49$

3.2.5 Vetorização do sorteio de spins

Implementamos o algoritmo de Marsaglia em versões vetorizadas, de maneira que o sorteio não se tornasse um gargalo para o desempenho de algoritmos vetorizados. Estas versões foram a recursiva e em loop. O Algoritmo 5 mostra em linhas gerais a primeira alternativa.

Algoritmo 5 Sorteio Marsaglia vetorizado recursivo.

Sorteie vetor v_1 com n elementos entre zero e um.

Sorteie vetor v_2 com n elementos entre zero e um.

$v_1 \leftarrow 1 - 2v_1$.

$v_2 \leftarrow 1 - 2v_2$.

Calcule soma dos quadrados de v_1 e v_2 (sqsum) elemento a elemento.

Crie máscara lógica em que elementos são resultado de sqsum ≥ 1 .

Conte n_v valores verdadeiros da máscara.

if algum elemento da máscara é verdadeiro **then**

 Crie vetores m_1 e m_2 , ambos com n_v elementos.

 Chame recursivamente Sorteio Marsaglia vetorizado recursivo, com $v_1 \leftarrow m_1$ e $v_2 \leftarrow m_2$ na rotina chamada.

 Faça $v_1 \leftarrow m_1$ onde a máscara é verdadeira.

 Faça $v_2 \leftarrow m_2$ onde a máscara é verdadeira.

 Destrua vetores m_1 e m_2 .

end if

No Algoritmo 6 apresentamos a versão Marsaglia vetorizada em *loop*.

A escolha do sorteio vetorizado de spins foi pela média mais rápida de cinco medidas para cada tipo de sorteio. Cada medida consistiu de 1000 chamadas á implementação escolhida, gerando-se em cada chamada uma matriz de 32^3 spins aleatórios com 3 componentes cada um. Em cada etapa da compilação do teste foram usadas as opções `-O3`, que realiza uma análise de dependência de dados agressiva, e `-xP`, que realiza a compilação específica para alguns processadores Intel e outras otimizações.

Verificamos também a qualidade dos sorteios seriado e em paralelo pelo algoritmo Marsaglia vetorial, com o uso do RNG *ran1*. Os sorteios seriados de Marsaglia vetorial aparentaram ser uniformemente distribuídos de qualquer dos pontos de vista usados, e como conseqüência de boa qualidade.

Como nas situações anteriores, a distribuição dos spins sorteados em paralelo aparentam ser uniformes e de boa qualidade.

O algoritmo vetorial mais rápido foi o recursivo, sendo 1,81 vezes mais rápido que o loop.

Algoritmo 6 Sorteio Marsaglia vetorizado em *loop*.

Sorteie vetor v_1 com n elementos entre zero e um.

Sorteie vetor v_2 com n elementos entre zero e um.

$v_1 \leftarrow 1 - 2v_1$.

$v_2 \leftarrow 1 - 2v_2$.

loop

Calcule soma dos quadrados de v_1 e v_2 elemento a elemento sqsum .

Crie máscara lógica em que elementos são resultado de $\text{sqsum} \geq 1$.

if algum elemento da máscara é verdadeiro. **then**

Conte n_v valores verdadeiros da máscara.

Crie vetores m_1 e m_2 , ambos com n_v elementos.

Sorteie vetor m_1 com n_v elementos entre zero e um.

Sorteie vetor m_2 com n_v elementos entre zero e um.

$m_1 \leftarrow 1 - 2m_1$.

$m_2 \leftarrow 1 - 2m_2$.

Faça $v_1 \leftarrow m_1$ onde a máscara é verdadeira.

Faça $v_2 \leftarrow m_2$ onde a máscara é verdadeira.

Destrua vetores m_1 e m_2 .

else

Saia do *loop*.

end if

end loop

Vimos assim que o melhor algoritmo de sorteio de spins é o Marsaglia. Ele funciona adequadamente tanto em sua versão seriada com na vetorial. O sorteio vetorial mais rápido é o recursivo.

4 *Termodinâmica do modelo de Heisenberg 3D*

Neste capítulo abordaremos a investigação termodinâmica do modelo estudado na região da transição de fase.

4.1 Transição de fases

O estudo de transição de fases é relevante para muitas disciplinas e em muitas áreas da Física. A transição de fase é caracterizada pela transformação de um sistema termodinâmico de uma fase ou estado para outro (27). São alguns de seus objetos de estudo os fluidos, materiais magnéticos, supercondutores e superfluidos. Elas ocorrem devido a interações de um número grande de partículas.

Segundo a classificação moderna, a transição de fase de primeira ordem ocorre quando ela envolve um calor latente, como na fusão da água. As transições de segunda ordem, também chamadas de transições contínuas, possuem uma divergência na susceptibilidade, um comprimento de correlação infinito e um decaimento das correlações com lei de potência. Um exemplo é a transição ferromagnética.

A transição de fase pode ser caracterizada por uma quantidade não-nula abaixo da temperatura crítica e zero acima dela: o parâmetro de ordem. Ele varia com t^β nas proximidades da T_c , onde $t \equiv (T_c - T)/T_c$ (17), e T é a temperatura do sistema. No caso em que a magnetização é o parâmetro de ordem, como o nosso, ela pode ter a forma $m = \mathcal{B}t^\beta$. Na prática é comum serem necessários termos de correção de forma que m pode ser escrita como

$$m = \mathcal{B}_0 t^\beta \{1 + B(t)^x + \dots\}, \quad (4.1)$$

com $x > 0$.

Os experimentos indicam a existência de classes de universalidade, que ainda precisam

ser provadas rigorosamente. Esses expoentes são importantes porque as correlações de extremo longo alcance não ocorrem fora da temperatura crítica e os expoentes obedecem a certas relações que transcendem um sistema em particular.

De acordo com a hipótese de universalidade, os expoentes críticos e as funções de escala dependem apenas de algumas propriedades globais, como a dimensionalidade, o alcance das interações e a simetria do parâmetro de ordem (15).

As formas de escala das quantidades termodinâmicas calor específico c , magnetização m e susceptibilidade χ para $t \rightarrow 0$ são

$$c \approx c_\infty(t) + L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}(tL^{1/\nu}) \quad (4.2)$$

$$m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}), \quad (4.3)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}). \quad (4.4)$$

Pode-se definir outro expoente crítico δ na T_c como:

$$m \approx DH^{1/\delta}. \quad (4.5)$$

onde H é o campo magnético.

Tais expoentes críticos já foram determinados em diferentes sistemas que são bem descritos pelo modelo de Heisenberg. Determinações experimentais recentes são mostradas na Tabela 4.1.

Várias relações para os expoentes críticos foram propostas. Uma dessas relações é a de escala, $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, para modelos teóricos e $\alpha + 2\beta + \gamma \lesssim 2$ em experimentos, cujos resultados conduzem à conjectura da igualdade.

A hipótese de escala estática tem como consequência a igualdade na relação de escala, e a predições novas sobre a equação de estado na vizinhança da T_c . Ela assume que certas funções termodinâmicas são funções homogêneas de seus argumentos.

Os modelos teóricos são pertinentes porque cada um deles produz um conjunto de expoentes críticos independentemente da T_c . Os modelos de Ising e de Heisenberg parecem espelhar até um dado momento resultados de sistemas fluidos e magnéticos, respectivamente. Um dos primeiros objetivos na investigação de expoentes críticos é encontrar os modelos teóricos adequados e entender que características do modelo são relevantes nesse estudo.

A investigação de expoentes críticos dos modelos não tratáveis analiticamente tem sido

Tabela 4: Determinações experimentais recentes de expoentes críticos da classe de universalidade de Heisenberg. As citações anteriores a 2003 foram encontradas por Campostrini *et al.* (15).

Citação	Ano	Material	γ	β	δ
(28)	1980	Ni		$0,354 \pm 0,014$	
(29)	1981	Fe		$0,367 \pm 0,005$	
(30)	1995	Ni	$1,345 \pm 0,010$	$0,395 \pm 0,010$	$4,35 \pm 0,06$
(31)	1995	Gd ₂ BrC	$1,392 \pm 0,008$	$0,365 \pm 0,005$	$4,80 \pm 0,25$
(31)	1995	Gd ₂ IC	$1,370 \pm 0,008$	$0,375 \pm 0,008$	$4,68 \pm 0,25$
(32)	1999	Tl ₂ Mn ₂ O ₇	$1,31 \pm 0,05$	$0,44 \pm 0,05$	$4,65 \pm 0,15$
(33)	2000	La _{0,82} Ca _{0,18} MnO ₃		$0,383 \pm 0,009$	
(34)	2000	La _{0,95} Ca _{0,05} MnO ₃	$1,39 \pm 0,05$	$0,36 \pm 0,07$	$4,75 \pm 0,15$
(35)	2000	Gd(0001)		$0,376 \pm 0,015$	
(36)	2000	Gd ₂ CuO ₄	$1,32 \pm 0,02$	$0,34 \pm 0,01$	
(37)	2000	C ₈₀ Pd ₂₀ (liq)	$1,42 \pm 0,05$		
(37)	2000	C ₈₀ Pd ₂₀ (sol)	$1,40 \pm 0,08$		
(38)	2001	GdS		$0,38 \pm 0,02$	
(39)	2001	CrO ₂	$1,43 \pm 0,01$	$0,371 \pm 0,005$	
(39)	2001	CrO ₂	$1,43 \pm 0,01$	$0,371 \pm 0,005$	
(40)	2001	La _{0,8} Ca _{0,2} MnO ₃	1,45	0,36	
(41)	2008	Pr _{0,73} Ca _{0,27} MnO ₃	$1,36 \pm 0,02$	$0,36 \pm 0,02$	$4,81 \pm 0,02$
(42)	2009	Eu ₈ Ga ₁₆ Ge ₃₀		$0,356 \pm 0,3$	
(43)	2009	La _{0,82} Ca _{0,18} MnO ₃	1,38	0,37	4,8
(43)	2009	La _{0,81} Ca _{0,19} MnO ₃	1,34	0,38	4,8
(43)	2009	La _{0,80} Ca _{0,20} MnO ₃	1,38	0,37	4,8
(44)	2009	CdCr ₂ S ₄	$1,44 \pm 0,02$	$0,33 \pm 0,04$	$5,38 \pm 0,01$

propulsionada pelo advento de computadores e de algoritmos convenientes. A simulação computacional por Monte Carlo tem permitido um resultado quantitativo melhor para uma variedade de fenômenos em diversas condições. Ela será abordada na próxima seção.

4.2 Monte Carlo

Uma das técnicas mais usadas na Física é a simulação Monte Carlo, que pode ser conjugada com métodos teóricos. Ela se baseia na amostragem aleatória e em geral seu uso é conjugado com o de geradores de números pseudo-aleatórios. Essa designação abrange uma diversidade de métodos que via de regra seguem o padrão mostrado no Algoritmo 7 (45).

Algoritmo 7 Padrão geral de um método Monte Carlo

Define-se um domínio das entradas possíveis.

Gera-se entradas aleatoriamente a partir de uma distribuição de probabilidade do domínio.

Realiza-se um procedimento determinístico das entradas sorteadas.

Agrega-se os resultados obtidos em um único resultado.

Para o estudo de transição de fases ou de propriedades dinâmicas precisamos gerar amostras de onde obtemos as grandezas de interesse (energia, correlações etc.). Se escolhermos o ensemble canônico, a probabilidade de cada estado é dada por:

$$p_i = \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z}, \quad (4.6)$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$, $Z = \sum_{i=1}^M \exp(-\beta E_i)$ é a função partição e M é o número de configurações possíveis.

Uma estratégia possível para gerar uma seqüência de estados com a distribuição desejada é a realização de um processo estocástico tal que a p_i seja sua distribuição estacionária.

No processo estocástico o sistema segue uma regra probabilística para evoluir. Um estado pode levar a uma série de outros estados, cada um com uma probabilidade diferente, que pode depender dos estados assumidos anteriormente.

Um caso particular é a cadeia de Markov, que é um processo estocástico em que o estado atual só depende do estado imediatamente anterior. Ele é definido pelo espaço de estados e das taxas ou probabilidades de transição (46). Ele pode ser usado para obtermos a amostra de estados que desejamos, ao chegarmos na distribuição de probabilidade

desejada partindo de um distribuição inicial.

Consideremos um espaço de N estados discretos, $\vec{p}(t)$ é o vetor distribuição de probabilidade de N elementos, e a matriz de transição \mathbf{T} , em que cada elemento T_{ij} indica a probabilidade de transição do estado j para o estado i . A probabilidade $\vec{p}(t+1)$ será dada por

$$\vec{p}(t+1) = \mathbf{T}\vec{p}(t).$$

Dessa maneira, partindo do tempo inicial $t = 0$, a distribuição de probabilidade no tempo n será

$$\vec{p}(n) = \mathbf{T}^n \vec{p}(0).$$

Para a distribuição estacionária, esperamos que

$$\mathbf{T}\vec{p}_{est} = \vec{p}_{est}$$

de maneira que \vec{p}_{est} é o autovetor da matriz de transição \mathbf{T} com autovalor 1. A distribuição estacionária é única se o processo for ergódico: se de um estado qualquer pudermos chegar a qualquer outro em um número finito de transições.

Para alcançarmos a distribuição desejada, escolhemos as probabilidades de transição tais que obedeçam a condição de balanço detalhado

$$T_{ij}p_j = T_{ji}p_i. \quad (4.7)$$

Sob essa condição, temos que no tempo $t+1$

$$\begin{aligned} p_j(t+1) &= \sum_{i=1}^N T_{ji}p_i(t) \\ &= \sum_{i=1}^N T_{ij}p_j(t) \quad (\text{via Equação 4.7}) \\ &= p_j(t) \sum_{i=1}^N T_{ij} \\ &= p_j(t), \end{aligned}$$

isto é, alcançamos uma distribuição estacionária.

Para simular estados no ensemble canônico, que é nosso caso, podemos definir

$$T_{ij} = \min[1, \exp(-\beta\Delta E)]$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, $\Delta E = E_i - E_j$ e E é a energia do estado. Essa definição é a base do algoritmo de Metropolis. Outros algoritmos possíveis são o Metropolis híbrido, onde o Metropolis é combinado com a Super-relaxação, a qual reduz a correlação entre estados consecutivos, e o Wolff, que se baseia no teorema de Fortuin-Kastelein (3, 47, 48). Todos esses algoritmos são descritos no capítulo Termodinâmica do modelo de Heisenberg 3D.

A Tabela 4.2 elenca expoentes críticos determinados por simulação e teoricamente.

Utilizamos o método Monte Carlo para gerar uma amostra de configurações em dada temperatura e estimar a energia e a magnetização. Destas calculamos as grandezas de interesse.

A configuração é uma rede cúbica simples $L \times L \times L$ de spins clássicos, representados por vetores tridimensionais unitários.

O tamanho de rede L é um número par de sítios em uma aresta. Ele foi escolhido desta forma para possibilitar a vantagem computacional em dividir-se a rede em duas sub-redes. Os tamanhos L foram escolhidos também de maneira que tivéssemos pelo menos cinco pares ($L, L' = 2L$) entre os tamanhos de rede escolhidos para a determinação do cumulante de Binder na temperatura crítica para a rede infinita U_4^* , que é um parâmetro universal.

Implementamos três algoritmos Monte Carlo: o de Metropolis (em versão seriada e vetorizada), a Super-relaxação (*Overrelaxation*) combinada com Metropolis, e o de Wolff, que serão apresentados no decorrer do texto.

4.3 Metropolis

O algoritmo de Metropolis é o modo mais comum e um dos mais simples de gerar configurações em dada temperatura. No entanto a energia e a magnetização podem exibir uma correlação significativa mesmo em medidas distantes de muitos passos de Monte Carlo.

Seu desenho geral é apresentado no Algoritmo 8.

A unidade de “tempo” usada é o passo Monte Carlo (MCS), onde 1 MCS corresponde à atualização de $L \times L \times L$ spins da rede. Em todos os algoritmos Metropolis implementados cada sítio é visitado uma única vez por MCS.

No algoritmo Metropolis seriado, usado na investigação inicial, os spins são armaze-

Tabela 5: Determinações simulacionais e teóricas recentes de expoentes críticos da classe de universalidade de Heisenberg. As citações anteriores a 2003 foram encontradas por Campostrini *et al.* (15). MC: Monte Carlo. HT: série de alta temperatura. FT: métodos *field-theory*. SFM: método *scaling-field*. RG: grupo de renormalização. CRG: grupo de renormalização contínuo.

Citação	Ano	Método	γ	ν	β
(15)	2002	MC+HT	$1,3960 \pm 0,0009$	$0,7112 \pm 0,0005$	$0,3689 \pm 0,0003$
(18)	2009	MC		$0,707 \pm 0,006$	
(15)	2002	MC	$1,3957 \pm 0,0022$	$0,7113 \pm 0,0011$	$0,3691 \pm 0,0006$
(49)	2000	MC	$1,393 \pm 0,004$	$0,710 \pm 0,002$	$0,3685 \pm 0,0011$
(50)	2000	MC	$1,3909 \pm 0,0030$	$0,6949 \pm 0,0038$	$0,3535 \pm 0,0030$
(51)	1996	MC	$1,396 \pm 0,003$	$0,7128 \pm 0,0014$	$0,3711 \pm 0,0009$
(52–54)	1993	MC	$1,389 \pm 0,014$	$0,704 \pm 0,006$	$0,362 \pm 0,003$
(55)	1991	MC	$1,390 \pm 0,023$	$0,706 \pm 0,009$	$0,364 \pm 0,005$
(56)	1997	HT sc	$1,406 \pm 0,003$	$0,716 \pm 0,002$	$0,3710 \pm 0,0013$
(56)	1997	HT bcc	$1,402 \pm 0,003$	$0,714 \pm 0,002$	$0,3700 \pm 0,0013$
(57)	1993	HT	$1,40 \pm 0,01$	$0,712 \pm 0,010$	$0,368 \pm 0,006$
(58)	2005	FT	$1,378 \pm 0,037$	$0,709 \pm 0,030$	$0,359 \pm 0,013$
(59)	2001	FT $d = 3$ exp	$1,3882 \pm 0,0010$	$0,7062 \pm 0,0007$	$0,3655 \pm 0,0005$
(60)	1998	FT $d = 3$ exp	$1,3895 \pm 0,0050$	$0,7073 \pm 0,0035$	$0,3662 \pm 0,0025$
(61)	1991	FT $d = 3$ exp	$1,3926 \pm 0,0013$	$0,7096 \pm 0,0008$	
(62)	1977	FT $d = 3$ exp	$1,386 \pm 0,004$	$0,705 \pm 0,003$	$0,3645 \pm 0,0025$
(63)	2007	FT ϵ -exp	$1,234 \pm 0,005$		$0,325 \pm 0,002$
(60)	1998	FT ϵ -exp	$1,382 \pm 0,009$	$0,7045 \pm 0,0055$	$0,3655 \pm 0,0035$
(64)	1998	FT ϵ -exp	1,39	0,708	0,367
(65)	2000	FT $(d - 2)$ -expi		$0,695 \pm 0,010$	
(66)	2010	RG	$1,363 \pm 0,008$	$0,69 \pm 0,02$	
(67)	1984	SFM	$1,40 \pm 0,03$	$0,715 \pm 0,020$	$0,373 \pm 0,011$
(68)	2001	CRG		0,74	0,37
(69)	2001	CRG	1,374	0,704	0,369
(70)	1996	CRG	1,465	0,747	0,388

Algoritmo 8 Metropolis

```

Defina configuração inicial do sistema.
loop
  Calcule a energia inicial  $E_i$  da configuração.
  Escolha um sítio.
  Sorteie um novo spin para esse sítio.
  Calcule a nova energia  $E_f$  da configuração.
  if  $\Delta E = E_f - E_i < 0$  then
    Troque estado antigo pelo novo.
  else
    if  $\exp(-\beta\Delta E) > r$  then
      Não troque o spin antigo pelo novo.
    else
      Troque o spin antigo pelo novo.
    end if
  end if
end loop

```

nados em uma matriz `spin` $n \times 3$. Esta matriz é dividida em duas sub-redes em que os primeiros vizinhos de um sítio pertencem à outra sub-rede. A Figura 6 mostra as sub-redes na rede quadrada representada por `spin`.

A configuração inicial é obtida sorteando-se sequencialmente um spin para cada sítio.

No cálculo da diferença de energia entre configurações basta calcular a diferença entre as energias do sítio visitado antes e após a escolha de um spin alternativo. A função `EnergiaSítio` determina a energia associada a um dado spin e seus vizinhos.

Para otimizar o cálculo da diferença de energia entre configurações os vizinhos de cada sítio foram tabelados.

O Algoritmo 9 mostra o algoritmo geral para um MCS, e em seguida alguns requisitos necessários a ele são apresentados.

O algoritmo de identificação de sub-redes é mostrado no Algoritmo 10. A função `IndiceSítio` calcula o índice correspondente as coordenadas (i, j, k) e é dada pela fórmula $i + (j - 1)L_x + (k - 1)L_xL_y$.

O índice dos vizinhos a um sítio é feito com o uso das funções `mais` e `menos` sobre a coordenada desejada em `IndiceSítio`. Essas funções garantem a condição de contorno periódica tornando-as iguais a 1 ao acrescentar-se 1 a uma coordenada L ou iguais a L ao subtrair-se 1 a uma coordenada 1, respectivamente.

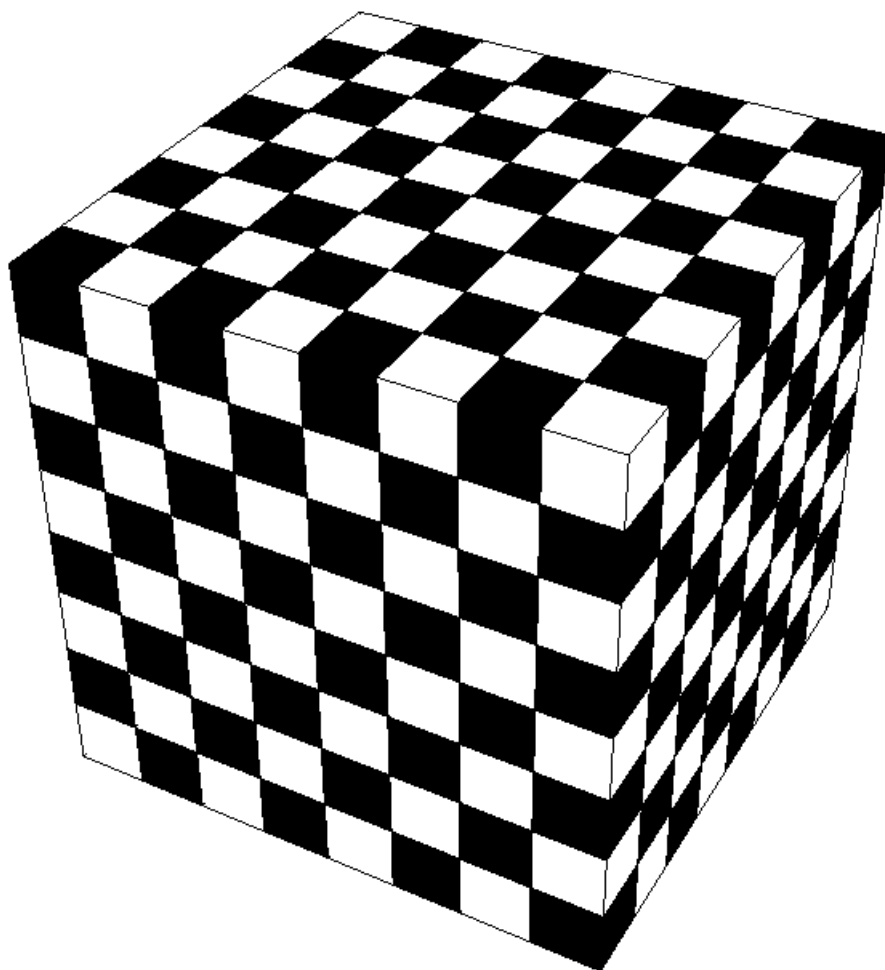


Figura 6: Sub-redes da rede cúbica com $L = 8$. Cada cor representa uma sub-rede diferente.

Algoritmo 9 Metropolis Seriado

```

for rede = 0 to 1 do
  for sítio = 1, n do
    atualiza ← falso.
    if subrede(sítio) = rede then
      for componente = 1 to 3 do
         $s_i(\text{componente}) \leftarrow \text{spin}(\text{sítio}, \text{componente}).$ 
      end for
      {Identificação de vizinhos.}
      direita ← viz(sítio, 1).
      esquerda ← viz(sítio, 2).
      frente ← viz(sítio, 3).
      trás ← viz(sítio, 4).
      cima ← viz(sítio, 5).
      baixo ← viz(sítio, 6).
      for componente = 1 to 3 do
         $s_{viz}(1, \text{componente}) = \text{spin}(\text{direita}, \text{componente}).$ 
         $s_{viz}(2, \text{componente}) = \text{spin}(\text{esquerda}, \text{componente}).$ 
         $s_{viz}(3, \text{componente}) = \text{spin}(\text{frente}, \text{componente}).$ 
         $s_{viz}(4, \text{componente}) = \text{spin}(\text{trás}, \text{componente}).$ 
         $s_{viz}(5, \text{componente}) = \text{spin}(\text{cima}, \text{componente}).$ 
         $s_{viz}(6, \text{componente}) = \text{spin}(\text{baixo}, \text{componente}).$ 
      end for
       $E_i \leftarrow \text{EnergiaSítio}(s_i, s_{viz}).$ 
      Sorteie spin alternativo  $s_f$ .
       $E_f \leftarrow \text{EnergiaSítio}(s_f, s_{viz}).$ 
      {Verifica se spin é atualizado ou não.}
      if  $E_f < E_i$ . then
        atualiza ← verdadeiro.
      else if  $r \leq \exp[-\beta(E_f - E_i)]$ . then
        atualiza ← verdadeiro.
      end if
      if atualiza é verdadeiro then
        energia ← energia -  $E_i$  +  $E_f$ . {Atualiza energia total.}
        for componente = 1 até 3 do {Atualiza magnetização total.}
          magnetização(componente) ← magnetização(componente) -
             $s_i(\text{componente}) + s_f(\text{componente}).$ 
        end for
        for componente = 1 até 3 do {Atualiza sítio.}
           $\text{spin}(\text{sítio}, \text{componente}) \leftarrow s_f(\text{componente}).$ 
        end for
      end if
    end if
  end for
end for
{Normaliza magnetização.} magnetização = magnetização/n

```

Algoritmo 10 Identificação de sítios das sub-redes.

```

for k = 1 to  $L_z$  do
  for j = 1 to  $L_y$  do
    for i = 1 to  $L_x$  do
      sítio = IndiceSítio(i, j, k).
      if módulo(i + j + k, 2) = 1 then
        subrede(sítio) = 1.
      else
        subrede(sítio) = 0.
      end if
    end for
  end for
end for

```

4.4 Exploração inicial

Passamos agora à exploração inicial das quantidades de interesse, com a energia, a magnetização e cumulantes. Usamos nestes casos uma faixa de temperatura ampla, que incluía a região de transição de fase.

A energia E é calculada a partir da Hamiltoniana do modelo na rede, após a atualização de estado pelo método escolhido. A energia obtida não é dividida pelo número de spins para processamentos posteriores.

No cálculo vetorizado de E era realizado o produto simultâneo elemento a elemento da matriz de spins com ela mesma deslocada de um sítio em um dos sentidos para cada direção possível, somava-se esses produtos e todos os elementos resultantes vetorialmente.

A Figura 7 mostra a dependência da energia com a temperatura para diferentes tamanhos de rede. As diversas curvas parecem convergir rapidamente com o aumento de L . Nota-se também o aumento da inclinação da curva próximo a temperatura crítica $T_c \approx 1,4$.

O comportamento da energia e da magnetização com a temperatura concordaram pelo menos qualitativamente com o resultado de Watson *et al.* (1). As barras de erro foram no entanto bem pequenas, em contraste com a observação daquele trabalho para a região de transição. Provavelmente isso se deve ao poder computacional atual, já que o algoritmo usado é basicamente o mesmo: o Metropolis seriado.

