



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

Danilo Pinheiro da Cunha

Criticalidade do modelo  $\phi^4$  em duas dimensões:  
Um estudo dinâmico

Recife - PE

2015

DANILO PINHEIRO DA CUNHA

CRITICALIDADE DO MODELO  $\phi^4$  EM DUAS DIMENSÕES: UM ESTUDO  
DINÂMICO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física Aplicada da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA

Recife - PE

2015

DANILO PINHEIRO DA CUNHA

CRITICALIDADE DO MODELO  $\phi^4$  EM DUAS DIMENSÕES: UM ESTUDO  
DINÂMICO

Dissertação apresentada a coordenação do programa de pós-graduação em física aplicada da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em ciências.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA

---

Prof. Dr. MARCO ANTÔNIO CAVALCANTI GAMEIRO DE MOURA

---

Prof. Dr. RAMÓN ENRIQUE RAMAYO GONZALÉZ

---

Recife - PE

2015

*“A minha Família”*

## Agradecimentos

Antes de mais nada, agradeço a Deus e aos meus pais, Neuza Pinheiro da Cunha e João Benedito da Cunha Filho (*in memoriam*), pela educação e ter me ajudado em tudo que até o presente momento conquistei.

A minha esposa Adriana Carvalho e ao meu Filho André Felipe, pelo incentivo, compreensão e paciência.

Ao meu orientador Professor Dr Adauto José Ferreira de Souza , pela cololaboração fundamental para a realização deste trabalho.

Aos amigos do mestrado: Thiago, Augusto Melo, Danilel, Francisco, Jorge, Raphael Vieira, Cosmo, Augusto Gurgel pela colaboração e amizade durante a minha caminhada durante esse tempo de mestrado.

Aos professores do departamento de Física, em especial, Prof. Dr. Aílton Macêdo, Prof. Dr. Ernande Barbosa, Prof. Dr. Pedro Hugo, Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Sara Cristina, Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Viviane Morais e aos professores do DEINFO Prof. Dr. Borko Stosic e Prof. Tatijana Stosic.

## Resumo

Neste trabalho é apresentado um estudo da criticalidade do modelo  $\phi^4$  em duas dimensões, discretizado em uma rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos e condições de contorno periódicas. O sistema é preparado para um estado completamente ordenado e a simulação é realizada resolvendo, em cada passo de tempo, as equações de movimento acopladas para cada sítio da rede. A evolução dinâmica do sistema é analisada em Tempos Curtos. A energia crítica do modelo é estimada utilizando um método, que analisa o comportamento da derivada temporal do parâmetro de ordem( $\psi(t, \varepsilon)$ ). A partir da análise da quantidade  $\psi(t, \varepsilon)$ , expoentes críticos são estimados e foi utilizada a técnica de colapso de dados, afim de se obter uma maior precisão nos resultados. Alguns dos resultados encontrados, foram comparados com valores obtidos em simulações já realizadas com modelos de mesma classe de universalidade existentes na literatura. Os expoentes estimados estão de acordo com os encontrados na literatura atual, exceto o expoente dinâmico  $z$ , que apresenta uma discrepância da ordem de 15% em relação a resultados publicados anteriormente. Este fato deve ser investigado de maneira cuidadosa, para compreender as motivações dessa mudança. .

## Abstract

This paper presents a study of the criticality of the model  $\phi^4$  in two dimensions, discretized on a square lattice with interactions between nearest neighbors and periodic boundary conditions. The system is prepared for a completely ordered state and solving simulation is performed in each time step, the coupled equations of motion for each site in the network. The analyzes are based on the dynamics for short times. The critical power model is estimated using a new method that analyzes the behavior of time derivative of the order parameter ( $\psi(t, \varepsilon)$ ). From the analysis of the amount  $\psi(t, \varepsilon)$ , critical exponents are estimated and the collapse data technique is used in order to obtain a greater precision in the results. Some of the results were compared with values obtained from simulations with model of the same class of universality existing in the literature. The estimated exponents are consistent with those found in the literature, except the dynamic exponent  $z$ , which shows a discrepancy of about 15% compared to previously published data. This should be investigated in a careful way, to understand the reasons of this change.

## Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fase típico de uma substância pura. . . . .	6
2.2	Diagrama de fases de um ferromagneto simples. . . . .	7
4.1	Ajuste de curva feito a partir de dados gerados em simulação numérica. . . . .	24
4.2	Ajuste para primeira derivada numérica, a partir dos dados brutos. . . . .	25
4.3	Comportamento de $\psi(t, \varepsilon)$ função do $\ln(t)$ . . . . .	29
4.4	$\psi(\varepsilon, t)$ função da temperatura $T$ . . . . .	30
5.1	Decaimento da magnetização para vários valores da densidade de energia em função do tempo. . . . .	35
5.2	Mesmos dados da figura 5.1 mostrados numa escala logarítmica. . . . .	36
5.3	Derivada do logaritmo da magnetização em relação a $\ln(t)$ em função de $\ln(t)$ , obtida a partir do método descrito na seção 4.3. Os ajustes das derivadas foram obtidos para valores do parâmetro de regularização ( $\lambda$ ) da ordem de $10^2$ . . . . .	37
5.4	Derivada do logaritmo da magnetização em relação a $\ln(t)$ em função de $\ln(t)$ , com valores de densidade de energia em uma região mais estreita, em relação aos valores da figura 5.3. . . . .	38
5.5	Diagrama da derivada do logaritmo da magnetização em relação a $\ln(t)$ ( $\psi(\varepsilon, t)$ ) em função da densidade de energia $e$ . . . . .	39



5.6	Erro no cálculo do colapso dos dados $E_r(1/\nu z)$ em função de $1/\nu z$ para alguns valores da densidade de energia. Os valores do erro, em cada densidade de energia, foram obtidos utilizando o método descrito na seção 4.4 com o conjunto de dados da figura 5.5. . . . . .	40
5.7	Colapso das curvas com reescalonamento de $\varepsilon t^{1/\nu z}$ . . . . .	41
5.8	Decaimento crítico da magnetização em função do tempo em escala log-log. . . . .	41
5.9	Segundo momento da magnetização em relação ao tempo na escala log-log. . . . .	42
5.10	Evolução temporal da flutuação da magnetização em escala log-log. . . . .	42
5.11	Segundo cumulante de Binder em função do tempo na escala log-log. . . . .	43

## Lista de Tabelas

2.1	Alguns valores dos principais expoentes críticos extraídos de dados experimentais e modelos matemáticos [1]. . . . .	9
5.1	Expoentes críticos obtidos nesta trabalho utilizando o modelo $\phi^4$ a partir de um estado inicial completamente ordenado em uma rede quadrada 1024x1024, em comparação com resultados obtidos para uma rede quadrada 256x256 com o mesmo modelo partindo de um estado inicial quase desordenado em [2]. . . . .	39
5.2	Resumo dos expoentes críticos obtidos para o modelo $\phi^4$ neste trabalho e os resultados obtidos para o modelo de Ising exato [3] e aproximado em [4].	39

## Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>v</b>
<b>Resumo</b>	<b>vi</b>
<b>Abstract</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>x</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Transições de fases e fenômenos críticos</b>	<b>4</b>
2.1 Transições de fases . . . . .	4
2.2 Fenômenos Críticos . . . . .	7
<b>3 Dinâmica crítica em tempos curtos</b>	<b>10</b>
3.1 Introdução . . . . .	10
3.2 Lei de Escala . . . . .	11
3.3 Dinâmica Crítica em Tempos Curtos . . . . .	13
<b>4 Modelo, materiais e métodos</b>	<b>18</b>
4.1 Teoria $\phi^4$ . . . . .	18
4.2 Algoritmo de Verlet . . . . .	19
4.3 Método de cálculo de derivadas numéricas . . . . .	20
4.3.1 Introdução . . . . .	20

<i>LISTA DE TABELAS</i>	xii
4.3.2 Equação integral do primeiro tipo . . . . .	20
4.3.3 Equações discretizadas . . . . .	21
4.3.4 Validação Cruzada Generalizada(VCG) . . . . .	23
4.3.5 Testando o método . . . . .	24
4.4 Colapso de Dados . . . . .	26
4.4.1 Introdução . . . . .	26
4.4.2 Descrição do método . . . . .	26
4.5 Método para Análise de Dados em Simulações em Tempos Curtos . . . . .	28
4.6 Simulação . . . . .	31
<b>5 Resultados e Discussões</b>	<b>34</b>
<b>6 Considerações finais</b>	<b>44</b>

As transições de fases e os fenômenos críticos têm sido objeto de estudo nos últimos anos em diversas áreas da ciência [5–7]. A Mecânica Estatística (ME), que possibilitou o estudo estatístico dos sistemas com elevado número de graus de liberdade, os chamados sistemas complexos [8], deu origem a vários procedimentos a partir de uma visão microscópica dos sistemas. Essa abordagem possibilitou a investigação por meio de diversos métodos. A exemplo dos ensembles estatísticos, que são capazes de descrever uma enorme classe de sistemas [9]. O interesse de diversos pesquisadores pelo tema se dá, em parte, pelo grande progresso que o uso dos computadores tem proporcionado em simulações numéricas, que possibilitam uma investigação cuidadosa de modelos e teorias [10, 11]. O primeiro experimento em simulações usando computadores foi realizado por volta de 1950, por Enrico Fermi e colaboradores. Eles realizaram experimentos numéricos de uma corda vibrante, que incluía um termo não linear na energia potencial do sistema [12]. A partir de então, houve um grande avanço na investigação das propriedades de sistemas descritos em simulações numéricas. Por sua vez, as transições de fases são classificadas como um dos fenômenos da natureza mais fascinante já observado. A física que governa esse tipo de fenômeno tem chamado a atenção de muitos pesquisadores [13, 14]. Um dos fatos mais curiosos, em fenômenos críticos, é que diferentes tipos de sistemas, quando analisados em seu estado crítico, exibem um mesmo conjunto de informações em comum. A exemplo dos sistemas magnéticos que apresentam transição de fases de segunda ordem e mostram propriedades críticas que são equivalentes a uma transição líquido-gás [9, 15, 16].

Muitos pesquisadores acreditam que a ME tem sua origem das equações fundamentais do movimento para sistemas com infinitos graus de liberdade ou da teoria de campos, no entanto ainda se busca uma evidência geral para essa afirmação [2, 12, 17–21].

Para se ter uma ideia qualitativa do experimento numérico desse trabalho, imagine um sistema ferromagnético exatamente em sua temperatura crítica  $T_c$  e submetido a um campo magnético externo que proporcione o alinhamento de todos os spins. Em um dado instante, esse campo desaparece subitamente. A evolução dinâmica de um experimento como esse tem sido sistematicamente investigada para diversas classes de sistemas, Tanto do ponto de vista experimental como em simulações de modelos matemáticos. O comportamento desses sistemas tem revelado aspectos gerais dos fenômenos críticos.

Neste trabalho é realizado um estudo da criticalidade da teoria  $\phi^4$  em duas dimensões. A escolha da teoria  $\phi^4$ , foi motivada por já existir resultados aproximados obtidos por simulações e também, por está na mesma classe de universalidade do modelo de Ising [22], onde existe solução exata e tem diversos resultados numéricos na literatura [3, 4]. Além disso a teoria  $\phi^4$  é amplamente utilizada e testada em diversas classes de sistemas [2, 21].

Tem-se como objetivos deste trabalho: analisar a criticalidade da teoria  $\phi^4$  utilizando um método para obtenção do parâmetro crítico aplicado a dinâmica em tempos curtos e ao mesmo tempo testar a eficiência do método. Assim como, complementar os trabalhos realizados por Zheng em [2], onde a dinâmica, para a teoria  $\phi^4$ , foi realizada para um estado inicial desordenado e com pequena magnetização. Além de verificar, através dos resultados, se a dinâmica determinística está ou não na mesma classe de universalidade da dinâmica estocástica.

Na seção 2.1 é feita uma breve introdução as transições de fase, caracterizando os tipos de transição e como é possível identificar esse fenômeno.

Na seção 2.2 é discutido alguns aspectos dos fenômenos críticos e é apresentado os expoentes críticos associados aos observáveis termodinâmicos.

No capítulo 3 é feita uma breve descrição da hipótese de escala a partir de um exemplo de um sistema Ising e é feita a descrição da Dinâmica Crítica em Tempos Curtos onde é apresentada uma lei de escala generalizada obtida por Janssen e colaboradores.

O capítulo 4 faz referência aos materiais e métodos utilizados nesta investigação. Nesse capítulo apresentamos o Hamiltoniano da teoria  $\phi^4$  na rede bidimensional, o método de derivação numérica que dá suporte a análise proposta, a técnica de colapso de dados utilizada na obtenção dos expoentes a partir de leis de escala, a descrição do algoritmo de solução numérica das equações diferenciais, o método de análise aplicado em dinâmica de tempos curtos e em seguida, o protocolo computacional para realizar a simulação.

O capítulo 5 é destinado à investigação e análise dos resultados e discussões da teoria  $\phi^4$  discretizada na rede bidimensional, partindo de um estado inicial completamente ordenado, onde é investigada, em diagramas, as séries temporais dos observáveis de interesse, que são obtidas tirando-se as médias, sobre configurações iniciais, das simulações numéricas.

No último capítulo 6 são feitas as considerações finais e perspectivas futuras para novos trabalhos

## Transições de fases e fenômenos críticos

### 2.1 Transições de fases

A termodinâmica do equilíbrio, em geral, trata de sistemas que são uniformes na escala macroscópica, ou seja, que apresentam a mesma estrutura, composição, densidade em todos os pontos do espaço ocupado pelo sistema e ainda apresenta volume com ordem de grandeza muito superior em relação ao “volume ocupado” por um átomo. Como se trata de sistemas no equilíbrio, implica que variáveis termodinâmicas intensivas como temperatura, pressão e o potencial químico são constantes em todos os pontos do sistema. Diz-se que um sistema que exibe estas propriedades é composto por uma única fase. O chamado estado físico, como é conhecido na linguagem corrente, é substituído e generalizado pelo conceito de fase. A exemplo, sólido, líquido e gasoso são nomes usualmente dados as fases de uma substância. Ao variar essas grandezas intensivas (temperatura, pressão, potencial químico, etc.) propriedades que caracterizam o sistema (densidade, estrutura, composição, etc.), em geral, variam de maneira contínua. Porém, em certas condições, pode ocorrer variações bruscas ou até mesmo divergências destas propriedades. Quando isso ocorre estamos em presença de uma transição de fases.

