



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Departamento de Física

Pós-graduação em Física Aplicada

**GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE REDES  
DE TENSORES APLICADOS A SISTEMAS  
DE SPINS CLÁSSICOS**

Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Recife  
14 de novembro de 2014

Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Departamento de Física

Adson Felipe Melo Rodrigues da Silva

**GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE REDES DE TENSORES  
APLICADOS A SISTEMAS DE SPINS CLÁSSICOS**

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

Orientador: *Prof. Dr. Aduino Ferreira Souza*

Recife  
14 de novembro de 2014

*À Minha Família*

## AGRADECIMENTOS

Ao meu grande e poderoso Deus. Sem ele nada disso seria possível.

A toda minha família, principalmente a meus pais Jose Nauci e Katia Cristina, pelo amor, carinho, e apoio durante todo o sempre. Aos meus irmãos, Adriano Regis, Anderson Rodrigues e Alessandra Cristina. Em especial ao meu irmão Adriano regis, obrigado mano por toda ajuda, atenção e incentivo. A minha querida e sempre linda avó Euridice Eleuteria, e aos meus amados avós, Jose Carneiro, Rosalia Rodrigues e Herlon da Silva. Levo todos vocês em meu coração.

Ao professor Aduino, por toda atenção, dedicação e paciência. Tenha certeza que seus ensinamentos foram fundamentais para meu crescimento como pessoa e profissional. Muito Obrigado!

A minha namorada e futura esposa Talita Alencar por todo amor e carinho. Obrigado meu amor por tudo, principalmente pela dedicação e por sua grande paciência nesses últimos meses.

Aos five Physics, Daniel, Maelyson Rolim, Mário Jorge e Milton por fazerem parte dessa história. Tenho todos vocês como irmãos. Aos amigos da Federal e Rural que eu fiz ao longo de toda jornada de graduação e mestrado, em especial a Marília Santos por segurar a barra nesse início de doutorado.

A meus queridos padrinhos Edmilson Bezerra e Eliane Gomes. Agradeço muito a Deus por vocês fazerem parte da minha vida.

A Capes, pelo apoio financeiro, que foi sem dúvida de fundamental importância.

*“Tá tudo na mente! Se é que você me entende  
Tá tudo na mente! Quem sabe sabe, quem não sabe aprende  
Tá tudo na mente! E o que tá nela ninguém tira da gente  
Tá tudo na mente.”*

—GABRIEL O PENSADOR

## RESUMO

Nós estudamos as propriedades termodinâmicas do Modelos Potts  $q$ -estados bidimensionais, usando o método do grupo de renormalização por redes de tensores com base na decomposição em valores singulares de alta ordem. Este método pode avaliar as quantidades térmicas no limite rede quase infinita e não tem os erros inerentes à extrapolação dos cálculos de tamanho finito. Nós avaliamos a dependência com a temperatura da energia interna e outras grandezas termodinâmicas. Introduzimos um procedimento de reescalonamento no processo de cálculo. O factor de escala parece divergir em uma temperatura muito próxima da crítica. O caso  $q = 2$  corresponde ao modelo de Ising a que exista uma solução exacta. Nós fomos capazes de obter alguns índices críticos do modelo de Ising bidimensional ajustando as quantidades termodinâmicas perto do ponto crítico. Nossos resultados se comparam bem com os bem conhecidos para o modelo de Ising.

**Palavras-chave:** Grupo de renormalização, Grupo de renormalização por rede de tensores, modelo de Ising, modelo de Potts.

## ABSTRACT

We study the thermodynamic properties of two-dimensional  $q$ -states Potts models using the tensor renormalization group method based on the higher-order singular value decomposition. This method can evaluate the thermal quantities in the nearly infinite lattice limit and does not have the errors inherent in extrapolations from finite size calculations. We have evaluated the dependence with temperature of the internal energy and other thermodynamic quantities. We introduced a re-scaling procedure in the calculation process. The scaling factor seems to diverge in a temperature very close to the critical one. The case  $q = 2$  corresponds to the Ising model to which an exact solution does exist. We were able to obtain some critical indices of the two-dimensional Ising model by fitting the thermodynamic quantities near the critical point. Our results compare well with those well-known for the Ising model.

**Keywords:** Renormalization group, Renormalization of tensor-network states, Ising model, Potts model.

# SUMÁRIO

|  |    |
|--|----|
| <b>Capítulo 1—Introdução</b>   | 1  |
| 1.1 Decomposição de Matrizes e Tensores . . . . .                              | 1  |
| 1.1.1 Teorema da Decomposição em Valores Singulares . . . . .                  | 2  |
| 1.1.2 Decomposição em Valores Singulares de Alta Ordem . . . . .               | 5  |
| 1.2 Modelo de Ising . . . . .  | 7  |
| 1.3 Modelo de Potts . . . . .  | 11 |
| 1.4 Grupo de Renormalização . . . . .  | 13 |
| 1.5 Grupo de Renormalização de Redes de Tensores . . . . .                     | 16 |
| <b>Capítulo 2—Fundamentos</b>  | 20 |
| 2.1 Representação como Rede de Tensores . . . . .                              | 20 |
| 2.1.1 Representação na rede dual . . . . .                                     | 20 |
| 2.1.2 Representação na rede original . . . . .                                 | 23 |
| 2.2 Renormalização de Redes de tensores para Sistemas Bidimensionais . . . . . | 25 |
| <b>Capítulo 3—Aplicações</b>   | 31 |
| 3.1 Modelo de Ising . . . . .  | 31 |
| 3.1.1 Resultados e Discussão do Modelo de Ising . . . . .                      | 37 |
| 3.2 Modelo de Potts . . . . .  | 46 |
| 3.2.1 Resultados e Discussão do Modelo de Potts . . . . .                      | 47 |
| <b>Capítulo 4—Conclusões</b>   | 55 |