A magnetização m é obtida somando-se todos os componentes dos spins separadamente e calculando-se o módulo deste vetor soma dividido pelo número de spins. A implementação vetorizada consiste na soma de todos os componentes dos spins primei-

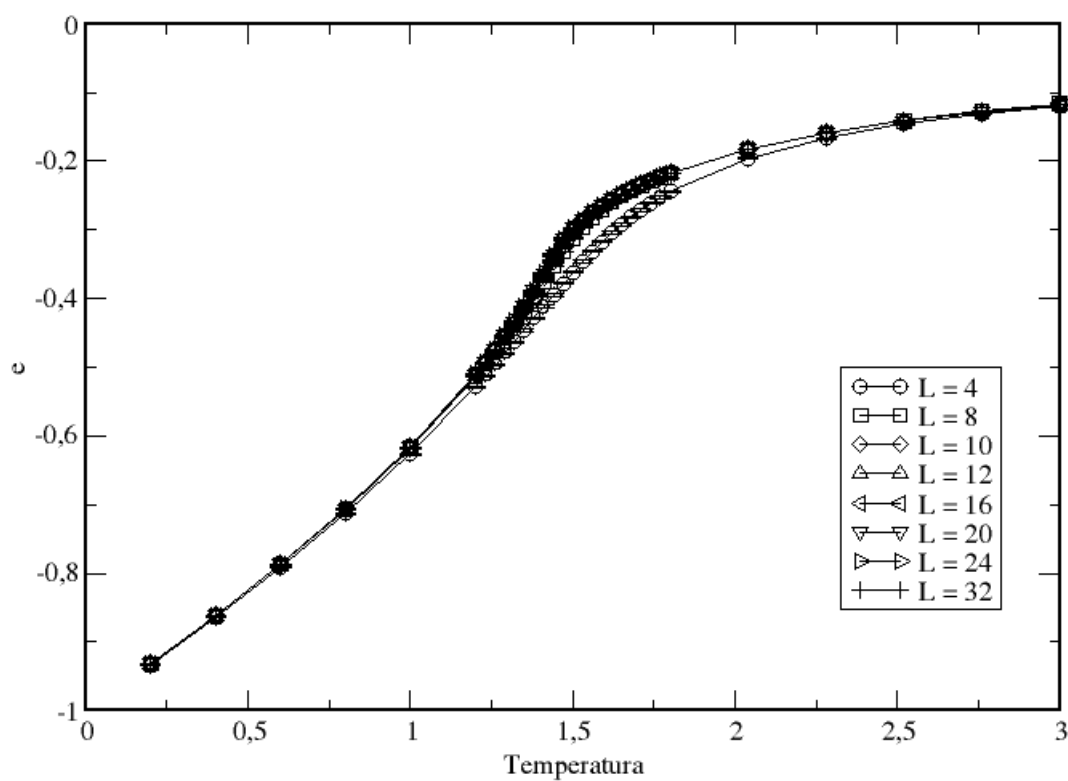


Figura 7: Energia por spin e em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

ramente na linha, depois na coluna e na profundidade da rede, de maneira que a soma resultante era um vetor de três elementos. O módulo m também foi calculado vetorialmente.

A magnetização diminui com a temperatura de maneira mais acentuada com o maior tamanho de rede, como se vê na Figura 8. Para as redes maiores m aproxima-se mais de zero para temperaturas altas.

Os cumulantes calculados na exploração inicial foram o calor específico c , a susceptibilidade χ , U_3 , U_4 , o cumulante de Binder U_{4B} , e os cumulantes D_{K_2} , D_{K_3} e D_{K_4} . Algumas delas foram expandidas em termos de médias termodinâmicas das potências da energia e da magnetização através do programa *Mathematica*, e algumas derivadas também foram obtidas desta maneira. Dentre as derivadas apresentadas, somente a derivada da susceptibilidade foi usada neste trabalho. As demais derivadas são mostradas como referência.

O calor específico foi calculado de

$$c = \frac{1}{T^2 L^3} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (4.8)$$

No comportamento de c com a temperatura (Figura 9) observa-se melhor o aumento da derivada da energia com a temperatura próximo a T_c . O calor específico c parece se comportar como uma lei de potência com prefatores diferentes antes e depois da transição.

O calor específico, mostrado na Figura 9 apresenta picos que são mais acentuados e deslocados para a esquerda para redes maiores em relação às redes menores. Eles são localizados próximos a T_c .

A expressão para a susceptibilidade magnética é

$$\chi = \frac{L^3}{T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (4.9)$$

O pico de susceptibilidade apresenta um aumento mais acentuado com o tamanho de rede que o calor específico, como pode ser visto na Figura 10. Os picos também se apresentam nas vizinhanças de T_c , e são deslocados para a esquerda com o tamanho de rede.

Apresentamos agora o comportamento dos demais cumulantes com a temperatura. Estes são de interesse especial para a obtenção da temperatura crítica T_c e do parâmetro universal U_{4B}^* .

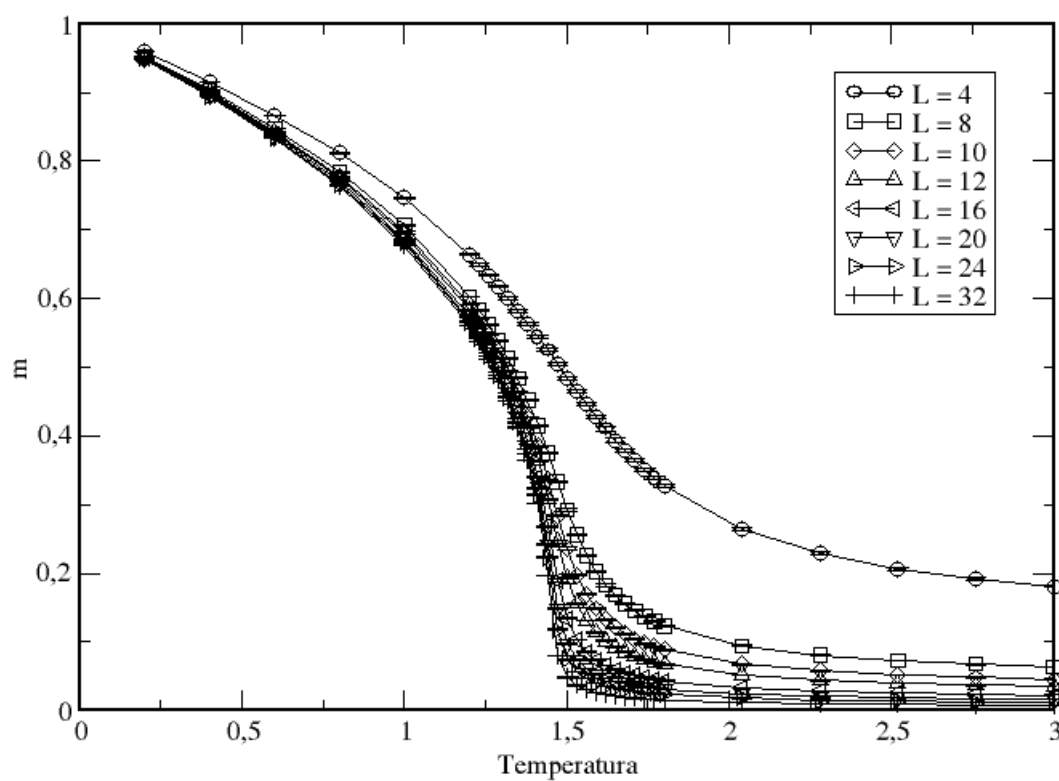


Figura 8: Magnetização por spin m em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

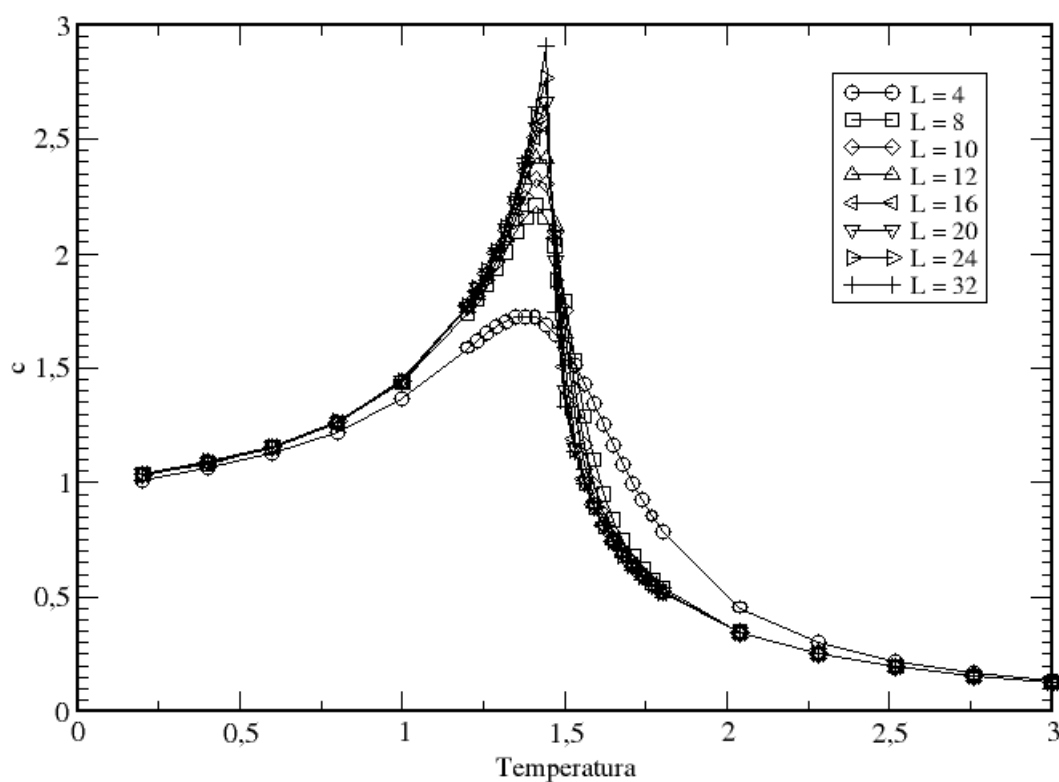


Figura 9: Calor específico c em função da temperatura para diferentes redes. As barras de erro não são mostradas por serem muito menores que os símbolos. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

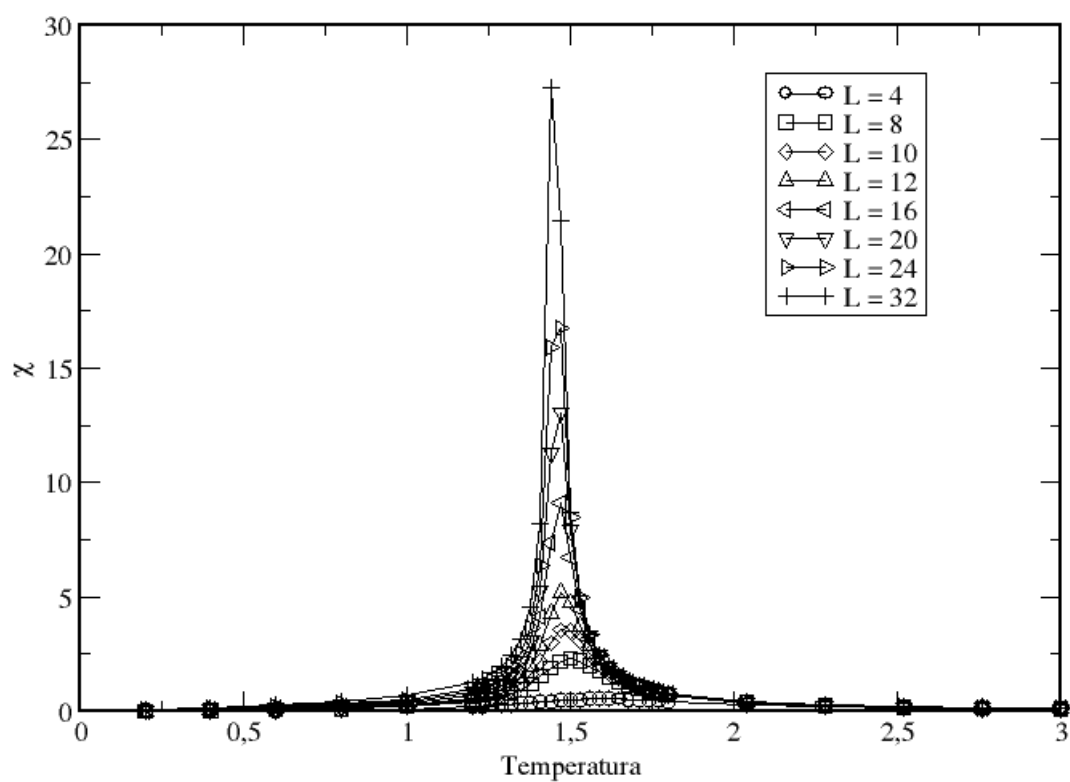


Figura 10: Susceptibilidade χ em função da temperatura para diferentes redes. As barras de erro não são mostradas por serem muito menores que os símbolos. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

O cumulante U_3 é dado por

$$\begin{aligned} U_3 &\equiv \frac{\langle(m - \langle m \rangle)^3\rangle}{\langle m \rangle \langle(m - \langle m \rangle)^2\rangle} \\ &= \frac{2\langle m \rangle^3 - 3\langle m \rangle \langle m^2 \rangle + \langle m^3 \rangle}{\langle m \rangle^3 - \langle m \rangle \langle m^2 \rangle}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

Na Figura 11 vemos como o cumulante U_3 possui um mínimo cada vez mais abrupto com o aumento do tamanho de rede, em torno de $T_c \approx 1,4$. Aparentemente o mínimo de U_3 converge para um valor em particular.

O cumulante U_4 é definido como

$$\begin{aligned} U_4 &\equiv \frac{3\langle(m - \langle m \rangle)^2\rangle^2 - \langle(m - \langle m \rangle)^4\rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \\ &= \frac{6\langle m \rangle^4 - 12\langle m \rangle^2 \langle m^2 \rangle + 3\langle m^2 \rangle^2 + 4\langle m \rangle \langle m^3 \rangle - \langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

A Figura 12 mostra o cumulante U_4 , que também parece ter um mínimo mais abrupto com o tamanho de rede como o U_3 . No entanto após o mínimo o seu comportamento não é facilmente identificável. Não notamos nenhum padrão em particular nesta região, onde os erros são muito maiores que em outros lugares.

O cumulante de Binder, muito útil em investigações de transição de fase, é obtido de U_4 tornando $\langle m \rangle = 0$, o que é esperado na T_c . Sua expressão final torna-se

$$U_{4B} = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (4.12)$$

A Figura 13 mostra o comportamento de curvas de U_{4B} com diferentes tamanhos de rede.

O cumulante de Binder U_{4B} teve o comportamento esperado, com cruzamentos de diferentes tamanhos de rede na região de transição de fase, e decrescente.

O cumulante D_{K_2} é definido como:

$$\begin{aligned} D_{K_2} &\equiv \frac{\partial \langle(m - \langle m \rangle)^2\rangle}{\partial T} \\ &= \frac{1}{T^2} (2\langle E \rangle \langle m \rangle^2 - 2\langle m \rangle \langle Em \rangle - \langle E \rangle \langle m^2 \rangle + \langle Em^2 \rangle), \end{aligned} \quad (4.13)$$

O cumulante D_{K_2} apresenta um máximo e um mínimo próximos a transição de fase. A princípio qualquer um deles poderia ser usado para a determinação de T_c , uma vez que ambos parecem convergir para uma única temperatura com o aumento do tamanho de

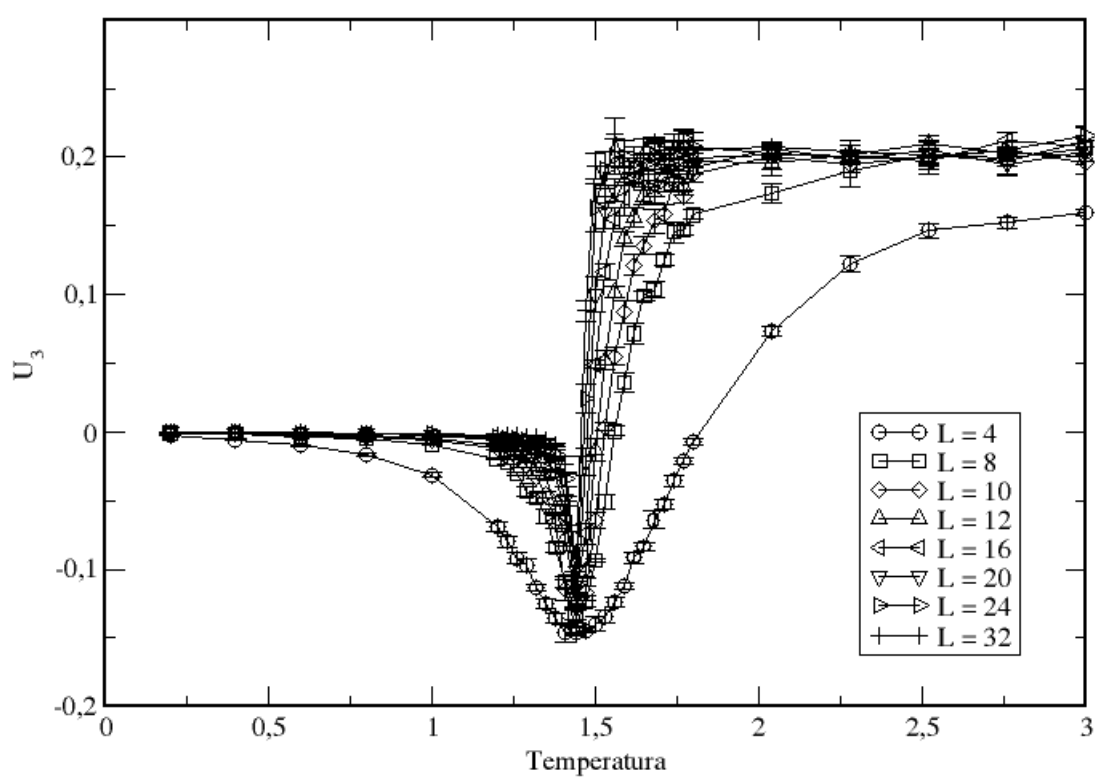


Figura 11: Cumulante U_3 em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

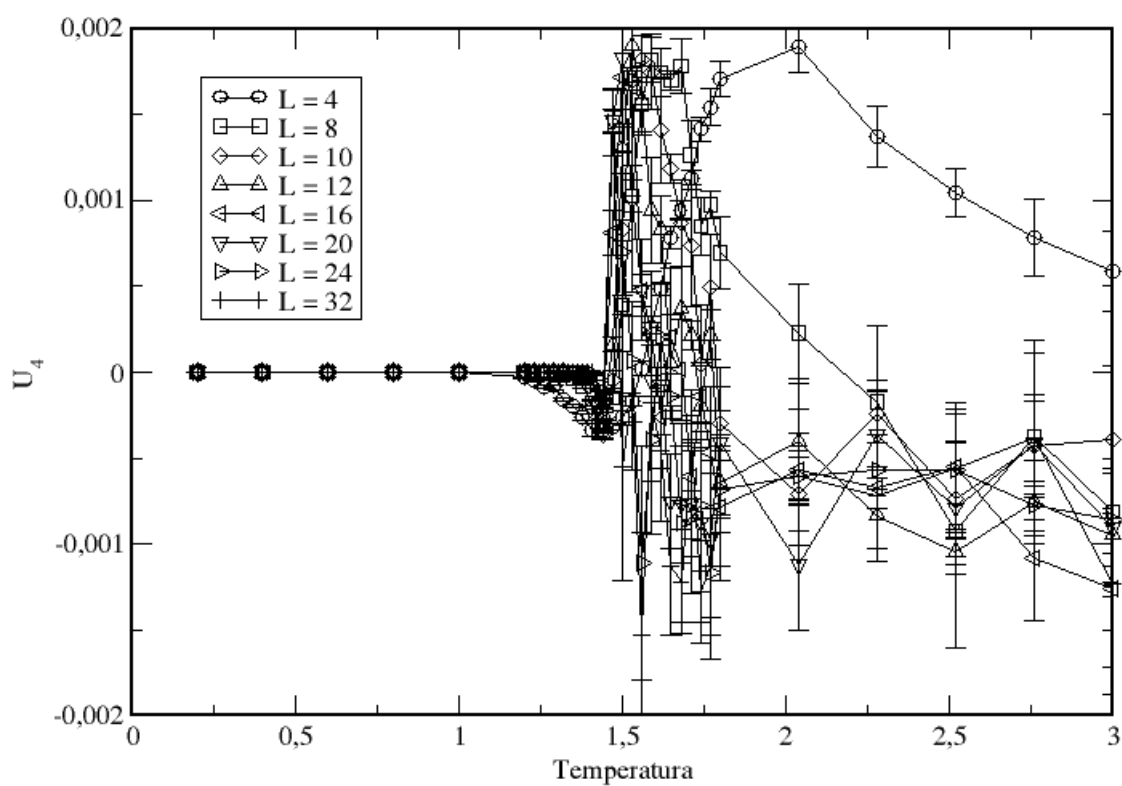


Figura 12: Cumulante U_4 em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

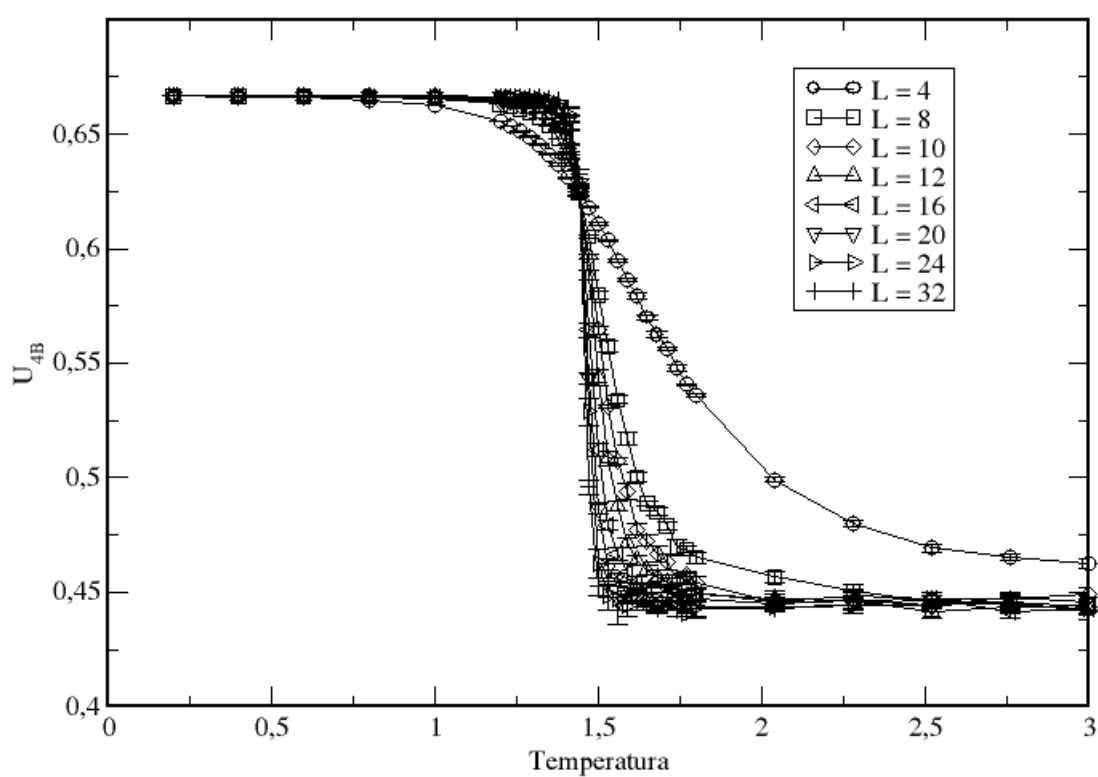


Figura 13: Cumulante de Binder U_{4B} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

rede.

O cumulante D_{K_3} é expresso como

$$\begin{aligned} D_{K_3} &\equiv \frac{\partial \langle (m - \langle m \rangle)^3 \rangle}{\partial T} \\ &= (1/T^2)(3\langle Em \rangle(2\langle m \rangle^2 - \langle m^2 \rangle) - 3\langle m \rangle \langle Em^2 \rangle - \\ &\quad \langle E \rangle(6\langle m \rangle^3 - 6\langle m \rangle \langle m^2 \rangle + \langle m^3 \rangle) + \langle Em^3 \rangle), \end{aligned} \quad (4.14)$$

O cumulante D_{K_3} tem um comportamento semelhante ao D_{K_2} , mas os extremos possuem uma faixa mais ampla de temperaturas. Novamente, qualquer um deles poderia, a princípio, ser usado na determinação da T_c .

O cumulante D_{K_4} é definido como

$$\begin{aligned} D_{K_4} &\equiv \frac{\partial (\langle (m - \langle m \rangle)^4 \rangle - 3\langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle^2)}{\partial T} \\ &= (1/T^2)(-2(12\langle m \rangle^3 \langle Em \rangle - 6\langle m \rangle^2 \langle Em^2 \rangle + 3\langle m^2 \rangle \langle Em^2 \rangle + 2\langle Em \rangle \langle m^3 \rangle + \\ &\quad 2\langle m \rangle(-6\langle Em \rangle \langle m^2 \rangle + \langle Em^3 \rangle)) + \langle E \rangle(6(4\langle m \rangle^4 - 6\langle m \rangle^2 \langle m^2 \rangle + \langle m^2 \rangle^2) + \\ &\quad 8\langle m \rangle \langle m^3 \rangle - \langle m^4 \rangle) + \langle Em^4 \rangle). \end{aligned} \quad (4.15)$$

O comportamento do cumulante D_{K_4} é caracterizado por um mínimo que desloca-se para a esquerda e aumenta com o aumento do tamanho da rede, cercado por dois máximos largos. A melhor escolha para encontrar-se T_c parece ser através do mínimo.

Foi interessante o conhecimento prévio de como os cumulantes se comportavam, como uma maneira de examinar a qualidade de suas implementações e para servir de base para explicação de eventuais resultados envolvendo-os.