As transições de fases são fenômenos que ocorrem em uma variedade de sistemas físicos. Por exemplo: fluidos, materiais magnéticos, supercondutores, ligas metálicas, etc [9, 15]. Uma das primeiras teorias que mostraram resultados satisfatórios sobre as transições de fases, foi proposta por Van der Waals, em sua tese de doutorado [23, 24]. Essa teoria foi utilizada como ferramenta relevante para uma análise de sistemas fluidos. As transições em sistemas ferromagnéticos, tem o comportamento descrito por uma teoria proposta por Pierre Curie [25], que foi desenvolvida mais tarde, por Pierre Weiss [26].



Essas teorias, apesar de tratarem de sistemas distintos, apresentam pontos em comum. As teorias que reúnem essas características, que são conhecidas como teorias clássicas das transições de fases, têm sido amplamente utilizadas para descrever os aspectos qualitativos de uma variedade de transições de fases.

Estritamente falando, no momento em que uma transição de fases ocorre, observam-se singularidades das funções termodinâmicas (energia livre e suas derivadas). Na medida que varia-se os parâmetros de controle de um dado sistema, por exemplo, temperatura ou pressão, ocorre uma mudança entre os estados de equilíbrio do sistema. Esse comportamento singular é motivado por flutuações microscópicas que afetam os estados macroscópicos. O conjunto de flutuações dão origem a um comportamento coletivo do sistema que fica caracterizado, de maneira eficaz, quando se analisa as correlações entre os elementos do sistema [27].

A figura 2.1 mostra o diagrama, pressão ( $P$ ) versus temperatura ( $T$ ), típico de uma substância pura. As curvas formada pelo conjunto de pontos, caracterizam a coexistência de fases da substância. As regiões *I*, *II* e *III*, separadas pelas curvas de coexistência, caracterizam as fases. O ponto em comum que delimita as três regiões é chamado de ponto triplo, onde as três fases coexistem. A pressão ( $P_t$ ) e temperatura ( $T_t$ ) são medidas no ponto triplo. A curva que delimita I e II termina no ponto crítico. Nas linhas descritas anteriormente as transições ocorrem com descontinuidades de algumas funções termodinâmicas. No ponto crítico, as Transições são ditas de segunda ordem ou contínuas. Neste tipo de transição alguns observáveis termodinâmicos, sofrem mudanças contínuas em seus respectivos valores.

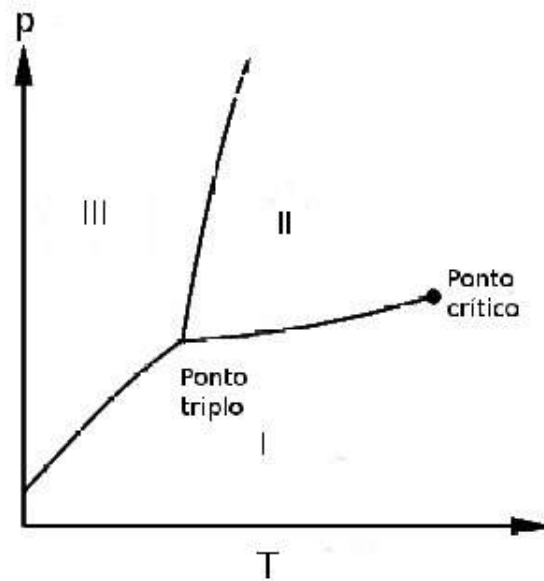


Figura 2.1: Diagrama de fase típico de uma substância pura.

Nos sistemas ferromagnéticos as transições de fases exibem fortes semelhanças com as transições de sistema fluidos. A figura 2.2 mostra o diagrama de fases de um ferromagneto simples. Semelhante aos fluidos existe uma linha de transição de primeira ordem onde é finalizada no ponto crítico  $T = T_c$ . As transições mostradas na figura 2.2 acontecem em um campo magnético  $H = 0$ . Em sistema magnéticos como este, a magnetização é o observável que indica a transição. Em  $T < T_c$ , a magnetização por spin sofre um salto (descontinuidade), ao passar de um estado de magnetização negativa para um estado com magnetização positiva, caracterizando a transição de primeira ordem. Em  $T \geq T_c$  a transição ocorre continuamente, o que configura uma transição de segunda ordem.

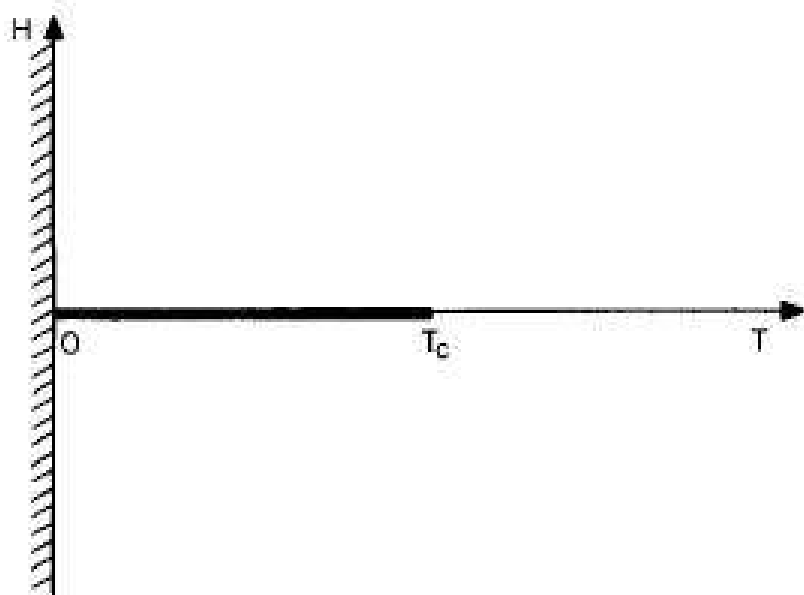


Figura 2.2: Diagrama de fases de um ferromagneto simples.

Tanto nas transições líquido-gás quanto nas ferromagnéticas, o comportamento do parâmetro que indica a transição (parâmetro de ordem) próximo ao ponto crítico exibem fortes semelhanças.

## 2.2 Fenômenos Críticos

Os fenômenos críticos, em geral, são observados em sistemas fora do equilíbrio. A experiência mostra que alguns observáveis termodinâmicos, a exemplo, calor específico, susceptibilidade magnética, compressibilidade, entre outros, exibem um comportamento singular ou divergem assintoticamente nas proximidades do ponto crítico. O comportamento dessas grandezas na região crítica tem caráter universal e formam um conjunto de expoentes, conhecidos por expoentes críticos. Os crescentes estudos e a compreensão das transições de fase e fenômenos críticos, têm proporcionado grandes avanços na base de teorias consistentes e eficazes, afim de explicar esse comportamento universal. A exemplo do grupo de renormalização, universalidade e invariância de escala [28, 29].

A partir do diagrama de fases da figura 2.1, considerando um fluido simples como a água, vamos dar um exemplo de expoente crítico. Percorrendo a linha de coexistência entre as fases líquidas e gasosas, a diferença de densidade entre as duas fases, vai dimi-

nuindo a medida que nos aproximamos do ponto crítico. Exatamente no ponto crítico essa diferença nas densidades vai a zero, onde ocorre a transição de fases de segunda ordem. A partir desse momento diz-se que o sistema está na fase desordenada. Saímos de uma região onde existia uma ordem, líquido ou gás e agora, no ponto crítico, não é possível estabelecer a ordem. Para isso é definido uma grandeza que informa a fase que o sistema se encontra, o chamado parâmetro de ordem. Esse observável, que na transições líquido-gás é a diferença de densidade entre a fase líquida e a fase sólida, assume valor diferente de zero para a fase ordenada e zero na fase desordenada. Para uma transição de segunda ordem, como a descrita o parâmetro de ordem (PO) tem seu comportamento próximo ao ponto crítico,

$$PO = \rho_L - \rho_g \sim \left( \frac{T_c - T}{T} \right)^\beta \quad (2.1)$$

O expoente  $\beta$  é chamado de expoente crítico. Ele traduz o comportamento nas proximidades do ponto crítico do parâmetro de ordem. Ele assume valores universais para algumas classes de sistemas, a exemplo da transição ferromagnética e líquido-gás.

Como já é de conhecimento que algumas grandezas termodinâmicas apresentam descontinuidades ou divergências no ponto crítico, e que estes comportamentos são definidos por expoentes críticos, tem-se uma definição mais rigorosa de expoente crítico seguindo [30].

Definimos primeiro, a grandeza adimensional conhecida como temperatura reduzida,

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \quad (2.2)$$

que mede a “distância” à temperatura crítica. Se  $F(\tau)$  é uma função de  $\tau$ , o objeto de interesse é o comportamento de  $F(\tau)$  nas proximidades do ponto crítico, ou seja, para  $|\tau| \ll 1$ . Assim temos o limite

$$\vartheta = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln F(\tau)}{\ln(\tau)} \quad (2.3)$$

existindo o limite,  $\vartheta$  é o expoente crítico associado a função  $F(\tau)$ . De acordo com essa maneira de definir o expoente crítico de  $F(\tau)$  que, em geral, é apresentada em sua forma reduzida,

$$F(\tau) \sim \tau^\vartheta \quad (2.4)$$

Na maioria dos casos não é possível encontrar a forma funcional de  $F(\tau)$ , e os expoentes críticos são obtidos a partir da inclinação do gráfico de  $F(\tau)$  versus  $\tau$ , em escala logarítmica, nas proximidades do ponto crítico.

Para alguns observáveis termodinâmicos temos as seguintes relações para os principais expoentes críticos associados em  $T < T_c$

Parâmetro de ordem

$$PO \sim (-\tau)^\beta \quad (2.5)$$

Função resposta

$$\chi \sim (-\tau)^{\gamma'} \quad (2.6)$$

Calor específico

$$C \sim (-\tau)^{-\alpha'} \quad (2.7)$$

Comprimento de correlação

$$\xi \sim (-\tau)^{-\nu'} \quad (2.8)$$

Para um fluido

$$P - P_c \sim \left( \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} \right)^\delta \quad (T = T_c) \quad (2.9)$$

Para sistemas magnéticos

$$H \sim M^\delta \quad (T = T_c) \quad (2.10)$$

A tabela 2.1 resume alguns valores experimentais, teóricos e de simulações numéricas para os principais expoentes críticos.

Tabela 2.1: Alguns valores dos principais expoentes críticos extraídos de dados experimentais e modelos matemáticos [1].

Expoente	Experimental	Teorias clássicas	Ising ( $d = 2$ )	Ising ( $d = 3$ )
$\alpha$	0,110 - 0,116	0	0	0,110
$\beta$	0,316-0,327	1/2	1/8	0,325
$\gamma$	1,23-1,25	1	7/4	1,24
$\nu$	0,6-0,7	1/2	1	0,64
$\delta$	4,6-4,9	3	15	4,82

## Dinâmica crítica em tempos curtos

### 3.1 Introdução

Em geral, nos sistemas hamiltonianos que exibem transição de fases envolvem muitos parâmetros. Porém, a ideia de "universalidade", introduzida por Kadanoff em 1966, sugere que o comportamento crítico desses sistemas não, necessariamente, dependa de todos os parâmetros do hamiltoniano. No ponto crítico, quando o comprimento de correlação vai para infinito, os expoentes críticos e o comportamento de escala, depende de poucos parâmetros como a dimensão espacial do sistema e o número de componentes do parâmetro de ordem. Dessa maneira, como já foi dito, sistemas distintos podem apresentar o mesmo comportamento no estado crítico. Kadanoff mostrou, em seus trabalhos, que propriedades de escala nos sistemas nas proximidades do ponto crítico, podem ser explicadas fazendo considerações que as interações resultantes que exibem o comportamento do sistema não seriam alteradas, se os graus de liberdade fossem agrupados e tomados como uma só entidade, do ponto de vista matemático. Dessa maneira os detalhes das interações microscópicas seriam cancelados, em favor das grandes flutuações observadas no ponto crítico. Portanto, a descrição qualitativa do sistema não seria alterada à medida que fosse reduzido o número de graus de liberdade. Mais tarde, as ideias de Kadanoff tornaram-se a base para a construção do "grupo de renormalização"(GR) [31]. O GR, consiste em um conjunto de operações matemáticas que permite a investigação sistemática de sistemas físicos, observados a partir de diferentes escalas. Este fato reflete que, em diferentes escalas os sistemas físicos podem apresentar invariância ou não. Essa mudança de escala recebe o nome de transformação de escala. O grupo de renormalização está intimamente relacionado com "invariância de escala", simetrias no qual um sistema parece

o mesmo em todas as escalas (a chamada autosimilaridade). A ideia de como a escala varia, é como se o sistema fosse investigado com "várias lupas". Na medida que mudamos as lentes, para aumentar a resolução, o sistema preserva suas característica/propriedades, a exemplo das estruturas fractais que preservam as suas característica geométricas [32].

## 3.2 Lei de Escala

Para uma melhor ideia da hipótese de escala segue-se um exemplo clássico de uma transformação de escala. Foi considerado uma redução de um dado sistema por um fator "b", tomando o modelo de Ising, por ser um modelo relativamente simples.

Considerando o modelo de Ising com dimensão  $d$ , em um campo magnético  $H$ ,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (3.1)$$

os parâmetros do hamiltoniano (3.1) são a interação de spins  $J$  e o campo magnético aplicado  $H$ . Agrupando os spins individuais em blocos de spins, a interação efetiva dos spins no bloco dá origem a um spin global. Se o número total de spins na rede é  $N$ , agora tem-se  $N'=N/b^d$  blocos de spins. Considerando que a forma funcional do Hamiltoniano não mude é possível escrever o novo Hamiltoniano em função dos novos parâmetros de  $\tilde{J}$  e  $\tilde{H}$ , que refletem a interação entre blocos e de um bloco com o campo exterior, nesta ordem. Esses novos parâmetros dependem de  $b$ . Como os Hamiltonianos têm a mesma forma funcional, a energia de Gibbs segue,

$$g(\tilde{\tau}, \tilde{H}) = b^d g(\tau, H) \quad (3.2)$$

onde temos a energia de Gibbs para os blocos é obtida a menos de um fator  $b^d$  da energia de Gibbs por spins.

$$\begin{aligned} \tilde{\tau} &= b^y \tau \\ \tilde{H} &= b^x H \end{aligned} \quad (3.3)$$

Das equações (3.2) e (3.3), obtém-se,

$$g(\tau, H) = b^{-1} g(b^{y/d} \tau, b^{x/d} H) \quad (3.4)$$

a energia de Gibbs é uma função homogênea das variáveis  $\tau$  e  $H$ .