## LISTA DE FIGURAS

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | Representação esquemática de uma rede de tensores, bem como sua representação algébrica. Onde cada sítio da rede quadrada representa um tensor. . . . .   | 6  |
| 1.2 | Representação gráfica de dois tensores de uma rede sendo contraídos no sentido vertical ( <i>a</i> ) e logo em seguida decomposto numa HOSVD ( <i>b</i> ). . .  | 7  |
| 1.3 | Ilustração de um sistema de spins do tipo Ising numa rede quadrada. Em geral, os íons magnéticos podem formar domínios de vários tamanhos, ou seja, conjunto de spins vizinhos com o mesmo sinal (domínios negativos estão delimitados por linhas pontilhadas). Tais domínios possuem um papel importante na análise da criticalidade e comportamento de escala do sistema. . . . . | 8  |
| 1.4 | representação do plano bidimensional contendo alguns dos $q$ vetores proposto por Domb . . . . .  | 11 |
| 1.5 | representação dos $q$ vetores no espaço de estado $d$ -dimensional . . . . .  | 12 |
| 1.6 | Orientação dos spins no modelo de Potts, na rede quadrada, com $N$ spins para o caso particular $q=3$ . A figura (I) representa uma configuração da fase desordenada, ou paramagnética. A figura (II) representa a configuração da fase ferromagnética. . . . .   | 12 |
| 1.7 | Processo de renormalização da rede quadrada, onde em cada etapa da renormalização temos um bloco com quatro spins dando lugar ao único spin. 15   | 15 |
| 2.1 | Representação esquemática de uma rede de tensores definida pela equação 2.9, onde as linhas pontilhadas representam a substituição dos triângulos, formada pelos spins em sua rede triangular, pelos tensores em sua rede dual. 22  | 22 |
| 2.2 | Representação esquemática de uma rede de tensores sobre uma rede quadrada. . . . .  | 23 |
| 2.3 | Renormalização de uma rede $4 \times 4$ (uma contrações do tensor no sentido vertical ( <i>a</i> ), seguida de uma na horizontal ( <i>b</i> )). . . . .   | 26 |
| 2.4 | Representação gráfica do tensor em cada sítio. . . . .  | 27 |
| 2.5 | (a) Contração HOTRG do estado rede de tensores ao longo do eixo $y$ da rede quadrada. (b) Passos de contração e renormalização de dois tensores locais. . . . .   | 28 |
| 3.1 | Uma rede de tensores $2 \times 2$ enumerada, bem como seus índices nas ligações, como forma de explicar a periodicidade de suas ligações. . . . .   | 34 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.2  | Gráfico dos fatores de escala na convergência do sistema em função da temperatura para o modelo de Ising. Onde se percebe um salto no gráfico próximo a $T_c$ . . . . .  | 38 |
| 3.3  | Fatores de escala do modelo de Ising, na convergência, em função da temperatura. Onde se determinou a temperatura crítica pelo método HOTRG, e se fez uma comparação com seu valor exato. . . . .  | 38 |
| 3.4  | Comportamento da Energia Livre de Helmholtz do Modelo de Ising usando o método HOTRG. . . . .  | 39 |
| 3.5  | Comportamento da Energia Interna do Modelo de Ising usando o método HOTRG. . . . .   | 40 |
| 3.6  | Comportamento do Calor Específico do Modelo de Ising usando o método HOTRG. . . . .  | 40 |
| 3.7  | Comportamento da Magnetização em função do campo magnéticos para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. Em $h = 0$ , para baixas temperaturas, nota-se o aparecimento de uma magnetização espontânea. . . . .                            | 41 |
| 3.8  | Comportamento da magnetização em função da temperatura do modelo de Ising ( $h = 0$ ). Indicando uma queda abrupta a medida que se aproxima da temperatura crítica e sua magnetização espontânea tendendo a 1 a medida que a temperatura diminui. . . . .                | 42 |
| 3.10 | Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. . . . .  | 42 |
| 3.9  | Gráfico $\log_{10} m$ versus $\log_{10}(1 - T/T_c)$ . Onde se obteve, através do coeficiente angular da curva linearizada, o expoente crítico $\beta$ para o Modelo de Ising usando o método HOTRG e que se fez uma comparação com seu valor teórico. . . . .            | 43 |
| 3.11 | Comportamento da susceptibilidade em função da temperatura do modelo de Ising ( $h = 0$ ). Indicando que a susceptibilidade vai a zero para temperaturas muito altas e que seu valor cresce muito a medida que a temperatura se aproxima da temperatura crítica. . . . . | 44 |
| 3.12 | Gráfico $\log_{10} \chi$ versus $\log_{10}( 1 - T/T_c )$ . Onde se obteve, através do coeficiente angular da curva linearizada, o expoente crítico $\gamma$ para o Modelo de Ising usando o método HOTRG e que se fez uma comparação com seu valor teórico. . . . .      | 45 |
| 3.13 | Comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Ising variando a dimensão de corte $D_c$ . . . . .  | 46 |
| 3.14 | Determinação da temperatura crítica $T_c$ usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts $q = 3$ . . . . .  | 48 |
| 3.15 | Energia Interna do Modelo de Potts $q = 3$ usando o método HOTRG. . . . .  | 48 |
| 3.16 | Calor Específico do Modelo de Potts $q = 3$ usando o método HOTRG. . . . .   | 49 |
| 3.17 | Comportamento da Magnetização em função do campo magnético para o modelo de Potts com $q = 3$ para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. . . . .  | 50 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.18 | Expoente crítico $\beta$ do Modelo de Potts $q = 3$ usando o método HOTRG. Expoente obtido através da inclinação da reta linearizada. . . . .  | 50 |
| 3.19 | Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para o modelo de Potts com $q = 3$ para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. . . . . | 51 |
| 3.20 | Expoente crítico $\gamma$ do Modelo de Potts $q = 3$ usando o método HOTRG. Expoente obtido através da inclinação da reta lineariza. . . . .   | 51 |
| 3.21 | Determinação da temperatura crítica $T_c$ usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts $q = 4$ . . . . .                                      | 52 |
| 3.22 | Determinação da temperatura de transição de fase $T_f$ usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts $q = 5$ . . . . .                         | 53 |
| 3.23 | Comportamento da Magnetização em função do campo magnético para o modelo de Potts com $q = 5$ para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. . . . .      | 54 |
| 3.24 | Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para o modelo de Potts com $q = 5$ para alguns valores de $\beta$ ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. . . . . | 54 |

## LISTA DE TABELAS

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | Definição de alguns expoentes críticos. . . . .   | 10 |
| 3.1 | Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Ising exato e usando o método HOTRG (2D). . . . .                                       | 45 |
| 3.2 | Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Potts ( $q = 3$ ) exatos e usando o método HOTRG (2D). . . . .                          | 52 |
| 3.3 | Comparação entre as temperaturas de transição de fase do método HOTRG e Teóricos para os modelo de Ising e Potts ( $q = 3, 4, 5$ ). . . . . | 53 |

Em Mecânica Estatística, a teoria de fenômenos críticos (que trata das propriedades de sistemas físicos próximos à transição de fase) sofreu um grande avanço, iniciado na década de sessenta, com o advento de experimentos mais precisos [1] na vizinhança da criticalidade (ponto onde ocorre a transição de fase). A partir de observações experimentais e das teorias clássicas observou-se que várias grandezas termodinâmicas como calor específico, susceptibilidade magnética, etc., apresentam um comportamento bem peculiar nesta região, o qual pode ser caracterizado por uma coleção de expoentes críticos muito bem definidos, independentes da natureza física da transição. O conjunto de fenômenos que podem ser caracterizados pelos mesmos expoentes críticos, dizemos que pertencem à mesma classe de universalidade.

A dissertação foi organizada com o seguinte roteiro: teremos uma breve introdução sobre os modelos estudados em questão (modelo de Ising e Potts), bem como o método utilizado para tal estudo. O capítulo 2 foi dividido em duas seções: A primeira seção corresponde aos tipos de representação dos chamados rede de tensores. Já na segunda seção veremos os fundamentos do método utilizado [2, 3], que se baseia nas ideias do grupo de renormalização [4], aplicado ao modelo de Ising ( $h = 0$ ), como forma de melhor exemplificar o método. Logo em seguida, no capítulo 3, iremos aplicar nosso método aos modelos de Ising, nesse momento na presença de um campo magnético, e ao modelo de Potts. Por fim, nas conclusões, faremos uma análise sobre o método, em comparação aos resultados já conhecidos na literatura sobre os modelos em questão. Falaremos de algumas eventuais limitações do método, bem como o tempo computacional de obtenção de alguns resultados.

### 1.1 DECOMPOSIÇÃO DE MATRIZES E TENSORES

Em Álgebra Linear, a decomposição em valores singulares (singular value decomposition), abreviado como SVD, é a fatoração de uma matriz.

Em 1924 através da fatoração de Takagi [5] podemos sempre fatorar uma matriz simétrica  $W$  na forma  $W = U\Lambda U^T$ , onde  $U$  é uma matriz unitária,  $\Lambda$  é uma matriz diagonal e  $U^T$  é a transposta de  $U$ . A SVD foi estabelecida para matrizes reais quadradas em 1970 por Beltrami e Jordan, e para matrizes retangulares quaisquer por Eckart e Young (1939) [6]. Essa decomposição é utilizada em álgebra linear em um grande número de aplicações, tais como: cálculo de soluções de equações homogêneas, cálculo de pseudo-inversa, soluções de norma mínima, generalização do problema de mínimos quadrados e etc. Além de várias aplicações em outras áreas, como por exemplo em geofísica, na identificação de refletores sísmicos [7], na separação de onda ascendentes e descendentes em perfis sísmicos verticais [8], na estimativa da direção de polarização do sinal de ruído

[9], e na área de física, com um artigo bem recente de 2014 [10], onde nele se compara a conceituação e prática de métodos do grupo de renormalização de espaço real [4] com a conceituação das transformações espaciais reais mais recentes baseados em rede de tensores [2].

Iremos aplicar o método SVD, bem como uma generalização de alta ordem desse método (HOSVD) [11], em mecânica estatística. Mais precisamente em problemas de renormalização de estados de uma rede de tensores, no qual nosso trabalho se baseia.

### 1.1.1 Teorema da Decomposição em Valores Singulares

Formalmente, a decomposição em valores singulares de uma matriz qualquer  $M$  de tamanho  $m \times n$ , real ou complexa, é uma fatoração na forma:

$$M = U\Lambda V^\dagger \quad (1.1)$$

onde  $U$  é uma matriz unitária  $m \times m$ ,  $\Lambda$  é uma matriz retangular diagonal  $m \times n$  com números reais não-negativos na diagonal, e  $V$  é uma matriz unitária  $n \times n$ .  $V^\dagger$  é a matriz hermitiana conjugada. Os elementos da diagonal  $\Lambda_{ii}$  de  $\Lambda$  são os chamados valores singulares de  $M$ .

#### TEOREMA DA DECOMPOSIÇÃO EM VALORES SINGULARES

Seja  $M$  uma matriz  $m \times n$  de posto  $r$ , então existem números reais  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ , uma matriz ortogonal  $U$   $m \times m$ ,  $U = [u_1, u_2, \dots, u_m]$  e uma matriz ortogonal  $V$   $n \times n$ ,  $V = [v_1, v_2, \dots, v_n]$ , onde  $u$  e  $v$  são vetores colunas, tais que são válidas as seguintes relações:

$$\begin{cases} \Lambda = U^* M V \\ M = U \Lambda V^* \end{cases} \quad (1.2)$$

Além disso,  $\{u_1, u_2, \dots, u_m\}$  formam uma base ortonormal de  $\mathbb{R}^m$  e  $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  formam uma base ortonormal de  $\mathbb{R}^n$  tais que:

1.  $Mv_i = \sigma_i u_i$  para  $i = 1, \dots, r$  e  $Mv_i = 0$  para  $i = r + 1, \dots, n$
2.  $M^T u_i = \sigma_i v_i$  para  $i = 1, \dots, r$  e  $M^T u_i = 0$  para  $i = r + 1, \dots, m$

Os vetores  $v_1, \dots, v_n$  são autovetores de  $M^T M$ , e  $u_1, \dots, u_m$  são autovetores de  $M M^T$ .  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_r^2$  são os autovalores não nulos de  $M^T M$  e  $M M^T$ . Em outras palavras, os valores singulares de  $M$  são as raízes quadradas dos autovalores não nulos de  $M^T M$  e  $M M^T$ . Podemos encontrar a demonstração desse teorema em [12].