As derivadas destes cumulante em relação a temperatura são:

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \frac{2\langle E \rangle^2(T + \langle E \rangle) - (2T + 3\langle E \rangle)\langle E^2 \rangle + \langle E^3 \rangle}{L^3 T^4}, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial T} = 1/T^3((T + 2\langle E \rangle)\langle m \rangle^2 - 2\langle m \rangle \langle Em \rangle - (T + \langle E \rangle)\langle m^2 \rangle + \langle Em^2 \rangle), \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_3}{\partial T} &= (\langle m \rangle^4 \langle Em^2 \rangle + 3\langle m \rangle^2 \langle Em \rangle \langle m^3 \rangle - \langle Em \rangle \langle m^2 \rangle \langle m^3 \rangle + \langle E \rangle \langle m \rangle (\langle m \rangle^3 \langle m^2 \rangle - \\ &\quad 2\langle m \rangle^2 \langle m^3 \rangle + \langle m^2 \rangle \langle m^3 \rangle) - \langle m \rangle^3 (2\langle Em \rangle \langle m^2 \rangle + \langle Em^3 \rangle) + \langle m \rangle (-\langle Em^2 \rangle \langle m^3 \rangle + \\ &\quad \langle m^2 \rangle \langle Em^3 \rangle)) / (T^2 \langle m \rangle^2 (\langle m \rangle^2 - \langle m^2 \rangle)^2), \end{aligned} \quad (4.18)$$

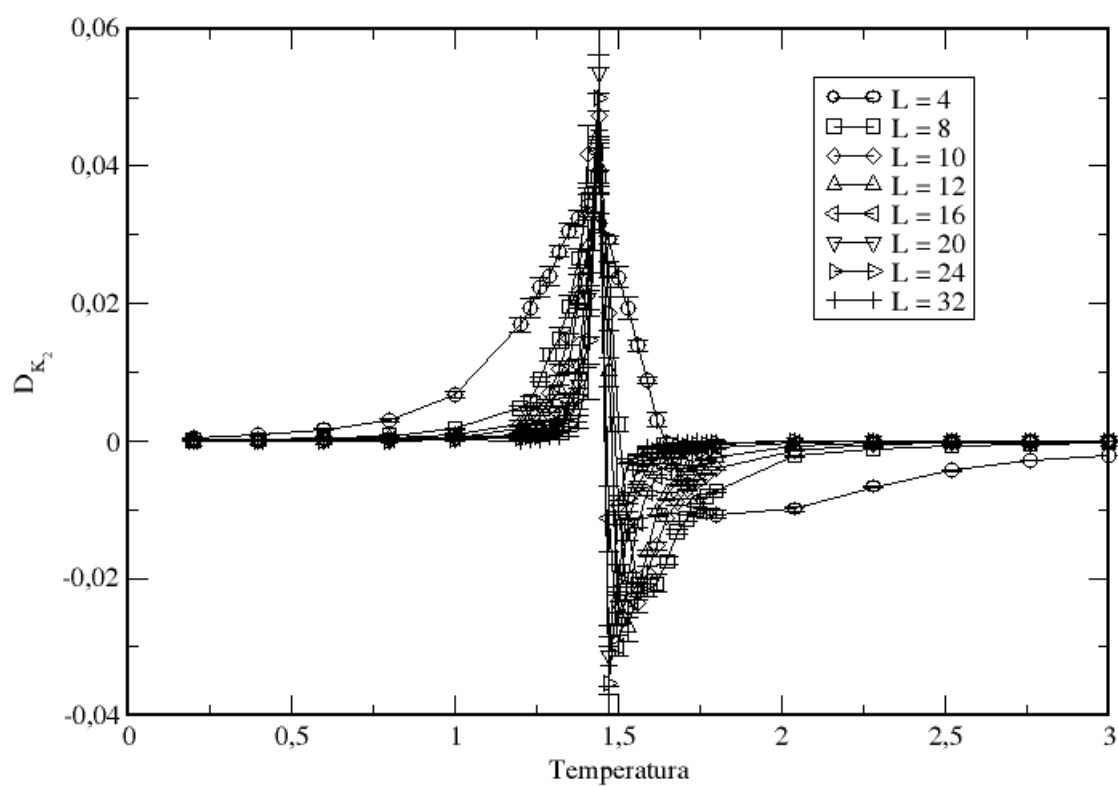


Figura 14: Cumulante D_{K_2} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

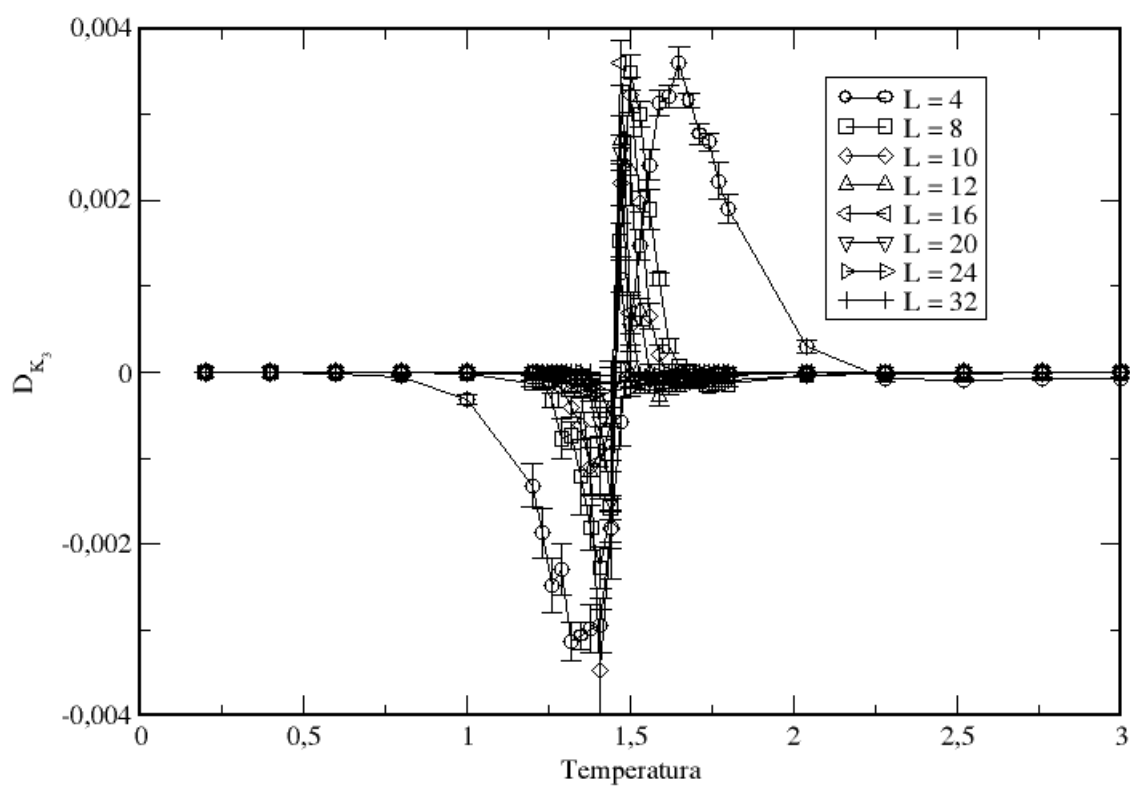


Figura 15: Cumulante D_{K_3} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

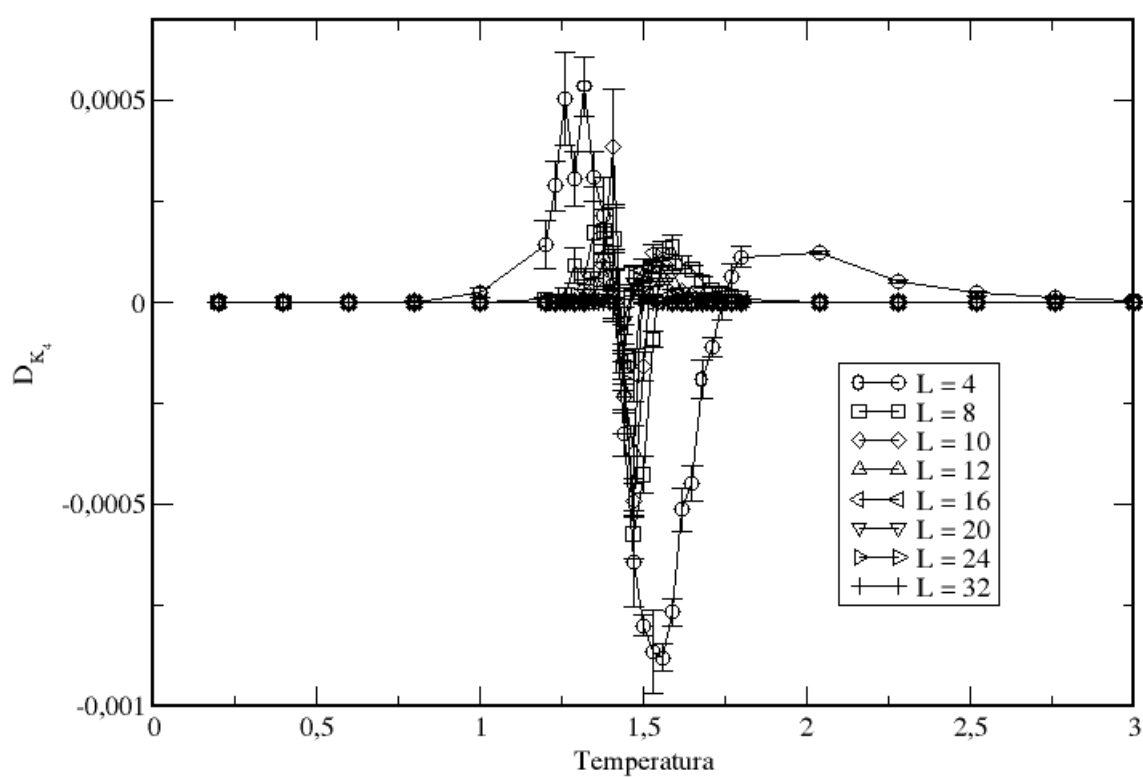


Figura 16: Cumulante D_{K_4} em função da temperatura para diferentes redes. O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_4}{\partial T} = & 1/(3T^2\langle m^2 \rangle^3)(24\langle m \rangle^3\langle Em \rangle\langle m^2 \rangle - 12\langle m \rangle^4\langle Em^2 \rangle + 12\langle m \rangle^2\langle m^2 \rangle\langle Em^2 \rangle + \\ & 4\langle m \rangle(-2\langle Em^2 \rangle\langle m^3 \rangle + \langle m^2 \rangle(-6\langle Em \rangle\langle m^2 \rangle + \langle Em^3 \rangle)) + \langle E \rangle\langle m^2 \rangle(-12\langle m \rangle^4 + \\ & 12\langle m \rangle^2\langle m^2 \rangle - \langle m^4 \rangle) + 2\langle Em^2 \rangle\langle m^4 \rangle + \langle m^2 \rangle(4\langle Em \rangle\langle m^3 \rangle - \langle Em^4 \rangle)), \quad (4.19) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial U_{4B}}{\partial T} = -((\langle E \rangle\langle m^2 \rangle - 2\langle Em^2 \rangle)\langle m^4 \rangle + \langle m^2 \rangle\langle Em^4 \rangle)/(3T^2\langle m^2 \rangle^3), \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{K_2}}{\partial T} = & 1/T^4(\langle E^2 \rangle(2\langle m \rangle^2 - \langle m^2 \rangle) + 2\langle E \rangle^2(-3\langle m \rangle^2 + \langle m^2 \rangle) - 2\langle E \rangle(2T\langle m \rangle^2 - \\ & 4\langle m \rangle\langle Em \rangle - T\langle m^2 \rangle + \langle Em^2 \rangle) - 2(\langle Em \rangle^2 + \langle m \rangle(-2T\langle Em \rangle + \langle E^2 m \rangle) + \\ & T\langle Em^2 \rangle) + \langle E^2 m^2 \rangle), \quad (4.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{K_3}}{\partial T} = & 1/T^4(6\langle m \rangle^2(-2T\langle Em \rangle + \langle E^2 m \rangle) - 3\langle E^2 m \rangle\langle m^2 \rangle + 6\langle Em \rangle(T\langle m^2 \rangle - \langle Em^2 \rangle) + \\ & 3\langle m \rangle(4\langle Em \rangle^2 + 2T\langle Em^2 \rangle - \langle E^2 m^2 \rangle) + 2\langle E \rangle^2(12\langle m \rangle^3 - 9\langle m \rangle\langle m^2 \rangle + \langle m^3 \rangle) - \\ & \langle E^2 \rangle(6\langle m \rangle^3 - 6\langle m \rangle\langle m^2 \rangle + \langle m^3 \rangle) + 2\langle E \rangle(6(T\langle m \rangle^3 - 3\langle m \rangle^2\langle Em \rangle + \\ & \langle Em \rangle\langle m^2 \rangle + \langle m \rangle(-T\langle m^2 \rangle + \langle Em^2 \rangle)) + T\langle m^3 \rangle - \langle Em^3 \rangle) - 2T\langle Em^3 \rangle + \\ & \langle E^2 m^3 \rangle), \quad (4.22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{K_4}}{\partial T} = & 1/T^4(\langle E^2 \rangle(6(4\langle m \rangle^4 - 6\langle m \rangle^2\langle m^2 \rangle + \langle m^2 \rangle^2) + 8\langle m \rangle\langle m^3 \rangle - \langle m^4 \rangle) - \\ & 2\langle E \rangle^2(60\langle m \rangle^4 - 72\langle m \rangle^2\langle m^2 \rangle + 9\langle m^2 \rangle^2 + 12\langle m \rangle\langle m^3 \rangle - \langle m^4 \rangle) - \\ & 2\langle E \rangle(24T\langle m \rangle^4 - 96\langle m \rangle^3\langle Em \rangle + 6\langle m^2 \rangle(T\langle m^2 \rangle - 2\langle Em^2 \rangle) + 36\langle m \rangle^2(-T\langle m^2 \rangle + \\ & \langle Em^2 \rangle) - 8\langle Em \rangle\langle m^3 \rangle + 8\langle m \rangle(9\langle Em \rangle\langle m^2 \rangle + T\langle m^3 \rangle - \langle Em^3 \rangle) - T\langle m^4 \rangle + \\ & \langle Em^4 \rangle) - 2(12\langle m \rangle^3(-2T\langle Em \rangle + \langle E^2 m \rangle) - 12\langle Em \rangle^2\langle m^2 \rangle + 3\langle Em^2 \rangle^2 + \\ & 6\langle m \rangle^2(6\langle Em \rangle^2 + 2T\langle Em^2 \rangle - \langle E^2 m^2 \rangle) + 3\langle m^2 \rangle(-2T\langle Em^2 \rangle + \\ & \langle E^2 m^2 \rangle) + 2\langle E^2 m \rangle\langle m^3 \rangle + 4\langle Em \rangle(-T\langle m^3 \rangle + \langle Em^3 \rangle) + 2\langle m \rangle(-2(3\langle E^2 m \rangle\langle m^2 \rangle + \\ & 6\langle Em \rangle(-T\langle m^2 \rangle + \langle Em^2 \rangle) + T\langle Em^3 \rangle) + \langle E^2 m^3 \rangle) + T\langle Em^4 \rangle) + \langle E^2 m^4 \rangle). \quad (4.23) \end{aligned}$$

4.5 Jackknife

Esta técnica é fundamental para o nosso trabalho estático, uma vez que graças a ela desenvolvemos um plano de obtenção de expoentes críticos mais preciso que o descrito anteriormente (4). Ela consiste, em linhas gerais, na determinação da estimativa de interesse excluindo uma ou mais observações por vez, e recalculando a estimativa deste novo conjunto de dados. Há com isso a redução do vício associado à medida.

A discussão adiante segue de perto o artigo de Miller (71). Seja Y_1, \dots, Y_n uma amostra de variáveis aleatórias independentes com mesma distribuição. Seja $\hat{\theta}$ o estimador do parâmetro θ baseado em toda a amostra anterior, de tamanho n . Seja $\hat{\theta}_{-i}$ o estimador correspondente baseado na amostra de tamanho $(g-1)h$ onde o i -ésimo grupo de tamanho h foi excluído. Definamos então

$$\tilde{\theta}_i = g\hat{\theta} - (g-1)\hat{\theta}_{-i} \quad (i = 1, \dots, g).$$

Podemos agora definir com clareza um estimador que elimina o vício de ordem $1/n$:

$$\tilde{\theta} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g \tilde{\theta}_i = g\hat{\theta} - (g-1) \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g \hat{\theta}_{-i}. \quad (4.24)$$

É esperado que a estatística

$$\frac{\sqrt{g}(\tilde{\theta} - \theta)}{\sqrt{\frac{1}{g-1} \sum_{i=1}^g (\tilde{\theta}_i - \tilde{\theta})^2}}$$

tenha uma distribuição t (72) com $g-1$ graus de liberdade e seja uma estatística essencial para a estimativa robusta de intervalo de confiança. Considerando que a distribuição t possua variância $\nu/(\nu-2)$, com ν sendo o número de graus de liberdade, e as propriedades do desvio padrão, deduzimos que

$$\sigma_{\tilde{\theta}} = \sqrt{\frac{g-1}{g-3}} \sqrt{\frac{1}{g(g-1)} \sum_{i=1}^g (\tilde{\theta}_i - \tilde{\theta})^2} \quad (4.25)$$

Realizamos *jackknife* sobre *jackknife*, na expectativa de reduzir o vício além da ordem $1/n$. Esta segunda estratégia foi utilizada quando da medida de grandezas diretamente na T_c .

4.6 Estratégia

Foram realizadas inicialmente cinco simulações para cada tamanho de rede e em vinte temperaturas entre 1,2 e 1,8. Os dados de energia e magnetização foram usados em grupos excluindo-se uma simulação por vez e com todas juntas, na construção de histogramas e cálculo das energias livres.

A temperatura crítica e o expoente crítico foram determinados em um mesmo processo, descrito no Algoritmo 11.

Algoritmo 11 Determinação da T_c e de ν .

Estime ν de cumulantes V .

Estime T_c de onde ν é igual para diferentes cumulantes.

loop

Calcule ν de cumulantes V na estimativa de T_c mais recente.

Calcule T_c de χ , U_3 , U_4 , D_{K_2} , D_{K_3} e D_{K_4} simultaneamente usando ν mais recente.

if Erro relativo de T_c e de ν são menores que a tolerância **then**

Saia do loop.

end if

end loop

Escreva T_c e ν em arquivo.

Os valores finais de T_c e de ν e seus erros foram obtidos por *jackknife*.

O cumulante U_{4B}^* obtido pelos métodos 2 e 3 usou os mesmos grupos de dados usados na determinação acima. Também usou-se *jackknife* em primeira ordem para sua determinação e do seu erro.

Em cada valor de T_c obtido de cada grupo realizou-se seis simulações, cujos dados foram novamente usados em grupos excluindo-se uma simulação por vez e com todas juntas. Calculou-se em cada um desses novos grupos para cada tamanho de rede o calor específico, a susceptibilidade e a magnetização, de onde obtivemos os expoentes α , β e γ e a quantidade U_{4B}^* (terceiro método) preliminar. Através da aplicação de dois *jackknives* consecutivos obtivemos o valor final destes parâmetros.

4.7 Multi-histogramas

O método de multi-histogramas (*weighted histogram analysis method* ou WHAM) permite a combinação de muitas simulações para calcular propriedades termodinâmicas como funções contínuas sobre uma faixa ampla de temperatura ou outras variáveis (13). Espera-se que esse método seja mais preciso que o uso de um único histograma. Descreveremos este método conforme sua apresentação em (13). Mostramos inicialmente a origem do método de histograma simples e em seguida apresentaremos o método com mais de um histograma.

Seja $H(E)$ a contagem de configurações com energia E , e $\mathcal{N}(E)$ o número de ocorrências de energia E em uma simulação com peso de Boltzmann $\exp(-\beta E)$. A média de uma grandeza termodinâmica $Q(E)$ é dada por

$$\langle Q(T_1) \rangle = \frac{\sum Q(E) \mathcal{N}(E)}{\sum \mathcal{N}(E)}.$$

Sabendo-se que $\mathcal{N}(E, T) \propto H(E) \exp(-\beta E)$, temos que

$$\frac{\mathcal{N}(E, T_1)}{\mathcal{N}(E, T_2)} = \exp[-(\beta_2 - \beta_1)E],$$

de maneira que

$$\langle Q(T_2) \rangle = \frac{\sum_E Q(E) \mathcal{N}(E) \exp[-(\beta_2 - \beta_1)E]}{\sum_E \mathcal{N}(E) \exp[-(\beta_2 - \beta_1)E]} \quad (4.26)$$

$$= \frac{\sum_E Q(E) H(E) \exp(-\beta_2 E)}{\sum_E H(E) \exp(-\beta_2 E)} \quad (4.27)$$

Assim temos a estimativa da quantidade $\langle Q \rangle$ a uma temperatura T_2 a partir de uma simulação feita a temperatura T_1

A função partição é dada por

$$Z = \sum_E W(E) \exp(-\beta E),$$

onde E é a energia, W é a densidade de estados e $\beta = 1/k_B T$. A energia livre é dada por

$$F = -\frac{\ln Z}{\beta}.$$

Consideremos os histogramas $H_n(E)$ obtidos em β_n , onde n indica uma simulação e varia de um a R . A melhor estimativa para a probabilidade não-normalizada da energia E a temperatura inversa β segundo as equações WHAM é

$$P(E, \beta) = \frac{\sum_{n=1}^R g_n^{-1} H_n(E) \exp(-\beta E)}{\sum_{m=1}^R N_m g_m^{-1} \exp(-\beta_m E - f_m)}, \quad (4.28)$$

onde $g_n = 2\tau_n + 1$ é uma medida da independência das energias da n -ésima simulação Monte Carlo, N_m é o número de dados na simulação m , τ_n é o tempo de relaxação, e os parâmetros de energia livre $f_n = -\beta F(\beta_n)$ são determinados da equação transcendental

$$e^{f_n} = \sum_E P(E, \beta). \quad (4.29)$$

As médias termodinâmicas $\langle Q(E, m) \rangle$ para uma temperatura arbitrária são calculadas

de

$$\langle Q(E, m) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n Q_i P(E, \beta_i)}{\sum_{i=1}^n P(E, \beta_i)} \quad (4.30)$$

onde o índice i identifica o intervalo de energia a que corresponde a medida e n é o número total de intervalos. O denominador foi usado para corrigir imprecisões numéricas, apesar de teoricamente seu valor ser unitário.

4.7.1 Determinação das energias livres f

Nesta tarefa podemos trabalhar com a diferença entre os parâmetros de energia livre, uma vez que eles são determinados a menos de uma constante aditiva. Começemos o desenvolvimento do cálculo destas diferenças para o caso simples de dois histogramas a β_i e β_{i+1} expandindo a Equação 4.29 com a substituição da Equação 4.28

$$e^{f_i} = \sum_E \frac{[g_i^{-1} H_i(E) + g_{i+1}^{-1} H_{i+1}(E)] \exp(-\beta_i E)}{N_i g_i^{-1} \exp(-\beta_i E - f_i) + N_{i+1} g_{i+1}^{-1} \exp(-\beta_{i+1} E - f_{i+1})} \quad (4.31)$$

que pode ser reescrita como

$$1 = \sum_E \frac{g_i^{-1} H_i(E) + g_{i+1}^{-1} H_{i+1}(E)}{N_i g_i^{-1} + N_{i+1} g_{i+1}^{-1} \exp(-\Delta\beta_i E - \Delta f_i)}, \quad (4.32)$$

onde $\Delta\beta_i = \beta_{i+1} - \beta_i$ e $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$. Nos referiremos a esta expressão como a equação de Bennett.

Existe uma assimetria em 4.31. Podemos trocar os índices i e $i + 1$ para obtermos

$$1 = \sum_E \frac{g_i^{-1} H_i(E) + g_{i+1}^{-1} H_{i+1}(E)}{N_i g_i^{-1} \exp(-\Delta\beta_i E + \Delta f_i) + N_{i+1} g_{i+1}^{-1}}. \quad (4.33)$$

Tanto a equação 4.32 como a 4.33 levam a mesma solução, mas o comportamento numérico é diferente. Se tomarmos por exemplo $\lim N_i \rightarrow 0$ a primeira equação retorna uma estimativa para Δf_i , enquanto a segunda não resulta em informação relevante.

É sempre possível obter estimativas de Δf_i de ambas as expressões, que servem como intervalo para a determinação de Δf_i pelo método de busca de raiz mais adequado.

Podemos incluir explicitamente q histogramas vizinhos como na equação 4.31, e chegarmos a sua respectiva equação de Bennett 4.32. Esse procedimento quando usado iterativamente permite-nos chegar a um método eficiente de encontrarmos os Δf_i do conjunto total de equações dos histogramas de interesse.

Definimos $\Delta f_i^{(n,q)}$ como o Δf_i após a n -ésima iteração com q vizinhos de cada lado

do par original. Quando $q = 0$, $\Delta f_i^{(0,0)}$ é obtido da equação de Bennett 4.32.

A equação de Bennett correspondente a q vizinhos é

$$1 = \sum_E \frac{\sum_{n=i-q}^{i+1+q} g_n^{-1} H_n(E)}{\sum_{m=i-q}^{i+1+q} N_m g_m^{-1} \exp[(\beta_i - \beta_m)E + f_i - f_m]}. \quad (4.34)$$

Subentende-se nesta equação que a soma é truncada quando $i - q < 1$ ou $i + 1 + q > R$. Façamos a seguir

$$\Omega_i(E) = \sum_{m=i-q}^{i+1+q} N_m g_m^{-1} \exp[(\beta_i - \beta_m)E + f_i - f_m], \quad (4.35)$$

que é o denominador da equação 4.34, a qual se torna

$$1 = \sum_E \frac{\sum_{n=i-q}^{i+1+q} g_n^{-1} H_n(E)}{\Omega_i(E)}. \quad (4.36)$$

Na implementação encontramos a raiz do logaritmo da Equação 4.36.

Fixemos todas as diferenças Δf_m com $m \neq i$ em seus valores antigos $\{\Delta f_m^{\text{old}} | m \neq i\}$. Para $m < i$, $f_i - f_m = \sum_{k=m}^{i-1} \Delta f_k^{\text{old}}$, e se $m > i + 1$, $f_{i+1} - f_m = -\sum_{k=i+1}^{m-1} \Delta f_k^{\text{old}}$. Para $m = i$ temos a diferença $f_{i+1} - f_i = \Delta f_i^{\text{new}}$ que queremos encontrar. A Equação 4.35 torna-se em

$$\begin{aligned} \Omega_i(E) = & N_i g_i^{-1} + N_{i+1} g_{i+1}^{-1} \exp[-\Delta \beta_i E - \Delta f_i^{\text{new}}] + \sum_{m=i-q}^{i-1} N_m g_m^{-1} \exp \left[(\beta_i - \beta_m) E + \sum_{k=m}^{i-1} \Delta f_k^{\text{old}} \right] \\ & + \exp[-\Delta f_i^{\text{new}}] \times \sum_{m=i+2}^{i+1+q} N_m g_m^{-1} \exp \left[(\beta_i - \beta_m) E + \sum_{k=i+1}^{m-1} \Delta f_k^{\text{old}} \right]. \end{aligned} \quad (4.37)$$

É fácil calcular Δf_i^{new} numericamente substituindo-se a Equação 4.37 na Equação 4.36.

A estratégia geral para encontrar-se os Δf_i é mostrada no Algoritmo 12.

É preciso atentar para dificuldades numéricas como o *arithmetic overflow* nas operações envolvendo exponenciais. Realizamos os seguintes procedimentos para minimizar este problema:

1. Transformar o termo $\sum_{n=i-q}^{i+1+q} g_n^{-1} H_n(E)$ em $\exp[Q_1(E)]$;
2. Transformar o termo $N_m g_m^{-1}$ em $\exp(Q_2^m)$;

Algoritmo 12 Iteração sucessiva sobre histogramas vizinhos

```

 $\Delta f_i \leftarrow 0$  para todo  $i$ .
for  $q = 0$  até  $q_{\max}$  do
  Armazene todos os  $\Delta f_i$  em  $\Delta f_i^{\text{old}}$ .
  for  $i = 1$  até  $R - 1$  do {Loop para cada histograma.}
    Encontre intervalo que contenha  $\Delta f_i$ .
    Encontre raiz do logaritmo da Equação de Bennett com  $q$  vizinhos.
  end for
end for

```

3. Manter o termo $\exp(-\beta_i E)$ no denominador;
4. Manter o termo $\exp(-f_i)$ no denominador;
5. Multiplicar $\exp(-\alpha_i)$ ao numerador e ao denominador, para evitar *overflow* em cada temperatura T_i ;
6. Usar precisão quádrupla para evitar *overflow*;
7. Passar $\exp(Q_1)$ para o denominador;
8. Agrupar os expoentes do denominador em um único, para reduzir chances de *overflow*;
9. Calcular f_i em *loop* em i para usar os f mais atualizados.

O Algoritmo 13 mostra o algoritmo de determinação das energias livres f com um detalhamento maior no algoritmo de iteração sucessiva sobre histogramas vizinhos (Algoritmo 12).

4.7.2 Construção de histogramas de potências de energia e magnetização

Para se lidar com grandezas que envolvam a magnetização além da energia pode-se trabalhar com histogramas e probabilidades multidimensionais. A limitação de memória para essas operações demanda porém o uso de outro método. A possibilidade escolhida por nós foi o uso conjugado da probabilidade da energia e das médias microcanônicas das quantidades de interesse $Q(E, m)$. Aqui, $Q(E, m) = E^p m^q$, com p e q inteiros entre zero e quatro.

As médias microcanônicas são dadas por

$$Q_i = \frac{\sum_t Q_t \delta_{E_t, E_i}}{\sum_t \delta_{E_t, E_i}},$$

Algoritmo 13 Determinação das energias livres f .

```

for  $i = 1$  até  $R$  do
  Leia histogramas em cada temperatura.
  Leia maior tempo de relaxação para cada temperatura entre  $\tau_E$  e  $\tau_M$ .
  Calcule  $g_i$  para todas as temperaturas  $T_i$ .
end for
Calcule soma  $N_i$  de histograma  $H_i$ .
Calcule  $Q_2^i = \ln(N_i/g_i)$ .
 $\Delta f \leftarrow 0$ .
for  $q = 0$  até  $q_{max}$  do { $q_{max}$  é o número máximo de vizinhos em cada lado do par
central de histogramas.}
  Armazene  $\Delta f$  atual em  $\Delta f^{va}$ ; {Estado do vizinho "antigo"}.
  iter  $\leftarrow 0$ .
  loop {Loop de iteração.}
    iter  $\leftarrow$  iter + 1.
    Armazene  $\Delta f$  atual em  $\Delta f^{ia}$ ; {Estado da iteração "antiga"}.
    for  $i = 1$  até  $R - 1$  do {Loop para cada  $\Delta f_i$  avaliado}
      Ache intervalo que contenha  $\Delta f_i$  considerando-se  $q$  vizinhos.
      Determine  $\Delta f_i$  a partir do logaritmo da função de Bennett com  $q$  vizinhos.
    end for
    Calcule erro relativo máximo entre  $\Delta f$  e  $\Delta f^{va}$ .
    if Erro relativo for menor que tolerância then {Se verdadeiro, determinar-se-á  $f$ 
com todos os vizinhos em uma única iteração.}
      Armazene  $\Delta f$  atual em  $\Delta f^{tv}$ . {Estado com todos os vizinhos, a ser determi-
nado.}
      for  $i = 1$  até  $R - 1$  do {Loop para cada  $\Delta f_i$  avaliado}
        Ache intervalo que contenha  $\Delta f_i^{tv}$  considerando-se todos os vizinhos.
        Determine  $\Delta f_i^{tv}$  a partir do logaritmo da função de Bennett considerando-se
todos os vizinhos.
      end for
      Calcule erro relativo máximo entre  $\Delta f$  e  $\Delta f^{tv}$ .
      if Erro relativo for menor que tolerância then
        Saia do loop de vizinhos.
      end if
    end if
  end loop
end for
 $f_1 \leftarrow 0$ 
for  $i = 1$  até  $R - 1$  do
   $f_{i+1} \leftarrow f_i + \Delta f_i^{tv}$ 
end for
Imprima  $f$  em arquivo

```

onde o índice i corresponde ao i -ésimo intervalo do histograma, t identifica o dado, e δ_{E_t, E_i} é um se E_t está localizado no intervalo do histograma representado por E_i e zero em caso contrário.

Testamos a convergência do pico de susceptibilidade e seu erro com diferentes números de intervalos dos histogramas com $L = 32$ para decidirmos pelo melhor valor. Os tamanhos usados foram 10000, 30000, 50000 e 100000 intervalos. Os métodos usados para localização destes picos já foram mencionados anteriormente. A estimativa e o erro foram feitos por *jackknife*.

4.7.3 Testes da implementação

A seguir apresentamos gráficos que permitem avaliar se a implementação foi bem-sucedida.

A Figura 17 mostra uma boa concordância entre a distribuição da probabilidade da energia obtida diretamente de simulações a diferentes temperaturas na região da transição de fase, e a obtida com multi-histogramas.

A susceptibilidade obtida diretamente das simulações concordou bem com a oriunda da técnica de multi-histogramas.

O multi-histograma pareceu corresponder bem ao cumulante U_{4B} , que tem um comportamento distinto dos demais cumulantes. Houve uma boa concordância entre os diferentes dados na região de transição, e uma continuidade dos dados de simulação com o U_{4B} obtido por multi-histogramas.