Das relações de Maxwell  $M = -(\partial G/\partial H)_T$  da termodinâmica [9] temos a magnetização,

$$M(\tau, H) = b^{x/d-1} M(b^{y/d}\tau, b^{x/d}H) \quad (3.5)$$

para  $H=0$  quando  $\tau \rightarrow 0$ ,

$$M(\tau, 0) = b^{x/d-1} M(b^{y/d}\tau, 0) \quad (3.6)$$

como  $b$  é arbitrário, toma-se  $b = \tau^{-d/y}$ ,

$$\begin{aligned} M(\tau, 0) &= \tau^{(d-x)/y} M(1, 0) \\ M(\tau) &\sim \tau^\beta, \quad \beta = \frac{d-x}{y} \end{aligned} \quad (3.7)$$

De maneira análoga, para  $b = H^{-d/x}$ ,  $\tau=0$  e  $H \rightarrow 0$  obtém-se,

$$\begin{aligned} M(0, H) &= H^{(d-x)/x} M(0, 1) \\ M(H) &\sim H^{1/\delta}, \quad \delta = \frac{x}{d-x} \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\beta = \frac{d-x}{y}, \quad \delta = \frac{x}{d-x} \quad (3.9)$$

Através de outros observáveis termodinâmicos é possível se chegar a outras relações entre os parâmetros  $x$  e  $y$ , que quando combinados resultam em relações entre expoentes críticos.

A partir da suscetibilidade magnética a temperatura constante,

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left( \frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T \quad (3.10)$$

Chega-se

$$\chi_T(\tau, H) = b^{2x/d-1} \chi_T(b^{y/d}\tau, b^{x/d}H) \quad (3.11)$$

Novamente para  $H=0$ , quando  $\tau \rightarrow 0$  e tomando  $b = \tau^{-d/y}$  chega-se,



$$\gamma = \frac{2x - d}{y} \quad (3.12)$$

fazendo a substituição de (3.9) em (3.12), obtém-se a relação de Windom,

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (3.13)$$

Portanto, através da hipótese de escala é possível deduzir relações entre expoentes críticos, embora não determine os seus valores.

### 3.3 Dinâmica Crítica em Tempos Curtos

Até pouco tempo acreditava-se que o comportamento universal, só era observado em sistemas no estado estacionário, ou seja, que já obedeciam a distribuição de Boltzmann no equilíbrio [9, 15, 33]. Por esse fato, os expoentes críticos eram obtidos, numericamente, a partir configurações de equilíbrio. Uma das grandes dificuldades encontradas é o fato que os sistemas em estudo, nas proximidades do ponto crítico são fortemente correlacionados. Este fato implica grandes esforços para obter configurações descorrelacionadas, afim de medir os observáveis termodinâmicos desejados. Esses fatos motivaram o interesse nos trabalhos de Huse [34] e Janssen [35]. Esses trabalhos revelam um comportamento universal bem antes do sistema atingir o equilíbrio. A proposta se dá com o tempo assumindo uma especie de comprimento, na teoria de escala para sistemas finitos.

Por meio de simulações numéricas é feita a análise das séries temporais de alguns observáveis, quando os parâmetros de controle são sintonizados no ponto crítico. Em geral, os observáveis utilizados são o parâmetro de ordem e seus momentos ou cumulantes [36]. Na análise, se faz necessário que a configuração inicial do sistema seja controlada. No caso de sistemas magnéticos podemos ter o caso ordenado e desordenado, caracterizando as configurações iniciais.

É observado que em uma grande variedade de sistemas hamiltoniano dinâmico, a evolução temporal dos observáveis no ponto crítico obedece uma certa lei de potência, logo após um tempo microscópico inicial  $t_{mic}$ . Em simulações Monte Carlo [37], esse tempo

tipicamente fica compreendido entre 10 e 100 passos Monte Carlo. Essa abordagem de curta duração é utilizada, em geral, para identificar os valores críticos dos parâmetros de controle. A partir dessa análise, os expoentes universais da transição, podem ser relacionados com os expoentes das leis de potências observadas, durante a evolução dinâmica das quantidades medidas. Esta técnica tem por objetivo, obter os expoentes críticos universais e o parâmetros crítico de controle [36].

A Dinâmica Crítica de Tempos Curtos (DCTC), tem sua base teórica desenvolvida a partir das contribuições de Janssen e colaboradores [35]. Primeiramente os trabalhos foram concentrados em resfriar o sistema a partir de temperaturas críticas elevadas [36]. Desde então, muitos trabalhos em simulações numéricas, tem sido realizados utilizando esta técnica [38, 39]

A partir de uma configuração desordenada, podemos descrever uma experiência típica de DCTC seguido o roteiro. O microestado inicial é escolhido de forma que o sistema apresente uma baixa magnetização inicial ( $m_0 \ll 1$ ). Em seguida o sistema evolui durante um tempo curto, em relação ao tempo necessário para o equilíbrio. Esse procedimento é repetido centenas de vezes e é realizada uma média, sobre as configuração iniciais, para obter a série temporal das quantidades de interesse [36]. O mesmo procedimento é realizado para um estado completamente ordenado ( $m_0 = 1$ ), o sistema é preparado para que a magnetização por sítio assumo o mesmo valor. Em seguida o sistema relaxa para o equilíbrio e o protocolo é repetido várias vezes.

Embora o tratamento realizado por Janssen seja sofisticado, a aplicação dos resultados obtidos tem um tratamento operacional relativamente simples e é possível analisar simulações de sistemas próximo do ponto crítico.

Em geral, os resultados da experiência dependem de  $m_0$ , do parâmetro de controle e do tamanho do sistema. Na vizinhança do ponto crítico uma relação de escala generalizada, para o regime de tempos curtos, foi obtida por Janssen e colaboradores em uma análise do grupo de renormalização para sistemas de tamanho finito para um estado completamente ordenado [35],

$$M(t)^{(k)} \equiv \langle M(t)^k \rangle = b^{-k\beta/\nu} \mathcal{M}^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\varepsilon, b^{-1}L) \quad (3.14)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  indica médias sobre diferentes realizações da dinâmica, com valores iguais

do parâmetro de ordem e diferentes configurações iniciais;  $b$  é um parâmetro espacial de redimensionamento da rede;  $\varepsilon$  mede a distância ao ponto crítico (diferença entre o valor crítico do parâmetro de controle e o valor usado no “experimento”),  $\beta$  e  $\nu$  são os expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem e à divergência do comprimento de correlação, respectivamente, e  $z$  é o expoente crítico dinâmico [28, 29], relacionado ao tempo de correlação. Os expoentes críticos  $\beta$  e  $\nu$  não tem relação com os detalhes, como a escolha da geometria da rede ou a dinâmica envolvida, enquanto o valor de  $z$  depende fortemente destes detalhes [36].

Nos primeiros passos de uma simulação MC nas proximidades do ponto crítico, as correlações espaciais não são significativas e o sistema tem um comportamento dado pela aproximação de campo médio [25]. Logo em seguida em um determinado tempo  $t > t_m$ , com a evolução temporal do sistema, as correlações passam a ser significativas e  $M(t)$  decresce para seu valor de equilíbrio. O comportamento em (3.14) pode ser obtido fazendo algumas considerações sobre a sua forma funcional. Primeiramente, assumindo que o comprimento de correlação, que depende do tempo,  $\xi(t) \sim t^{1/z}$  é pequeno em relação a dimensão linear do sistema  $L$  e também em relação ao comprimento de correlação do equilíbrio  $\xi_{eq}(T) \sim \tau^{-\nu}$  [36]. Como  $b$  é um fator de redimensionamento da estrutura, podemos definir  $b = t^{1/z}$  e reescrever 3.14,

$$M(t)^{(k)} \equiv \langle M(t)^k \rangle = t^{-k\beta/\nu z} M^{(k)}(1, t^{1/\nu z} \varepsilon, t^{-1/z} L) \quad (3.15)$$

essa relação vale apenas para o regime de tempo  $L/t^{1/z} \gg 1$  e  $\xi_{eq}(T) \gg 1$ .

Tomando agora a relação de escala no ponto crítico  $\varepsilon = 0$  temos,

$$M(t)^{(k)} \equiv \langle M(t)^k \rangle = t^{-k\beta/\nu z} M^{(k)}(1, 0, t^{-1/z} L) = t^{-k\beta/\nu z} G^{(k)}(t^{-1/z} L) \quad (3.16)$$

fazendo a consideração que a função  $G(x)$  é universal, logo  $G(x) \sim \text{constante}$ , reescrevemos

$$M(t)^{(k)} \sim t^{-k\beta/\nu z} \quad (3.17)$$

Uma outra quantidade que exibe um comportamento de lei de potência, na região crítica é a flutuação do parâmetro de ordem. Esse observável é definido como,

$$\Delta M(t)^{(2)} \equiv \langle M^2(t) \rangle - \langle M(t) \rangle^2 \quad (3.18)$$

A medida que o comprimento de correlação, que depende do tempo, ainda é muito pequeno comparado com o tamanho  $L$ , o comportamento  $\Delta M(t)^{(2)} \sim L^{-d}$  de acordo com o teorema do limite central [40]. Feita a consideração  $b = t^{1/z}$ , no ponto crítico  $\varepsilon = 0$ , tomando  $\Delta M(t)^{(2)} \sim L^{-d}$ , chega-se ao comportamento  $\Delta M(t)^2$ ,

$$\Delta M(t)^{(2)} \sim t^{-2\beta/\nu z} (Lt^{-1/z})^{-d} \sim t^{d/z - 2\beta/\nu z} \quad (3.19)$$

usando a relação de hiper-escala  $\gamma = d\nu - 2\beta$  [9], a expressão acima pode ser reescrita como

$$\Delta M(t)^{(2)} \sim t^{\gamma/\nu z} \quad (3.20)$$

Para determinação do expoente  $z$  usamos o cumulante de Binder de segunda ordem que é definido como,

$$U^{(2)}(t) = \frac{\langle M(t)^2 \rangle}{\langle M(t) \rangle^2} - 1 \quad (3.21)$$

usando as relações obtidas anteriormente chegamos a lei de escala,

$$U^{(2)}(t) \sim t^{d/z} \quad (3.22)$$

Agora, usando a relação de escala (3.14) com  $b = t^{1/z}$ , ainda no regime  $L/t^{1/z} \gg 1$  o primeiro momento da magnetização é,

$$M(t) = t^{-\beta/\nu z} M(1, t^{1/\nu z} \varepsilon, t^{-1/z} L) = t^{-\beta/\nu z} F(t^{1/\nu z} \varepsilon) \quad (3.23)$$

Tomando a derivada do logaritmo da magnetização  $\ln(M)$  com respeito a  $\varepsilon$ , calculada em  $\varepsilon=0$  chegamos ao comportamento em lei de potência,

$$\left(\frac{\partial \ln(M)}{\partial \varepsilon}\right)_{\varepsilon=0} = \tilde{F}(0)t^{1/\nu z} \quad (3.24)$$

para obter o expoente  $1/\nu z$ .

## Modelo, materiais e métodos

### 4.1 Teoria $\phi^4$

A teoria  $\phi^4$  é uma teoria clássica de campos, onde existe um termo quártico no hamiltoniano que dá origem ao seu nome. As teorias clássicas de campos estudam sistemas físicos cujas quantidades que os definem são funções (ou campos) do espaço e do tempo. Essas funções determinam um estado do sistema e são chamados graus de liberdade da teoria. A ideia da teoria é encontrar uma forma explícita para os graus de liberdade, de forma a determinar os possíveis estados do sistema. A descrição das teorias clássicas de campos é feita para sistemas com graus de liberdade contínuos. Em geral, é usado na descrição uma formulação lagrangiana ou hamiltoniana. A distribuição espacial dos campos infinitesimais, que interagem em uma certa vizinhança, reflete o comportamento desse fenômeno nessa região. Um exemplo bem familiar é a teoria eletromagnética da matéria. O modelo  $\phi^4$  utilizado neste trabalho, pode representar algumas classes de sistemas físico e, em particular, são utilizados parâmetros que aproximam o modelo para a descrição de sistemas magnéticos. O hamiltoniano do modelo discretizado em uma rede bidimensional é,

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[ \frac{1}{2} \pi_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu} (\phi_{i+\mu} - \phi_i)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_i^2 + \frac{1}{4!} \lambda_t \phi_i^4 \right], \quad (4.1)$$

onde  $\phi_i$  é o campo escalar do  $i$ -ésimo sítio na rede,  $\pi_i = \dot{\phi}_i$ , os parâmetros  $m^2$  e  $\lambda_t$  definem uma particular realização da teoria. Neste trabalho foi utilizado os valores  $m^2 = 2$  e  $\lambda = 0,6$  seguindo os mesmos utilizados em [2]. Utilizando as equações de Hamilton [41],

o hamiltoniano (4.1) nos leva a seguinte equação de movimento para os campos

$$\ddot{\phi}_i = \sum_{\mu} (\phi_{i+\mu} + \phi_{i-\mu} - 2\phi_i) + m^2\phi_i - \frac{1}{3!}\lambda_t\phi_i^3. \quad (4.2)$$

Na evolução governada por (4.2) a energia é conservada. Nesta abordagem do modelo  $\phi^4$ , as equações foram resolvidas para uma rede quadrada, com interações entre os primeiros vizinhos e fronteiras periódicas.

## 4.2 Algoritmo de Verlet

Para obtenção das soluções das equações diferenciais de cada sítio na rede (4.2), foi utilizado o algoritmo de Verlet [11, 42]. Esse algoritmo é bastante utilizado em dinâmica molecular [43]. O método consiste em obtermos duas expansões de Taylor de terceira ordem dos campos  $\phi_i(t)$  locais, uma deslocada temporalmente um passo a frente e outra com um passo atrás.

$$\phi_i(t + \Delta t) = \phi_i(t) + \dot{\phi}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\phi}_i(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\dddot{\phi}_i(t)\Delta t^3 + \vartheta(\Delta t^4) \quad (4.3)$$

$$\phi_i(t - \Delta t) = \phi_i(t) - \dot{\phi}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\phi}_i(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\dddot{\phi}_i(t)\Delta t^3 + \vartheta(\Delta t^4) \quad (4.4)$$

Das equações (4.3) e (4.4) temos:

$$\phi_i(t + \Delta t) = 2\phi_i(t) - \phi_i(t - \Delta t) + \ddot{\phi}_i(t)\Delta t^2 + \vartheta(\Delta t^4) \quad (4.5)$$

A partir de (4.5), verificamos de imediato, que o erro do algoritmo é da ordem de  $\Delta t^4$ . Para efeito de nossa simulação, esse algoritmo é de fácil implementação e relativamente preciso. A expressão para a aceleração dos campos fica:

$$\ddot{\phi}_i(t) = [\phi_i(t + \Delta t) + \phi_i(t - \Delta t) - 2\phi_i(t)]/\Delta t^2 \quad (4.6)$$

## 4.3 Método de cálculo de derivadas numéricas

### 4.3.1 Introdução

É muito comum em investigações científicas, a medida de observáveis ou determinadas análises, que exigem a obtenção de cálculos das primeiras derivadas a partir de dados experimentais. A diferenciação direta numericamente é, em geral, não aconselhável pois, o ruído dos dados é amplificado, gerando resultados não confiáveis. A base do método de análise dos observáveis para esse trabalho, exige os cálculos da primeira derivada e essa foi a motivação para o uso de um método de diferenciação numérica. Utilizamos o método descrito em [44], que consiste em usar um processo inverso aos comumente utilizados. A diferenciação dos dados é convertida em resolver uma equação integral, de um grande número de pontos espaçados uniformemente da segunda derivada. Este é então, integrado para dar a primeira derivada. As vantagens apresentada em [44] é que o método não impõe suposições da forma funcional dos dados e que existe uma variedade de métodos confiáveis para resolver equações integrais numericamente. O método de regularização de Tikhonov, utilizado no presente método de diferenciação numérica introduz um parâmetro de regulação interno que garante um equilíbrio em manter as características dos dados e, ao mesmo tempo, manter a amplificação do ruído sob controle.