Notações:

1. Os números  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$  são chamados valores singulares de  $A$ .
2. Os vetores  $v_1, \dots, v_n$  são chamados vetores singulares à direita de  $M$  e  $u_1, \dots, u_n$  são chamados vetores singulares à esquerda de  $M$ .

Considere, como efeito de ilustração, o seguinte exemplo de uma SVD (Escolhemos este exemplo em particular por se tratar de um exemplo no qual iremos precisar de sua decomposição mais adiante). Sendo assim, seja  $W$  uma matriz dada por:

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

com  $\beta, J \in \mathbb{R}$ .

Para encontrar os valores singulares ( $\sigma_i$ ) de  $W$ , precisamos determinar os autovalores da matriz  $W^T W$  ou  $W W^T$ , pois se sabe, pelo teorema da decomposição visto anteriormente, que os esses valores singulares são raízes quadradas dos autovalores não nulos dessa matriz.

Assim, os autovalores são as raízes da equação:

$$\det(W^T W - \lambda I) = 0$$

Pela equação 1.3, temos que:

$$W^T W = \begin{pmatrix} e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} & 2 \\ 2 & e^{2\beta J} + e^{-2\beta J} \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

e portanto, os autovalores são:

$$\begin{cases} \lambda_1 = 2[\cosh(2\beta J) - 1] = 4 \cosh^2(\beta J) \\ \lambda_2 = 2[\cosh(2\beta J) + 1] = 4 \sinh^2(\beta J). \end{cases} \quad (1.5)$$

Daí, os valores singulares de  $W$  são:

$$\begin{cases} \sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = 2 \cosh(\beta J) \\ \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = 2 \sinh(\beta J). \end{cases} \quad (1.6)$$

Ou seja,

$$\lambda = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Como  $V = [v_1, v_2]$ , onde  $v_1$  e  $v_2$  são autovetores de  $W^T W$ . Então temos:

(1.) Cálculo dos autovetores associados a  $\lambda_1$ :

$$(W^T W - \lambda_1 I) = 0, \quad (1.8)$$

logo,

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Resolvendo o sistema tem-se que  $a - b = 0$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$ . Daí, temos que

$$v_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Normalizando  $v_1$ , obtemos

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

(2.) Cálculo dos autovetores associados a  $\lambda_2$ :

$$(W^T W - \lambda_2 I) = 0, \quad (1.12)$$

logo,

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Resolvendo o sistema tem-se que  $a' + b' = 0$ ,  $a', b' \in \mathbb{R}$ . Daí, temos que

$$v_2 = a' \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Normalizando  $v_2$ , obtemos

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Com isso, temos que:



$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Pelo teorema, sabemos também que  $U = [u_1, u_2]$ . Com  $u_1$  e  $u_2$  dados por:

$$\begin{cases} u_1 = \frac{1}{\sigma_1} W v_1 \\ u_2 = \frac{1}{\sigma_2} W v_2 \end{cases} \quad (1.17)$$

e assim temos,

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

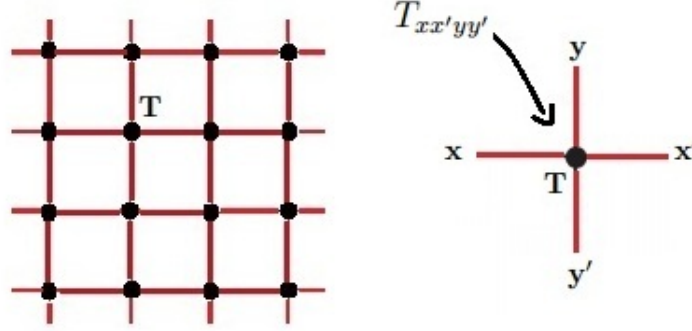
E assim a decomposição está completa, e podemos escrever  $W$  na forma:

$$W = U \Lambda V^T. \quad (1.19)$$

Note que a matriz  $W$  é simétrica, e nesse caso, como sabemos, teremos sempre na decomposição  $U = V$  (fatoração de Takagi [5]). Ou seja, sempre podemos fatorar a matriz na forma  $W = U \Lambda U^T$  [5, 13]. Essa fatoração torna a decomposição mais simples a medida que aumentamos a ordem da matriz.

### 1.1.2 Decomposição em Valores Singulares de Alta Ordem

Como havíamos citado, a HOSVD (singular value decomposition higher-order) é uma generalização da SVD. Ou seja, podemos tratar, ou decompor, não apenas com matrizes, como é o caso da SVD, mas também com tensores. Podemos pensar que tensores são objetos geométricas introduzidas na matemática e na física para generalizar a noção de escalares, vetores e matrizes. Considere a figura 1.1, para melhor entendimento de uma representação de um tensor em uma rede.



**Figura 1.1** Representação esquemática de uma rede de tensores, bem como sua representação algébrica. Onde cada sítio da rede quadrada representa um tensor.

A notação  $T_{xx'yy'}$  representa um tensor com quatro índices, os quais então relacionados com o número de ligações que o tensor possui. Como se trata de uma rede quadrada, temos nesse caso quatro índices. Se por acaso ao invés de uma rede quadrada tivermos em uma rede unidimensional, o tensor teria nesse caso dois índices  $T_{xx'}$ .

No presente trabalho, será fundamental e necessário contraírmos esses tensores alternadamente nas duas direções. Essas contrações de tensores são de extrema importância devido a estarmos interessados em renormalizar nossa rede de tensores (mais detalhes nos capítulos seguintes). Note que se ao invés de tensores fossem matrizes, essas contrações se dariam pela multiplicação usual das mesmas. A figura 1.2 ilustra geometricamente como se dá a contração da rede na direção vertical (a) bem como a decomposição HOSVD desse novo tensor contraído (b).

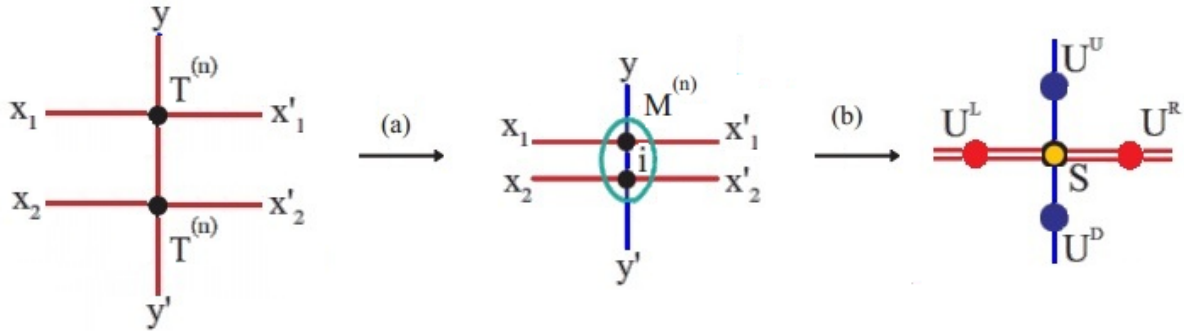
As contrações no sentido vertical (o eixo  $y$  permanece inalterado nesse caso) será feito sobre as ligações  $i$ , e será dada por

$$M_{xx'yy'}^{(n)} = \sum_i T_{x_1x'_1y_i}^{(n)} T_{x_2x'_2i y'}^{(n)}, \quad (1.20)$$

de posse desse novo tensor contraído ( $M_{xx'yy'}^{(n)}$ ), podemos aplicar uma HOSVD ao tensor, ao qual essa decomposição é dada da seguinte forma [11]:

$$M_{xx'yy'}^{(n)} = \sum_{ijkl} S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'_j}^R U_{yk}^U U_{y'l}^D, \quad (1.21)$$

onde  $U$ 's são matrizes unitárias e  $S$  é o tensor núcleo de  $M^{(n)}$ . Note ainda pela figura 1.2, que devido ao fato das contrações nesse caso se darem no sentido vertical, temos o aparecimento de uma dupla ligação no sentido horizontal.



**Figura 1.2** Representação gráfica de dois tensores de uma rede sendo contraídos no sentido vertical (a) e logo em seguida decomposto numa HOSVD (b).

À obtenção das matrizes dos  $U$ 's assim como sua utilização, será vista mais adiante.