Conseguimos implementar adequadamente a técnica de multi-histogramas, que foi muito importante para a obtenção precisa de grandezas de interesse. A qualidade da implementação foi vista através do casamento de suas curvas com os dados simulacionais, tanto de grandezas que envolviam extremos como a susceptibilidade como a quantidade sem picos U_{4B} . O casamento das distribuições de probabilidade do multi-histograma e simulacional revelou uma consistência interna da implementação.

4.8 Localização de picos

Durante o processamento das curvas geradas por multi-histogramas fez-se necessária a localização das coordenadas do extremo (máximo ou mínimo) de grandezas de interesse. Usamos duas estratégias: a localização de extremos pelo método de Brent, e a localização

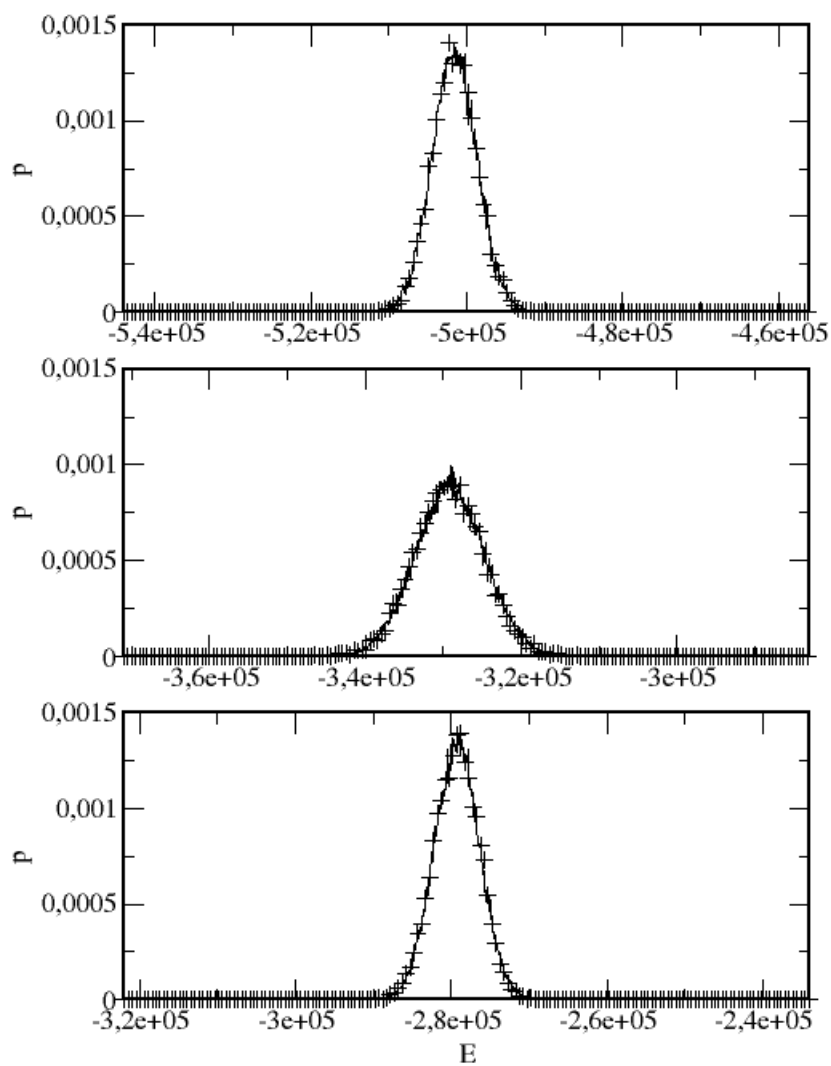


Figura 17: Probabilidade p em função da energia calculada diretamente das simulações (cruz) e por multi-histogramas (linha) para a rede $L = 32$, a temperaturas $T = 1,2$ (acima), $1,44$ (no meio) e $1,53$ (abaixo). O algoritmo de atualização foi o Metropolis seriado.

da raiz da derivada da grandeza de interesse pelo método Pégaso (73).

4.8.0.1 Brent

O método Brent (20) usa a *golden search* (20) nas situações em que a função se comporta de modo anômalo, e encontra o mínimo de uma parábola ajustada na região de interesse quando a função é aproximadamente parabólica. A implementação mostrada em Press *et al.* (20) (i) administra variáveis para evitar avaliações de função na troca dos métodos, (ii) atenta para o fim da execução quando f é avaliada próxima ao erro de arredondamento, e (iii) detecta com robustez quando a função coopera ou não para uma busca otimizada do extremo.

4.8.0.2 Pégaso

O método Pégaso (73) é usado para o encontro de uma raiz de uma função, e aqui foi usado para localizar o zero da derivada da susceptibilidade. É esperado que esta raiz corresponda ao extremo da susceptibilidade, que não se mostrou passível de exame pelo método Brent. O Pégaso é superior ao método da secante e ao da *regula falsi*.

Semelhantemente a outros baseados na aproximação linear, ele converge recorrentemente por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}), k = 1, 2, 3, \dots$$

Os pontos $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$ e $[x_k, f(x_k)]$ que definem a reta usada para obter x_{k+1} são escolhidos de maneira a f_{k-1} e f_k tenham sempre sinais opostos garantindo que a raiz esteja no intervalo $[x_{k-1}, x_k]$. O valor f_{k-1} é sempre reduzido de maneira que evite a retenção de um dos pontos como na *regula falsi*.

4.9 Modelagem de dados

A modelagem de dados é importante para condensar dados e para interpolação (20). O ajuste pode ser feito por um conjunto de funções convenientes ou fornecidos pela teoria.

Em geral minimiza-se uma função figura de mérito, que freqüentemente é o χ^2 , dado em uma forma geral por

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^N N \left(\frac{y_i - y(x_i; a_1, \dots, a_m)}{\sigma_i} \right)^2, \quad (4.38)$$

onde N é o número de dados, y_i é o valor da variável dependente do dado i , y é a função que se quer ajustar, a_j é o parâmetro j da função y , e σ_i é o desvio padrão de y_i .

Na regressão linear a função y é igual a $y(x_j; a, b) = a + bx$, onde a é o coeficiente linear e b é o coeficiente angular. A determinação dos coeficientes que minimizam o χ^2 é feita pela resolução do sistema de equações em que a derivada parcial da figura de mérito em relação a cada parâmetro é igualada a zero.

As fórmulas da regressão linear simples apresentadas foram obtidas de Press et al. (20), e as demais foram deduzidas e checadas por nós. Abordaremos a seguir as diferentes regressões lineares implementadas.

4.9.1 Regressão linear simples

Na regressão linear simples uma única reta é ajustada ao conjunto de dados. O χ^2 é

$$\chi^2(a, b) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (4.39)$$

Temos as derivadas parciais dadas por

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i^2} \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{x_i(y_i - a - bx_i)}{\sigma_i^2} \quad (4.41)$$

Fazendo $S = \sum 1/\sigma_i^2$, $S_x = \sum x_i/\sigma_i^2$, $S_y = \sum y_i/\sigma_i^2$, $S_{xx} = \sum x_i^2/\sigma_i^2$ e $S_{xy} = \sum x_i y_i/\sigma_i^2$ e igualando as derivadas parciais a zero, obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} aS + bS_x &= S_y \\ aS_x + bS_{xx} &= S_{xy} \end{cases}$$

A solução é dada por

$$\begin{cases} \Delta &= SS_{xx} - (S_x)^2 \\ a &= \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{\Delta} \\ b &= \frac{SS_{xy} - S_x S_y}{\Delta} \end{cases}$$

Os erros de a e b são dados por

$$\begin{cases} \sigma_a^2 &= \frac{S_{xx}}{\Delta} \\ \sigma_b^2 &= \frac{S}{\Delta} \end{cases}$$

4.9.2 Regressão linear múltipla com coeficiente linear compartilhado

Nesta regressão vários conjuntos de dados, que supostamente têm comportamento linear com mesmo coeficiente linear e coeficientes angulares diferentes, são ajustados simultaneamente. O χ^2 usado neste caso é

$$\chi^2 = \sum_i \sum_j \left[\frac{y_{ij} - y_i(x_j; a, b_i)}{\sigma_{ij}} \right]^2, \quad (4.42)$$

onde o índice i corresponde ao conjunto de dados e o j corresponde ao j -ésimo dado do conjunto.

Resolvendo o sistema de derivadas do χ^2 em relação aos parâmetros a e b_i iguais a zero, obtivemos

$$\begin{cases} a &= \frac{S_y - \sum_i \frac{S_{xy}^i S_x^i}{S_{xx}^i}}{S - \sum_i \frac{(S_x^i)^2}{S_{xx}^i}} \\ b_i &= \frac{S_{xy}^i - a S_x^i}{S_{xx}^i} \end{cases}$$

com $S = \sum_i \sum_j 1/\sigma_{ij}^2$, $S_y = \sum_i \sum_j y_{ij}/\sigma_{ij}^2$, $S_x^i = \sum_j x_j/\sigma_{ij}^2$, $S_{xy}^i = \sum_j x_j y_{ij}/\sigma_{ij}^2$ e $S_{xx}^i = \sum_j x_j^2/\sigma_{ij}^2$.

Os erros são dados por

$$\begin{cases} \sigma_a^2 &= \frac{1}{S_a} \\ \sigma_{b_i}^2 &= \left(\sum_i \frac{1}{S_{xx}^i} \right) + \frac{1}{S_a^2} \left\{ \left(\sum_i \frac{S_x^i (S_x^i)^2}{(S_{xx}^i)^2} \right) - \left(\sum_i \frac{(S_x^i)^4}{(S_{xx}^i)^3} \right) \right\}. \end{cases}$$

onde $S^i = \sum_j 1/\sigma_{ij}^2$ e $S_a = S - \sum_i (S_x^i)^2/S_{xx}^i$.

4.9.3 Regressão linear múltipla com coeficiente angular compartilhado

Neste tipo de regressão os diferentes conjuntos de dados têm diferentes coeficientes lineares e compartilham o mesmo coeficiente angular. O χ^2 é dado por

$$\chi^2 = \sum_i \sum_j \left[\frac{y_{ij} - y_i(x_j; a_i, b)}{\sigma_{ij}} \right]^2 \quad (4.43)$$

onde o índice i corresponde ao conjunto de dados e o j corresponde ao j -ésimo dado do conjunto.

Os parâmetros obtidos após a minimização do χ^2 foram

$$\begin{cases} a_i &= \frac{S_y^i - bS_x^i}{S^i} \\ b &= \frac{S_{xy} - \sum_i \frac{S_y^i S_x^i}{S^i}}{S_b} \end{cases}$$

onde $S_y^i = \sum_j y_{ij}/\sigma_{ij}^2$, $S_{xx} = \sum_i \sum_j x_j^2/\sigma_{ij}^2$ e $S_{xy} = \sum_i \sum_j x_j y_{ij}/\sigma_{ij}^2$, e $S_b = S_{xx} - \sum_i \frac{(S_x^i)^2}{S^i}$.

Os erros são dados por

$$\begin{cases} \sigma_{a_i}^2 &= \left(\sum_i \frac{1}{S^i}\right) + \frac{1}{S_b^2} \left\{ \left[\sum_i \frac{(S_x^i)^2 S_{xx}^i}{(S^i)^2} \right] - \left[\sum_i \frac{(S_x^i)^4}{(S^i)^3} \right] \right\} \\ \sigma_b^2 &= \frac{1}{S_b^2} \left[S_{xx} - \sum_i \frac{(S_x^i)^2}{S^i} \right]. \end{cases}$$

4.10 Expoente crítico ν e temperatura crítica T_c

O expoente crítico ν e a temperatura crítica T_c foram obtidos iterativamente entre si, até convergirem dentro de certa tolerância.

O expoente crítico ν foi extraído do coeficiente angular das regressões dos cumulantes V contra o logaritmo da dimensão linear da rede. Os cumulantes são definidos a partir de

$$[m^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T} = \ln \frac{-\langle E m^n \rangle + \langle E \rangle \langle m^n \rangle}{T^2}.$$

São eles:

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (4.44)$$

$$V_2 \equiv 2[m^2] - [m^4], \quad (4.45)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (4.46)$$

$$V_4 \equiv \frac{4[m] - [m^4]}{3}, \quad (4.47)$$

$$V_5 \equiv \frac{3[m] - [m^3]}{2}, \quad (4.48)$$

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2]. \quad (4.49)$$

A temperatura crítica foi determinada a partir do coeficiente linear comum aos cumulantes χ , U_3 , U_4 , D_{K_2} , D_{K_3} , e D_{K_4} através de regressão linear múltipla com coeficiente linear compartilhado com a abcissa $L^{-1/\nu}$. A Figura 18 mostra uma regressão múltipla dos cumulantes V usada na determinação de ν na T_c . Nela estão incluídos os dados de

todas as simulações.

Os cumulantes V na Figura 18 parecem bem alinhados, com regressões bem ajustadas. Não se nota um desvio dos dados das redes menores. O inverso do expoente ν foi determinado com o menor erro sem o descarte de redes menores, e seu valor foi de $1/\nu = 1,4778 \pm 0,0043$.

As regressões simultâneas com os cumulantes V são semelhantes as do artigo de Chen *et al.*(4), e os V são bem ajustados pelas retas. Isso confirma que o método está funcionando para a obtenção direta de ν e indireta de T_c e demais expoentes críticos.

A regressão múltipla com todos os dados usada na determinação do inverso da temperatura crítica K_c é mostrada na Figura 19.

Os cumulantes na Figura 19 parecem bem ajustados pelas regressões. No cumulante D_{K_2} os dados das redes menores parecem se desviar mais da respectiva regressão. O valor de K_c com menor erro foi obtido incluindo-se todos os tamanhos de rede e foi de $0,69314 \pm 0,00032$.

As regressões simultâneas com χ , U_3 , U_4 , D_{K_2} , D_{K_3} e D_{K_4} parecem de ótima qualidade. O gráfico no entanto não corresponde ao de Chen *et al.* (4) porque a ordem das regressões não é a mesma. Uma possível explicação é a escolha diferente de máximos ou mínimos para esta determinação.

4.11 Escolha do algoritmo para simulação na T_c

Na transição de fase ocorre um aumento da correlação entre medidas consecutivas, o que diminui o número de dados independentes. O uso de algoritmos que diminuam essa correlação e que sejam mais rápidos é muito desejada.

No intuito de aumentar a eficiência do algoritmo Monte Carlo e tendo em vista a necessidade de se trabalhar nas condições especiais da temperatura crítica, implementamos três algoritmos vetorizados: o Metropolis, o Metropolis híbrido com Super-relaxação, e o Wolff. Mostramos cada um deles a seguir, e como se sucedeu a escolha do algoritmo mais adequado.

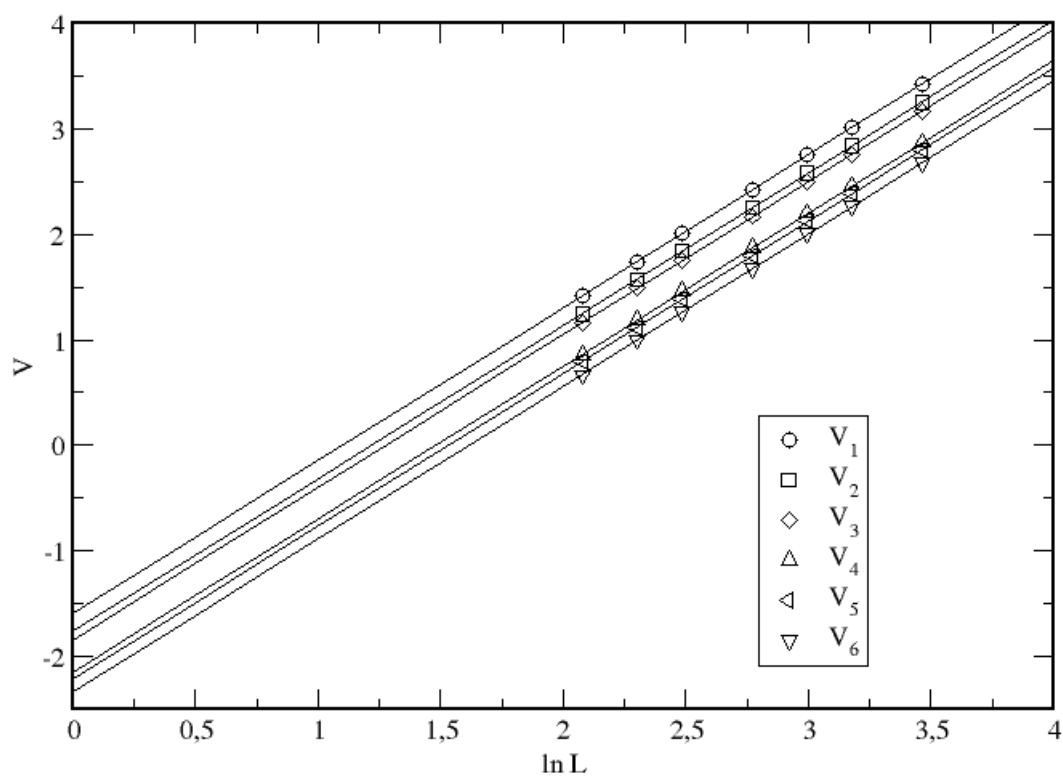


Figura 18: Determinação do inverso do expoente crítico ν a partir dos cumulantes V_1 a V_6 na temperatura crítica T_c da amostra. A rede $L = 4$ não foi considerada aqui. Não houve exclusão de simulação.

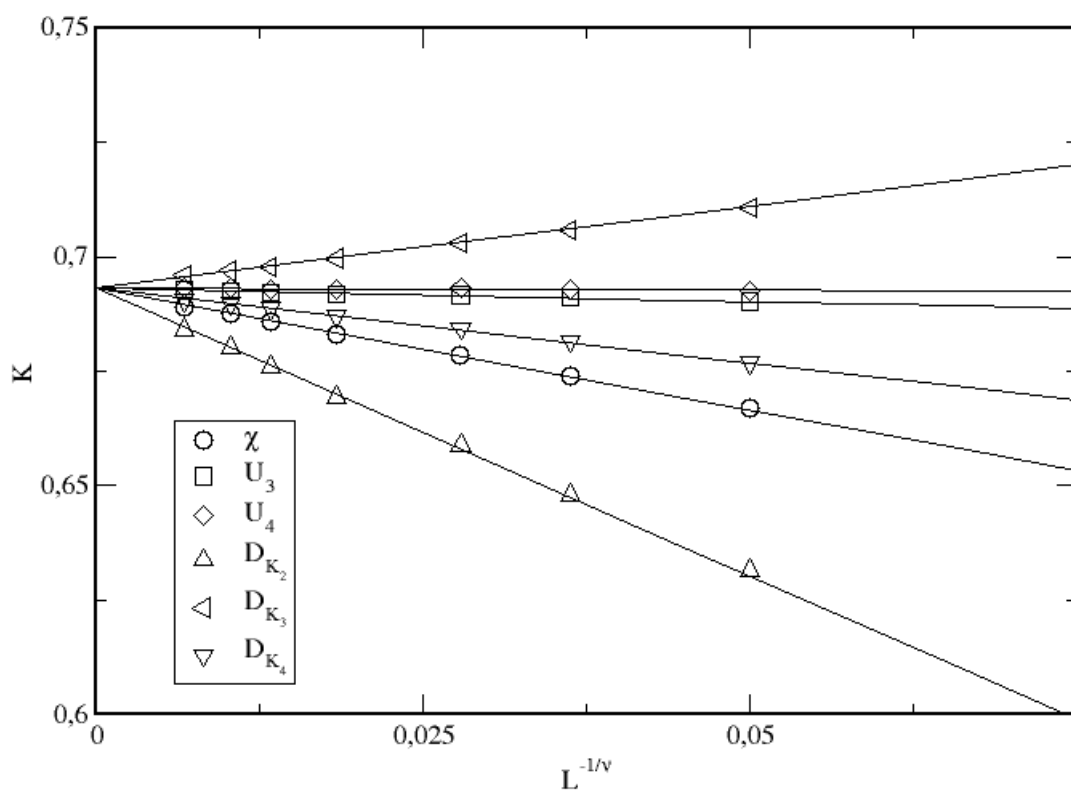


Figura 19: Determinação do inverso da temperatura crítica T_c a partir da temperatura inversa K do pico da susceptibilidade χ e dos cumulantes U_3 , U_4 , D_{K_2} , D_{K_3} e D_{K_4} . A rede $L = 4$ não foi considerada aqui. Não houve exclusão de simulação.

4.11.1 Metropolis vetorizado

No algoritmo Metropolis vetorizado fez-se uso de um sorteio vetorizado de números aleatórios e de spins. Foi mais adequado trabalhar diretamente com a rede cúbica porque os comandos para a vetorização permitiam atualizar os spins sem indexações intermediárias ou tabelamento de vizinhos.

Aqui se faz notar a vantagem de dividir-se a rede em duas sub-redes intercaladas. Tal vantagem consiste na execução do teste de Metropolis simultaneamente em $n/2$ sítios por vez porque nenhuma mudança de spin em uma sub-rede produz efeito colateral.

O Algoritmo 14 exhibe o procedimento geral usado, e o Algoritmo 15 mostra a atualização vetorizada de spins em uma sub-rede qualquer. A variável lógica `atualização` agora tem dimensões $L \times L \times L$, r passa a ser um vetor de números aleatórios independentes com n elementos, e a matriz `subrede` passa a ser lógica. Note a compactação e a legibilidade deste algoritmo em relação a sua versão seriada.

Algoritmo 14 Metropolis vetorizado.

`atualização` \leftarrow falso.

Sorteie r como uma matriz $L \times L \times L$.

Sorteie uma rede alternativa de spins $L \times L \times L$

Realize Metropolis vetorizado onde sub-rede é verdadeira.

Realize Metropolis vetorizado onde sub-rede é falsa.

O passo de Metropolis vetorizado para a sub-rede é mostrado no Algoritmo 15. O cálculo das energias dos sítios da sub-rede é feito vetorialmente somando-se as matrizes `spin` deslocadas de um sítio nas seis direções, realizando-se o produto escalar desta soma com a matriz `spin` não deslocada e selecionando-se os sítios da sub-rede.

Algoritmo 15 Metropolis vetorizado na sub-rede.

Calcule a energia inicial E_i nos sítios da sub-rede selecionada.

Calcule a energia alternativa E_f nos sítios da sub-rede selecionada, com seus spins trocados pelos correspondentes da rede alternativa.

Calcule a diferença entre as matrizes energia alternativa e inicial ΔE .

`atualização` \leftarrow ($\Delta E \leq 0$) nas posições da sub-rede selecionada.

Aplice $\exp(-\beta\Delta E)$ em cada elemento da matriz ΔE .

`atualização` \leftarrow (`atualização` OU ($r \leq$ novo ΔE)) nas posições da sub-rede selecionada.

Mude spin da rede original muda para o da rede alternativa onde `atualização` é verdadeira.

A identificação das sub-redes é feita vetorialmente a partir de um cubo $2 \times 2 \times 2$ devidamente dividido em sub-redes, e com duplicações do cubo dos passos anteriores nos

quadrantes restantes até alcançar-se o tamanho desejado.

4.11.2 Super-relaxação

A Super-relaxação (3, 74, 75) por si só não realiza a amostragem de configurações a uma dada temperatura. Seu papel é reduzir a correlação entre configurações consecutivas, o que aumenta o número de medidas independentes e com isso melhora a estatística. Neste procedimento não há mudança de energia do sistema: cada spin em cada sub-rede é girado de 180 graus em torno da soma normalizada de spins de seus vizinhos (i.e. o campo efetivo \vec{H} normalizado do spin). A Figura 20 ilustra a precessão de um spin em torno de um campo efetivo local.

A Super-relaxação é aplicada vetorialmente em cada sub-rede, consecutivamente.

O procedimento em cada sub-rede é mostrado no Algoritmo 16.

Algoritmo 16 Super-relaxação vetorizada na sub-rede.

Calcule vetorialmente a soma dos spins vizinhos de cada sítio da sub-rede selecionada. Torne a soma de spins vizinhos unitária.

Calcule vetorialmente a matriz de rotação para cada sítio da sub-rede selecionada.

Multiplique vetorialmente cada spin da sub-rede selecionada por sua matriz de rotação.

A matriz de rotação para cada spin \mathbf{R} é dada por

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 2H_x^2 - 1 & 2H_xH_y & 2H_xH_z \\ 2H_xH_y & 2H_y^2 - 1 & 2H_yH_z \\ 2H_xH_z & 2H_yH_z & 2H_z^2 - 1 \end{pmatrix}$$

onde H_α é o componente α do campo efetivo \vec{H} normalizado sentido pelo sítio. Ela foi obtida a partir da expressão para rotação de um ângulo qualquer em torno de um eixo arbitrário mostrada em (76), usando como ângulo de rotação π radianos.

4.11.3 Wolff

O algoritmo de Wolff é muito eficiente em reduzir o aumento do tempo de relaxação próximo a temperatura crítica (*critical slowing down*) de modelos ferromagnéticos de spin (77), o que implica no aumento de medidas independentes. No algoritmo inicial de Swendsen e Wang (78) para o modelo de Potts os sítios são unidos por ligações formando *clusters*. A atualização é feita pela escolha aleatória de um estado para cada *cluster*. Wolff

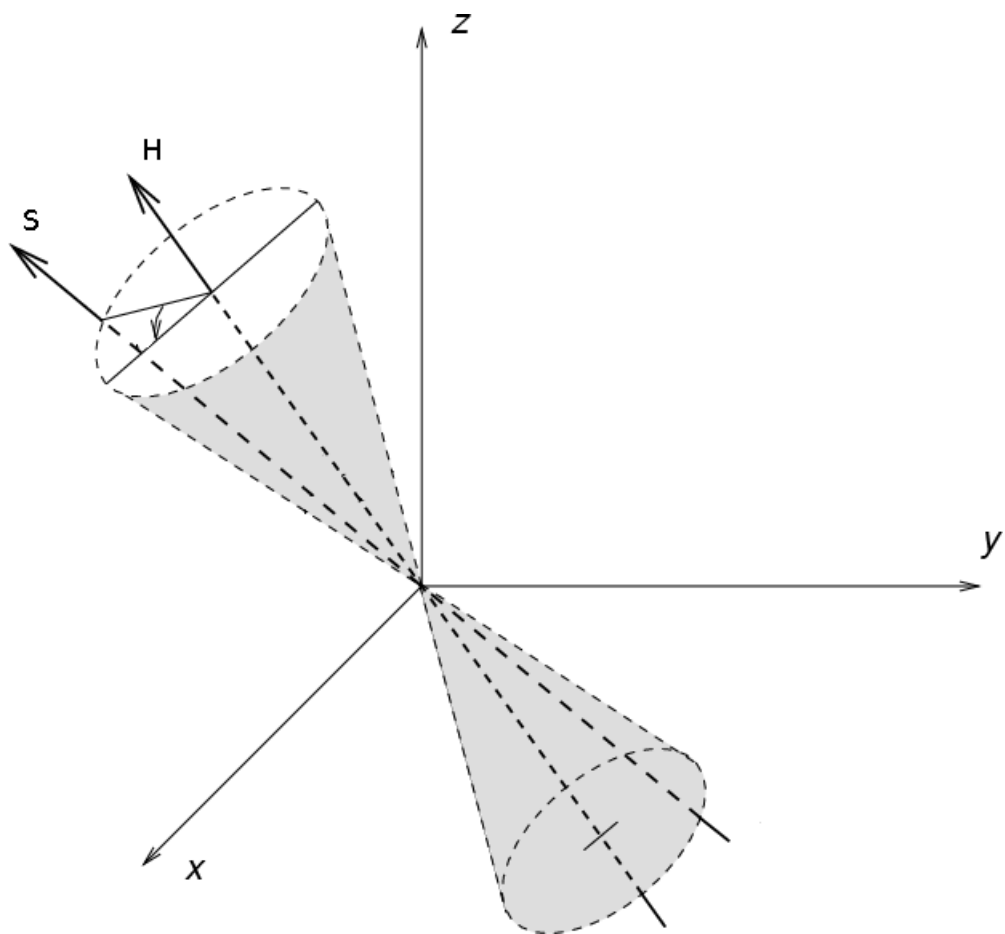


Figura 20: Precessão de um spin \vec{S} em torno de um campo efetivo local \vec{H} . Modificado de (14).

sugeri o crescimento de um único *cluster* a partir de um sítio aleatório, com posterior mudança de estado. Para spins contínuos ele introduziu variáveis Ising.

Chen, Landau e Ferrenberg (4) propuseram uma atualização de spins baseada no método de Wolff, cujo desenho é apresentado no Algoritmo 17. S_i^k é a decomposição do i -ésimo spin S sobre o eixo k .

Algoritmo 17 Esquema geral de Wolff

loop

Escolha aleatoriamente um sistema de coordenadas ortogonal.

Decomponha os spins no novo sistema de coordenadas.

for $i = 1$ até rep **do**

Escolha um sítio aleatório

Construa um *cluster* para cada eixo ativando ligações entre os sítios com probabilidade

$$P_{ij}^k = \begin{cases} 1 - \exp(-2\beta S_i^k S_j^k) & \text{se } S_i^k S_j^k > 0 \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases}$$

Inverta todos os componentes dos respectivos *clusters*.

end for

end loop

O desenho da implementação vetorizada é mostrado no Algoritmo 18. A variável lógica **cluster** tem a dimensão da rede de spins e informa se uma componente de um spin qualquer pertence a um *cluster*.