### 4.3.2 Equação integral do primeiro tipo

Os dados experimentais são dispostos em pares coordenados:  $(x_1^M, y_1^M), (x_2^M, y_2^M), (x_3^M, y_3^M), \dots, (x_i^M, y_i^M), \dots, (x_{N_D}^M, y_{N_D}^M)$ , em ordem crescente da variável independente  $x$ . Neste caso,  $y$  é a variável depende que iremos calcular a derivada.  $N_D$  é o número pares do conjunto de dados. O sobrescrito  $M$  indica os dados originais medidos experimentalmente. Toma-se a primeira derivada por  $r(x) = dy(x)/dx$  e a segunda por  $f(x) = d^2y(x)/dx^2$ . As relações exatas da variável  $y(x)$  com as derivadas são,

$$y^C(x) = \int_{x'=x_0}^x r(x')dx' + y_0 \quad (4.7)$$

e

$$y^C(x) = \int_{x'=x_0}^x (x - x')f(x')dx' + (x - x_0)r_0 + y_0 \quad (4.8)$$



$x_0$  é um ponto de referência arbitrário, que neste método é o primeiro ponto  $x_1^M$ . O subscrito  $C$  indica o valor a ser calculado a partir do valor medido experimentalmente.

É possível notar que as equações (4.7) e (4.8) são exatamente, o primeiro e o segundo termo, respectivamente, da expansão de Taylor entorno de  $x_0$  da função  $y(x)$  e os termos restantes então expressos na integral. As equações são resolvidas para as funções desconhecidas  $r(x)$  e  $f(x)$ , com as constantes, também, desconhecidas  $r(x_0) = r_0$  e  $y(x_0) = y_0$ . A equação integral (4.7) é resolvida numericamente a partir de um esquema, baseado na regulação Tikhonov, para se obter  $r(x)$ . O mesmo esquema numérico pode ser utilização, com algumas alterações, para a solução numérica de (4.8).

### 4.3.3 Equações discretizadas

Na prática, os dados experimentais são armazenado em vetores coluna  $\mathbf{y}^M = (y_1^M, y_2^M, \dots, y_i^M, \dots, y_{N_D}^M)$  e  $\mathbf{x}^M = (x_1^M, x_2^M, \dots, x_i^M, \dots, x_{N_D}^M)$ . Embora não haja nenhuma exigência, os dados correspondentes ao intervalo  $x_{N_D}^M - x_1^M$  são discretizados em  $N_k$  pontos, uniformemente espaçados  $\mathbf{x}^C = (x_1^C = x_1^M, x_2^C, \dots, x_j^C, \dots, x_{N_k}^C = x_{N_D}^M)$  distância que separa os novos dados é  $\Delta = (x_{N_D}^M - x_1^M)/(N_k - 1)$ .

Primeiramente é discretizada a equação (4.8),

$$y_i^C = \sum_{j=1}^{N_K} B_{ij} f_j + (x_i^M - x_0) r_0 + y_0 \quad \text{com } i = 1, 2, \dots, N_D \quad (4.9)$$

Em uma notação matricial temos:

$$\mathbf{y}^C = \mathbf{B}\mathbf{f} + \mathbf{1}(\mathbf{x}^M - \mathbf{1}x_0)r_0 \quad (4.10)$$

Aqui  $\mathbf{B}$  é uma matriz  $N_D \times N_K$  de coeficientes numéricos conhecidos, que são obtidos por uma aproximação da integral (4.8) por um método de quadratura numérica como o trapezoidal ou Simpson.  $\mathbf{1}$  é uma matriz coluna com todos os elementos iguais a 1. As incógnitas  $f_1, f_2, f_3, \dots, f_{N_K}, y_0$ , e  $r_0$  devem ser obtidas de forma a minimizar:

- (a) O somatório dos quadrados dos desvios ( $S_1$ ) entre  $y_i^C(x_i^M)$  e  $y_i^M$   $S_1$ , com  $i = 1$  a  $N_D$

(b) O somatório dos quadrados de  $d^2f(x)/dx^2$  ( $S_2$ ) no interior dos pontos  $x_j^C$ , ou seja, para  $j = 2, 3, \dots, N_{K-1}$

A condição (a), garante um ajuste mais estreito entre  $y^C(x)$  e  $y^M(x)$ , já a condição (b) a suavidade dos dados, evitando possíveis oscilações espúrias.

Na regularização Tikhonov, é feita uma combinação linear das duas condições (a) e (b), que deve também seguir o critério de minimização,

$$R = S_1 + \lambda S_2 \quad (4.11)$$

o parâmetro de regularização  $\lambda$  controla a força das duas condições. Para um  $\lambda$  grande a condição de suavidade dos dados é melhor satisfeita, enquanto para valores pequenos de  $\lambda$  favorece uma melhor precisão. De acordo com [44], o  $\lambda$  apropriado depende de  $N_D$ ,  $N_K$  e também do ruído dos dados.

É possível mostrar que para qualquer valor fixo de  $\lambda$ , as variáveis  $f_1, f_2, f_3, \dots, f_{N_K}$ ,  $y_0$ , e  $r_0$  que minimizam (4.11) são,

$$\mathbf{f}' = \left( \mathbf{B}'^T \mathbf{B}' + \frac{\lambda}{\Delta^4} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \right)^{-1} \mathbf{B}'^T \mathbf{y}^M \quad (4.12)$$

onde  $\mathbf{f}' = (f_1, f_2, f_3, \dots, f_{N_K}, y_0, r_0)$  é a matriz das variáveis a determinar e  $\mathbf{B}'$  é a matriz  $\mathbf{B}$  com mais duas colunas,  $\mathbf{1}$  e  $(\mathbf{x}^M - \mathbf{1}x_0)$ , devido a inclusão de  $y_0$  e  $r_0$  em  $\mathbf{f}$ .  $\boldsymbol{\beta}$  é a matriz tridiagonal construída pela aproximação das segundas derivadas de  $d^2f(x)/dx^2$ . Os zeros nas duas últimas colunas de (4.13) é devido incorporação de  $y_0$  e  $r_0$ .

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & & 0 & 0 \\ & 1 & -2 & 1 & & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Usando agora,  $\mathbf{B}'$  e  $\mathbf{f}'$  temos a matriz dos dados suavizados,

$$\mathbf{y}^C = \mathbf{B}' \mathbf{f}' \quad (4.14)$$

A equação algébrica linear (4.12) fornece os valores da segunda derivada( $f(x)$ ) para os dados experimentais  $y^M$ . De posse dos valores de  $f(x)$ , para uma grande quantidade de pontos estreitamente espaçados e livre de oscilações espúrias, o conjunto é integrado numericamente para obtenção da primeira derivada  $r(x)$ . Na integração de  $r(x)$ ,  $r_0$  é utilizado como condição de contorno. De maneira semelhante, o resultado de  $r(x)$  é integrado para gerar o conjunto  $y^C(x)$  e  $y_0$  como condição de contorno. Desta maneira, ao comparar os valores de  $y^C(x)$  e  $y^M(x)$ , é possível medir o nível de confiabilidade das primeiras e segundas derivadas,  $r(x)$  e  $f(x)$ , respectivamente [44].

#### 4.3.4 Validação Cruzada Generalizada(VCG)

A VCG, é utilizada para escolha adequada do parâmetro de regularização  $\lambda$  e é baseada no princípio “deixa um fora”. Vamos apresentar de maneira bem prática esse princípio. Para um dado valor de  $\lambda$  o cálculo da regularização Tikhonov é repetido  $N_D$  vezes e em cada repetição, é retirado um ponto dos dados. O somatório dos quadrados de  $V(\lambda)$ , que é a diferença entre o valor computado pelo valor real para cada ponto dos dados da esquerda para fora, depende de  $\lambda$ . No princípio “deixa um fora” o  $\lambda_{opt}$ , é o que minimiza  $V(\lambda)$ . Na implementação de VCG do princípio "deixa um ponto fora"  $V(\lambda)$  é dado como,

$$V(\lambda) = \frac{(\mathbf{y}^C - \mathbf{y}^M)^T (\mathbf{y}^C - \mathbf{y}^M) / N_D}{(1 - \text{Tr}[\mathbf{A}] / N_D)^2} \quad (4.15)$$

onde  $\text{Tr}[\mathbf{A}]$  é o traço da matriz quadrada  $\mathbf{A}$ , conhecida como matriz de influência, definida por,

$$\mathbf{A} = \mathbf{B}' \left( \mathbf{B}'^T \mathbf{B}' + \frac{\lambda}{\Delta^4} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \right)^{-1} \mathbf{B}'^T \quad (4.16)$$

### 4.3.5 Testando o método

A fim de testar confiabilidade do método, foi realizado um ajuste dos dados originais e calculada a derivada numérica de primeira ordem. Os resultados obtidos foram comparados com os dados originais para o ajuste e a primeira derivada foi comparada com um método de diferenciação numérica direta. A figura 4.1 mostra o ajuste com os dados originais e em seguida a figura 4.2 com as derivadas. Os dados utilizados nas figuras foram coletados de uma das amostras desse trabalho.

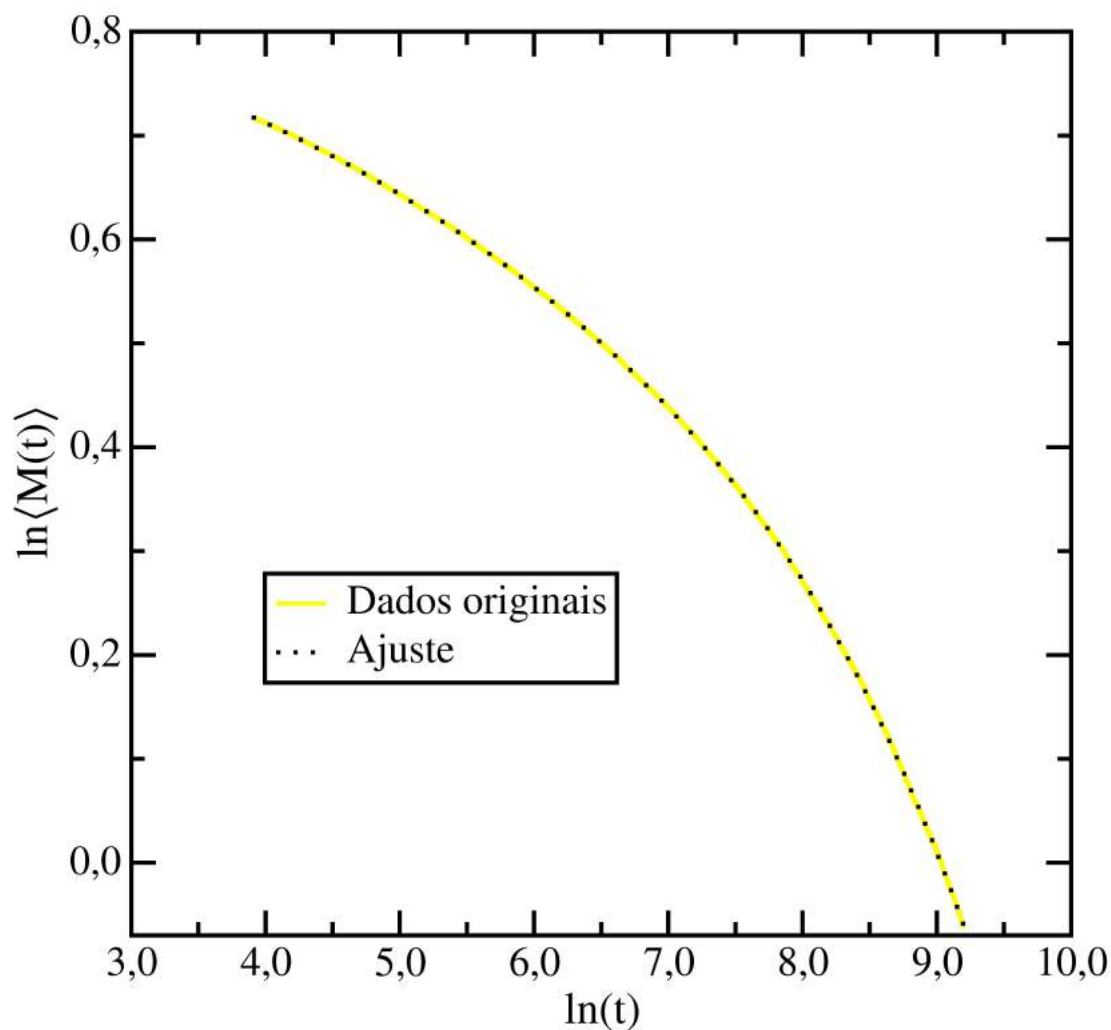


Figura 4.1: Ajuste de curva feito a partir de dados gerados em simulação numérica.

É possível perceber através da figura a qualidade do ajuste, portanto a confiabilidade do método. Nesse ajuste foi utilizamos  $\lambda$  da ordem de  $10^2$ .