## 1.2 MODELO DE ISING

Wilhelm Lenz, em 1920, propôs um modelo microscópico simples para o estudo de fenômenos magnéticos em materiais ao estudante Ernst Ising. Ising resolveu o modelo em uma dimensão em 1925 [14, 15] ficando seriamente frustrado, pois o caso em uma dimensão não apresentava transição de fase e magnetização espontânea.

O trabalho de Ising [14] foi citado pela primeira vez em 1928 por Heisenberg e voltou a ser novamente discutido em 1933 por Pierls, o qual apresentou um argumento mostrando que de fato o modelo de Ising em uma dimensão não apresentava transição de fase em uma temperatura finita. Já Lars Onsager em 1944 resolveu o modelo para duas dimensões na ausência de um campo magnético e demonstrou a transição de fase [16]. Sem fazer o uso de nenhuma aproximação, não existe solução analítica para três dimensões até o momento.

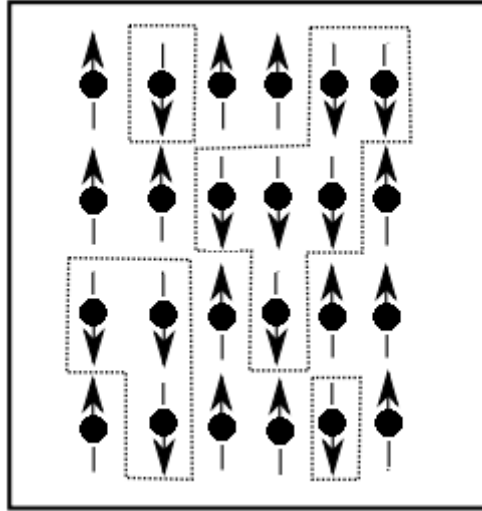
O nome “Modelo de Ising” foi concebido em uma publicação de 1936 com o título “On Ising’s Model of Ferromagnetism” [17], no qual demonstra que a magnetização espontânea pode existir no caso bidimensional.

Embora o modelo de Ising em três dimensões ainda não possua solução analítica, suas propriedades críticas são bem conhecidas numericamente [18] tendo como parâmetro de ordem a magnetização total do sistema ( $M$ ). Desse modo,  $M$  nulo corresponde à spins desalinhados e descorrelacionados, representando a fase paramagnética.  $M$  não nulo corresponde à spins alinhados numa determinada direção distribuídos em um único ou vários domínios magnéticos, representando a fase condensada.

O modelo de Ising impõe uma restrição uniaxial aos spins (privilegiando uma única direção) forçando-os a ter apenas dois estados, representados por dois mínimos da energia livre no estado fundamental. Por se tratar de um modelo simples, graças à sua natureza binária, diversas interpretações são dadas ao modelo de Ising e suas aplicações vão desde modelos de gás na rede até modelos de redes neurais [19].

Para entender melhor o modelo de Ising, considere uma coleção de  $N$  momentos

magnéticos, como spins eletrônicos, distribuídos numa rede cristalina. Se as interações forem anisotrópicas, tal que apenas a interação das componentes dos spins numa dada direção seja relevante, podemos descrever a configuração de cada sítio da rede por uma variável binária, podendo assumir os valores  $+1$  ou  $-1$  em unidades apropriadas. Uma configuração de um tal sistema numa rede quadrada está ilustrada na Figura 1.3.



**Figura 1.3** Ilustração de um sistema de spins do tipo Ising numa rede quadrada. Em geral, os íons magnéticos podem formar domínios de vários tamanhos, ou seja, conjunto de spins vizinhos com o mesmo sinal (domínios negativos estão delimitados por linhas pontilhadas). Tais domínios possuem um papel importante na análise da criticalidade e comportamento de escala do sistema.

O modelo de Ising pode ser definido pelo hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.22)$$

em que  $S_i$  e  $S_j$  são variáveis aleatórias (spins) que podem assumir valores  $\pm 1$ , nos sítios  $i = 1, 2, 3, \dots, N$  de uma rede  $d$ -dimensional,  $J_{ij}$  é a constante de acoplamento:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ forem vizinhos} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (1.23)$$

A constante de acoplamento  $J_{ij}$  define a natureza das interações entre os spins: ferromagnética para  $J > 0$  e antiferromagnética para  $J < 0$ . O valor constante  $J_{ij} = J$  caracteriza o modelo puro. E a notação  $\langle i, j \rangle$ , no somatório da equação 1.22, denota que a soma deve ser realizada sobre os primeiros vizinhos. Com respeito ao segundo

termo,  $h$  corresponde a um campo magnético externo aplicado.

O Hamiltoniano  $H$  dada pela equação 1.22 é composta de dois termos. O primeiro, relacionado à interação intermolecular dentro do magneto, satisfaz a propriedade

$$H_0(S_1, \dots, S_N) = H_0(-S_1, \dots, -S_N) \quad (1.24)$$

que decorre da simetria por uma inversão, que em última análise implica que  $H$  é invariante se os sinais dos campos e momentos magnéticos forem invertidos. Um modelo descrito por variáveis binárias e com interações com a simetria mencionada acima é chamado de modelo de Ising, em geral, independente da forma explicitada pela equação 1.22.

A resolução do modelo de Ising implica escrever a função de partição canônica:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta H), \quad (1.25)$$

na qual a soma é efetuada sobre todas as configurações das variáveis de spin. Isto permite fazer a conexão com a Termodinâmica, obtendo grandezas termodinâmicas como calor específico, energia livre, susceptibilidade, etc. Algumas grandezas, no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), podem ser dadas por [15]:

1. Energia Livre por sítio:

$$f(h, T) = -K_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(h, T) \quad (1.26)$$

2. Energia Interna por sítio:

$$u(h, T) = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} [f(h, T)/T] \quad (1.27)$$

3. Calor Específico por sítio:

$$c(h, T) = \frac{\partial}{\partial T} u(h, T) \quad (1.28)$$

4. Magnetização por sítio:

$$M(h, T) = -\frac{\partial}{\partial H} f(h, T) \quad (1.29)$$

5. Susceptibilidade por sítio:

$$\chi(h, T) = \frac{\partial}{\partial H} M(h, T). \quad (1.30)$$

Podemos determinar os expoentes críticos diretamente das grandezas termodinâmicas do sistema. As grandezas termodinâmicas, dadas a partir de derivadas da energia livre, apresentam um comportamento assintótico tipo lei de potência ao redor da região crítica. Para o ferromagnetismo temos as seguintes relações, dadas pela Tabela 1.1 ( $t \equiv (T - T_c)/T_c$ ),

**Tabela 1.1** Definição de alguns expoentes críticos.

|                           |                                    |                     |
|---------------------------|------------------------------------|---------------------|
| Magnetização              | $M_0(T) \sim (-t)^\beta$           | $t \rightarrow 0^-$ |
| Calor Específico          | $C(0, T) \sim (-t)^{-\alpha}$      | $t \rightarrow 0^-$ |
| Calor Específico          | $C(0, T) \sim (t)^{-\alpha}$       | $t \rightarrow 0^+$ |
| Susceptibilidade          | $\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma}$   | $t \rightarrow 0^-$ |
| Susceptibilidade          | $\chi(0, T) \sim (t)^{-\gamma}$    | $t \rightarrow 0^+$ |
| Equação de estado         | $M(H, T_c) \sim (H)^{1/\delta}$    | $H \rightarrow 0$   |
| Comprimento de Correlação | $\xi \sim (-t)^{-\nu}$             | $t \rightarrow 0^-$ |
| Comprimento de Correlação | $\xi \sim (t)^{-\nu}$              | $t \rightarrow 0^+$ |
| Função de Correlação      | $\Gamma(r) \sim  r ^{-(d-2+\eta)}$ | $H = t = 0$         |

onde  $h$  é um parâmetro externo, geralmente chamado de campo magnético,  $M$  é o parâmetro magnético,  $C$  o calor específico,  $\chi_T$  a susceptibilidade,  $\xi$  o comprimento de correlação e  $\Gamma(r)$  é a função de correlação entre dois spins a uma distância  $r$ .