Algoritmo 18 Wolff vetorizado

Escolha sistema de coordenadas ortogonal aleatório.

Decomponha spins no novo sistema de coordenadas.

for $i = 1$ to 2 **do** {Repita escolha de sítio e crescimento de *cluster* duas vezes.}

cluster \leftarrow falso.

Sorteie vetorialmente três sítios ao acaso com reposição, um para cada componente.

Designa elementos de *cluster* respectivos como verdadeiros.

Cresça *clusters* vetorialmente.

if $i = 1$ **then**

Armazene *clusters* atuais em uma variável auxiliar.

end if

Inverta componentes pertencentes aos *clusters* vetorialmente.

end for

A subseções seguintes explicitam alguns passos deste algoritmo.

4.11.3.1 Escolha de sistema de coordenadas aleatório

Os eixos da nova coordenada equivalem às colunas de uma matriz de rotação aleatória. Esta pode ser obtida usando o método de Arvo (79), que foi sintetizado por ele da seguinte forma: “Para gerar rotações aleatórias uniformemente distribuídas de uma esfera unitária, primeiro realize uma rotação aleatória em torno do eixo vertical, então rode o polo norte para uma posição aleatória.”

O Algoritmo 19 mostra os passos necessários para se obter tal matriz. O vetor \mathbf{v} é o vetor unitário na direção $\overline{z\bar{p}}$, onde z é o azimute e p é um ponto aleatório na superfície da esfera unitária.

Algoritmo 19 Como encontrar uma matriz de rotação aleatória \mathbf{M} .

Encontre uma matriz de rotação aleatória no plano \mathbf{R} .

Encontre a matriz de Householder $\mathbf{H} = \mathbf{1} - 2 \mathbf{v}\mathbf{v}^T$.

$\mathbf{M} = - \mathbf{H} \mathbf{R}$.

A matriz \mathbf{R} é obtida de

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & 0 \\ -y_1 & x_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

onde o par (x_1, y_1) corresponde às coordenadas de um ponto aleatório sobre uma circunferência. Foram cogitados dois métodos para sortear-se este ponto (80): um que chamamos de trivial, e outro denominado Cook. No sorteio trivial este par é dado por

$$\begin{cases} x_1 = \cos(\alpha) \\ y_1 = \sin(\alpha) \end{cases}$$

O ângulo α é sorteado uniformemente entre zero e 2π .

O sorteio Cook é feito sorteando-se dois números a_1 e a_2 de uma distribuição uniforme no intervalo $(-1,1)$, rejeitando-se pares em que $a_1^2 + a_2^2 \geq 1$. Os pares são obtidos com coordenadas

$$\begin{cases} x_1 = \frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 + a_2^2} \\ y_1 = \frac{2a_1 a_2}{a_1^2 + a_2^2} \end{cases}.$$

O sorteio do vetor unitário aleatório pode ser feito por qualquer um dos métodos apresentados anteriormente. Note que ao usarmos o método de Arvo na forma como é apresentado o polo norte vai para o vetor oposto ao pretendido, que também é aleatório.

A matriz \mathbf{H} é dada neste caso por

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} -\frac{p_2^2}{p_3-1} - p_3 & \frac{p_1 p_2}{p_3-1} & p_1 \\ \frac{p_1 p_2}{p_3-1} & 1 + \frac{p_2^2}{p_3-1} & p_2 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{pmatrix}$$

Se for necessária uma transparência maior na execução da rotação e se quiser levar o polo norte literalmente ao ponto sorteado na esfera, faz-se inicialmente a reflexão de p para $-p$ e depois multiplica-se esta matriz de Householder pela matriz de rotação no plano. Esta matriz \mathbf{H}' obtida por nós é mostrada como um resultado complementar. Não há diferença do ponto de vista computacional ou físico usar-se \mathbf{H}' no lugar de \mathbf{H} .

$$\mathbf{H}' = \begin{pmatrix} -\frac{p_2^2}{p_3+1} - p_3 & \frac{p_1 p_2}{p_3+1} & p_1 \\ \frac{p_1 p_2}{p_3+1} & -1 + \frac{p_2^2}{p_3+1} & p_2 \\ p_1 & p_2 & p_3 \end{pmatrix}$$

O método para a rotação aleatória \mathbf{R} foi definido através da verificação da distribuição uniforme e do menor tempo de execução dentre as alternativas Trivial e Cook. A tomada de tempo corresponde a média de cinco séries de 10^7 sorteios cada.

4.11.3.2 Crescimento de *clusters*

O crescimento vetorial dos *clusters* é o cerne do algoritmo vetorizado de Wolff. O Algoritmo 20 mostra as linhas gerais de como ele foi implementado.

Algoritmo 20 Crescimento vetorizado de *clusters*

Crie matrizes lógicas $L \times L \times L$, uma para cada direção de visita (cima, baixo, direita, esquerda, frente, trás).

Torne matrizes das direções visitadas falsas inicialmente.

loop

Armazene *cluster* atual em uma variável auxiliar.

Cresça vetorialmente o *cluster* visitando seus vizinhos em cada uma das direções por vez.

if *cluster* é igual ao armazenado na variável auxiliar **then**

Saia do loop.

end if

end loop

O Algoritmo 21 detalha o passo de crescimento direcional do *cluster*.

Algoritmo 21 Crescimento de *clusters* em uma direção arbitrária

Crie máscara lógica m de sítios a serem visitados.
 $m \leftarrow (\textit{cluster} \text{ é falso}) \text{ E } (\textit{direção visitada é falsa}) \text{ E } (\textit{cluster no sítio que visita é verdadeiro})$.
 Contar sítios a serem visitados no passo na variável c .
 Crie vetor f para armazenar situação futura dos sítios a serem visitados, com dimensão c .
 Crie vetor probabilidade de inversão de componente p , com dimensão c .
 Crie vetor produto de componente entre sítios visitantes e visitados, com dimensão c .
 Calcule o produto entre as componentes estudadas dos sítios visitante e visitado.
 Calcule a probabilidade de inversão dada por $1 - \exp(-2p/T)$ se p é maior que zero, e é zero caso contrario.
 Crie vetor de números aleatórios r com dimensão c .
 Sorteie r com números entre zero e um.
 $f \leftarrow r < p$.
 Destrua vetores r e p .
 Atualize *cluster* com f nas posições correspondentes.
 Destrua f .
 Faça a matriz da direção visitada verdadeira no sítio da matriz visitada.

4.11.4 Comparação entre os algoritmos

Para a escolha do melhor algoritmo para a simulação na T_c fizemos simulações a diferentes temperaturas ($L = 4$) com as três alternativas: Metropolis, Metropolis híbrido e Wolff. As curvas de energia com a temperatura dos tres métodos sobrepuseram-se perfeitamente, com forma semelhante à mostrada na Figura 7. Os algoritmos de Metropolis, Super-relaxação e Wolff vetorizado foram implementados com sucesso.

A escolha do método de atualização de spins foi a do que tinha a maior razão de medidas independentes por tempo computacional, determinada por *jackknife* (veja adiante).

O número de medidas independentes é dado por $n = 2\tau + 1$, onde τ é o tempo de relaxação, o maior tomado da energia ou da magnetização.

O tempo de relaxação linear da energia τ_E foi calculado da regressão linear (veja adiante) dos primeiros valores da função autocorrelação temporal normalizada da energia ϕ_{EE} em um gráfico mono-log. Essa função é calculada como

$$\phi_{AA} = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2},$$

onde A é a grandeza de interesse.

O tempo de relaxação linear da magnetização τ_M parecia ser mais curto que τ_E de modo que a regressão linear dos primeiros valores da autocorrelação não ser o método

Tabela 6: Número de medidas independentes por segundo de diferentes combinações de atualização de spins. $K_c = 0,69247$, $L = 32$.

Métodos			Medida/s
Wolff	Metropolis	Super-relaxação	
0	1	0	$0,17 \pm 0,003$
0	1	1	$0,58 \pm 0,03$
0	1	2	$0,71 \pm 0,03$
0	1	4	$1,0 \pm 0,2$
0	1	8	$0,7 \pm 0,3$
0	2	1	$0,42 \pm 0,01$
0	4	1	$0,4 \pm 0,1$
0	1	16	$0,5 \pm 0,2$
1	0	0	$0,331 \pm 0,004$

mais adequado. τ_M foi determinado então por integração de ϕ_{MM} até momento em que a medida fosse mais confiável. Isto foi verificado por inspeção visual de τ_M em função de MCS.

Esta integração foi feita somando-se as correlações até o MCS final e multiplicando-se a soma pelo intervalo de coleta de dados em MCS, por serem os dados em número reduzido e restritivos quanto ao uso de integrações mais sofisticadas.

Foram descartados 10^5 MCS de cada simulação para o cálculo do tempo de relaxação linear τ e para a obtenção das demais grandezas.

A comparação entre os métodos Monte Carlo foi feita para o maior $L(= 32)$, onde o *critical slowing down* é esperado ser maior.

O número de medidas independentes realizadas por segundo para diferentes combinações destes métodos é mostrado na Tabela 4.11.4.

O método mais eficiente foi a combinação do método Metropolis:Super-relaxação 1:4, que foi adotada para as simulações seguintes. O método Wolff foi duas vezes mais eficiente que o Metropolis, mas não mostrou um desempenho relativo favorável.

4.12 Expoentes críticos α , β e γ

O expoente crítico α foi obtido através da relação de hiperescala

$$2 - \alpha = d\nu \quad (4.50)$$

Outra relação de hiperescala útil é

$$2 - \alpha = 2\beta + \gamma \quad (4.51)$$

A razão α/ν foi obtido a partir de

$$\frac{\alpha}{\nu} = \frac{2}{\nu} - d \quad (4.52)$$

O valor estimado do expoente crítico α foi de $-0,0301 \pm 0,0058$.

A Figura 21 mostra a regressão linear do calor específico em função de $L^{\alpha/\nu}$.

Como esperado da equação 4.2, o ajuste foi razoável, com os primeiros pontos (redes maiores) mais alinhados que os demais e com inclinação diferente.

O expoente crítico β foi obtido da regressão linear do logaritmo da magnetização em função do logaritmo de L . A Figura 23 ilustra essa obtenção.

Há um ótimo alinhamento dos dados da Figura 23. O valor de β com menor erro foi obtido sem exclusão de nenhuma rede, e foi de $0,3430 \pm 0,0072$.

O expoente γ foi obtido da inclinação da regressão linear $\chi[T_c(L)]$ (susceptibilidade máxima para a rede de dimensão linear L) ou $\chi(T_c)$ (medido diretamente na temperatura crítica para cada tamanho de rede) contra $\ln L$.

A Figura 25 mostra as regressões destas duas susceptibilidades.

Os ajustes das χ mostrados na Figura 25 foram muito bons. Os valores de γ obtidos na T_c e dos picos foram $1,353 \pm 0,012$ e $1,3633 \pm 0,0051$, respectivamente. O valor final de γ foi de $1,3616 \pm 0,0047$, obtido da combinação dada por

$$Q_i = \frac{\sum w_i Q_i}{\sum w_i} \quad (4.53)$$

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (4.54)$$

onde Q é o valor combinado, Q_i são os valores a serem combinados, e σ_i é o desvio padrão da medida Q_i .

Não houve exclusão de redes nesta determinação.

Ao final destas determinações, verificamos a relação de hiperescala. A Tabela 4.12 mostra esses resultados.

Os membros da hiperescala têm valores bastante concordantes.

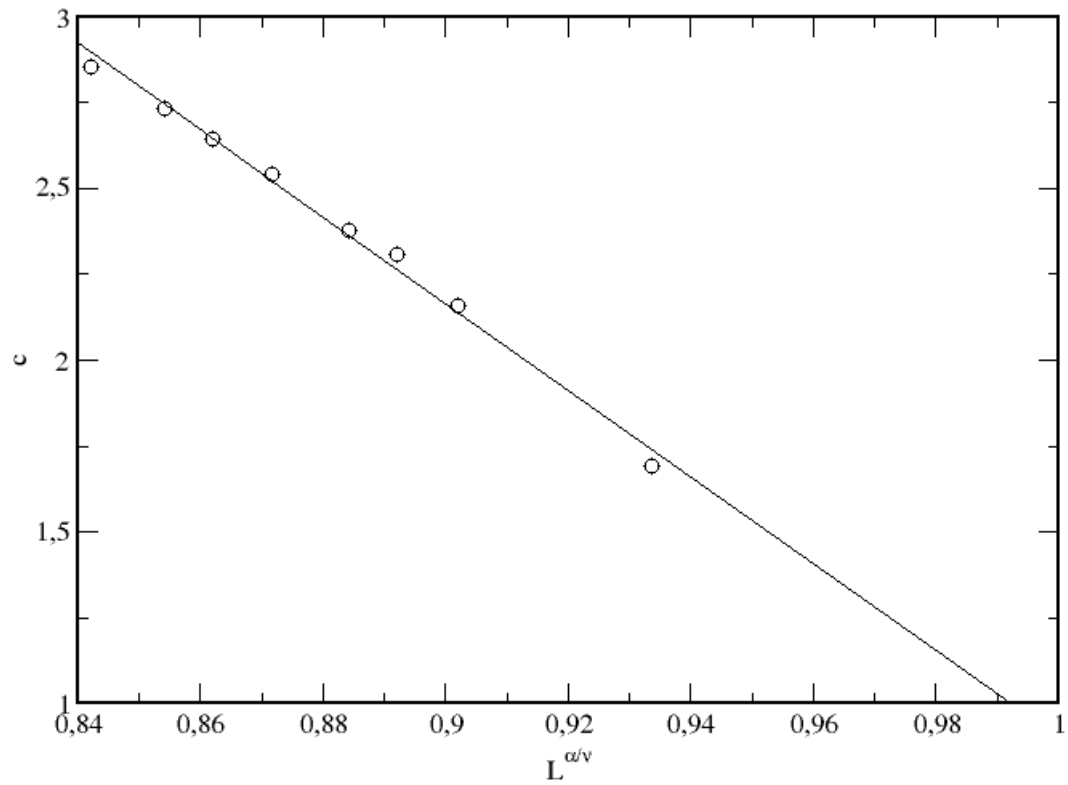


Figura 21: Calor específico c em função do tamanho da rede $L^{\alpha/\nu}$, com $\alpha/\nu = -0,0495$. Não houve exclusão de simulação.

Tabela 7: Membros da relação de hiperescala, com expoentes críticos obtidos neste trabalho.

Membro	Valor
$2 - \alpha$	$2,03 \pm 0,01$
$d\nu$	$2,03 \pm 0,01$
$2\beta + \gamma$	$2,04 \pm 0,02$

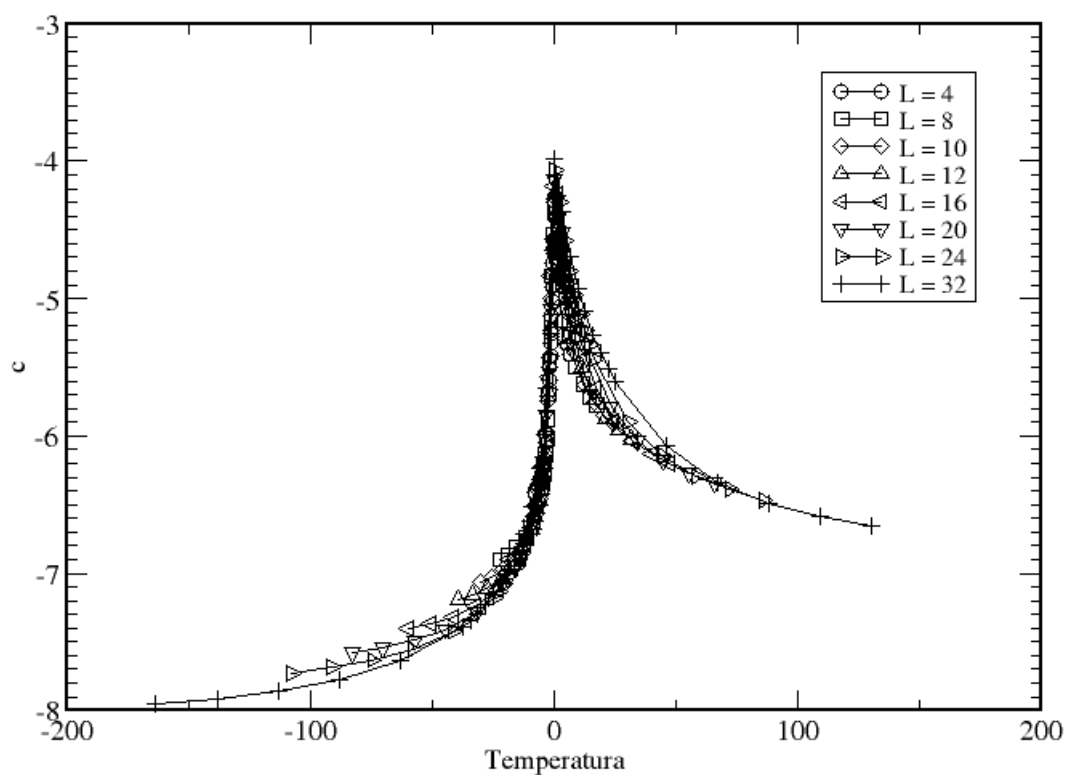


Figura 22: Colapso das curvas do calor específico c com diferentes L usando o expoente crítico $\alpha = -0,0709 \pm 0,0099$ deste trabalho e os parâmetros $c_\infty = 5,70 \pm 0,12$ e $\mathcal{C}(0) = -4,89 \pm 0,11$ obtidos por Chen *et al.* (4).

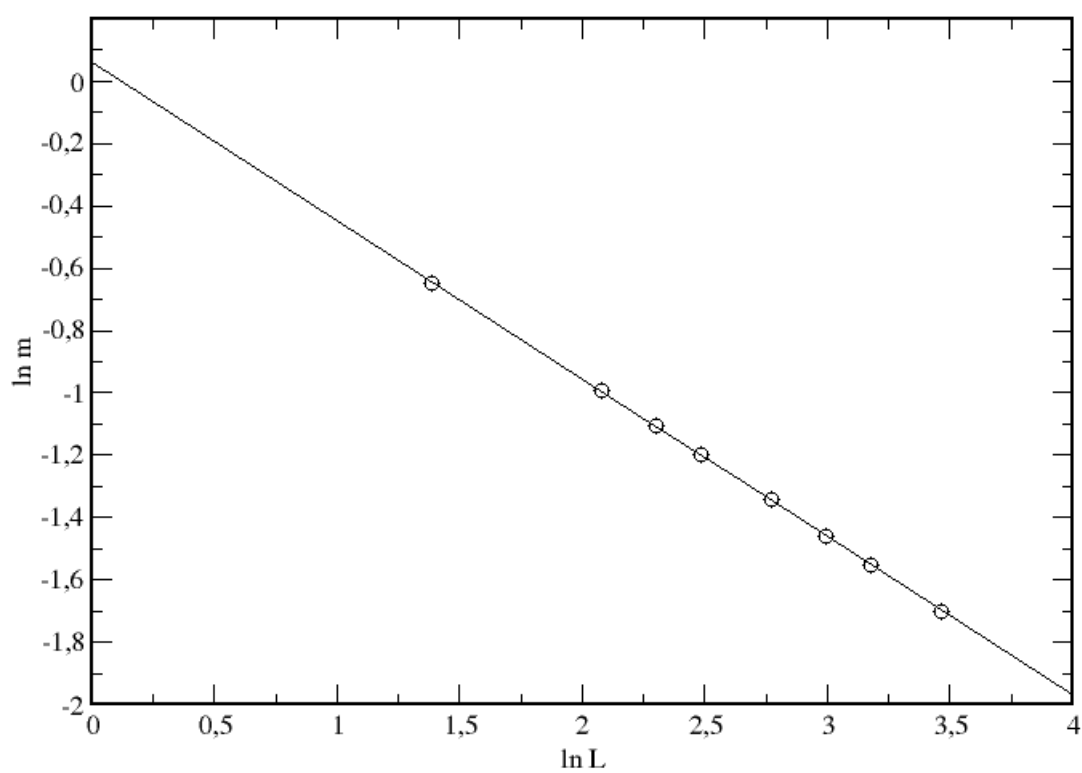


Figura 23: Logaritmo da magnetização m em função do logaritmo do tamanho da rede L . Não houve exclusão de simulação.

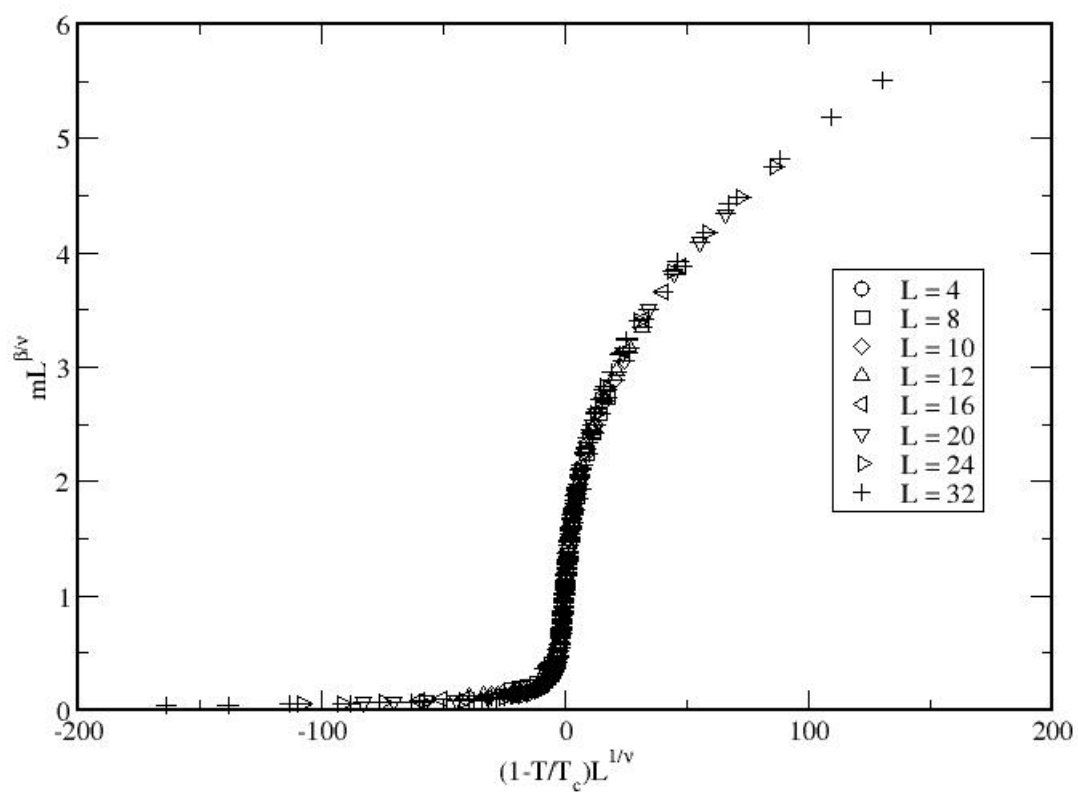


Figura 24: Colapso das curvas da magnetização m com diferentes L usando o expoente crítico $\beta = 0,3499 \pm 0,0076$ deste trabalho.

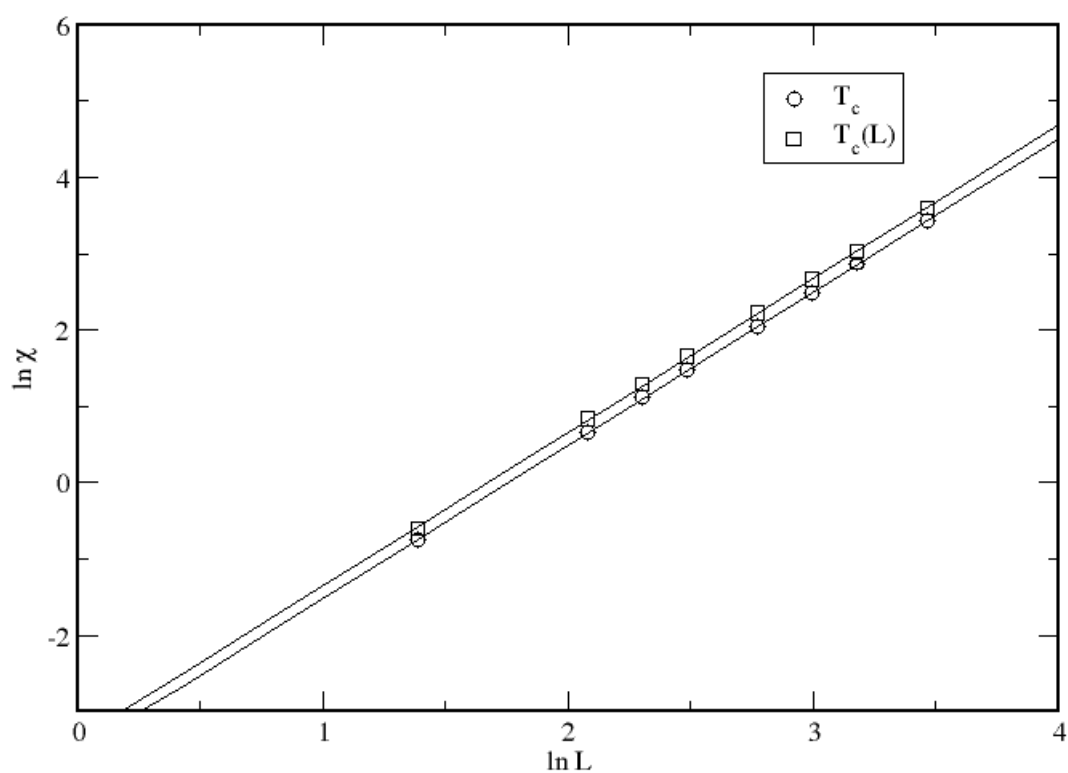


Figura 25: Logaritmo da susceptibilidade χ na temperatura crítica T_c (círculo) ou máxima obtida por multi-histogramas (quadrado) em função do logaritmo do tamanho da rede L . Não houve exclusão de simulação.

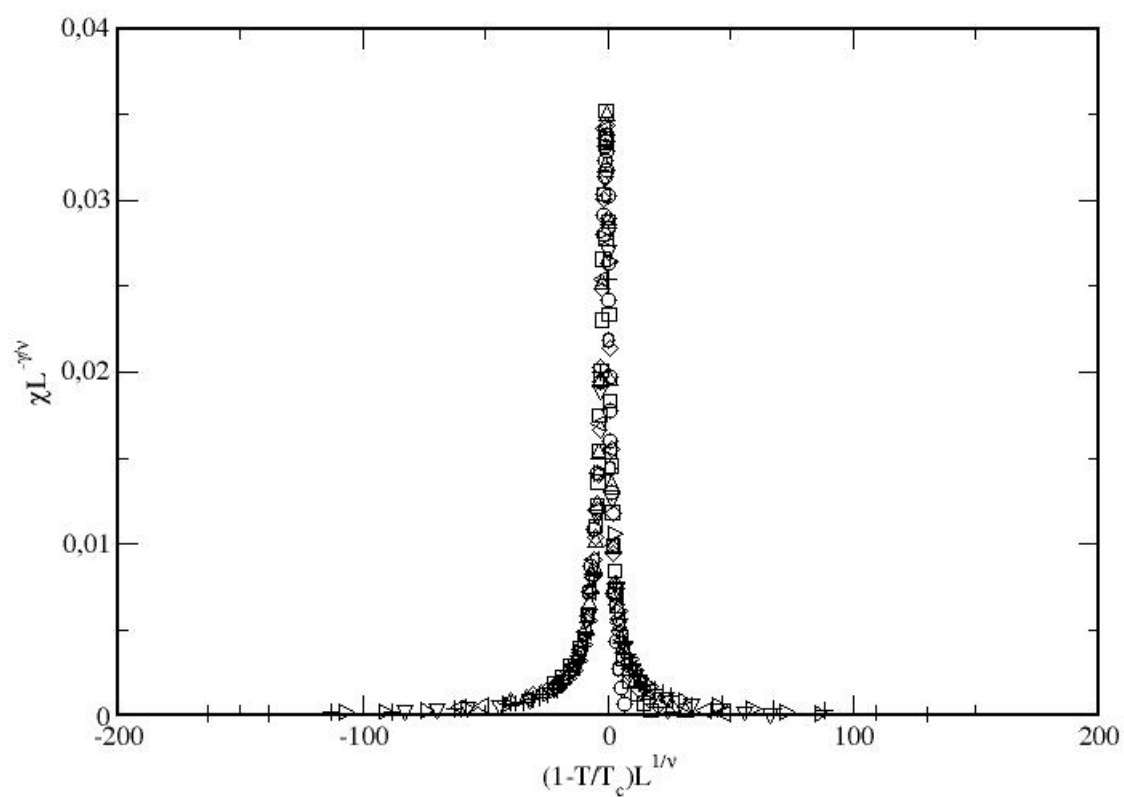


Figura 26: Colapso das curvas de susceptibilidade χ com diferentes L usando o expoente crítico $\gamma = 1,3880 \pm 0,0066$ deste trabalho.