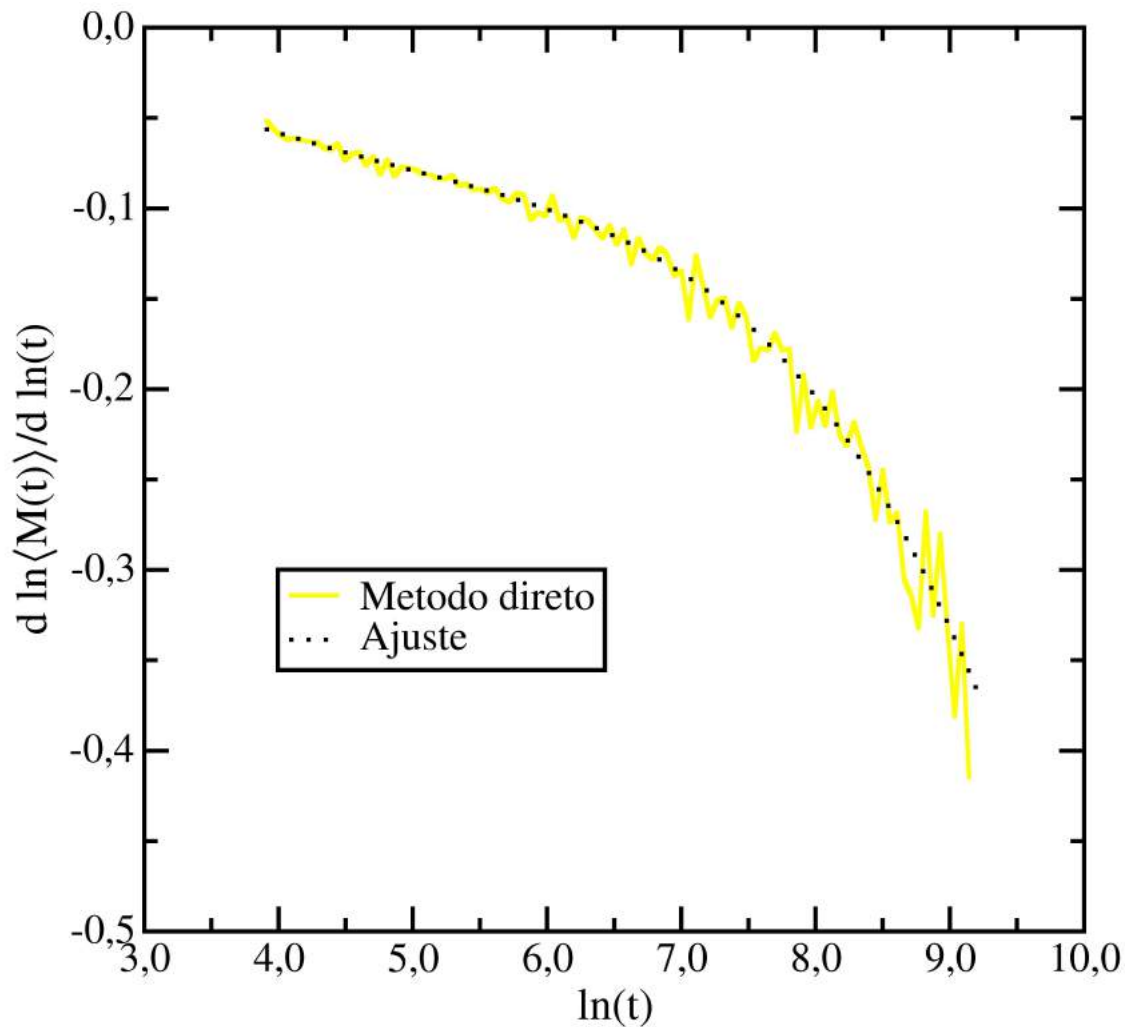


Figura 4.2: Ajuste para primeira derivada numérica, a partir dos dados brutos.

## 4.4 Colapso de Dados

### 4.4.1 Introdução

O colapso de dados é uma técnica bastante utilizada para estabelecer escala e extrair expoentes associados em diversos problemas, com características auto-similares [8]. Nesta abordagem foi utilizado um método numérico para extrair expoentes baseado em [45]. A escolha foi motivada pelo método não oferecer grandes dificuldades de implementação e ao mesmo tempo oferecer uma boa precisão nos resultados.

### 4.4.2 Descrição do método

O método consiste em analisar a quantidade  $m(t, L)$ , que é uma definição operacional de escala, em função de duas variáveis,  $t$  e  $L$ . A escala considerada pode ser do tipo

$$m(t, L) = L^d f(t/L^c) \quad (4.17)$$

onde a quantidade  $m(t, L)$  depende da natureza do problema a ser considerado, podendo assumir observáveis como a magnetização, calor específico, tamanho ou qualquer outra característica do sistema observado. De acordo com a descrição do problema os parâmetros  $L$  e  $t$  podem representar qualquer variável de controle ou evolução do sistema. A equação (4.17) é uma escala de tamanho finito (ETF) [46]  $L$  a dimensão linear do sistema e  $t$  é uma outra variável qualquer, que pode assumir o papel do tempo dinâmico. Para sistemas de tamanho muito grande, ou seja, no limite termodinâmico (Número de componentes do sistema indo para o infinito),  $L$  e  $t$  representariam parâmetros termodinâmicos, como o campo magnético, potencial químico, pressão, etc. Tal escala teria  $t$  e  $L$  representando dois parâmetros termodinâmicos, como campo magnético, potencial químico, etc ou o tempo. Sendo  $L$  um observável da escala de comprimento,  $d$  seria um tipo de dimensão da quantidade  $m(t, L)$  e  $c$  da variável  $t$ . Em geral é regra para sistemas dominados por flutuações que os expoentes  $d$  e  $c$  assumam valores difíceis de ser obtidos, ao contrário de uma análise dimensional. Tendo os expoentes quanto a função  $f(x)$  definem o compor-

tamento do sistema. Dessa forma duas variáveis, que são independentes uma da outra (tanto de maneira conceitual como controladas em experimentos) combinam em uma escala para dar origem a uma nova variável que leva a uma simplificação na descrição do fenômeno. Esse fato reforça ainda mais a importância da hipótese de escala.

O colapso de dados é uma maneira quantitativa de se obter escala, a partir da observação de curvas em determinadas regiões, para muitos sistemas simples, podem ser feitas cair em uma única curva [46]. Como exemplo, tomando os valores de  $m(t, L)$  em um conjunto de  $t$  e  $L$  pode ser feito um colapso em uma única curva se usarmos o gráfico de  $mL^{-d}$  versus  $tL^{-c}$ . O método de colapso de dados aparece como uma poderosa ferramenta para estabelecer escala. A partir de simulações numéricas este método tem sido utilizado para analisar e extrair expoentes em diversos problemas [36]. Desta maneira é essencial ter uma medida adequada para que se possa ter uma confiabilidade do colapso.

Em alguns problemas, são esperadas leis de potência pura, em outros os expoentes são conhecidos aproximadamente, porém o colapso de dados é passível de correções em termos do escalonamento. Nessas situações existem métodos conhecidos para extrair os expoentes ou para adicionar os termos de correções [45]. No método proposto em [45] a aplicação torna-se eficiente, em situações onde existem conhecimentos prévios da faixa de tais expoentes. Este fato se aplica porque muitos fenômenos estão sendo analisados para possíveis comportamento de escala.

Em [45] é proposto uma medida que pode ser utilizada para qualificar o colapso. Essa medida utiliza um princípio de minimização, para uma busca dos expoentes exatos ou mais precisos.

Se a função  $f(x)$  em (4.17) é conhecida, a soma dos resíduos é dada por

$$E_r = \frac{1}{N} \sum |L^{-d}m - f(t/L^c)| \quad (4.18)$$

neste caso a soma é superior a todos os pontos dados e é mínima para a escolha correta dos expoentes  $(d, c)$ . Na ausência de qualquer erro, estatístico ou sistemático, o valor mínimo é igual a zero.

Na maioria dos casos, a função  $f(x)$  não é conhecida, mas é, em geral, uma função analítica. O método sugere que se faça uma interpolação de  $f(x)$ . Colocando em ordem os valores dos dados, de modo que  $m_{ij}$  e  $t_{ij}$  representem o  $i$ -ésimo valor de  $t$  para o  $j$ -ésimo valor da variável  $L$ . É definido o erro residual,

$$E_r = \left[ \frac{1}{N_p} \sum_p \sum_{j \neq p} \sum_{i, N_p} |L_j^{-d} m_{i,j} - \epsilon_p(L_j^{-c} t_{ij})|^q \right]^{1/q} \quad (4.19)$$

onde  $\epsilon_p(x)$  é a interpolação da função  $f(x)$  para os valores do conjunto de dados  $p$  e  $N_p$  é o número de pares. Na expressão do erro residual  $q$  tem caráter geral, embora neste trabalho foi utilizado o mesmo valor da referência [45]  $q = 1$ .

A título ilustrativo, em uma figura tridimensional os expoentes  $c$  e  $d$  podem ocupar o plano da base e o erro residual pode ser localizado no eixo-z. A projeção do menor valor do erro conduz ao valor mais provável dos expoentes a determinar. Para que se encontre o valor dos expoentes é necessário ter conhecimento da faixa de valores no mesmo. Esse fato pode ser visto, em determinadas situações, como uma desvantagem do método.

## 4.5 Método para Análise de Dados em Simulações em Tempos Curtos

A partir da dinâmica em tempos curtos é feita uma nova proposta para análise de dados de Simulações MC. O método descrito em [47] apresenta uma maneira sistemática e precisa para obtenção do ponto crítico. A descrição aqui realizada é feita de maneira objetiva. A análise é realizada a partir da quantidade  $\psi(\varepsilon, t)$ , que é derivada do logaritmo do PO. (na teoria  $\phi^4$  a magnetização  $M(t)$ ) em relação ao logaritmo do tempo  $\ln(t)$ .

Partindo de um estado completamente ordenado e tomando o fator arbitrário de redimensionamento  $b = t^{1/z}$  a equação (3.15), no regime  $L/t^{1/z} \gg 1$ , para o primeiro o momento da magnetização assume a forma,

$$\langle M(t) \rangle = t^{-\beta/\nu z} Y(t^{1/\nu z}) \quad (4.20)$$

$$\psi(t, \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \ln(t)} \ln(\langle M(t) \rangle) = -\frac{\beta}{\nu z} + t^{1/\nu z} \varepsilon \mathcal{F}(t^{1/\nu z} \varepsilon) \quad (4.21)$$

onde  $\mathcal{F}(x)$  é uma função de escala universal e  $\varepsilon$  pode ser dado por  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$  onde  $T$  é a temperatura do sistema e  $T_c$  a temperatura crítica. Desta maneira  $\psi(\varepsilon, t)$  vai para zero ou tende a  $-\infty$  com a evolução temporal, quando  $\varepsilon < 0$  ou  $\varepsilon > 0$ , respectivamente. No ponto crítico  $\psi(\varepsilon = 0, t) = -\beta/\nu z$ , para qualquer valor de  $\ln(t)$ .



Na figura 4.3 é ilustrado o comportamento de  $\psi(\varepsilon, t)$  para dois valores de temperatura  $T_1$  e  $T_2$ , acima e abaixo da temperatura crítica, respectivamente para um modelo, Ising por exemplo, com dinâmica Monte Carlo. A partir desta figura, em tempos fixos, os valores  $\psi(\varepsilon, t)$  são associados aos respectivos valores da temperatura  $T$ . Com as informações da figura 4.3 é construído um diagrama de  $\psi(\varepsilon, t)$  em função de  $T$ .

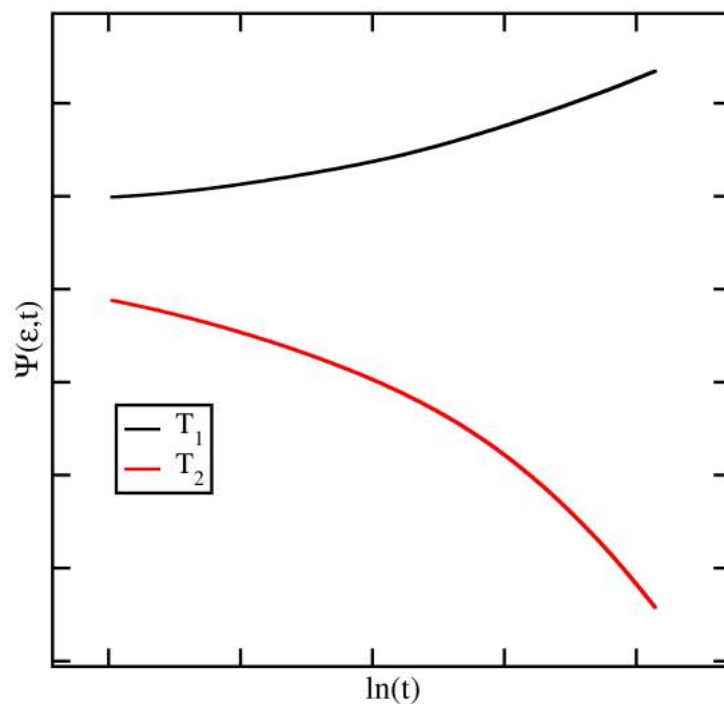


Figura 4.3: Comportamento de  $\psi(t, \varepsilon)$  função do  $\ln(t)$ .

Desta maneira são construídas várias curvas, para cada  $t$ , com um ponto de intersecção comum a todas as curvas  $(T_c, -\beta/\nu z)$ . A figura 4.4 ilustra duas curvas para dois instantes de tempos distintos.

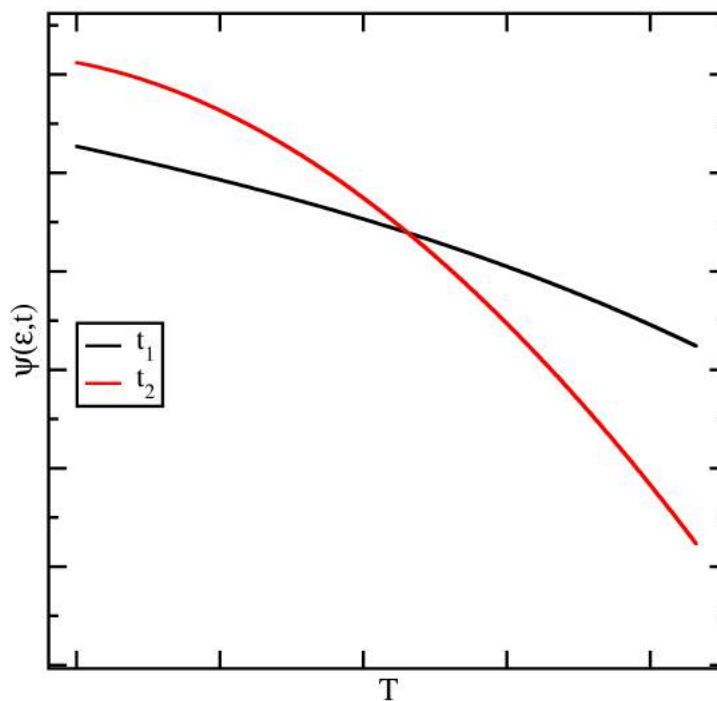


Figura 4.4:  $\psi(\varepsilon, t)$  função da temperatura  $T$

Também é sugerido em [47], uma maneira de encontrar o expoente  $1/\nu z$  é através da derivada de  $\psi(\varepsilon, t)$  com respeito a distância ao ponto crítico, tomado em  $\varepsilon = 0$

$$\left( \frac{\partial \psi(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon} \right) \Big|_{\varepsilon=0} = \mathcal{F}(0)t^{1/\nu z} \quad (4.22)$$

## 4.6 Simulação

A partir do hamiltoniano (4.1) foi resolvida numericamente, de acordo com o método de Verlet descrito na seção 4.2, as equações de movimento acopladas (4.2) como segue.