Sabendo dois desses expoentes críticos podemos determinar todos os outros pelas relações de escala e hiperescala (onde  $d = 2$  para o caso bi-dimensional),

$$\begin{cases} \alpha + 2\beta + \gamma = 2, \\ \alpha + \beta(1 + \delta) = 2, \\ (2 - \eta)\nu = \gamma, \\ (2 - \alpha) = d \cdot \nu. \end{cases} \quad (1.31)$$

É interessante observar os resultados obtidos em um dos poucos sistemas em que existe solução exata: o modelo de Ising bi-dimensional, como foi dito anteriormente, cuja

solução de Onsager em 1944 (para  $h = 0$ ). Nesse caso, temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = 0(\log), \\ \beta = 0.125, \\ \delta = 15, \\ \gamma = 1.75, \\ \nu = 1, \\ \eta = 0.25, \end{array} \right. \quad (1.32)$$

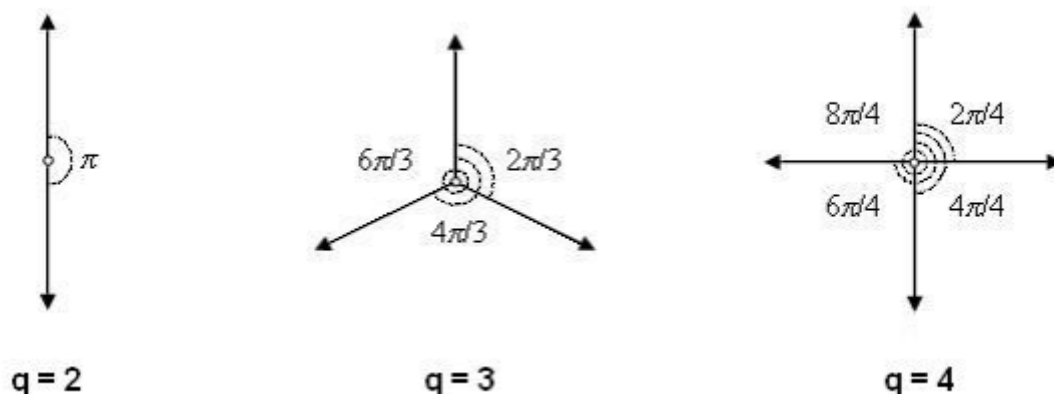
onde o expoente  $\alpha = 0$  significa que o calor específico diverge logaritmicamente.

### 1.3 MODELO DE POTTS

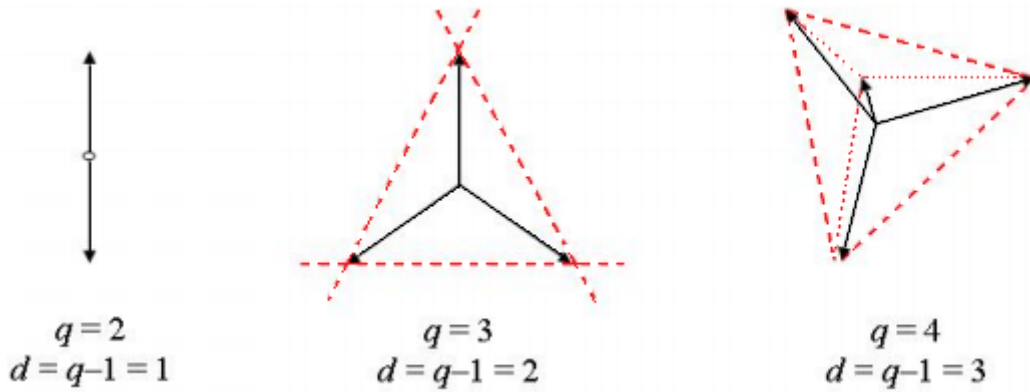
O modelo de Potts é uma generalização do modelo de Ising para sistemas com mais de dois estados. Historicamente, uma versão de quatro estados deste modelo foi inicialmente estudada por Ashkin e Teller [20]. Depois, um modelo geral de  $q$ -estados foi proposto por Domb [21] ao seu aluno de doutorado, Potts [22, 23], como um tópico de sua tese. Sabe-se que este modelo está relacionado a um grande número de problemas em estatística de redes e que seu comportamento crítico tem se mostrado mais rico e mais geral que o do modelo de Ising.

A ideia original foi considerar o modelo de Ising como um sistema de spins paralelos e antiparalelos interagindo entre si. Assim, uma generalização natural seria considerar este mesmo sistema confinado em um plano, com cada spin apontando para uma dada direção  $q$  igualmente espaçada definida pelos ângulos, e como mostra a Figura 1.4

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}, \quad n = 0, 1, \dots, q - 1 \quad (1.33)$$

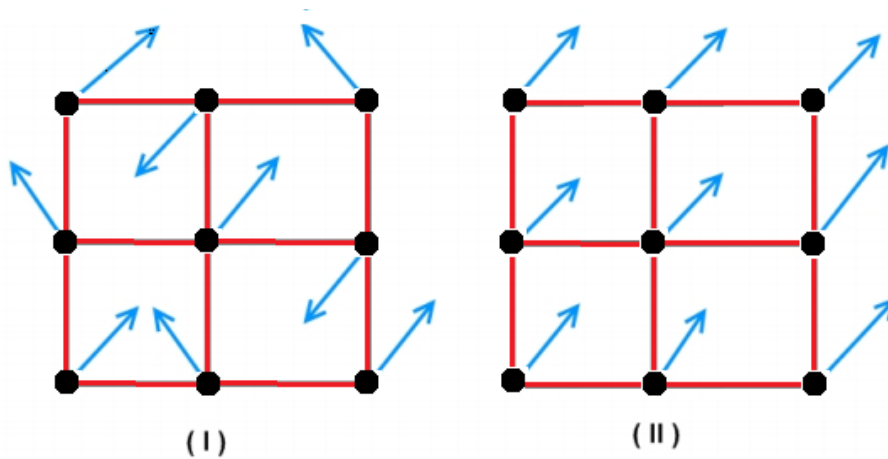


**Figura 1.4** representação do plano bidimensional contendo alguns dos  $q$  vetores proposto por Domb



**Figura 1.5** representação dos  $q$  vetores no espaço de estado  $d$ -dimensional

Dessa forma, o sistema possuirá  $q$  estados relacionados à  $q$  mínimos da energia livre, como esquematizado na Figura 1.6 para o caso  $q = 3$



**Figura 1.6** Orientação dos spins no modelo de Potts, na rede quadrada, com  $N$  spins para o caso particular  $q=3$ . A figura (I) representa uma configuração da fase desordenada, ou paramagnética. A figura (II) representa a configuração da fase ferromagnética.

O modelo de Potts é um modelo mais rico e geral, que apresenta diferentes tipos de transições e estruturas de fases, sendo reduzido ao modelo de Ising para  $q = 2$ . Embora tenha sido inicialmente um modelo proposto para estudos dos fenômenos críticos em Física Estatística, ele também se destacou devido à sua grande variedade de aplicações, entre elas, o estudo do crescimento de grãos metálicos, espumas de sabão, etc [23].

O Hamiltoniano do modelo de Potts padrão com interações entre primeiros vizinhos, na presença de um campo externo  $h$ , é descrito por:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta(S_i, S_j) - h \sum_i \delta(S_i, 0), \quad (1.34)$$



onde a variável de spin  $S_i = 0, 1, \dots, q - 1$  especifica o estado do spin do  $i$ -ésimo sítio. O símbolo  $\delta$  representa a função delta de Kronecker:

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } S_i = S_j \\ 0, & \text{de qualquer outra forma.} \end{cases} \quad (1.35)$$

Todas as propriedades físicas do sistema são extraídas da função de partição no limite termodinâmico, através das relações já bastante conhecidas da Mecânica Estatística. As funções termodinâmicas são fundamentais para determinação da ordem da transição de fase do modelo de Potts.

O modelo de Potts em duas dimensões possui soluções exatas nos pontos críticos para redes quadradas, triangular e hexagonal. Este modelo apresenta transições de ordens diferentes conforme o número de estados. Exibe transição de fase descontínua para  $q > 4$  e contínua para  $q \leq 4$  [24, 25]. Binder [26] através de simulação de Monte Carlo estudou as propriedades críticas deste modelo para  $q = 3; 4; 5; 6$ . Seus resultados estão em excelente acordo com resultados teóricos já conhecidos. Em três dimensões, nenhum resultado exato foi encontrado até agora, entretanto Herrman [27], Knak Jensen e Mouristsen [28] estudaram as propriedades críticas deste modelo através de simulação de Monte Carlo. Estudos de grupos de renormalização de Monte Carlo efetuados por Blöter e Swendsen [29] mostram que a transição é de primeira ordem para  $q \geq 3$ .

Para o modelo de Potts ferromagnético isotrópico em uma rede quadrada, a temperatura crítica é dada por [15]:

$$\frac{K_B T_c(q)}{J} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q})}, \quad \forall q \quad (1.36)$$

## 1.4 GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

A transformação de renormalização [30], é um dos métodos de resolução de modelos de spins, que permite o cálculo dos expoentes críticos de uma forma bastante natural. Antes da teoria proposta por Kadanoff em 1976 [31], a maior parte do que se conhecia sobre transições de fase se dava através de métodos aproximativos. Sua proposição para o cálculo de expoentes críticos, uma das soluções mais bem sucedidas para o estudo das transição de fase, consiste que ao nos aproximarmos do ponto crítico, o comprimento de correlação seria tão grande ( $\xi \rightarrow \infty$ ) que o sistema se torna invariante por escala [32].