Tabela 8: Valores do parâmetro universal U_{4B}^* obtido na T_c , dos cruzamentos de U_{4B} e da inclinação máxima de U_{4B}

Método	U_{4B}^*
T_c	$0,6219 \pm 0,0022$
Inclinação máxima	$0,5694 \pm 0,0017$
Cruzamento	$0,62178 \pm 0,00050$

4.13 Parâmetro universal U_{4B}^*

O parâmetro universal U_4^* pôde ser obtido do coeficiente linear do cumulante de Binder de três maneiras:

1. Do valor de $U_{4B}(L)$ medido diretamente na T_c ;
2. Do valor de $U_{4B}(L)$ onde a sua inclinação com a temperatura é máxima;
3. Do valor de $U_{4B}(L)$ onde a temperatura inversa é

$$K_{\text{cross}}(L, b) = K_c + gL^{-w+1/\nu} \left[\frac{b^{-w} - 1}{b^{1/\nu} - 1} \right]$$

onde L é o tamanho da menor rede cujo U_{4B} se cruza, b é a razão entre dos tamanhos de redes envolvidas no cruzamento (L'/L) e w é uma correção ao expoente de escala de tamanho finito. A escolha dos tamanhos de rede foi feita de modo que houvesse cinco cruzamentos com $b = 2$.

A regressão linear foi feita com o U_{4B} escolhido em função de $L^{-1/\nu}$.

Essas regressões são mostradas na Figura 27.

As regressões de U_{4B} na T_c e dos cruzamentos foram de qualidade razoável e com boa concordância visual de U_{4B}^* . Os dados obtidos da inclinação máxima tinham uma dispersão maior e o U_{4B}^* obtido por esse método foi muito distinto dos demais.

A Tabela 4.13 mostra os diferentes valores obtidos para este parâmetro universal.

Os valores U_{4B}^* obtidos de simulações na T_c e de cruzamentos de U_{4B} têm boa concordância. O valor de U_{4B}^* combinado destes dois métodos foi de $0,62178 \pm 0,00049$.

Obtivemos também o parâmetro universal U_{4B}^* , que não foi obtido em (4). De maneira semelhante ao trabalho de Ferrenberg e Landau com o modelo de Ising tridimensional (81), o U_{4B}^* obtido pela derivada máxima de U_{4B} foi muito menor que os obtidos pelos demais

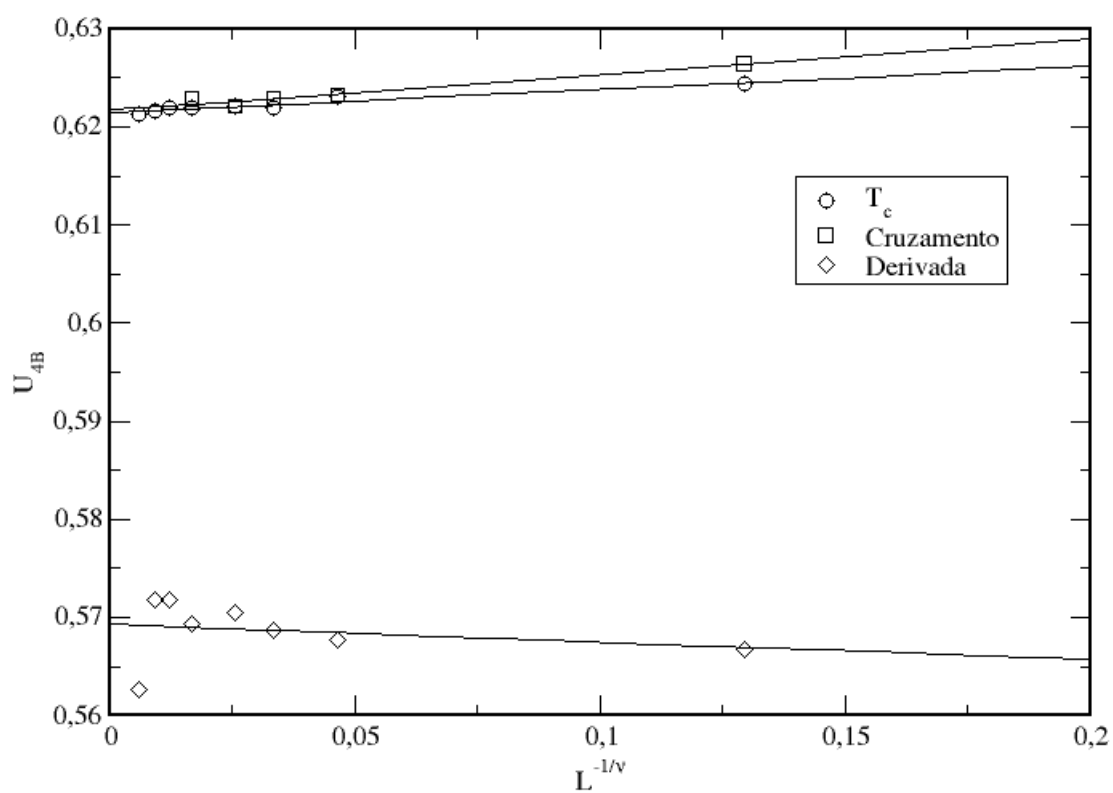


Figura 27: Cumulante de Binder U_{4B} na temperatura crítica T_c (círculo), obtida por cruzamentos do cumulante entre redes diferentes (quadrado) ou na inclinação máxima em função do tamanho da rede $L^{-1/\nu}$ (diamante). Não houve exclusão de simulação.

Tabela 9: Temperatura e expoentes críticos obtidos de trabalho semelhante realizado por Chen *et al.* (4) e neste trabalho. O índice (1) indica os expoentes obtidos do ν sem exclusão de redes, e o índice (2) indica os expoentes obtidos do ν com exclusão da rede $L = 4$

Quantidade	Chen <i>et al.</i>	Este trabalho (1)	Este trabalho (2)
K_c	$0,693035 \pm 0,000037$	$0,69314 \pm 0,00032$	$0,69314 \pm 0,00032$
ν	$0,7036 \pm 0,0023$	$0,6767 \pm 0,0020$	$0,6903 \pm 0,0034$
α	$-0,1108 \pm 0,0069$	$-0,0301 \pm 0,0058$	$-0,0709 \pm 0,0099$
β	$0,3616 \pm 0,0031$	$0,3430 \pm 0,0072$	$0,3499 \pm 0,0076$
γ	$1,3896 \pm 0,0070$	$1,3616 \pm 0,0047$	$1,3880 \pm 0,0066$

métodos, que concordaram entre si. Segundo eles, esse comportamento não era inesperado devido a natureza do cumulante quando $L \rightarrow \infty$.

A Tabela 4.13 mostra a temperatura e os expoentes críticos obtidos e os da literatura.

Os valores da temperatura e dos expoentes críticos obtidos em nosso trabalho estão próximos dos obtidos por Chen *et al.* (Tabela 4.13). A K_c concorda estatisticamente com a obtida anteriormente, mas os demais expoentes não. Acreditamos que nossos expoentes foram bem determinados, com o uso de regressões especiais e de convergência entre ν e T_c , e da técnica *jackknife* que pode ter eliminado vícios das quantidades não-lineares de ordem maior que $1/n$. Os membros da relação de hiperescala atestam a qualidade dos expoentes, a menos de que o expoente α foi obtido internamente usando-se essa relação. Esses fatos podem apontar para uma superioridade do nosso método sobre o de Chen *et al.*, mesmo eles tendo usado redes maiores que as nossas.

É preciso considerar que o valor de $1/\nu$ sem exclusão de redes é significativamente diferente do obtido excluindo-se a rede $L = 4$. A rede menor pode estar contribuindo com um erro sistemático para esse expoente, que está envolvido na determinação dos demais. Ao usarmos o ν obtido com a exclusão da rede $L = 4$ os expoentes aproximam-se dos obtidos em (4). O expoente β passa a ser compatível estatisticamente com o valor de Chen *et al.*, mas os demais não.

Os expoentes críticos β e γ calculados com ν obtido com $L_{\min} = 8$ concordam bem com os expoentes críticos experimentais mostrados na Tabela 4.1. O mesmo expoente γ tem boa concordância com os expoentes teóricos e simulacionais mostrados na Tabela 4.2, enquanto os expoentes β e ν obtidos na mesma circunstância concordam com estes dados, mas estão mais próximos dos menores valores tabelados. Esta diferença pode ser devida a um não-uso de técnicas de redução de vício nos expoentes da literatura obtidos

por simulação.

A minimização dos erros ao incluir-se todos os tamanhos de rede indica que a exclusão das redes menores pode ser desfavorável do ponto de vista estatístico, e que nem todas as grandezas podem sofrer erros sistemáticos com tamanhos menores de rede. É possível também que eventuais desvios sistemáticos sejam tão reprodutíveis que isso não implique em um erro de precisão, mas de exatidão.

5 *Dinâmica do modelo de Heisenberg 1D*

Apresentamos aqui a segunda parte de nossa investigação do modelo de Heisenberg, que é complementar ao estudo termodinâmico. Aqui trabalhamos com redes unidimensionais com contorno periódico, ou anéis de spins, uma vez que a dinâmica de redes tridimensionais apresenta complicações desnecessárias para nossa finalidade aqui.

5.1 Difusão de spins

A difusão de spins desempenha um papel importante em experimentos dinâmicos como na Ressonância Magnética Nuclear e na Ressonância Paramagnética Eletrônica (9) e é uma das motivações para as simulações de dinâmica realizadas por nós. Iremos mostrar a seguir a origem dessa fenomenologia e como medi-la. A apresentação inicial segue de perto o livro de Forster (82).

Consideremos partículas i com spins \vec{S}_i que interagem por uma força independente da velocidade ou do spin. Definamos o operador magnetização como

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = \sum_i 2\mu \vec{S}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)). \quad (5.1)$$

onde μ é o momento magnético de spin de cada partícula.

Vamos estudar a evolução temporal do sistema quando $\vec{M} \neq 0$ em um ponto, e nula nas demais, de forma a facilitar o estudo de como o spin se difunde. Da equação 5.1 obtemos as (três) equações de continuidade:

$$\frac{\partial M^\alpha(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}^{M^\alpha(\vec{r}, t)} = 0, \quad (5.2)$$

com M^α sendo a componente α da magnetização e \vec{j}^{M^α} a corrente de M^α . Para resolvermos a Equação 5.2 precisamos encontrar umnexo entre \vec{M} e $\vec{j}^{\vec{M}}$. Como a magnetização

tende a um estado de equilíbrio, propomos a Equação constitutiva 5.3.

$$\langle \vec{j}^{M^\alpha}(\vec{r}, t) \rangle = -D \vec{\nabla} \langle M^\alpha(\vec{r}, t) \rangle. \quad (5.3)$$

em que $\langle \dots \rangle$ representa uma média termodinâmica.

O coeficiente de transporte D é chamado de coeficiente de difusão de spin e é positivo.

Se substituirmos a Equação 5.3 na Equação 5.2, chegamos a Equação de difusão 5.4

$$\frac{\partial \langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle}{\partial t} - D \nabla^2 \langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle = 0. \quad (5.4)$$

A Equação 5.4 pode ser resolvida com uma Transformada de Fourier no espaço seguida da Transformada de Laplace no tempo

$$\langle \vec{M}(\vec{q}, \omega) \rangle = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle. \quad (5.5)$$

A solução para a Equação 5.4 é

$$\langle \vec{M}(\vec{q}, \omega) \rangle = \frac{i}{\omega + iDq^2} \langle \vec{M}(\vec{q}, t = 0) \rangle. \quad (5.6)$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace no tempo na Equação 5.6, obtemos

$$\langle \vec{M}(\vec{q}, t) \rangle = e^{-Dq^2 t} \langle \vec{M}(\vec{q}, 0) \rangle. \quad (5.7)$$

A Transformada Inversa de Fourier no espaço da Equação 5.7 será um produto de d termos, um para cada dimensão do sistema, da Transformada Inversa de Fourier para cada componente de \vec{q} . Vamos resolve-la para um dos componentes que chamaremos por simplicidade de q . A Transformada Inversa de uma função gaussiana e^{-ax^2} como a nossa é

$$\mathcal{F}^{-1}[e^{-ax^2}](q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-iqx} dx. \quad (5.8)$$

Podemos completar o quadrado do expoente fazendo $ax^2 + iqx = A^2 + 2AB + B^2 - B^2 = (A + B)^2 - B^2$, o que resulta em $A = \sqrt{a}$ e $B = iq/(2\sqrt{a})$. Fazendo $x' = A + B$, temos que $dx' = \sqrt{a} dx$ e a Equação 5.8 torna-se em

$$\mathcal{F}^{-1}[e^{-ax^2}](q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x'^2} dx' \right] \frac{e^{-\frac{q^2}{4a}}}{\sqrt{a}}. \quad (5.9)$$

A integral entre colchetes é calculada como

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x'^2} dx' &= \left\{ \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x'^2} dx' \right] \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y'^2} dy' \right] \right\}^{1/2} \\
&= \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \right\}^{1/2} \\
&= \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-r^2} r dr d\theta \right\}^{1/2} \\
&= \left\{ 2\pi \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-r^2} r dr \right\}^{1/2} \\
&= \left\{ \pi \int_{-\infty}^0 e^u du \right\}^{1/2} \\
&= \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

O resultado da Transformada de Fourier da Equação 5.9 é

$$\mathcal{F}^{-1}[e^{-ax^2}](q) = \sqrt{\frac{1}{2a}} e^{-q^2/(4a)}. \quad (5.10)$$

Fazendo $a = Dt$ chegamos a solução

$$\langle \vec{M}(x, t) \rangle = \frac{\exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)}{\sqrt{2Dt}}. \quad (5.11)$$

A função correlação é diretamente relacionada a medidas experimentais de espalhamento, que pode informar, dentre outras coisas, a difusão de spins a partir do espalhamento magnético de nêutrons. Essa função tem várias propriedades, como a simetria sob reversão temporal, positividade, teoremas de dissipação-flutuação, relações de Kramers-Kronig que expressam causalidade, relações de Kubo que ligam os coeficientes de transporte às funções correlação e a regra da soma (82).

Vamos definir a função correlação para a magnetização

$$C(\vec{r}, t) = \langle \vec{M}(\vec{r}, t) \cdot \vec{M}(\vec{0}, 0) \rangle. \quad (5.12)$$

Se momentaneamente eliminarmos as média termodinâmicas da Equação de difusão 5.4, fizermos o produto escalar pela direita com $\vec{M}(\vec{0}, 0)$ e enfim retomarmos a média termodinâmica, concluiremos que

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\nabla^2 \right] C(\vec{r}, t) = 0. \quad (5.13)$$

Sua solução é análoga a da difusão da magnetização, de forma que ela exhibe uma cauda em lei de potência com

$$C(\vec{0}, t) \propto t^{-a_d} \quad (5.14)$$

onde $a_d = d/2$. A verificação da difusão de spins obtida pode ser feita através da observação ou não deste tipo de decaimento. Quando a autocorrelação tem outro tipo de comportamento é dito que a difusão é anômala.

5.2 Difusão anômala de spins

A existência de uma difusão anômala de spins tem sido motivo de controvérsias consideráveis (9–12, 83, 84), a partir de simulações da dinâmica de spins.

Müller (9) em 1988 verificou para redes de dimensionalidades d iguais a 1, 2 ou 3 que os expoentes característicos a_d diferem significativamente dos valores previstos $d/2$. Em uma dimensão a diferença era substancial, enquanto que para redes bi ou tridimensionais ela era mais sutil.

Gerling e Landau (10), em simulações bem mais longas que a de Müller, redes unidimensionais bem maiores, mas amostras menores, tiveram resultados concordantes com os de Müller para mesmos períodos de simulação. No entanto eles observaram um comportamento assintótico consistente com um decaimento não anômalo, apesar deles não excluírem a possibilidade de um $a_d = a_1$ maior que $1/2$. Eles também viram que a autocorrelação energia-energia aproxima-se do expoente esperado mais rapidamente que a autocorrelação spin-spin. Algumas conclusões deste trabalho são a necessidade de um esforço computacional substancial e a crença de que não há difusão anômala para as redes de dimensões $d = 1, 2$ e 3 .

Na réplica ao trabalho de Gerling e Landau, Müller (11) reconhece que sua estimativa de a_1 foi de certa forma alta, mas não acredita em uma evidência significativa para a difusão simples de spins. Ele alega que não se pode notar um comportamento assintótico da autocorrelação spin-spin muito tempo depois do comportamento observado para a autocorrelação energia-energia. Mais ainda, a tendência de curvatura após $t > 100J^{-1}$ está dentro do ruído observado.

Em um trabalho mais extenso, Gerling e Landau (12) confirmam a difusão clássica de spins com uma aproximação lenta ao decaimento apresentado na Equação 5.14.

Nesses trabalhos é preciso atentarmos para o uso de integradores de movimento em

um sistema não-integrável de spins, que pode ter sua confiabilidade limitada para tempos mais curtos que os utilizados nestes trabalhos. Em nossa pesquisa será levantada essa questão.

Mostraremos a seguir origem das equações de movimento, as quais regem a dinâmica de spins a ser simulada.

5.3 Equações de movimento

As expressões das dinâmicas são obtidas a partir da representação de Heisenberg

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, A] + \frac{\partial A}{\partial t}, \quad (5.15)$$

que no caso do componente α do spin S_i (S_i^α), que não depende explicitamente do tempo.

$$\dot{S}_i^\alpha = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, S_i^\alpha]. \quad (5.16)$$

No nosso estudo, a hamiltoniana \mathcal{H} é dada pela Equação 1.6. Substituindo-a na Equação 5.16, obtemos

$$\begin{aligned} \dot{S}_i^\alpha &= \frac{i}{\hbar} \left[J \sum_{\langle j,k \rangle} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_k, S_i^\alpha \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{\beta=1}^3 J \sum_{\langle j,k \rangle} S_j^\beta \cdot S_k^\beta, S_i^\alpha \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{\beta=1}^3 J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^\beta \cdot S_j^\beta, S_i^\alpha \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} J \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\langle i,j \rangle} S_j^\beta [S_i^\beta, S_i^\alpha] \\ &= \frac{i}{\hbar} J \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\langle i,j \rangle} S_j^\beta (i\hbar \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_i^\gamma) \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_j^\beta S_i^\gamma \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_{\alpha\gamma\beta} S_j^\beta S_i^\gamma \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)_\alpha \\ &= -J (\vec{S}_i \times \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_j)_\alpha \end{aligned}$$

de modo que

$$\dot{\vec{S}}_i = -J\vec{S}_i \times \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_j. \quad (5.17)$$

Essa equação pode ser integrada por vários métodos, como o Runge-Kutta e métodos simpléticos. A integração numérica é susceptível a problemas de estabilidade numérica, truncamentos e poder computacional, especialmente quando lidamos com sistemas não-integráveis. Usamos sem perda de generalidade $J = 1$.

5.4 Integradores das equações de movimento

Os métodos aqui apresentados permitiram o estudo da dinâmica de spins. Todos eles são de quarta ordem e realizados em redes lineares de 4 ou 18 spins, com precisões simples, dupla ou quádrupla, e diferentes passos de integração δt . São eles: o Runge-Kutta (RK4), o Preditor-Corretor (PC4), e os métodos simpléticos Suzuki-Trotter (ST4) e o Forest-Ruth otimizado (OFR).

Todos estes experimentos foram realizados a temperatura infinita, o que equivale dizer que todos os possíveis estados iniciais têm igual probabilidade de ocorrência. As configurações iniciais são sorteios aleatórios de todos os spins da rede.

O RK4 pode ser encontrado no Wikipedia (85). O PC4 e o ST4 podem ser encontrados em Krench et al. (86), e o OFR é descrito por Omelyan et. al (87) e corrigido por nós (veja a seguir).

5.4.1 Runge-Kutta de quarta ordem

No método RK4 a equação de movimento quando escrita na forma $y' = f(y)$, com $y_0 = y(0)$ é resolvida por (85)

$$\begin{cases} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{cases}$$

onde

$$\begin{cases} k_1 &= f(t_n, y_n) \\ k_2 &= f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 &= f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}$$

A próxima estimativa é produto de h e de uma estimativa de inclinação. Essa estimativa é a média ponderada das inclinações no começo do intervalo (peso 1), no meio do intervalo estimando y por k_1 (peso 2), novamente no meio, usando k_2 (peso 2), e no fim do intervalo, estimando y por k_3 (peso 1).

5.4.2 Preditor-Corretor de quarta ordem

No PC4 precisamos dos estados dos quatro instantes mais recentes, o que pode ser obtido no início rodando-se RK4 para tempos negativos. O passo preditor Adam-Bashforth é

$$y(t + \delta t) = y(t) + \frac{\delta t}{24} [55f(y(t)) - 59f(y(t - \delta t)) + 37f(y(t - 2\delta t)) - 9f(y(t - 3\delta t))]. \quad (5.18)$$

O passo corretor Adams-Moulton é

$$y(t + \delta t) = y(t) + \frac{\delta t}{24} [9f(y(t + \delta t)) + 19f(y(t)) - 5f(y(t - \delta t)) + f(y(t - 2\delta t))]. \quad (5.19)$$

5.4.3 Métodos simpléticos

Nos métodos não-simpléticos RK4 e PC4 ocorre um acúmulo rápido de erros de truncamento na integração de equações de movimento, e as soluções produzidas por estes métodos não são reversíveis no tempo(87).

Foi proposto um método em que a propagação era conduzida com base na decomposição exponencial. Com isso torna-se possível a construção de algoritmos simpléticos e reversíveis no tempo, além de simples e explícito.

A dinâmica do spin pode ser visualizada como uma precessão de Larmor do spin \mathbf{S} em torno de um eixo efetivo ω que é dependente do tempo. Nesse método dividimos a rede em sub-redes em que a precessão de um spin é em torno de um campo local ω de spins vizinhos que estão todos localizados na outra sub-rede. A rotação, expressa pelo exponencial $e^{(A+B)t}$, pode ser reescrita como

$$e^{(A+B)t} = \prod_{i=1}^5 e^{p_i A \delta t / 2} e^{p_i B \delta t} e^{p_i A \delta t / 2}. \quad (5.20)$$

onde p_i são constantes e δt é o passo de integração.

Essa é uma decomposição de quarta ordem.

A variável A se refere a uma das sub-redes, e B a outra. Podemos agrupar variáveis

de maneira a chegarmos a onze termos de rotação alternada entre as sub-redes.

Descreveremos a seguir os dois métodos simpléticos usados: o ST4 e o OFR.

5.4.3.1 Suzuki-Trotter

No método de quarta ordem Suzuki-Trotter (ST4), que é bastante conhecido, os coeficientes a Equação 5.20 são: $p_1 = p_2 = p_4 = p_5 = p = 1/(4 - 4^{1/3})$ e $p_3 = 1 - 4p$ (86).

5.4.3.2 Forest-Ruth otimizado

Espera-se que o OFR seja ótimo entre todos os possíveis integradores por decomposição de quarta ordem com divisão única do operador de Liouville (87). Portanto, ele deve ser mais eficiente que o ST4 ou que o método original de Forest-Ruth (87).

A expansão pode ser feita neste caso como

$$e^{(A+B)t+C_3t^3+C_5t^5+\mathcal{O}(t^7)} = e^{B\xi t} e^{A(1-2\lambda)t/2} e^{B\chi t} e^{A\lambda t} e^{B(1-2(\chi+\xi))t} e^{A\lambda t} e^{B\chi t} e^{A(1-2\lambda)t/2} e^{B\xi t}, \quad (5.21)$$

onde C_3 cancela truncamentos de terceira ordem e C_5 minimiza o truncamento de quinta ordem. C_3 é dado por

$$C_3 = \alpha(\xi, \lambda, \chi)[A, [A, B]] + \beta(\xi, \lambda, \chi)[B, [A, B]],$$

onde $[,]$ é o comutador entre dois operadores e

$$\alpha(\xi, \lambda, \chi) = -\frac{1}{24} + \lambda^2\chi + \frac{\xi}{4}, \quad (5.22)$$

$$\beta(\xi, \lambda, \chi) = -\frac{1}{12} + \lambda\chi(1 - \chi - 2\xi) + \frac{\xi}{2} - \frac{\xi^2}{2}. \quad (5.23)$$

C_5 é dado por

$$C_5 = \gamma_1[A, [A, [A, [A, B]]]] + \gamma_2[A, [A, [B, [A, B]]]] + \gamma_3[B, [A, [A, [A, B]]]] + \gamma_4[B, [B, [B, [A, B]]]] + \gamma_5[B, [B, [A, [A, B]]]] + \gamma_6[A, [B, [B, [A, B]]]], \quad (5.24)$$

com

$$\gamma_1 = \frac{7}{5760} - \frac{\lambda^2 \chi}{12} \left(\frac{1}{2} - \lambda^2 \right) - \frac{\xi}{192}, \quad (5.25)$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{480} - \frac{\lambda \chi}{2} \left(\frac{1}{12} - \frac{\lambda}{6} + \lambda^2 \chi + \lambda \xi - \frac{\chi}{12} - \frac{\xi}{6} \right) - \frac{\xi^2}{24}, \quad (5.26)$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{360} - \lambda^2 \chi \left(\frac{1}{6} - \frac{\lambda}{6} - \frac{\lambda \chi}{3} + \frac{\lambda \xi}{3} - \frac{\xi}{2} \right) - \frac{\xi}{48} + \frac{\xi^2}{24}, \quad (5.27)$$

$$\gamma_4 = \frac{1}{720} - \lambda \chi \left(\frac{\chi}{12} - \frac{\chi^2}{6} + \frac{\chi^3}{12} - \frac{\chi \xi}{2} + \frac{\chi^2 \xi}{2} + \frac{\chi \xi^2}{2} + \frac{\xi}{6} - \frac{\xi^2}{2} + \frac{\xi^3}{3} \right) - \frac{\xi^2}{24} + \frac{\xi^3}{12} - \frac{\xi^4}{24}, \quad (5.28)$$

$$\gamma_5 = \frac{1}{120} - \lambda \chi \left[\frac{1}{6} - \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{6} + \frac{\chi}{2} - \chi^2 - \chi \xi - \xi + \xi^2 \right) - \frac{\chi}{6} + \frac{\chi \xi}{2} - \frac{5\xi}{6} + \xi^2 \right] - \frac{\xi}{16} + \frac{7\xi^2}{48} - \frac{\xi^3}{8}, \quad (5.29)$$

$$\gamma_6 = -\frac{1}{360} + \lambda \chi \left(\frac{1}{12} - \frac{\lambda \chi}{2} + \frac{2\lambda \chi^2}{3} + \lambda \chi \xi - \frac{\chi}{12} + \frac{\chi \xi}{2} - \frac{2\xi}{3} + \xi^2 \right) + \frac{\xi}{24} - \frac{\xi^2}{6} + \frac{\xi^3}{6}. \quad (5.30)$$

Devemos portanto resolver o sistema de equações

$$\begin{cases} \alpha(\xi, \lambda, \chi) = 0, \\ \beta(\xi, \lambda, \chi) = 0, \\ \gamma(\xi, \lambda, \chi) = \min(\text{global}). \end{cases}$$

com

$$\gamma(\xi, \lambda, \chi) = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2 + \gamma_4^2 + \gamma_5^2 + \gamma_6^2}.$$

Das equações para α e β , obtém-se

$$\chi(\lambda) = \frac{4\lambda - 8\lambda^2 \pm \sqrt{2\lambda(-1 + 8\lambda - 24\lambda^2 + 24\lambda^3)}}{12\lambda - 96\lambda^3 + 96\lambda^4}, \quad (5.31)$$

$$\xi(\lambda) = \frac{1}{6} - 4\lambda^2 \chi. \quad (5.32)$$

O resultado da literatura para ξ , λ e χ é

$$\xi = +0,1720865590295143E + 00 \quad (5.33)$$

$$\lambda = -0,9156203075515678E - 01 \quad (5.34)$$

$$\chi = -0,1616217622107222E + 00. \quad (5.35)$$

Recalculamos estas constantes através da *golden search* em Fortran (20) e do Mathema-

tica. As novas constantes são mostradas no capítulo Resultados.

5.5 Grandezas dinâmicas

Estudamos a dinâmica de spins principalmente pela correlação energia-energia e spin-spin para todos os vizinhos. Fizemos investigações das correlações individuais assim como de uma amostra de correlações.

Verificamos também o efeito de perturbações no estado inicial sobre as correlações dinâmicas.

Comparamos o resultado da auto-correlação spin-spin do sistema integrável ($L = 4$) com sua solução analítica.

5.5.1 Correlação energia-energia

A correlação energia-energia $\langle E_i(t_0)E_i(t) \rangle$ foi calculada determinando-se a Hamiltoniana para cada sítio em $t_0 = 0$ e em t e calculou-se a média do produto do vetor energia em t_0 com o vetor energia em t deslocado n sítios à direita e à esquerda.

A Hamiltoniana do sítio é o produto escalar do spin do sítio com a soma de seus spins vizinhos.

Podemos expressar esta correlação como

$$\langle E_i(t_0)E_i(t) \rangle = \langle [\vec{S}_i(t_0) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_j(t_0))] [\vec{S}_i(t) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_j(t))] \rangle,$$

onde $sum_{\langle ij \rangle}$ representa uma soma sobre os primeiros vizinhos j do sítio i .

5.5.2 Correlação spin-spin

A correlação spin-spin $\langle \vec{S}(t_0) \cdot \vec{S}(t) \rangle$ foi calculada determinando-se a média do produto escalar da rede em t_0 com a rede em t .