### Inicialização da implementação

O sistema foi preparado para um estado completamente ordenado, para isso, o valor inicial do campo para cada sítio da rede foi fixado em  $\phi_i(0) = a$ . O valor  $a$  define o sistema em seu estado fundamental. O valor dos campos que leva o sistema ao estado fundamental, para a configuração inicial de um estado completamente ordenado, é obtido fazendo,

$$\frac{\partial E}{\partial \phi_i} = 0 \quad (4.23)$$

dessa forma o valor dos campos no estado fundamental para a configuração citada é,

$$\phi_i = a = \sqrt{\frac{6m^2}{\lambda_t}} \quad (4.24)$$

Definida a energia para o estado fundamental, fornecemos uma energia cinética capaz de levar o sistema para uma particular energia total desejada, agora a energia total é,

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \dot{\phi}_i^2 + E_F \quad (4.25)$$

onde  $E_F$  é a energia do sistema no estado fundamental, os valores de  $\dot{\phi}_i(0)$  são escolhidos aleatoriamente de  $-\infty$  a  $+\infty$ . Porém para que se possa levar o sistema a uma energia  $E$

conhecida é necessário introduzir um fator de correção  $\alpha$  no termo de energia cinética,

$$E = \alpha \frac{1}{2} \sum_i \dot{\phi}_i^2(0) + E_F, \text{ logo } \alpha = \frac{E - E_F}{\frac{1}{2} \sum_i \dot{\phi}_i^2(0)} \quad (4.26)$$

Feita a primeira parte da inicialização do programa, agora é realizada a inicialização do algoritmo de Verlet. Para a solução da equação (4.5) é necessário conhecer os campos no instante  $-\Delta t$ . Dessa maneira tomamos a equação (4.4) em  $t = 0$  até o termo de segunda ordem e seguimos,

$$\phi_i(-\Delta t) = \phi_i(0) - \dot{\phi}_i(0)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\phi}_i(0)\Delta t^2 \quad (4.27)$$

onde  $\ddot{\phi}_i(0)$  é calculado através da equação (4.2). Agora o sistema evolui e as soluções são armazenadas em vetores. Esse protocolo é repetido várias vezes para diferentes configurações iniciais de  $\phi_i(0)$ , com o objetivo de obter as médias das quantidades de interesse.

As soluções aqui são consideradas para gerar um ensemble microcanônico. Como a temperatura não pode ser introduzida como variável do sistema, ela assume o lugar da energia cinética média. Nessa abordagem a energia total é um parâmetro de controle do sistema, já que é conservada e pode ser introduzida a partir do estado inicial da energia cinética. Dessa maneira,  $\tau$  em (2.2) passa a ser a densidade de energia reduzida  $\varepsilon$  ou como já foi dito a distância ao ponto crítico,

$$\varepsilon = \frac{e - e_c}{e_c} \quad (4.28)$$

$e_c$  é a densidade de energia crítica, que corresponde a uma transição de fase de segunda ordem. Como o parâmetro de ordem do modelo  $\phi^4$  é a magnetização, o primeiro e o segundo momento podem ser calculados numericamente para uma rede quadrada,

$$M^{(k)}(t) = \frac{1}{L^{2k}} \left\langle \left[ \sum_i \phi_i(t) \right]^{(k)} \right\rangle, \quad k = 1, 2 \quad (4.29)$$

O programa foi feito na linguagem de programação C [48] e testado na CPU. Porém, como se trata de um sistema muito grande, do ponto de vista computacional,

os dados foram obtidos em processamentos paralelos na GPU, utilizando a linguagem de programação C CUDA oferecida pela NVIDIA [49]. A conversão entre as linguagem C e C CUDA foi realizada por um programador experiente.

## Resultados e Discussões

O modelo  $\phi^4$  foi estudado em uma rede quadrada dentro do procedimento da dinâmica de tempos curtos, como descrito anteriormente. O modelo foi resolvido numericamente na rede quadrada de tamanho  $L = 1024$ . Algumas simulações foram realizadas com redes de  $L = 256$  para alguns valores de densidade de energia, afim de identificar dependências com o tamanho da estrutura. Nas simulações realizadas não foram encontradas nenhuma evidência dos efeitos de tamanho finito. O passo de tempo utilizado na solução do sistema de equações diferenciais acopladas foi  $\Delta t = 0,05$ , o mesmo passo utilizado em [2]. O erro do algoritmo de Verlet, utilizado para resolver o conjunto de soluções das equações de movimento (4.2), foi estimado na ordem  $10^{-6}$ . As simulações foram realizadas para um número da ordem de oito à dez mil amostras (configurações iniciais distintas das velocidades dos campos) e tomadas as médias dos observáveis desejados, afim de se obter as séries temporais das quantidades de interesse. Para que se possa dar ênfase na exibição do método, não foi utilizado barras de erros nos gráficos, uma vez que os erros estatísticos são muito menores do que o tamanho dos símbolos. Esses erros estatísticos, foram estimados na ordem de  $10^{-5}$  a  $10^{-4}$ .

Primeiramente a análise se refere ao comportamento do parâmetro de ordem do modelo  $\phi^4$ , a magnetização. Esta quantidade é peça chave na análise proposta neste trabalho, uma vez que fornece as condições para que se possa sintonizar o sistema no parâmetro crítico de controle. A figura 5.1, exhibe o decaimento da magnetização em tempos curtos, para diferentes valores de densidade de energia na faixa  $10,800 \leq e \leq 11,200$ . Em cada caso, o sistema é iniciado a partir de um estado completamente ordenado, em uma janela de tempo de 50 à 10000.

O gráfico da evolução temporal de  $M(t)$  na escala logarítmica, está exibido na figura

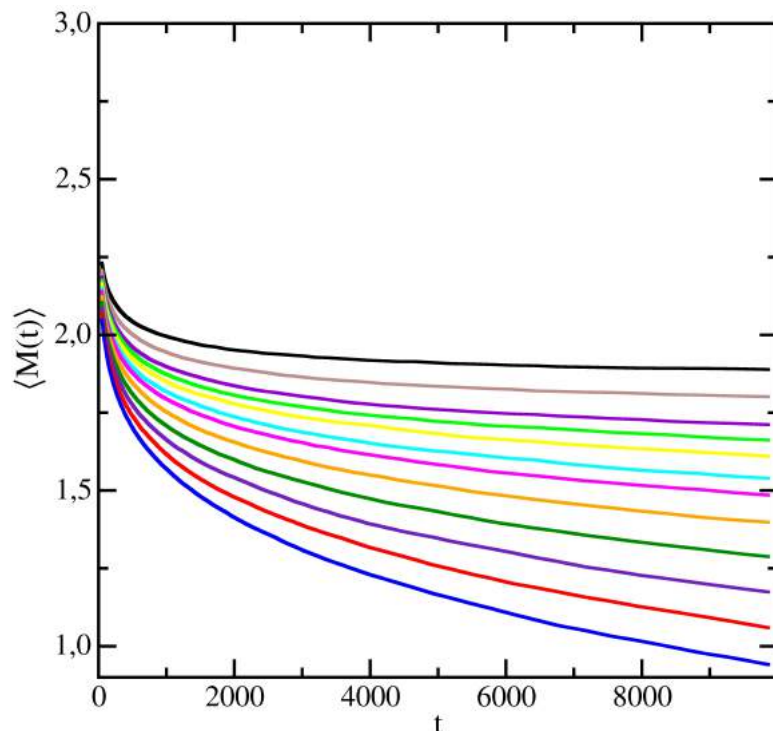


Figura 5.1: Decaimento da magnetização para vários valores da densidade de energia em função do tempo.

5.2, para os mesmos valores da densidade da energia da figura 5.1. Esses valores estão compreendidos entre  $10,800 \leq e \leq 11,200$ . Na figura 5.2 não é possível perceber a curva que representa a melhor lei de potência, como é sugerido em [2]. No entanto, o comportamento da derivada do logaritmo da magnetização com respeito ao logaritmo do tempo, definida na equação (4.21), configura uma melhor estimativa para esse comportamento em lei de potência.

A figura 5.3 exibe o comportamento de  $\psi(\varepsilon, t)$  com a evolução de  $\ln(t)$ . De acordo com [47], no ponto crítico  $\psi(\varepsilon, t)$  assume um valor constante para toda a evolução temporal. E o seu valor exatamente no ponto crítico, determina o valor de  $\beta/\nu z$ . Nesta figura 5.3 é possível eleger através das curvas, uma largura onde está a provável densidade de energia crítica. Os valores observados ficaram no intervalo de  $10,944 \leq e \leq 10,986$ . Para se ter uma melhor visualização a figura 5.3 foi ampliada para uma faixa de densidade de energia representada na figura 5.4. Nesta figura 5.4 é possível perceber que o comportamento de  $\psi(\varepsilon, t)$  é tal, que as curvas se afastam da região central a medida que o módulo de  $\varepsilon$  aumenta ou aproximam-se com a diminuição do módulo de  $\varepsilon$ . Também é observado

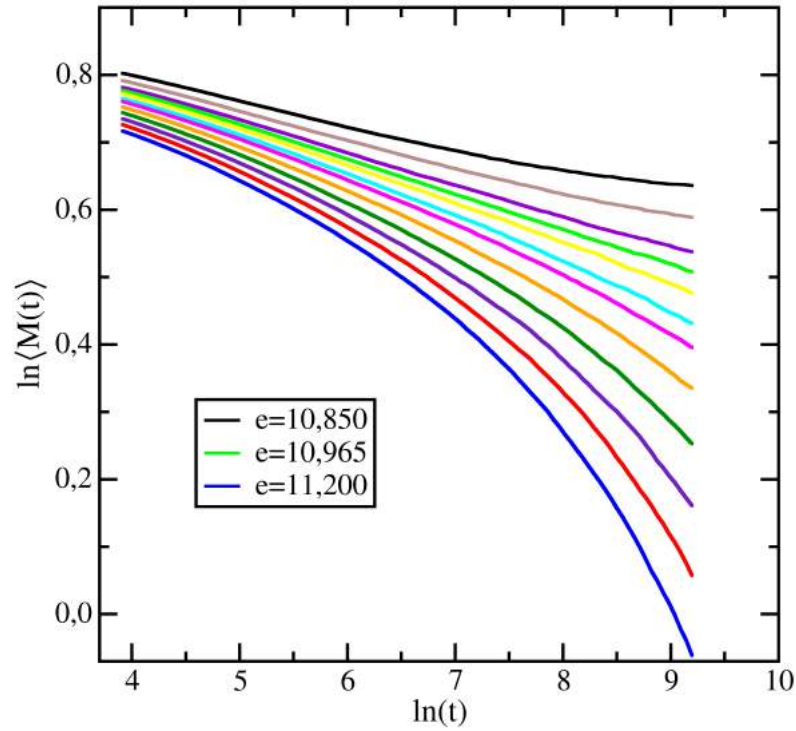


Figura 5.2: Mesmos dados da figura 5.1 mostrados numa escala logarítmica.

que  $\psi(\varepsilon, t)$  crescem monotonamente para  $e \leq 10,944$ , que corresponde que o sistema está na fase ordenada. Já para  $e \geq 10,986$  é evidente que  $\psi(\varepsilon, t)$  diminuem monotonamente, isso indica que o sistema está na fase desordenada. Para uma outra análise das informações da figura 5.3, são feitos cortes com linhas verticais, com cada linha em um instante de tempo distinto. A partir dos pontos obtidos pela intersecção das linhas verticais com as curvas da figura 5.3 foi construído o diagrama da figura 5.5 com os respectivos valores de densidade de energia. Tem-se agora o comportamento de  $\psi(\varepsilon, t)$  em função de  $e$  para valores fixos de  $t$ . Cada curva na figura 5.5 representa um instante  $t$  e a intersecção destas curvas informa o valor crítico  $e_c$ . De acordo com figura 5.5 esse valor foi estimado em  $e_c = 10,955 \pm 0,015$ .

Agora, uma nova análise é realizada utilizando o colapso de dados. A partir das curvas da figura 5.5 foi realizado o colapso dos dados, de acordo com o procedimento descrito da seção 4.4. A lei de escala da equação 4.20 foi utilizada para realizar o colapso e o expoente  $1/\nu z$  foi determinado junto com o valor crítico mais provável para densidade de energia.

A figura 5.6 mostra o erro  $E_r(x)$  em função dos valores de  $1/\nu z$  para alguns valores



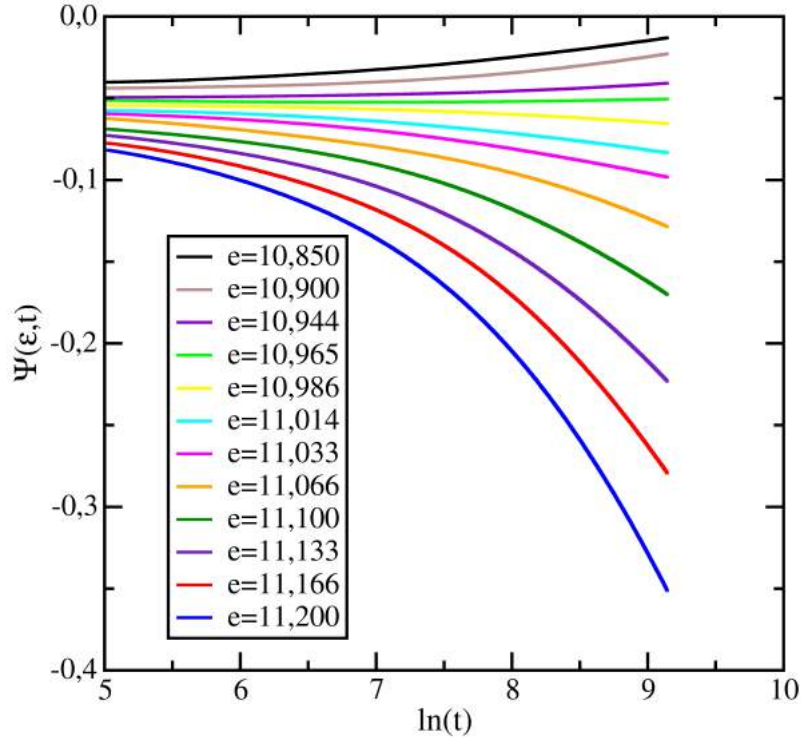


Figura 5.3: Derivada do logaritmo da magnetização em relação a  $\ln(t)$  em função de  $\ln(t)$ , obtida a partir do método descrito na seção 4.3. Os ajustes das derivadas foram obtidos para valores do parâmetro de regularização ( $\lambda$ ) da ordem de  $10^2$ .

da densidade de energia. O resultado que reproduz o menor erro leva a uma densidade de energia crítica  $e_c = 10,964$  e  $1/\nu z = 0,410$ . O valor de  $1/\nu z = 0,410$  foi utilizado para o reescalonamento da distância ao ponto crítico  $\varepsilon$  e a figura 5.7 mostra o colapso das curvas. Na figura 5.7, para  $\varepsilon t^{1/\nu z} = 0$  o expoente  $\beta/\nu z$  é determinado com o valor de  $\psi(t, \varepsilon t^{1/\nu z} = 0)$ . Esse valor foi estimado em  $\beta/\nu z = 0,0510 \pm 0,00035$ . Combinando os resultados obtidos para  $1/\nu z$  e  $\beta/\nu z$ , o valor de  $\beta$  é estimado em  $\beta = 0,124 \pm 0,001$ , que deve ser comparado com o valor exato  $\beta = 0,125$  [3].