Posteriormente, o formalismo matemático desenvolvido por Kenneth Wilson, através de dois artigos fundamentais no ano de 1971 [33, 34], que surgiram com base nas ideias de Kadanoff, ofereceu um mecanismo sistemático para se calcular os expoentes críticos de

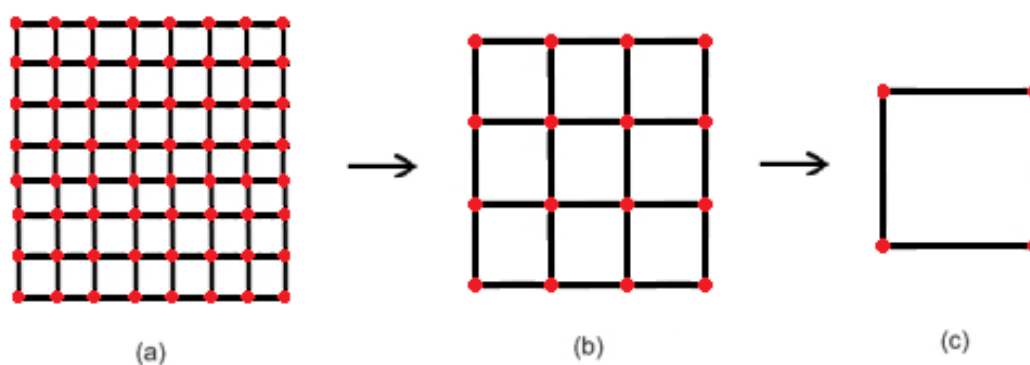
maneira quantitativa definitiva [35], aperfeiçoando profundamente a argumentação física intuitiva de Kadanoff. Essa técnica ficou conhecida na física como Grupo de Renormalização (G.R). A técnica do grupo de renormalização, que garantiu um Prêmio Nobel em 1982 a Wilson, pode ser dividida em duas classes. Uma ligada à teoria de campos, conhecida como grupo de renormalização no espaço dos momentos, que trata de quantidades escritas em termos de transformadas de Fourier. E a outra recebe o nome de grupo de renormalização no espaço real [4]. O termo espaço real se refere ao fato da técnica envolver quantidades que dependem da posição no espaço de coordenadas usual, que também é conhecido como Grupo de Renormalização de Migdal-Kadanoff (GRMK).

O conceito básico do G.R é a ideia de uma família de transformações contínuas. Estas transformações, no aspecto matemático, têm a característica de um semi-grupo, pois o produto delas é definido, mas não há reversibilidade. Tais transformações estabelecem diferentes estados. Classificamos estas correspondências de renormalização de parâmetros. A ideia central da teoria é a sistemática redução do número de graus de liberdades. Os graus de liberdade, que estão efetivamente correlacionados são aqueles contidos num volume com dimensões lineares da ordem do comprimento de correlação ( $\xi$ ). O comprimento de correlação é qualitativamente o tamanho limite de uma determinada amostra que preserva as propriedades fisicamente significativas de um sistema maior do qual esta amostra faz parte. Em Mecânica Estatística mesmo uma pequena amostra de uma substância pode apresentar suas propriedades termodinâmicas relevantes desde que contenha um grande número de graus de liberdade. Próximo à região crítica, o número de graus de liberdade correlacionados é muito elevado. Os métodos de aproximação, que são mais amplamente usados, desprezam correlações entre grandes números de partículas, e são válidos somente quando o comprimento de correlação é pequeno.

Na prática, lida-se consistentemente com correlações entre pares de partículas. A inclusão de correlação entre três ou mais partículas aumenta consideravelmente a dificuldade operacional do problema. Este tipo de tratamento falha quando o comprimento de correlação é grande como é o caso de próximo da região crítica de interesse. O grande mérito do grupo de renormalização foi a criação de procedimentos sistemáticos de redução dos graus de liberdade até que seja possível a aplicação de métodos aproximativos. A redução do número de graus de liberdade implica no estabelecimento de uma correspondência entre um problema tendo um dado comprimento de correlação e um outro onde o comprimento de correlação é menor por um determinado fator que depende do grau de redução (ou mudança de escala).

Um ponto a destacar é que onde o comprimento de correlação é infinito (ou nulo), o mesmo permanece invariante [32]. Longe da região crítica, onde  $\xi$  é pequeno, métodos tradicionais como expansões perturbativas, campo médio, e outras, podem ser adequados na análise do sistema. Consideramos em particular uma transição de fase magnética de um sistema de spins localizados sobre sítios de uma rede. O problema torna-se difícil de ser tratado porque apesar de cada spin interagir diretamente somente com os spins na sua vizinhança, a transição de fase ocorre através do efeito cooperativo resultante das correlações entre um grande número de spins. A existência desses efeitos cooperativos é que impede o uso direto de esquemas de aproximações que levam em consideração somente interações entre alguns spins.

O grupo de renormalização está adequado especificamente para atacar este tipo de problema. Há várias maneiras de formular o G.R. Todas elas tem o mesmo ingrediente básico. Na linguagem de spins, localizados como no modelo de Ising, os graus de liberdade são reduzidos eliminando de forma sistemática o número de spins numa região do tamanho do comprimento de correlação. Em cada passo, elimina-se vários spins vizinhos em favor de um único novo spin que é adequado para desempenhar o papel do bloco original (ver figura 1.7). Depois de um número finitos (apropriado) de passos, ficamos com um sistema no qual a relação entre o comprimento de correlação e a separação entre os spins não é grande.



**Figura 1.7** Processo de renormalização da rede quadrada, onde em cada etapa da renormalização temos um bloco com quatro spins dando lugar ao único spin.

A técnica de GRMK no espaço real é apropriada para modelos baseados em redes que apresentam simetria de escala discreta. Uma rede tem simetria de escala se ao agruparmos os sítios da rede em blocos e substituímos esses blocos por um único sítio que representa todos os sítios do bloco, inclusive com suas interações, conseguimos produzir uma rede semelhante à inicial, exceto por um fator de escala  $b$ . Essa transformação, que altera a escala do sistema em um fator  $b$ , através do reescalonamento da rede promovendo assim uma redução no número de graus de liberdade, torna possível o cálculo dos expoentes críticos do sistema, pois no ponto crítico as propriedades termodinâmicas permanecem invariantes por transformação de escala, como já era previsto pela teoria de escala.

Definição do Grupo:

Suponha, que o sistema estudado seja descrito pelo hamiltoniano  $\bar{H} = H/KT$ , então é aplicado uma transformação de escala, dado pelo Operador de Renormalização,  $\mathbf{R}$ , para produzir um novo hamiltoniano  $\bar{H}'$ , ou seja,

$$\bar{H}' = \mathbf{R}\bar{H}. \quad (1.37)$$

O fator de escala é o que defini a redução do graus de liberdades do sistema  $d$ -dimensional, de  $N$  para  $N'$ :

$$b^d = \frac{N}{N'}. \quad (1.38)$$

$N$  é o número de spins da rede original,  $N'$  é o número de spins da rede renormalizada e  $d$  é o número de dimensões espaciais. O objetivo é que a energia livre total permaneça a mesma. Para isso, é necessário que a função de partição seja invariante sobre transformação [30]:

$$Z_{N'}(\bar{H}') = Z_N(\bar{H}). \quad (1.39)$$

A energia livre por spins é uma grandeza intensiva, assim

$$\bar{f}(\bar{H}') = \bar{f}(\bar{H}). \quad (1.40)$$

As medidas dos comprimentos do sistema, em relação a uma dada origem, ficam reduzidas por um fator de  $b$ ,

$$\vec{r}' = \frac{1}{b} \vec{r}. \quad (1.41)$$

## 1.5 GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE REDES DE TENSORES

Considere, para efeito de motivação, a solução do modelo de ising em uma dimensão na presença de um campo, para melhor entender a necessidade do uso de outros métodos no estudo de sistemas clássicos com interações locais.