5.5.3 Solução analítica

A solução analítica da correlação spin-spin a temperatura infinita para $L = 4$ é apresentada por Klemm e Luban (88). As integrações foram realizadas pelo método de inte-

Tabela 10: Parâmetros ξ , λ e χ usados no método OFR na literatura e calculados neste trabalho. A tolerância usada na obtenção dos parâmetros calculados por nós é em torno de 10^{-16} .

Parâmetro	Omelyan (87)	Este trabalho
ξ	+0,1720865590295143	+0,171769920830100170852271820100736
λ	-0,9156203075515678E-01	-8.648206099077544181945498927338507E-02
χ	-0,1616217622107222	-0.170582763313274728512636638438501

gração de quarta ordem de polinômios cúbicos (20). A definição da função de Heaviside usada na expressão desta solução pode ser encontrada no Wikipedia (89).

5.6 Parâmetros do método OFR

O parâmetro λ foi obtido pela minimização da função $\gamma(\xi(\lambda), \lambda, \chi(\lambda))$ pelo método de Brent. Os demais parâmetros ξ e χ foram calculados a partir de λ . Seus valores, assim como os valores da literatura (87) são mostrados na Tabela 5.6.

O aumento da precisão foi de $3,1 \times 10^{-4}$ vezes.

Obtivemos um valor mais preciso para os parâmetros ξ , λ e χ do método OFR. A melhora de desempenho, apesar de pequena, pode ter sido importante nos estudos do sistema não-integrável.

5.7 Sistema integrável

Escolhemos como sistema integrável a rede $L = 4$ (88), da qual já foi obtida a autocorrelação temporal spin-spin a temperatura infinita. Com isso dispúnhamos de um padrão contra o qual pudemos comparar nossos dados experimentais.

5.7.1 Autocorrelações típicas de um sistema integrável

De início mostramos a exploração inicial das autocorrelações de energia e de spin do sistema integrável. A Figura 28 mostra estas autocorrelações de três configurações iniciais diferentes.

Percebe-se que a autocorrelação de energia tem formato senoidal nas três trajetórias, e a de spin tem certa regularidade, com um comportamento mais complexo.

O sistema integrável parece apresentar um comportamento periódico, notável tanto

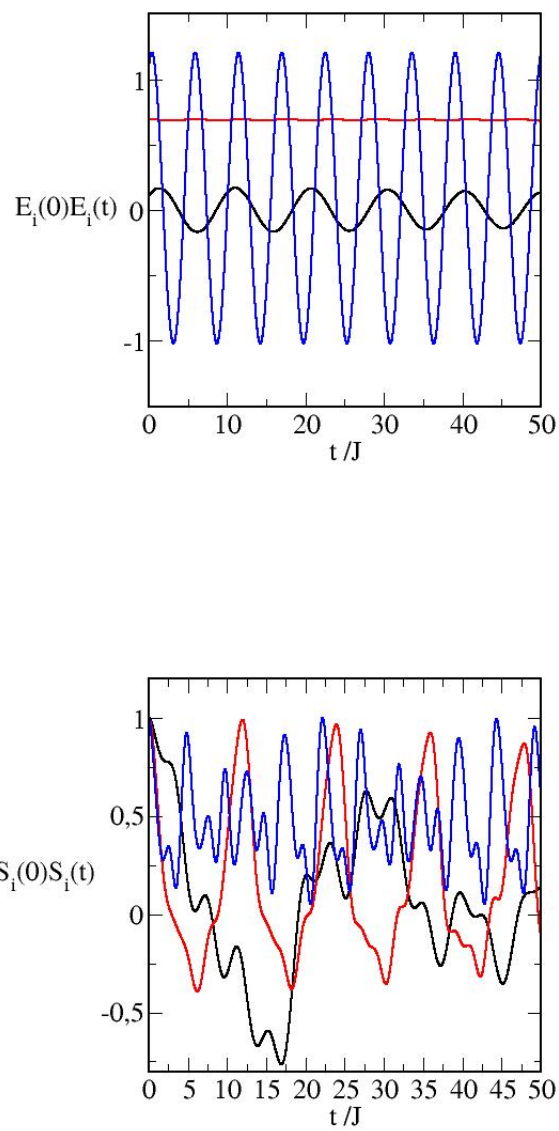


Figura 28: Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para cadeia de spins $L = 4$ a partir de diferentes configurações iniciais.

pela autocorrelação de energia como de spin.

5.7.2 Efeito de variáveis sobre dinâmica de um sistema integrável

Mostramos na Figura 29 dinâmicas de uma mesma configuração inicial obtidas com diferentes métodos de integração, passos de integração e precisões (dupla e quádrupla).

Todas essas correlações coincidiram.

Algumas dinâmicas realizadas com precisão simples não tiveram essa coincidência.

As trajetórias do sistema integrável não dependeram do passo, do método de integração ou da precisão ser dupla ou quádrupla. Nesse tipo de sistema eventuais diferenças numéricas entre esses procedimentos não são capazes de alterar drasticamente a dinâmica da rede. Houve problemas no uso da precisão simples e do passo de integração da ordem de 5×10^{-8} , que devem estar relacionados a instabilidades numéricas e a um erro local de truncamento, respectivamente.

A concordância entre os diferentes métodos para o sistema integrável contribui para estabelecermos os diferentes métodos como confiáveis.

5.7.3 Convergência de dinâmica para a solução exata

Após a verificação de que os métodos e passos de integração para o sistema integrável são equivalentes, usamos o método mais rápido com precisão dupla e o menor passo de integração para gerar uma grande amostra de autocorrelações. As autocorrelações médias destas amostras são mostradas na Figura 30, juntamente com a autocorrelação média de spins esperada.

Nota-se a convergência das autocorrelações médias de spin para a curva teórica com o aumento do tamanho da amostra. A concordância entre experimento e teoria é muito boa a partir de $N = 10^6$.

A autocorrelação de energia também parece convergir para uma curva com o aumento da amostra. As curvas para $N = 10^6$ e $N = 10^7$ parecem muito próximas de uma curva limite. Não dispomos da expressão para esta autocorrelação.

A Figura 31 mostra o erro das autocorrelações médias de spin em relação a curva teórica.

Os erros parecem ser inversamente proporcionais a raiz de N : com uma amostra de

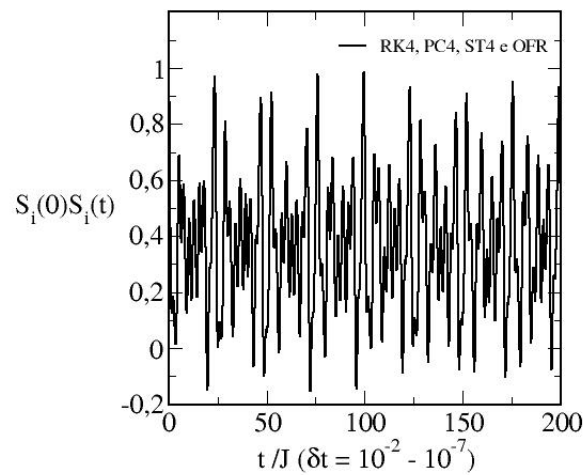
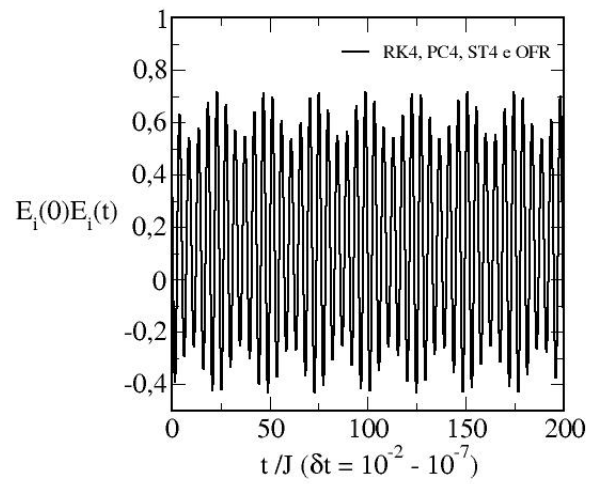


Figura 29: Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para cadeia de spins $L = 4$. As autocorrelações para os diferentes métodos e passos de integração partem da mesma configuração inicial e coincidem. As precisões usadas foram a dupla e a quádrupla.

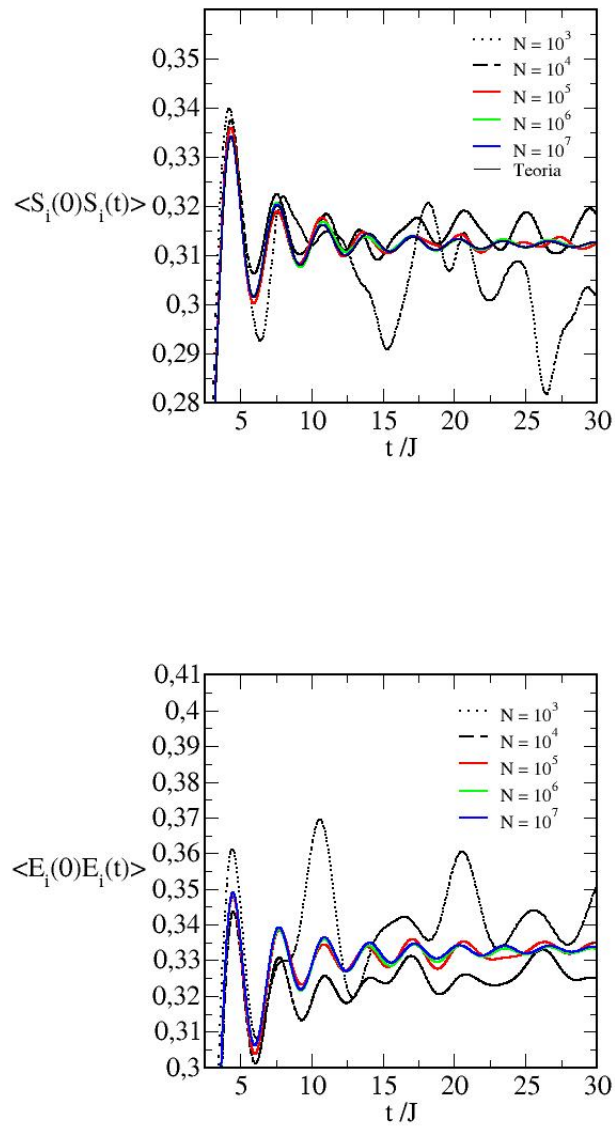


Figura 30: Média de 10^3 , 10^5 e 10^7 autocorrelações da energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia de spins $L = 4$. No gráfico de spins há também a autocorrelação teórica. Método usado foi o RK4 com passo de integração de 1×10^{-2} .

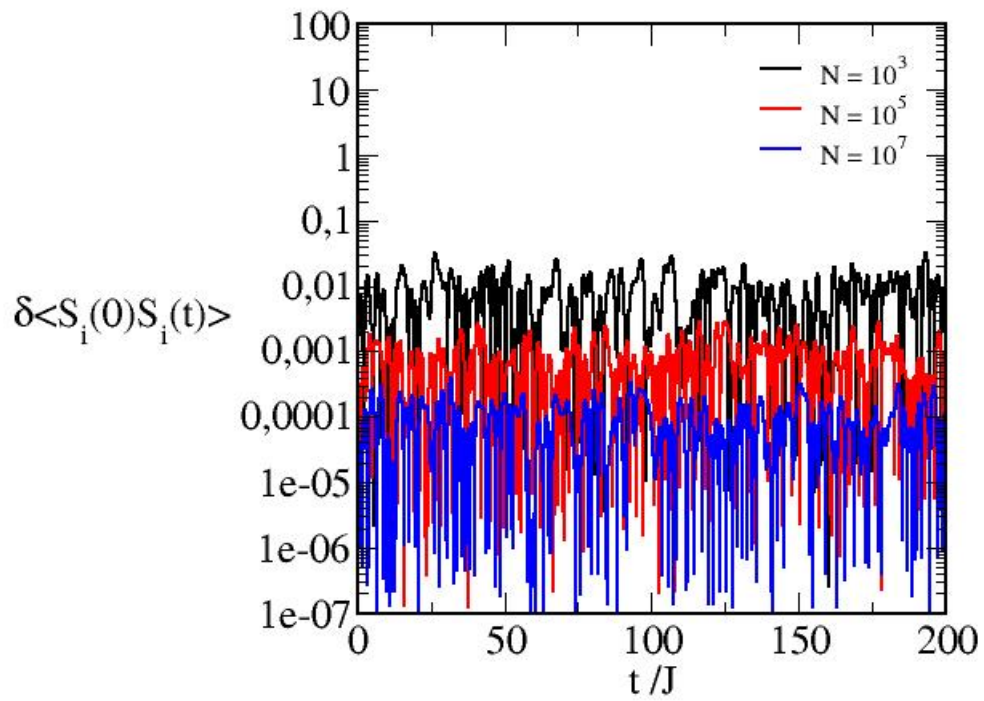


Figura 31: Erro da média de 10^3 , 10^5 e 10^7 autocorrelações de spin em relação a sua autocorrelação teórica, para a cadeia de spins $L = 4$.

10^3 os erros concentram-se em 0,01, com $N = 10^5$ os erros ficam em torno de 0,001, e com $N = 10^7$ os erros são aproximadamente de 0,0001. Os erros com $N = 10^5$ já aparentam ser muito pequenos.

A convergência da autocorrelação média de spin para a curva teórica leva-nos a estabelecer com confiança os métodos de dinâmica implementados, e nos fornece uma noção do tamanho de amostra necessário para se obter a precisão desejada. Aparentemente amostras com $N = 10^5$ aproximam-se significativamente do resultado almejado.

5.8 Sistema não-integrável

A rede de spins no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ é um sistema não-integrável. O estudo desse sistema pode ser iniciado com uma rede modelo menor que também seja não-integrável.

Uma rede que foi bem caracterizada como não-integrável foi $L = 18$ (90). O tamanho reduzido desta rede permite a simulação de amostras grandes, e com isso uma boa estatística. Ela será o objeto de estudo nesta seção.

5.8.1 Autocorrelações típicas de um sistema não-integrável

Apresentamos na Figura 32 a exploração inicial das trajetórias do sistema não-integrável.

Tanto as autocorrelações de energia como de spin parecem erráticas. Após um momento inicial as autocorrelações parecem permanecer nestes casos entre 0,5 e -0,5.

5.8.2 Efeito de variáveis sobre dinâmica de um sistema não-integrável

Estudamos a seguir o efeito do passo de integração, da precisão, do método e da implementação sobre as trajetórias do sistema não-integrável.

5.8.2.1 Efeito do passo

Investigamos o efeito dos passos de integração de 10^{-2} a 10^{-7} para cada um dos métodos e precisões usados.

A Figura 33 mostra o este efeito quando do uso do método RK4.

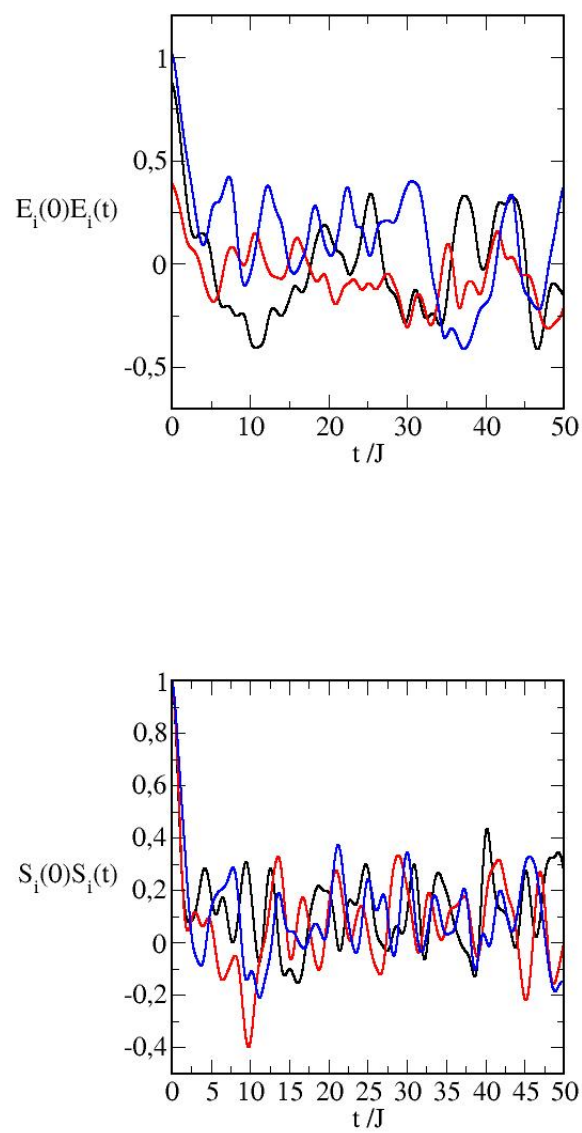


Figura 32: Autocorrelação da energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia de spins $L = 18$ a partir de diferentes configurações iniciais.

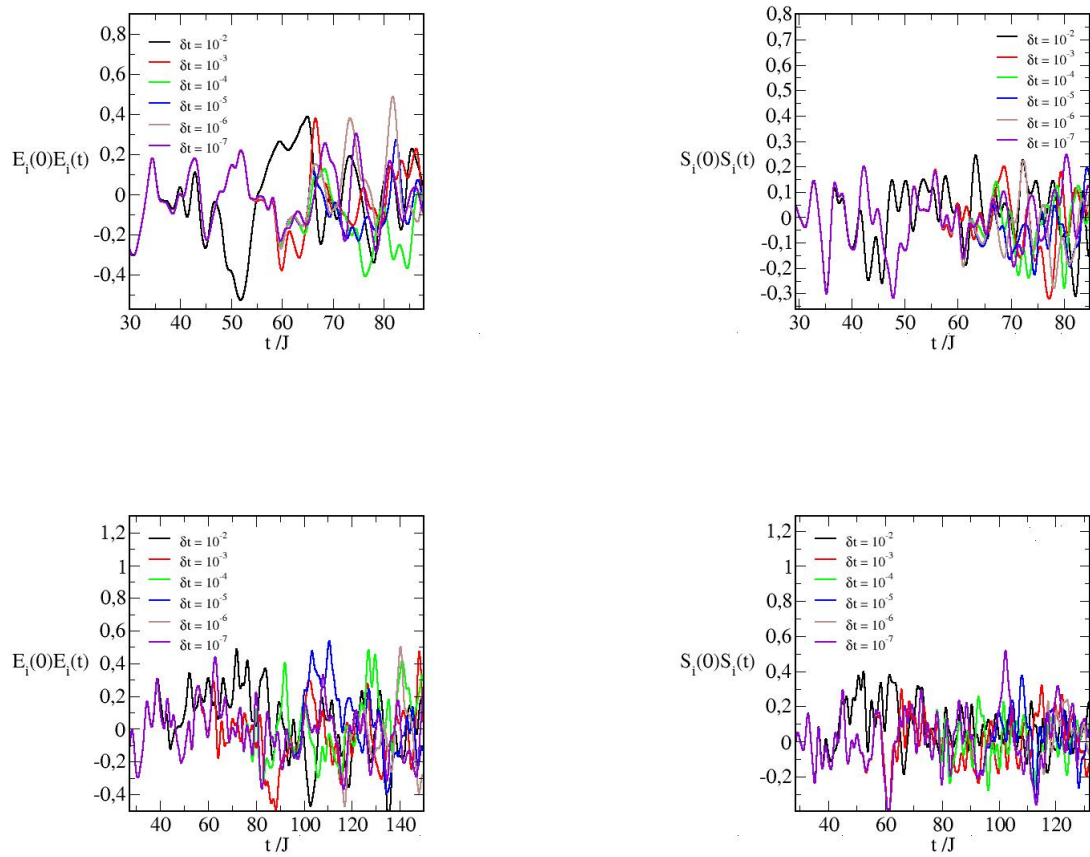


Figura 33: Autocorrelação de energia (direita) e de spin (esquerda) com precisões dupla (acima) e quádrupla (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com diferentes passos de integração a partir de mesma configuração inicial. Método usado foi o RK4.

Notamos que tanto para a autocorrelação de energia e de spin as trajetórias parecem se separar mais tarde quanto menor é o passo de integração e quanto maior é a precisão usada. A autocorrelação de energia e de spin parecem separar-se na mesma ocasião.

Para o PC4, um método de integração com fundamentos distintos do RK4, a análise foi semelhante. Quanto menor o passo de integração e quanto maior a precisão, mais tarde a trajetória se separou das demais. As correlações de energia e spin pareceram separar-se nos mesmos tempos.

Como esperado, o sistema não-integrável $L = 18$ apresentou autocorrelações erráticas.

Os resultados do método ST4 mostraram a mesma tendência observada anteriormente. As trajetórias se separaram em geral mais tarde quanto menor o passo de integração e maior a precisão. Mas na precisão dupla os passos 10^{-4} a 10^{-6} separaram-se juntos de 10^{-7} .

As trajetórias de energia e de spin pareceram separar-se ao mesmo tempo.

Para o método OFR, no caso da precisão dupla, as trajetórias separaram-se quase que na ordem inversa que os demais. Na precisão quádrupla, as trajetórias de passos menores separaram-se mais cedo, e em seguida as demais separaram-se na ordem decrescente de tamanho de passo.

Neste caso o passo menor divergiu dos demais mais cedo. Sugerimos duas explicações: a de que no passo menor o erro de truncamento acumulado foi maior ou que uma imprecisão maior dos passos 10^{-3} a 10^{-6} (menores que o passo 10^{-7}) foi a causa deste fenômeno.

As trajetórias de energia e spin pareceram separar-se ao mesmo tempo.

5.8.2.2 Efeito da precisão

Passamos agora a investigação do efeito da precisão sobre a dinâmica de spins. A Figura 34 ilustra essa influência em uma integração com passo pequeno.

As trajetórias de autocorrelação de energia e spin com diferentes precisões separam-se ao mesmo tempo e cedo, se comparado as separações com passos de mesma ordem dentro de uma mesma precisão (Figura 33).

A Figura 35 mostra com mais evidência o efeito da precisão em cada método.

Em todos os métodos, ao usar-se passos pequenos, a primeira separação ocorre entre as diferentes precisões. Em seguida separam-se os passos da precisão dupla, e mais adiante

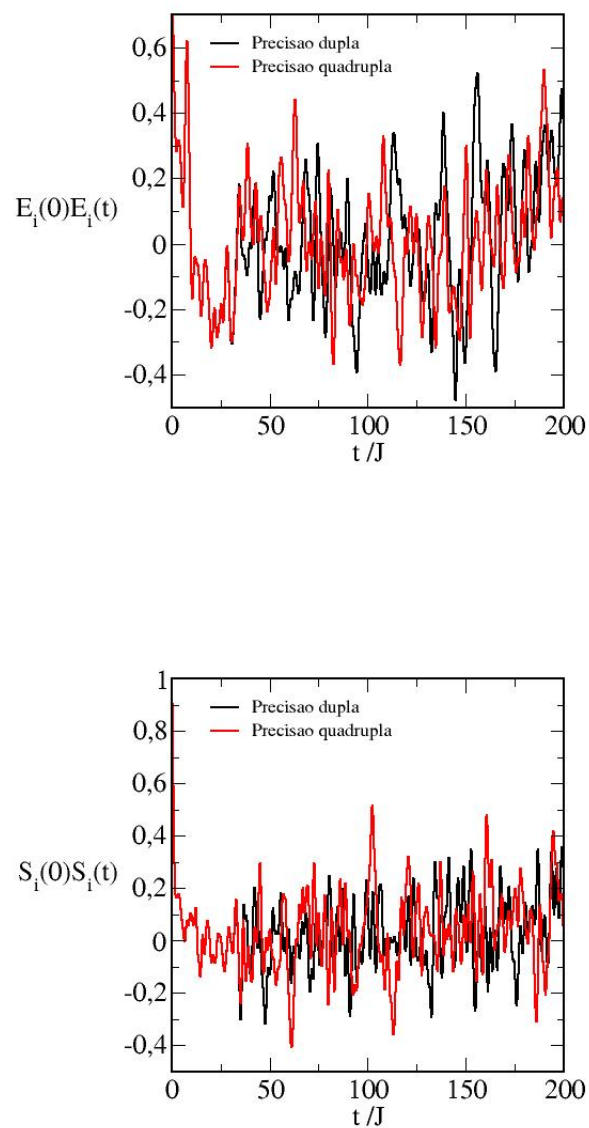


Figura 34: Autocorrelação de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com precisões dupla e quádrupla, a partir de mesma configuração inicial. Método RK4. Passo de integração de 1×10^{-7} .

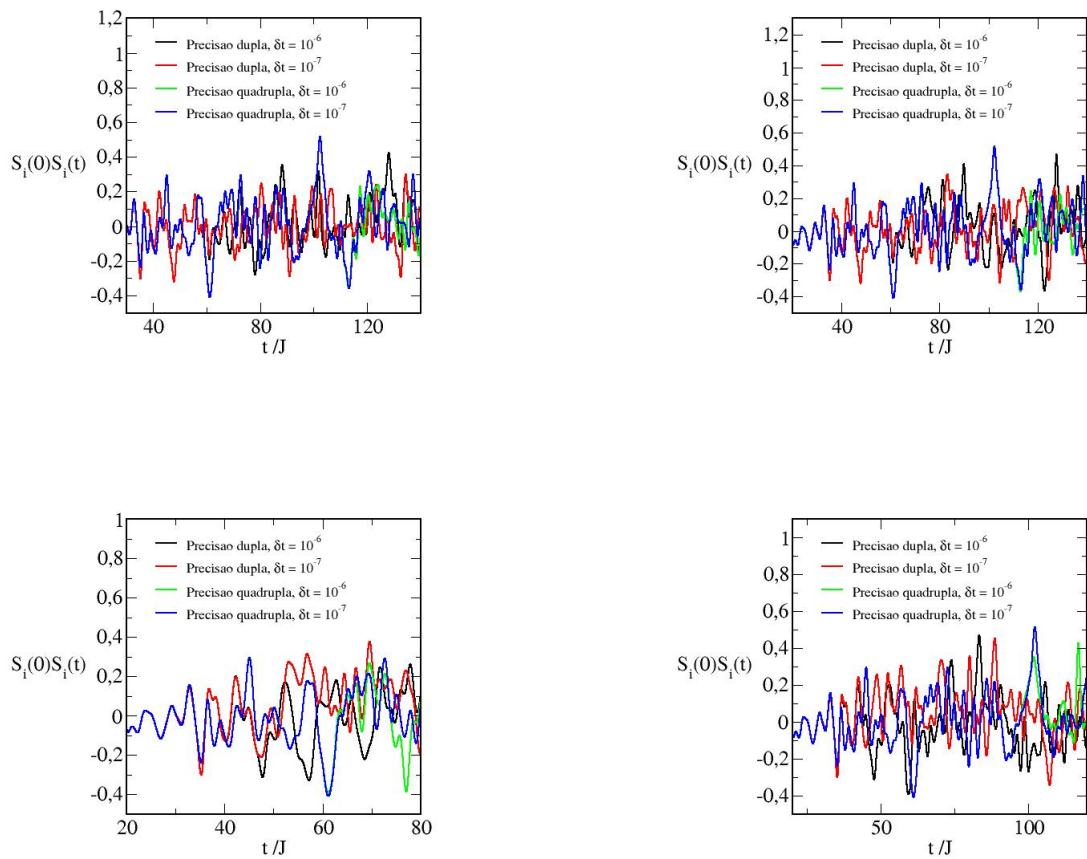


Figura 35: Autocorrelação de spin com precisões dupla e quádrupla para a cadeia $L = 18$, com os métodos RK4 (acima, à esquerda), PC4 (acima à direita), ST4 (abaixo, à esquerda) e OFR (abaixo, à direita), a partir de mesma configuração inicial. Os passos de integração usados foram de 1×10^{-6} e 1×10^{-7} .

os da precisão quádrupla. As separações mas tardias ocorrem com RK4 e PC4.

A separação antecipada entre diferentes precisões se comparadas a diferentes passos indica que estabilidade numérica é mais importante que o erro de truncamento. O resultado mostra também que não é suficiente que duas trajetórias concordem até certo ponto para considerar-se esse trecho confiável, e indica a relevância em se usar a maior precisão possível e os menores passos que não impliquem em acúmulo significativo de erro no caso não-integrável.

Parece ser uma regra geral que as trajetórias separam-se mais tarde quanto menor o passo de integração e maior a precisão. Nesses casos o erro de truncamento local parece não ser muito significativo e o acúmulo de erros é menor nessas condições. Assim as configurações obtidas demoram a acumular diferenças significativas nas autocorrelações estudadas.

5.8.2.3 Efeito do método

Comparamos na Figura 36 a separação entre os diferentes métodos.

Os métodos RK4 com PC4, ST4 e OFR separam-se ao mesmo tempo. As separações parecem simultâneas para a autocorrelação de energia e de spin.

Os métodos RK4 e PC4 têm trajetórias que separam-se mais tarde que os métodos simpléticos. Os primeiros métodos têm em comum a não-conservação da energia e a irreversibilidade no tempo.

A diferença de desempenho entre ST4 e OFR parece ser importante para a dinâmica.