Agora, com valor estimado para densidade de energia crítica, foi realizada uma nova simulação para o sistema na  $e_c = 10,964$ . A partir dos dados obtidos na densidade de energia crítica, foi tomada as médias para os observáveis de interesse. A figura 5.8 exhibe o comportamento da magnetização com a evolução temporal em escala logarítmica na densidade de energia crítica e em uma janela de tempo curto de  $200 < t < 500$ . Baseado na equação (4.20), tomado no ponto crítico a inclinação da reta, obtida por regressão linear, na figura 5.8, utilizando a lei de escala (3.17), revela o valor estimado

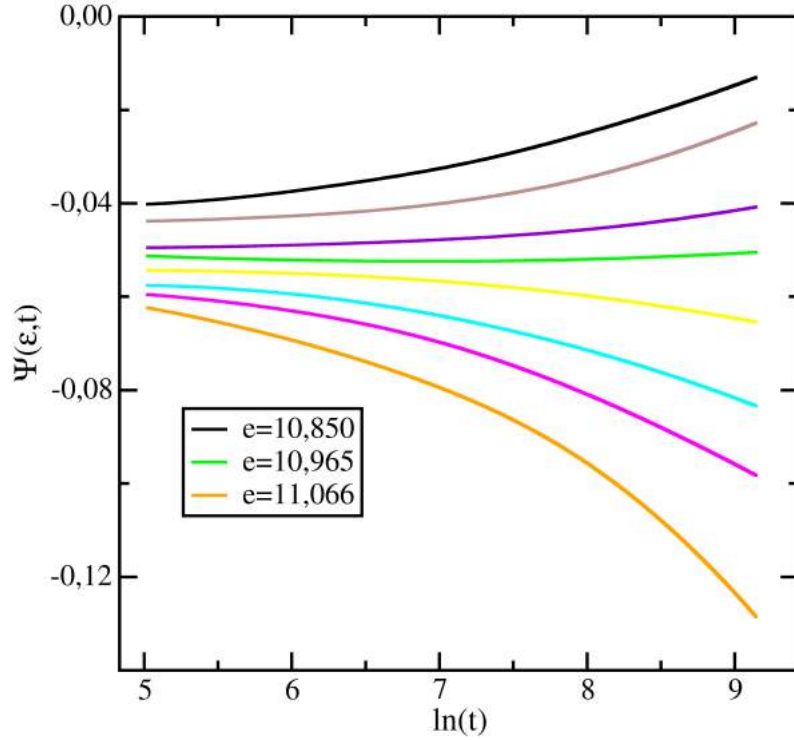


Figura 5.4: Derivada do logaritmo da magnetização em relação a  $\ln(t)$  em função de  $\ln(t)$ , com valores de densidade de energia em uma região mais estreita, em relação aos valores da figura 5.3.

do expoente  $\beta/\nu z = 0,0507 \pm 0,0003$ . De maneira semelhante é mostrado na figura 5.9 o segundo momento da magnetização com a evolução temporal em escala logarítmica e extraído o expoente  $2\beta/\nu z$  no mesmo intervalo de tempo da figura 5.8 e utilizando a equação (3.17), o resultado obtido foi  $2\beta/\nu z = 0,102 \pm 0,002$ .

Seguido a análise do sistema na densidade de energia crítica, foi medido a flutuação do parâmetro de ordem. A figura 5.10 mostra o comportamento da flutuação do parâmetro de ordem no tempo, novamente em escala logarítmica. De acordo com a equação (3.19) foi feita a estimativa do expoente  $(d - 2\beta/\nu)/z = 0,737 \pm 0,002$ . Por fim, é exibido na figura 5.11 o comportamento do segundo cumulante de Binder. Por regressão linear dos dados e utilizando a lei de escala (3.15) é estimado o expoente  $d/z = 0,829 \pm 0,005$ .

As tabelas 5.1 e 5.2, resume todos os valores encontrados dos expoentes críticos discutidos neste trabalho, juntamente com obtidos por Zheng em [2] e valores exatos [3] e aproximados [4] para o modelo de Ising em duas dimensões obtidos a partir de processos seguindo o padrão Monte Carlo de simulação.

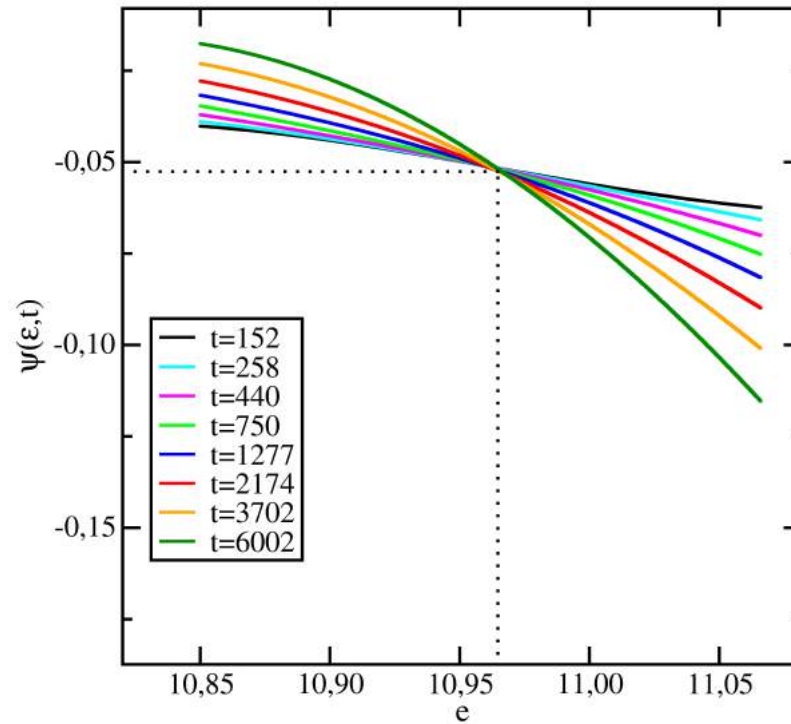


Figura 5.5: Diagrama da derivada do logaritmo da magnetização em relação a  $\ln(t)$  ( $\psi(\varepsilon, t)$ ) em função da densidade de energia  $e$ .

Tabela 5.1: Expoentes críticos obtidos nesta trabalho utilizando o modelo  $\phi^4$  a partir de um estado inicial completamente ordenado em uma rede quadrada 1024x1024, em comparação com resultados obtidos para uma rede quadrada 256x256 com o mesmo modelo partindo de um estado inicial quase desordenado em [2].

	$1/\nu z$	$\gamma/z$	$\nu$	$z$	$2\beta/\nu z$
$\phi^4$	0,410	$0,737 \pm 0,002$	$1,011 \pm 0,006$	$2,412 \pm 0,015$	$0,102 \pm 0,002$
$\phi^4$ [2]	0,492	0,819	0,95	2,148	0,112

Tabela 5.2: Resumo dos expoentes críticos obtidos para o modelo  $\phi^4$  neste trabalho e os resultados obtidos para o modelo de Ising exato [3] e aproximado em [4].

	$\nu$	$\beta$	$\gamma$	$z$
$\phi^4$	$1,011 \pm 0,006$	$0,124 \pm 0,001$	$1,77 \pm 0,02$	$2,412 \pm 0,015$
Ising	1	0,125	1,75	2,140

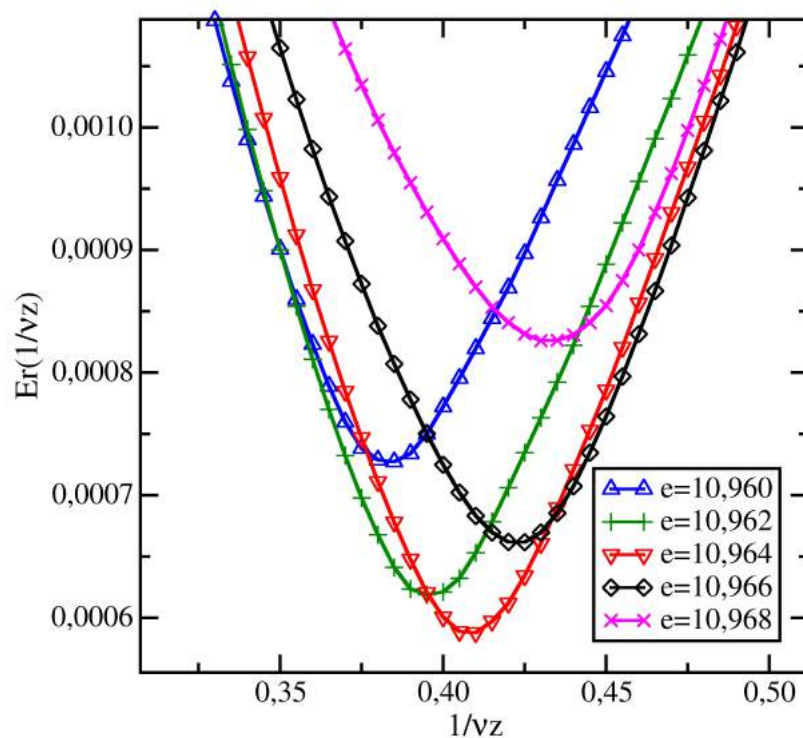


Figura 5.6: Erro no cálculo do colapso dos dados  $E_r(1/\nu z)$  em função de  $1/\nu z$  para alguns valores da densidade de energia. Os valores do erro, em cada densidade de energia, foram obtidos utilizando o método descrito na seção 4.4 com o conjunto de dados da figura 5.5.

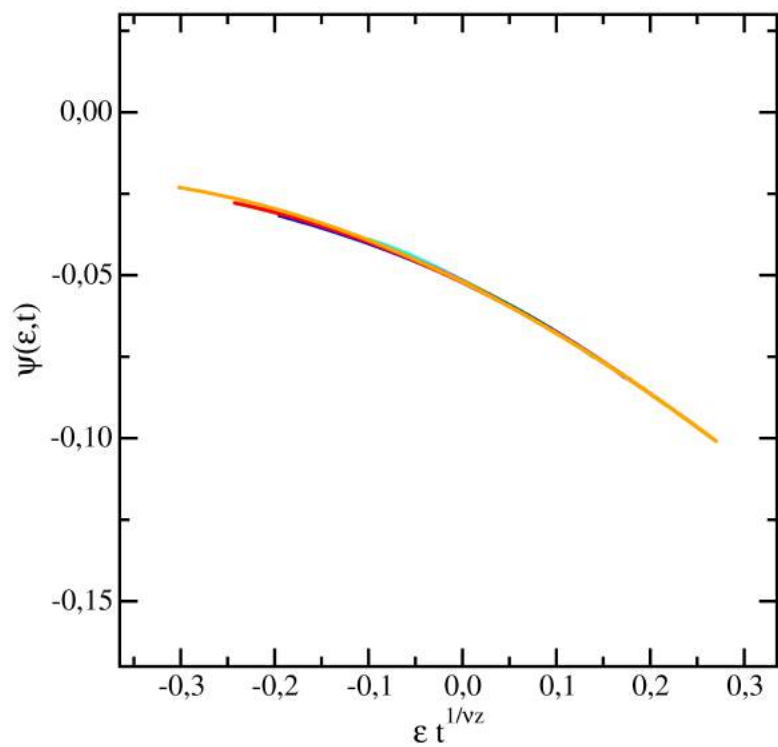


Figura 5.7: Colapso das curvas com reescalonamento de  $\epsilon t^{1/\nu z}$ .

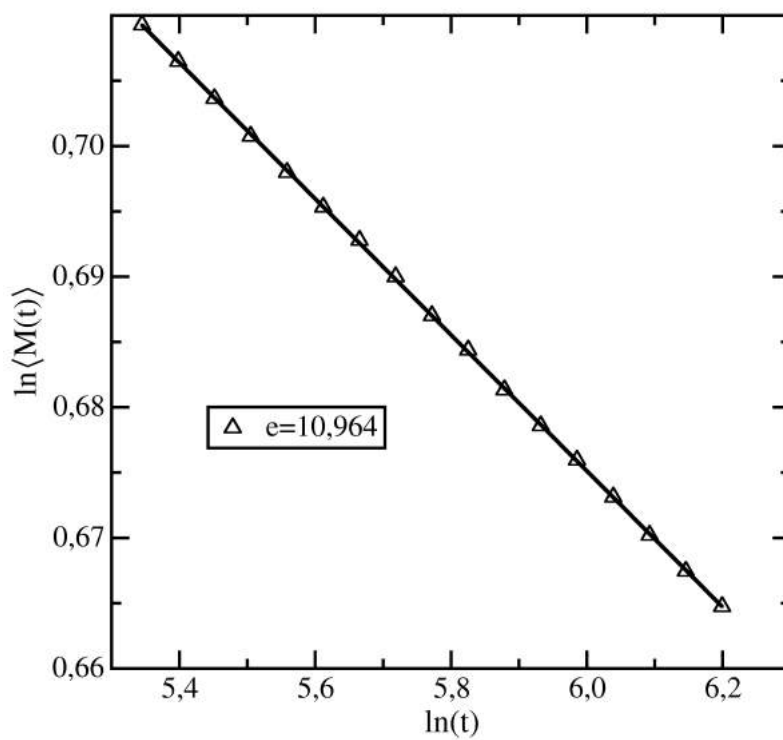


Figura 5.8: Decaimento crítico da magnetização em função do tempo em escala log-log.