O hamiltoniano do modelo é dado por,

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (1.42)$$

Observe que empregando condições de contorno periódicas, ou seja,  $S_{N+1} = S_1$ , podemos reescrever o hamiltoniano na forma:

$$H = \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}). \quad (1.43)$$

A solução do modelo é obtida através da obtenção da função de partição canônica:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H}, \quad (1.44)$$

e assim temos,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[ \beta J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{\beta h}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right]. \quad (1.45)$$

Podemos escrever essa exponencial como um produto de exponenciais, ou seja,

$$e^{\beta J S_1 S_2} e^{\beta J S_2 S_3} \dots e^{\beta J S_N S_{N+1}} e^{(S_1+S_2)\beta h/2} e^{(S_2+S_3)\beta h/2} \dots e^{(S_N+S_{N+1})\beta h/2}. \quad (1.46)$$

Usando as condições de contorno periódicas, temos:

$$e^{\beta J S_1 S_2} e^{\beta J S_2 S_3} \dots e^{\beta J S_N S_1} e^{(S_1+S_2)\beta h/2} e^{(S_2+S_3)\beta h/2} \dots e^{(S_N+S_1)\beta h/2}, \quad (1.47)$$

ou na forma mais compacta,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N T(S_i, S_{i+1}). \quad (1.48)$$

Observe agora que cada fator do produtório,

$$T(S_i, S_{i+1}) = \exp \left[ \beta J S_i S_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (S_i + S_{i+1}) \right] \quad (1.49)$$

pode assumir apenas quatro valores, pois  $S_i = \pm 1$  e  $S_{i+1} = \pm 1$ , independentemente do valor de  $i$ , portanto

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\beta J(1 \cdot 1) + (1+1)\beta h/2} = e^{\beta(J+h)} \\ e^{\beta J[1 \cdot (-1)] + (1-1)\beta h/2} = e^{-\beta J} \\ e^{\beta J[(-1) \cdot 1] + (-1+1)\beta h/2} = e^{-\beta J} \\ e^{\beta J[(-1) \cdot (-1)] + (-1-1)\beta h/2} = e^{\beta(J-h)}. \end{array} \right. \quad (1.50)$$

Se colocarmos estes valores em forma de matriz, temos

$$\begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

onde  $T$  é denominada matriz transferência. Podemos notar que o produtório da equação 1.48, pode ser representada como um produto de  $N$  matrizes  $2 \times 2$  idênticas

$$Z_N = \text{Tr}(T)^N, \quad (1.52)$$

onde,  $Tr$  é o traço da matriz, que é uma função matricial que associa a matriz à soma dos elementos da sua diagonal principal. É a soma sobre todas as configurações de spins. Assim, a diagonalização desta matriz leva

$$Z_N = Tr(\mathbf{T})^N = Tr(\mathbf{D})^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (1.53)$$

onde  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são os autovalores associados a matriz de transferência, e são dadas por

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} [\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}]. \quad (1.54)$$

É fácil perceber que esses autovalores são sempre positivos e que  $\lambda_1 \geq \lambda_2$ . A campo nulo ( $h = 0$ ) estas expressões ficam mais simples,

$$\lambda_1 = 2 \cosh(\beta J) \geq \lambda_2 = 2 \sinh(\beta J). \quad (1.55)$$

Para obter a energia livre no limite termodinâmico, é conveniente escrever:

$$Z_N = \lambda_1^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right]. \quad (1.56)$$

E assim, no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), temos que nossa energia livre por spin é dada por:

$$f(T, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} - \left[ \frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right] = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_1, \quad (1.57)$$

de onde todas as propriedades termodinâmicas do sistema são obtidas.

A magnetização por spin é dada por:

$$m = \left( \frac{\partial f}{\partial h} \right)_T = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (1.58)$$

que se anula para  $h = 0$ , servindo apenas para a explicação do paramagnetismo e não o ferromagnetismo, pois  $m$  é diferente de zero quando  $h = 0$  em um material ferromagnético a temperaturas baixas.

Note que estamos tratando do modelo de forma clássica, no caso unidimensional, e usando condições periódicas de contorno percebemos que o produto da equação 1.48 pode ser representado como um produto dessas  $N$  matrizes idênticas. Essas matrizes, no qual chamamos de matriz de transferência, estão associadas a cada par de spins, como podemos perceber pela equação 1.49. O fato dessas matrizes serem todas iguais, fazem com que o cálculo seja relativamente simples. A extensão das ideias por matriz de transferência para duas dimensões, dada pela solução de Lars Onsager [16], já se torna não trivial, e aparentemente não funciona para modelos superiores a duas dimensões.

Pensando em uma generalização para dimensões superiores a uma dimensão, já que no caso unidimensional sua solução é trivial por matriz de transferência, Levin e Nave [36] propôs um grupo de renormalização de rede de tensores (TRG). Seria uma espécie de generalização da equação 1.48, que nesse caso, por se tratar de uma generalização,

estariamos tratando com objetos denominados tensores. Note que, podemos pensar nessa matriz de transferência, dada pela equação 1.51, como sendo um tensor com dois índices ( $T(S_i, S_{i+1}) = T_{S_i S_{i+1}}$ ). Onde, como já havíamos citado, esses índice estão relacionados com as ligações que o spin possui na rede (dois índices devido a se tratar de uma rede unidimensional). E assim, poderíamos reescrever nossa equação 1.48 na forma:

$$Z = Tr \prod_i T_{S_i S_{i+1}}^i, \quad (1.59)$$

ou simplesmente, como:

$$Z = Tr \prod_i T_{xx'}^i. \quad (1.60)$$

Também já comentamos que no caso de uma rede quadrada, temos cada spins com quatro ligações, e assim teríamos o tensor na forma  $T_{ijkl}$ . E assim, uma generalização da equação 1.48 seria,

$$Z = Tr \prod_i T_{xyz\dots}^i. \quad (1.61)$$

Neste trabalho, iremos estudar o método grupo de renormalização de rede de tensores com base na decomposição em valores singulares de alta ordem (HOSVD) [11], abreviado como HOTRG, com o proposito, além de aprender e conhecer o método, poder aplicá-lo ao modelo de Ising e Potts ( $q = 3$ ).

Existe duas abordagens para representar a função de partição de um modelo estatístico clássico na forma de rede de tensores [2]. Uma delas é definir o tensor em numa nova estrutura, no seu espaço dual, através de uma transformação de dualidade. Isso pode transformar um modelo estatístico clássico para um modelo de rede de tensores em sua correspondente rede dual. Como veremos, esse tipo de transformação é útil se o número de coordenadas da rede dual for menor que o número de coordenadas da estrutura inicial. Observe que não é vantagem trabalhar com a rede dual de uma rede quadrada, pois a mesma é autodual. Ou seja, ao fazer uma transformação de dualidade numa rede quadrada, continuamos a trabalhar com uma rede quadrada (Ver Figura 2.2). A segunda abordagem, na qual é feito nosso trabalho, se trata de definir o tensor na própria rede original, e a partir daí, tomando como base as ideias do grupo de renormalização, poder trabalhar com essa rede de tensores. A seguir, no capítulo de fundamentos, iremos mostrar como essas abordagens são feitas, bem como detalhar melhor o método TRG através de aplicações.

2.1 REPRESENTAÇÃO COMO REDE DE TENSORES

2.1.1 Representação na rede dual

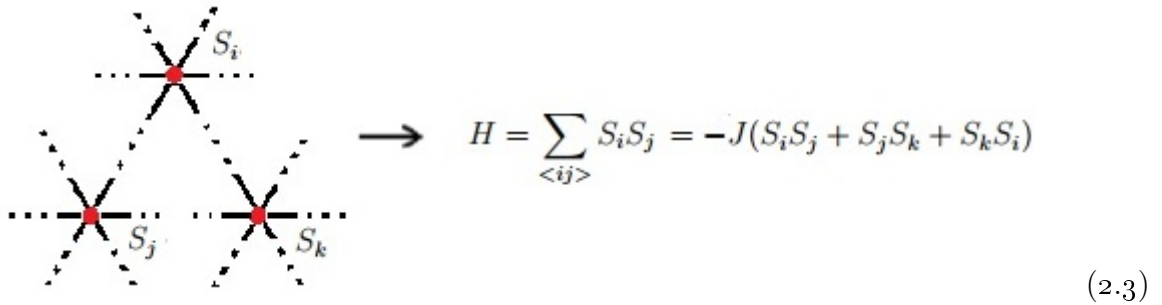
Como forma de melhor ilustrar a função de partição como produto de tensores em sua rede dual [2], considere o modelo de Ising  $S = 1/2$  em uma rede triangular, como mostrada na Figura 2.1(a). O Hamiltoniano do modelo de Ising ( $h = 0$ ) pode ser definido como:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \tag{2.1}$$

onde  $J$  é a energia de troca e  $S_i$  podem assumir dois valores ( $\pm 1$ ). A função de partição canônica é dado por:

$$Z(\beta, H) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H}. \tag{2.2}$$

Como se trata de uma estrutura triangular, temos:



$$H = \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j = -J(S_i S_j + S_j S_k + S_k S_i) \tag{2.3}$$

Assim, a função de partição do modelo de Ising numa malha triangular será dado por:

$$\left\{ \begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} \\ &= \sum_{\{S_i\}} \prod_{\Delta_{ijk}} e^{\beta J(S_i S_j + S_j S_k + S_k S_i)/2} \\ &= Tr \prod_{\Delta_{ijk}} e^{\beta J(S_i S_j + S_j S_k + S_k S_i)/2}, \end{aligned} \right. \tag{2.4}$$



onde  $Tr$  é a soma sobre todas as configurações de spins e o produto é tomado sobre todos os pequenos triangulos da rede. Observe que introduzimos o fator de  $\frac{1}{2}$ , pelo fato de cada ligação ser compartilhado por dois triangulos.