5.8.2.4 Efeito da implementação

Verificamos se existe diferença também entre implementações de um mesmo método. O algoritmo escolhido foi o RK4, com diferentes níveis de vetorização. O resultado é mostrado na Figura 37.

As trajetórias de autocorrelação de spin de diferentes implementações de RK4 sob as mesmas condições experimentais separam-se cedo se comparado as separações entre os passos 10^{-4} e 10^{-5} dos diferentes métodos.

Houve diferença entre diferentes implementações de um mesmo método, o que pode significar que as diferenças nas autocorrelações são muito sensíveis ao algoritmo implementado. Isso indica que contrariamente ao que pensávamos, cada implementação pode

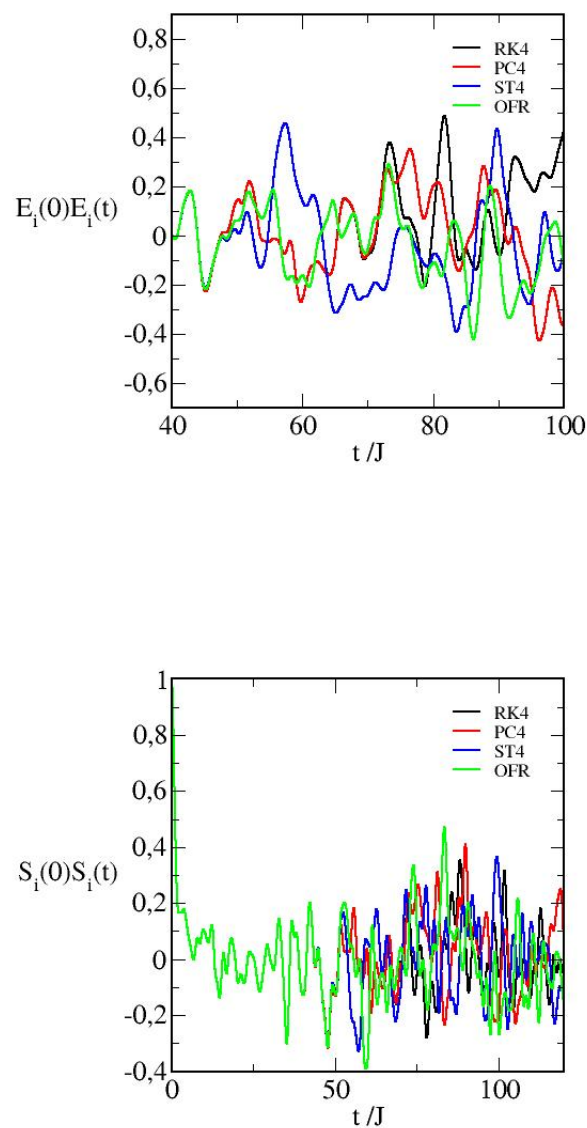


Figura 36: Autocorrelação de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com os diferentes métodos, a partir de mesma configuração inicial. Passo de integração de 1×10^{-6} . Precisão dupla.

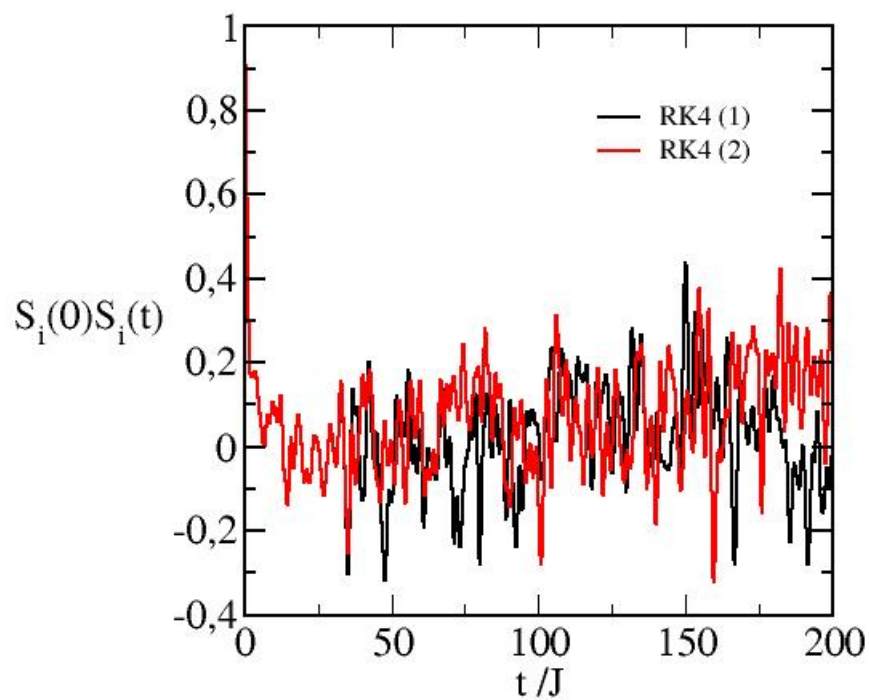


Figura 37: Autocorrelação de spin para a cadeia $L = 18$ com diferentes implementações do método RK4. Passo de integração de 1×10^{-4} . Precisão dupla.

implicar em um operador temporal diferente, ao invés do método.

5.8.3 Métodos e amostra de dinâmica de um sistema não-integrável

Comparamos então as autocorrelações médias de energia e de spin de diferentes métodos e sementes na Figura 38.

Os decaimentos das autocorrelações dos diferentes métodos são bastante semelhantes em linhas gerais. Em uma escala ampliada nota-se as pequenas diferenças entre os métodos, que são da mesma ordem que o erro das autocorrelações médias de spins do caso integrável, com mesmo tamanho de amostra (Figura 31)

A diferença entre o método RK4 com diferentes configurações iniciais é semelhante às diferenças entre os métodos.

Os resultados das autocorrelações médias com diferentes métodos indicam que eles têm uma concordância compatível com o erro obtido para o caso integrável em condições semelhantes. A concordância estatística parece ainda mais justificável ao verificarmos que as diferenças entre os métodos é semelhante a diferença entre diferentes amostras de um mesmo método. O decaimento das autocorrelações parece ser exponencial, mas uma análise de difusão anômala seria mais adequada com cadeias de spins maiores, e talvez com amostras maiores.

5.8.4 Origem das diferenças entre trajetórias

Fizemos a dinâmica a partir de configurações levemente perturbadas de uma configuração inicial para verificar o efeito desta perturbação e a origem das diferenças entre as trajetórias.

A Figura 39 mostra resultados relativos a esses experimentos.

A perturbação da ordem de 10^{-32} radianos (próximo a última casa da precisão quádrupla) em um único spin parece implicar em uma separação de trajetórias em $t \approx 160J^{-1}$, e uma perturbação semelhante da ordem de 10^{-16} (próximo a última casa da precisão dupla) parece implicar em uma separação de trajetórias em $t \approx 75J^{-1}$.

Vimos finalmente que pequenas perturbações são responsáveis por separações de trajetórias cedo. O limite de confiança para autocorrelações com dupla precisão parece ser em torno de $75J^{-1}$, o que está na região em que $\langle S_i(0)S_i(t) \rangle$ não concorda com a difusão esperada (10). A concordância com a difusão anômala verificada naquele trabalho pode

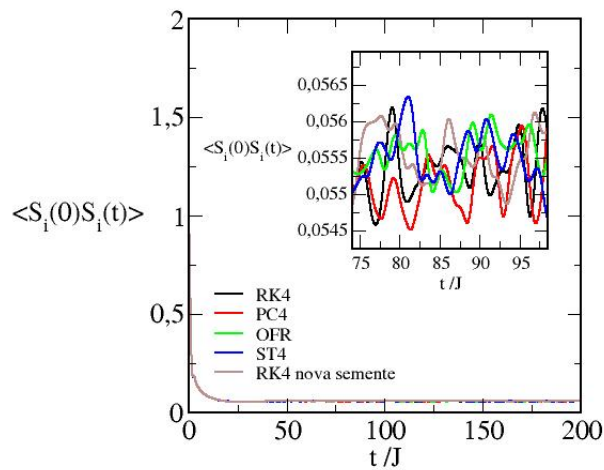
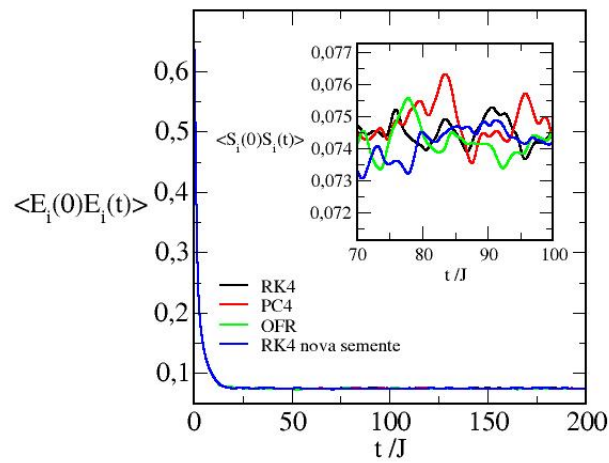


Figura 38: Média de 10^5 autocorrelações de energia (acima) e de spin (abaixo) para a cadeia $L = 18$, com diferentes métodos, a partir de mesmas configurações iniciais (RK4, PC4, ST4, OFR) ou de configurações diferentes (RK4 nova semente). Passo de integração de 1×10^{-4} . Precisão dupla.

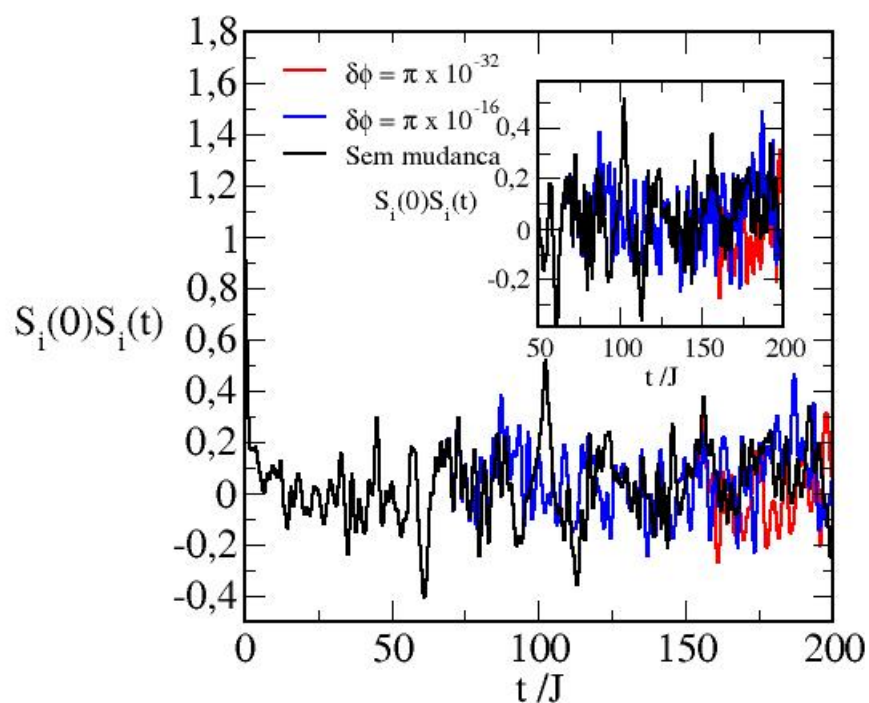


Figura 39: Autocorrelação de spin para a cadeia $L = 18$, a partir de configurações com um spin mudado de ϕ radianos. O método usado foi o RK4. Passo de integração de 1×10^{-6} . Precisão quádrupla.

ser assim um artefato da técnica. A perturbação da ordem da última casa decimal da precisão quádrupla sugere *a priori* uma autocorrelação confiável até $t \approx 160J^{-1}$, o que deve ser suficiente nos estudos de difusão. Verifica-se a importância de se usar a precisão quádrupla nesses estudos.

6 *Conclusões*

Com o uso de RNG, sorteio de spins, algoritmos de atualização, multi-histogramas confiáveis e da técnica *jackknife* determinamos parâmetros e expoentes críticos de um modelo clássico de Heisenberg, em rede cúbica simples. A maioria das quantidades aqui apresentadas são de ótima qualidade, e no caso que divergem dos resultados de Chen *et al.* (4) têm erros comparáveis aos deles com a vantagem de terem sido obtidos com uma técnica de correção de vício.

Identificamos fatores importantes que podem introduzir artefatos no estudo de difusão anômala, como a precisão e o passo de integração. Verificamos que o uso da precisão quádrupla com um passo pequeno e amostra grande podem ser suficientes para um bom estudo de difusão de spins, concomitante ao uso de cadeias de tamanho adequado. Vimos também que podem existir diferentes operadores temporais associados a cada implementação usada, apesar da concordância estatística entre os diferentes métodos não permitir ainda tal afirmação.

Novos estudos com um poder computacional maior podem dirimir as dúvidas levantadas por este trabalho.

Referências

- 1 R. E. Watson, M. Blume, and G. H. Vineyard. Spin motions in a classical ferromagnet. *Physical Review*, 181(2):811–823, 1969.
- 2 Joanne Rebbeck. What makes a great science lab notebook? www.sciencebuddies.org/science-fair-projects/project-laboratory-notebook.pdf.
- 3 David P. Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- 4 Kun Chen, Alan M. Ferrenberg, and David P. Landau. Static critical behavior of three-dimensional classical heisenberg models: A high resolution monte carlo study. *Physical Review B*, 48(5):3249–3256, 1993.
- 5 Andy Bruce and Ken Langdon. *Como Gerenciar Projetos*. Publifolha, São Paulo, 2002.
- 6 Wilhelm Gehrke. *Fortran 90 Language Guide*. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- 7 Intel. *Intel Fortran Compiler User and Reference Guides*.
- 8 Bo Einarsson. Status of fortran 95. <http://www.nsc.liu.se/~boein/f77to90/f95.html>.
- 9 Gerhard Muller. Anomalous spin diffusion in classical heisenberg magnets. *Physical Review Letters*, 60(26):2785–2788, 1988.
- 10 R. W. Gerling and D. P. Landau. Comment on “anomalous spin diffusion in classical heisenberg magnets”. *Physical Review Letters*, 63(7):812, 1989.
- 11 Gerhard Muller. Muller replies. *Physical Review Letters*, 63(7):813, 1989.
- 12 R. W. Gerling and D. P. Landau. Time-dependent behaviour of classical spin chains at infinite temperature. *Physical Review B*, 42(13):8214–8219, 1990.
- 13 Tristan Bereau and Robert H. Swendsen. Optimized convergence for multiple histogram analysis. *Journal of Computational Physics*, 228:6119–6129, 2009.
- 14 <http://www.aanda.org/articles/aa/full/2008/26/aa7794-07/img246.gif>. Acessado em 14/02/2011.
- 15 Massimo Campostrini, Martin Hasenbusch, Andrea Pelissetto, Paolo Rossi, and Ettore Vicari. Critical exponents and equation of state of the three-dimensional heisenberg universality class. *Physical Review B*, 65:144520–1–14520–21, Abril 2002.
- 16 M. S. Dresselhaus. *Solid state physics*, 2001.

- 17 H. Eugene Stanley. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Clarendon Press, Oxford, 1971.
- 18 F-J Jiang and U. Gerber. Subtlety of determining the critical exponent ν of the spin-1/2 Heisenberg model with a spatially staggered anisotropy on the honeycomb lattice. *Journal of Statistical Mechanics – Theory and Experiment*, Setembro 2009.
- 19 Simulation. <http://en.wikipedia.org/wiki/Simulation>. Acessado em 11/02/2011.
- 20 William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery, editors. *Numerical Recipes in Fortran: the art of scientific computing*, volume 1. Cambridge University Press, New Delhi, 2nd edition, 2000.
- 21 William H. Press, editor. *Numerical Recipes in Fortran 90: the art of parallel scientific computing*, volume 2. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2nd edition, 1999.
- 22 Pearson's chi-square test. http://en.wikipedia.org/wiki/Pearson's_chi-square_test. Acessado em 24/03/2011.
- 23 P value. <http://en.wikipedia.org/wiki/P-value>. Acessado em 24/03/2011.
- 24 Eric W. Weisstein. Noise sphere. <http://mathworld.wolfram.com/NoiseSphere.html>.
- 25 Andrew Rukhin, Juan Soto, James Nechvatal, Miles Smid, Elaine Barker, Stefan Leigh, Mark Levenson, Mark Vangel, David Banks, Alan Heckert, James Dray, and San Vo. *A Statistical test suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications*. National Institute of Standards and Technology, Agosto 2008. Revisão 1 por Lawrence E. Bassham III.
- 26 G. Marsaglia. Choosing a point from the surface of a sphere. *Ann. Math. Stat.*, 43:645–646, 1972.
- 27 Phase transition. http://en.wikipedia.org/wiki/Phase_transition. Acessado em 10/02/2011.
- 28 M. Scharif, J. Barak, U. Elhanany, and W. W. Warren. NMR-Study of the 3D ferromagnetic metals – critical region and paramagnetic phase. *Physical Review B*, 22(11):5400–5419, 1980.
- 29 M. A. Kobeissi. Mossbauer study of static and dynamic critical-behavior in Fe. *Physical Review B*, 24(5):2380–2396, 1981.
- 30 M. Seeger, S. N. Kaul, H. Kronmüller, and R. Reisser. Asymptotic critical-behavior of Ni. *Physical Review B*, 51(18):12585–12594, Maio 1 1995.
- 31 R. Reisser, R. K. Kremer, and A. Simon. Magnetic phase-transition in the metal-rich rare-earth carbide halides $Gd(2)XC$ ($X=BR,I$). *Physical Review B*, 52(5):3546–3554, Agosto 1 1995.
- 32 J. H. Zhao, H. P. Kunkel, X. Z. Zhou, G. Williams, and M. A. Subramanian. Critical behavior of the magnetoresistive pyrochlore $T12Mn2O7$. *Physical Review Letters*, 83(1):219–222, Julho 5 1999.

- 33 S. G. Barsov, A. L. Getalov, V. P. Koptev, S. A. Kotov, S. M. Mikirtychyants, G. V. Shcherbakov, A. A. Arsenov, and Y. M. Mukovskii. Study of the CMR manganites $\text{La}_{0.82}\text{Ca}_{0.18}\text{MnO}_3$ and $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ by mu SR method. *Physica B*, 289:81–84, Agosto 2000.
- 34 J. H. Zhao, T. Song, H. P. Kunkel, X. Z. Zhou, R. M. Roshko, and G. Williams. $\text{La}_{0.95}\text{Mg}_{0.05}\text{MnO}_3$: an ideal ferromagnetic system? *Journal of Physics – Condensed Matter*, 12(30):6903–6918, Julho 31 2000.
- 35 C. S. Arnold and D. P. Pappas. $\text{Gd}(0001)$: A semi-infinite three-dimensional heisenberg ferromagnet with ordinary surface transition. *Physical Review Letters*, 85(24):5202–5205, Dezembro 11 2000.
- 36 J. Mira, J. Rivas, A. Butera, L. B. Steren, J. M. Garcia-Beneytez, and M. Vazquez. Magnetic order and weak ferromagnetic transition in Gd_2CuO_4 . *Journal of Applied Physics*, 87(9, Part 3):5911–5913, Maio 1 2000.
- 37 C. Buhner, M. Beckmann, M. Fahnle, U. Grunewald, and K. Maier. The liquid ferromagnet $\text{Co}_{80}\text{Pd}_{20}$ and its critical exponent γ . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 212(1-2):211–224, Março 2000.
- 38 T. Bruckel, D. Hupfeld, J. Strempler, W. Caliebe, K. Mattenberger, A. Stunault, N. Bernhoeft, and G. J. McIntyre. Antiferromagnetic order and phase transitions in GdS as studied with X-ray resonance-exchange scattering. *European Physical Journal B*, 19(4):475–490, Fevereiro 2001.
- 39 F. Y. Yang, C. L. Chien, X. W. Li, Gang Xiao, and A. Gupta. Critical behavior of epitaxial half-metallic ferromagnetic cro_2 films. *Phys. Rev. B*, 63(9):092403, Fevereiro 2001.
- 40 C. S. Hong, W. S. Kim, and N. H. Hur. Transport and magnetic properties in the ferromagnetic regime of $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$. *Physical Review B*, 63(9), Março 1 2001.
- 41 Wanjun Jiang, X. Z. Zhou, Gwyn Williams, Y. Mukovskii, and K. Glazyrin. Critical behavior and transport properties of single crystal $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x=0.27$, and 0.29). *Physical Review B*, 78(14), Outubro 2008.
- 42 V. V. Krishnamurthy, D. J. Keavney, D. Haskel, J. C. Lang, G. Srajer, B. C. Sales, D. G. Mandrus, and J. L. Robertson. Temperature dependence of Eu 4f and Eu 5d magnetizations in the filled skutterudite $\text{EuFe}_4\text{Sb}_{12}$. *Physical Review B*, 79(1), Janeiro 2009.
- 43 Wanjun Jiang, XueZhi Zhou, Gwyn Williams, Y. Mukovskii, and R. Privezentsev. The evolution of Griffiths-phase-like features and colossal magnetoresistance in $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0.18 \leq x \leq 0.27$) across the compositional metal-insulator boundary. *Journal of Physics - Condensed Matter*, 21(41), Outubro 14 2009.
- 44 X. Luo, Z. R. Yang, Y. P. Sun, X. B. Zhu, W. H. Song, and J. M. Dai. Critical behavior of the spinel CdCr_2S_4 . *Journal of Applied Physics*, 106(11), Dezembro 1 2009.
- 45 Monte carlo method. http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method. Acessado em 11/02/2011.

- 46 Ronald Dickman. Aula de métodos de simulação. Notas de aula feitas por Alexandre Soares. UFMG., Abril 2010.
- 47 C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn. On the random-cluster model : I. introduction and relation to other models. *Physica*, 57(4):536 – 564, 1972.
- 48 P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin. Phase transitions in lattice systems with random local properties. *Journal of the Physical Society of Japan*, S 26(Suppl. S):11–&, 1969.
- 49 M. Hasenbusch. Monte Carlo studies of the three-dimensional Ising model in equilibrium. *International Journal of Modern Physics C*, 12(7):911–1009, Setembro 2001.
- 50 A. A. Caparica, A. Bunker, and D. P. Landau. Classical ferromagnet with double-exchange interaction: High-resolution Monte Carlo simulations. *Physical Review B*, 62(14):9458–9462, Outubro 1 2000.
- 51 H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. MartinMayor, and A. M. Sudupe. Finite size effects on measures of critical exponents in $d=3$ $O(N)$ models. *Physics Letters B*, 387(1):125–131, Outubro 10 1996.
- 52 C. Holm and W. Janke. Critical exponents of the classical 3-dimensional Heisenberg-model – a single-cluster Monte-Carlo study. *Physical Review B*, 48(2):936–950, Julho 1 1993.
- 53 C. Holm and W. Janke. Finite-size scaling study of the 3-dimensional classical Heisenberg-model. *Physics Letters A*, 173(1):8–12, Janeiro 25 1993.
- 54 Kun Chen, Alan M. Ferrenberg, and D. P. Landau. Monte Carlo study of critical behavior in the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet. *Journal of Applied Physics*, 73(10):5488–5490, 1993.
- 55 P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau. High-accuracy Monte-Carlo study of the 3-dimensional classical Heisenberg-ferromagnet. *Physical Review B*, 43(7, Part B):6087–6093, Março 1 1991.
- 56 P. Butera and M. Comi. N-vector spin models on the simple-cubic and the body-centered-cubic lattices: A study of the critical behavior of the susceptibility and of the correlation length by high-temperature series extended to order $\beta(21)$. *Physical review B*, 56(13):8212–8240, Outubro 1 1997.
- 57 J. Adler, C. Holm, and W. Janke. High-temperature series analyses of the classical Heisenberg and XY models. *Physica A*, 201(4):581–592, Dezembro 15 1993.
- 58 H. Kleinert and V. I. Yukalov. Self-similar variational perturbation theory for critical exponents. *Phys. Rev. E*, 71(2):026131, Fevereiro 2005.
- 59 F. Jasch and H. Kleinert. Fast-convergent resummation algorithm and critical exponents of $\phi(4)$ -theory in three dimensions. *Journal of Mathematical Physics*, 42(1):52–73, Janeiro 2001.
- 60 R. Guida and J. Zinn-Justin. Critical exponents of the N-vector model. *Journal of Physics A – Mathematical and General*, 31(40):8103–8121, Outubro 9 1998.

- 61 D. B. Murray and B. G. Nickel. Guelph university report. 1991.
- 62 J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin. Critical exponents from field theory. *Physical Review B*, 21(9):3976–3998, 1980.
- 63 V. I. Yukalov and E. P. Yukalova. Calculation of critical exponents by self-similar factor approximants. *Européan Physical Journal B*, 55(1):93–99, Janeiro 2007.
- 64 V. I. Yukalov and S. Gluzman. Self-similar exponential approximants. *Physical Review E*, 58(2, Part A):1359–1382, Agosto 1998.
- 65 H. Kleinert. Variational resummation for epsilon-expansions of critical exponents of nonlinear $O(n)$ -symmetric sigma-model in $2+\epsilon$ dimensions. *Physics Letters A*, 264(5):357–365, Janeiro3 2000.
- 66 Wei Li, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, and Gang Su. Quantum phase transition, $O(3)$ universality class, and phase diagram of the spin-(1)/(2) Heisenberg antiferromagnet on a distorted honeycomb lattice: A tensor renormalization-group study. *Physical Review B*, 81(18), Maio 1 2010.
- 67 K. E. Newman and E. K. Riedel. Critical exponents by the scaling-field method: the n-isotropic N-vector model in 3 dimensions. *Physical Review B*, 30(11):6615–6638, 1984.
- 68 O. Bohr, B. J. Schaefer, and J. Wambach. Renormalization group flow equations and the phase transition in $O(N)$ -models. *International Journal of Modern Physics A*, 16(23):3823–3852, Setembro 20 2001.
- 69 G. von Gersdorff and C. Wetterich. Nonperturbative renormalization flow and essential scaling for the Kosterlitz-Thouless transition. *Physical Review B*, 64(5), Agosto 1 2001.
- 70 J. Berges, N. Tetradis, and C. Wetterich. Critical equation of state from the average action. *Physical Review Letters*, 77(5):873–876, Julho 29 1996.
- 71 Rupert G. Miller. The jackknife – a review. *Biometrika*, 61(1):1–15, 1974.
- 72 Student’s t-distribution. http://en.wikipedia.org/wiki/Student%27s_t-distribution. Acessado em 25/03/2011.
- 73 Frederico Ferreira Campos, filho. *Algoritmos Numéricos*. LTC Editora, Rio de Janeiro, 2001.
- 74 Michael Creutz. Overrelaxation and monte carlo simulation. *Physical Review D*, 36(2):515–519, 1987.
- 75 Frank R. Brown and Thomas J. Woch. Overrelaxed heat-bath and metropolis algorithms for accelerating pure gauge monte carlo calculations. *Physical Review Letters*, 58(23):2394–2396, 1987.
- 76 Rotation matrix. http://en.wikipedia.org/wiki/Rotation_Matrix#cite_note_0. Acessado em 06/08/2009.
- 77 Ulli Wolff. Collective monte carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, 62(4):361–364, 1989.

- 78 Robert H. Swendsen and Jian-Sheng Wang. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Physical Review Letters*, 58(2):86–88, Janeiro 1987.
- 79 James Arvo. Fast random rotation matrices. <http://www.ics.uci.edu/~arvo/papers/RotationMat.ps>. Acessado em 28/11/2009.
- 80 Eric W. Weisstein. Circle point picking. <http://mathworld.wolfram.com/CirclePointPicking.html>.
- 81 Alan M. Ferrenberg and D. P. Landau. Critical behavior of the three-dimensional ising model: A high resolution monte carlo study. *Physical Review B*, 44(10):5081–5091, 1991.
- 82 Dieter Forster. *Hydrodynamic Fluctuations, Broken symmetry, and Correlation Functions*. Perseus Books, United States, 1996.
- 83 O. F. de Alcantara Bonfim. Breakdown of hydrodynamics in the classical 1d heisenberg model. *Physical Review Letters*, 69(2):367–370, 1992.
- 84 Jian-Min Liu, Niraj Srivastava, V. S. Viswanath, and Gerhard Muller. Deterministic and stochastic spin diffusion in classical heisenberg magnets. *Journal of Applied Physics*, 70(10):6181–6183, 1991.
- 85 Runge-kutta. http://en.wikipedia.org/wiki/Runge%E2%80%93Kutta_methods. Acessado em 06/01/2010.
- 86 M. Krench, Alex Bunker, and D. P. Landau. Fast spin dynamics algorithms for classical spin systems. *Computer Physics Communications*, 111:1–13, 1998.
- 87 I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Optimized forest-ruth and suzuki-like algorithms for integration of motion in many-body systems. *Computer Physics Communications*, 146:188–202, 2002.
- 88 Richard A. Klemm and Marshall Luban. Zero-field time correlation functions of four classical heisenberg spins on a ring. *Physical Review B*, 64:104424–1–104424–16, Agosto 2001.
- 89 Heaviside step function. http://en.wikipedia.org/wiki/Heaviside_step_function. Acessado em 12/03/2010.
- 90 V. Constantoudis and N. Theodorakopoulos. Nonlinear dynamics of classical heisenberg chains. *Physical Review E*, 55(6):7612–7618, 1997.