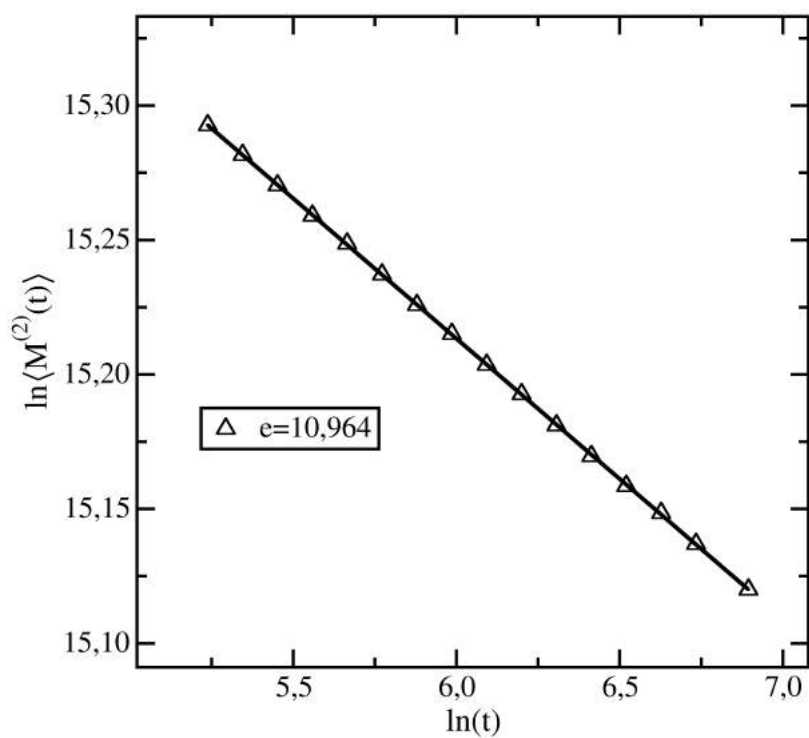


Figura 5.9: Segundo momento da magnetização em relação ao tempo na escala log-log.

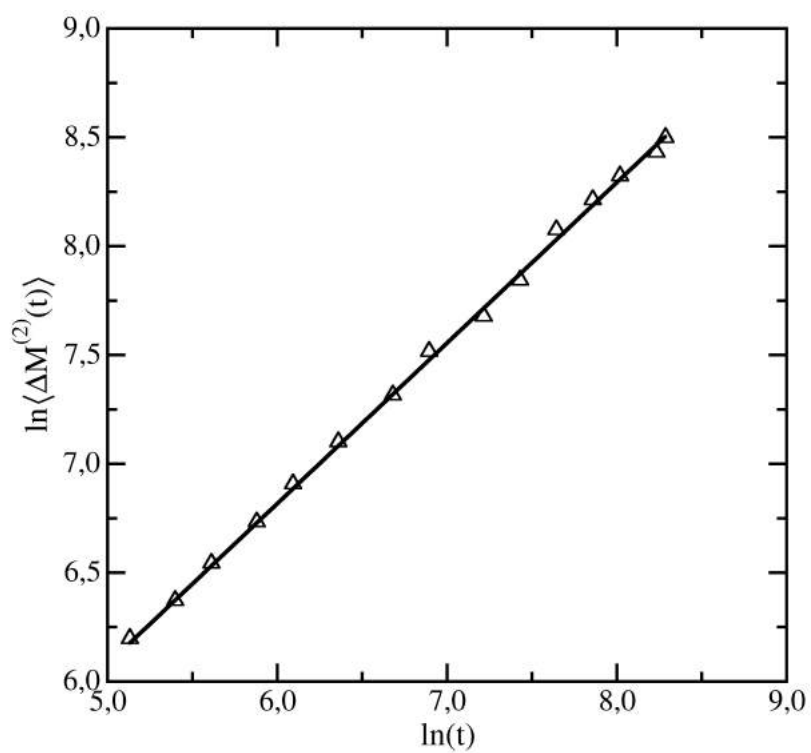


Figura 5.10: Evolução temporal da flutuação da magnetização em escala log-log.

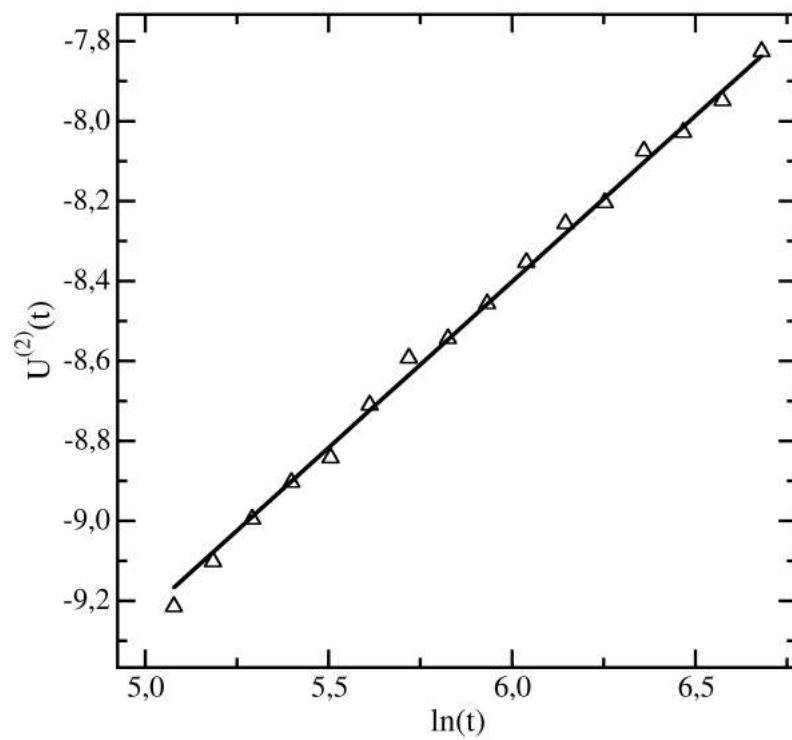


Figura 5.11: Segundo cumulante de Binder em função do tempo na escala log-log.

## Considerações finais

Neste trabalho foi estudado o comportamento do modelo  $\phi^4$  discretizado na rede quadrada. A análise teve como um dos objetivos encontrar a densidade de energia crítica, onde ocorre uma transição de fase de segunda ordem, com uma maior precisão. Como esperado, os resultados possibilitaram encontrar os expoentes críticos estáticos e o expoente dinâmico  $z$ . A forma sistemática e precisa para encontrar o ponto crítico, revelou consistência nos resultados. Por ser  $\phi^4$  um modelo clássico, com dinâmica própria, em princípio era de se esperar resultados diferentes comparados a modelos com dinâmica estocástica. No entanto, os resultados são comparáveis com aqueles obtidos em dinâmicas estocásticas em modelos com a mesma classe de universalidade. O valor da densidade de energia crítica foi estimado com uma precisão de 1% em relação ao resultado obtido em [2]. Esses fatos fortalecem e evidenciam a aplicação do método proposto em [47]. Embora os resultados foram satisfatórios, em relação a modelos com mesma classe de universalidade, o expoente  $z$  apresentou um aumento em seu valor, em relação ao trabalho anterior com o mesmo modelo [2], que partiu de um estado inicial desordenado. É possível atribuir esse aumento do expoente  $z$  ao vínculo microcanônico de conservação da energia, intrínscio do modelo  $\phi^4$ . Embora os resultados dos expoentes estáticos, para o modelo  $\phi^4$ , mostram uma mesma classe de universalidade em relação ao modelo de Ising, em [36] fica claro a dependência do expoente dinâmico  $z$  com a estatística dinâmica do modelo estudado. Desta maneira podemos confirmar, através dos resultados, as hipóteses levantadas em [2], que a teoria  $\phi^4$  descrita pelas equações determinísticas de movimento estão em uma mesma estatística, assim como classe de universalidade, do modelo de Ising com norma dinâmica Monte Carlo. Para uma melhor análise do modelo  $\phi^4$ , podemos sugerir a realização de novas simulações com os mesmos tamanhos de redes e parâmetros



deste trabalho partindo de um estado desordenado, a fim de verificar o comportamento do expoente dinâmico  $z$ .

## Referências Bibliográficas

- [1] João Paulo Casquilho and Paulo Ivo Cortez Teixeira. *Introdução à Física Estatística*. 2012.
- [2] B. Zheng, M. Schulz, and S. Trimper. Deterministic Equations of Motion and Dynamic Critical Phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1891–1894, Mar 1999.
- [3] L. Onsager. *Phys. Rev.*, 65:1117, 1944.
- [4] L. F. D. A. Silva, U.L Fulco, and F.D Nobre. The two-dimensional site-diluted ising model: a short-time-dynamics approach. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(34):346005, 2009.
- [5] Rodrick Wallace. Dynamic statistical models of biological cognition: insights from communications theory. *Connection Science*, 26(4):415–439, 2014.
- [6] Y-Y Chen, Y-Z Jiang, X-W Guan, and Qi Zhou. Critical behaviours of contact near phase transitions. *Nature communications*, 5, 2014.
- [7] Za. Mohamed, E. Tka, J. Dhahri, and E.K. Hlil. Short-range ferromagnetic order in  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.16}\text{Ca}_{0.17}\text{MnO}_3$  perovskite manganite. *Journal of Alloys and Compounds*, 619(0):520 – 526, 2015.
- [8] Herch Moyses Nussenzveig and Jacob Palis Júnior. *Complexidade e caos*. Editora UFRJ/COPEA, 1999.
- [9] Linda E Reichl and Ilya Prigogine. *A modern course in statistical physics*, volume 186. University of Texas press Austin, 1980.

- [10] A Asad and B Zheng. Non-equilibrium critical dynamics of the two-dimensional xy model with hamiltonian equations of motion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(33):9957, 2007.
- [11] J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper. Critical behavior of the two-dimensional random-bond Potts model: A short-time dynamic approach. *Phys. Rev. E*, 70:056134, Nov 2004.
- [12] Enrico Fermi, J Pasta, and S Ulam. *Studies of nonlinear problems*. 1955.
- [13] Fernando Pigead de Almeida Prado. *Fenômenos críticos em sistemas de partículas interagentes e suas aplicações na modelagem de mercados financeiros*. PhD thesis, Universidade de São Paulo (USP). Instituto de Matemática e Estatística, 2004.
- [14] Lei Xiao-Wei Zhao Xiao-Yu. The dynamic exponent of two-dimensional fully frustrated xy model [j]. *Acta Physica Sinica*, 8:080, 2009.
- [15] Sílvio Roberto Salinas. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. Edusp, 1997.
- [16] Mário José de Oliveira. *Termodinâmica*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [17] A Asad and B Zheng. Non-equilibrium critical dynamics of the two-dimensional xy model with hamiltonian equations of motion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(33):9957, 2007.
- [18] RH Dong, B Zheng, and NJ Zhou. Hamiltonian equation of motion and depinning phase transition in two-dimensional magnets. *arXiv preprint arXiv:1209.0513*, 2012.
- [19] A Asad and B Zheng. Non-equilibrium critical dynamics of the two-dimensional xy model with hamiltonian equations of motion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(33):9957, 2007.
- [20] B Zheng. Monte carlo simulations and numerical solutions of short-time critical dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 283(1):80–85, 2000.
- [21] RH Dong, B Zheng, and NJ Zhou. Hamiltonian equation of motion and depinning phase transition in two-dimensional magnets. *arXiv preprint arXiv:1209.0513*, 2012.

- [22] Barry M McCoy and Tai Tsun Wu. *The two-dimensional Ising model*. Courier Corporation, 2014.
- [23] J. D. Van der Walls. Sobre a continuidade do estado líquido e gasoso. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 1873.
- [24] Johannes Diderik Waals. *Over de continuïteit van den gas-en vloeïstoestand*. AW Sijthoff, 1873.
- [25] Rodney J Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Courier Dover Publications, 2007.
- [26] P. Weiss. Radium. *J. Phys*, 4:661, 1907.
- [27] L. P. Kadanoff. *Phys. Rev. Lett.*, 18:1113, 1967.
- [28] H Eugene Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, 71(2):S358, 1999.
- [29] John Cardy. *Scaling and renormalization in statistical physics*, volume 5. Cambridge University Press, 1996.
- [30] H. E. Stanley. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, Oxford University Press, 1971.
- [31] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. Newman. *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. Oxford University Press, Inc., 1992.
- [32] Benoit B Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*, volume 173. Macmillan, 1983.
- [33] Sílvio R Dahmen. Boltzmann's work in physics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 28(3):281–295, 2006.
- [34] David A Huse. Remanent magnetization decay at the spin-glass critical point: A new dynamic critical exponent for nonequilibrium autocorrelations. *Physical Review B*, 40(1):304, 1989.

- [35] H.K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 73(4):539–549.
- [36] E V Albano, M A Bab, G Baglietto, R A Borzi, T S Grigera, E S Loscar, D E Rodriguez, M L Rubio Puzzo, and G P Saracco. Study of phase transitions from short-time non-equilibrium behaviour. *Reports on Progress in Physics*, 74(2):026501, 2011.
- [37] David P Landau and Kurt Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2009.
- [38] M. Leticia Rubio Puzzo and Ezequiel V. Albano. Short-time critical dynamics of damage spreading in the two-dimensional ising model. *Phys. Rev. E*, 81:051116, May 2010.
- [39] Wanderson G. Wanzeller, Tereza Mendes, and Gastão Krein. Short-time dynamics of percolation observables. *Phys. Rev. E*, 74:051123, Nov 2006.
- [40] Marcos Nascimento Magalhães. *Probabilidade e variáveis aleatórias*. Edusp, 2011.
- [41] Jerry B. Marion and Stephen T. Thornton. *Classical dynamics of particles and systems*. Brooks/Cole Cengage Learning, 2003.
- [42] Loup Verlet. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Phys. Rev.*, 159:98–103, Jul 1967.
- [43] D.C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulations*. Cambridge University Press, 1997.
- [44] A. S. Lubansky, Y. Leong Yeow, Yee-Kwong Leong, S. Ranil Wickramasinghe, and Binbing Han. A general method of computing the derivative of experimental data. *AIChE journal*, 52(1):323–332, 2006.
- [45] Somendra M Bhattacharjee and Flavio Seno. A measure of data collapse for scaling. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(33):6375, 2001.
- [46] H. Eugene Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S358–S366, Mar 1999.

[47] L. C. de Souza e A. J. F. de Souza K. P. do Nascimento. *Submetido*, 2014.

[48] Herbert Schildt and Roberto Carlos Mayer. *C completo e total*. 2006.

[49] CUDA Nvidia. Programming guide, 2008.