A idéia é escrever essa função de partição como uma rede de tensores em termos de variáveis de ligação através de uma transformação de dualidade. E com isso obter, em sua rede dual, uma rede hexagonal como na Figura 2.1(b). Começamos definindo o vínculo,

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = S_i S_j \\ \sigma_{jk} = S_j S_k \\ \sigma_{ki} = S_k S_i \end{cases} \quad (2.5)$$

( $\sigma_{ij} = S_i S_j = \pm 1$ , já que  $S_i$  e  $S_j$  podem assumir valores  $\pm 1$ ). Assim, temos:

$$Z = Tr \prod_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_{ij} - S_i S_j) \prod_{\Delta_{ijk}} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ki})/2}, \quad (2.6)$$

observe que introduzimos a função delta de kronecker devido ao vínculo do problema. Observe também, que devido ao vínculo temos:

$$\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{ki} = 1 \quad (2.7)$$

É fácil de verificar a equação 2.7 acima. Assumimos, sem perda de generalidade, que  $\sigma_{ij}$  seja igual à 1 ( $\sigma_{ij} = S_i S_j = 1$ ). Isso implica dizer que

$$\begin{cases} S_i = S_j = 1 \\ S_i = S_j = -1, \end{cases} \quad (2.8)$$

e assim temos essas duas situações:

$$(i) (S_i = S_j = 1 \quad \therefore \quad \sigma_{ij} = 1)$$

Se  $S_k = 1$  implica que  $\sigma_{ij} = \sigma_{jk} = \sigma_{ki} = 1$ . Agora, se  $S_k = -1$  temos que  $\sigma_{jk} = \sigma_{ki} = -1$  e portanto continuaremos com  $\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{ki} = 1$ .

$$(ii) (S_i = S_j = -1 \quad \therefore \quad \sigma_{ij} = 1)$$

Se  $S_k = -1$  implica que  $\sigma_{ij} = \sigma_{jk} = \sigma_{ki} = 1$ . Agora, se  $S_k = 1$  temos que  $\sigma_{jk} = \sigma_{ki} = -1$  e portanto  $\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{ki} = 1$ .

Então, nossa equação 2.6 fica na forma:

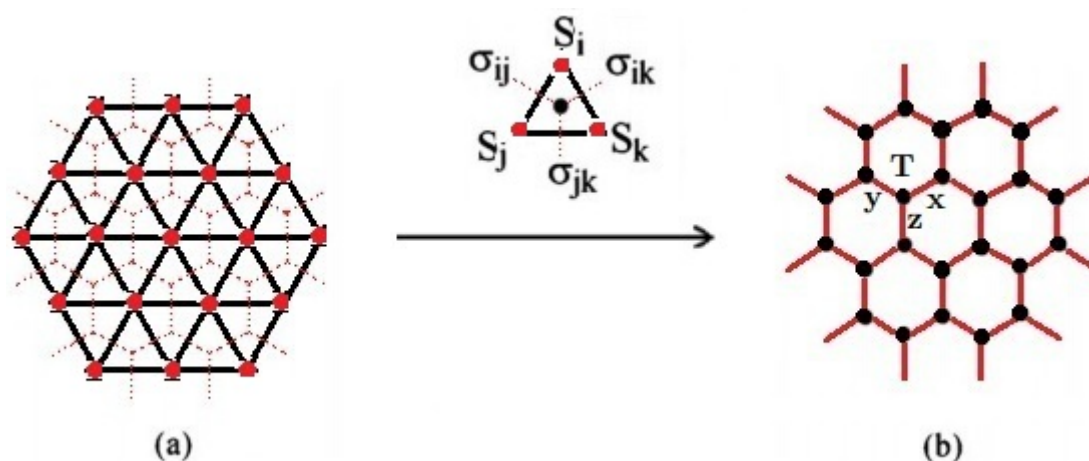
$$Z = Tr_{\sigma} \prod_{\Delta_{ijk}} \frac{1 + \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{ki}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ki})/2}. \quad (2.9)$$

Agora, se utilizarmos  $i$  para representar a posição do local em sua rede dual, podemos escrever a função de partição como modelo rede de tensores:

$$Z = Tr \prod_i T_{x_i y_j z_k}, \quad (2.10)$$

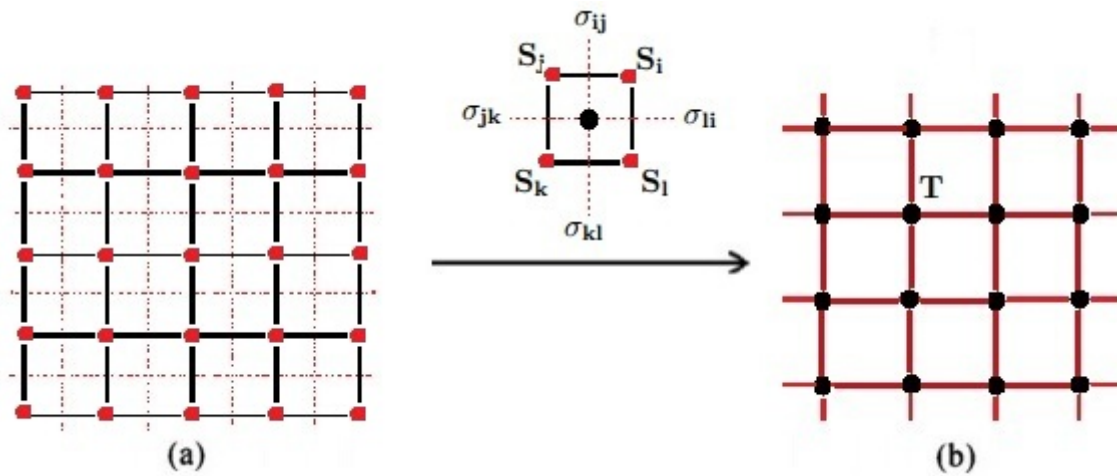
onde

$$T_{x_i y_j z_k} = \frac{1 + \sigma_{x_i} \sigma_{y_j} \sigma_{z_k}}{2} e^{\beta J (\sigma_{x_i} + \sigma_{y_j} + \sigma_{z_k}) / 2}. \quad (2.11)$$



**Figura 2.1** Representação esquemática de uma rede de tensores definida pela equação 2.9, onde as linhas pontilhadas representam a substituição dos triângulos, formada pelos spins em sua rede triangular, pelos tensores em sua rede dual.

Note, pela Figura 2.1, que partimos de um modelo clássico definido em uma estrutura triangular (Figura 2.1(a)), cujo número de coordenação é seis (seis coordenadas, devido ao número de ligações que cada vértice possui), para ser representado por um modelo rede de tensores em uma estrutura Hexagonal (Figura 2.1(b)), cujo número de coordenações são três. A Figura 2.2 representa justamente o que havíamos dito sobre a rede quadrada ser autodual.



**Figura 2.2** Representação esquemática de uma rede de tensores sobre uma rede quadrada.

### 2.1.2 Representação na rede original

Um modelo estatístico clássico com interações locais pode ser sempre expresso como um modelo rede de tensores em sua rede original [2]. Iremos usar, mais uma vez, o modelo de Ising em duas dimensões como forma de representar o modelo rede de tensores na própria rede original.

Considere o Hamiltoniano definido pela equação:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} K(S_i S_j), \quad (2.12)$$

onde  $K(S_i S_j)$  são as interações entre dois estados locais básicos  $S_i$  e  $S_j$ . Observe que para o modelo de Ising ( $h = 0$ ) em comparação com a equação 1.22, temos:

$$K(S_i S_j) = -J S_i S_j. \quad (2.13)$$

Assim, podemos escrever nossa função de partição como:

$$\left\{ \begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} \\ &= \sum_{\{S_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta K(S_i, S_j)} \\ &= \text{Tr} \prod_{\langle ij \rangle} W(S_i, S_j), \end{aligned} \right. \quad (2.14)$$

onde

$$W(S_i, S_j) = \exp[-\beta K(S_i, S_j)], \quad (2.15)$$

define uma matriz cujos índices de linha e coluna são, respectivamente,  $S_i$  e  $S_j$ .  $W$  não precisa ser necessariamente simétrico e positivo definido. Observe que para o modelo de Ising em duas dimensões (2D), e usando a equação 2.13, temos:

$$W_{\text{Ising}} = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Podemos decompor  $W(S_i, S_j)$  em valores singulares ( $SV D$ ), ou seja,

$$W(S_i, S_j) = \sum_l U(S_i, l) \lambda_l V(S_j, l), \quad (2.17)$$

onde, como já sabemos,  $U$  e  $V$  são matrizes unitárias, e  $\lambda$  é a matriz diagonal semi-positiva. Podemos definir:

$$Q_a(S, l) = U(S, l) \lambda_l^{1/2}, \quad (2.18)$$

$$Q_b(S, l) = V(S, l) \lambda_l^{1/2}, \quad (2.19)$$

de modo que  $W$  possa ser expresso como,

$$W = Q_a Q_b. \quad (2.20)$$

Agrupando agora todos os  $Q$ 's que se conecta ao sítio  $i$ , e assim um tensor local pode ser definido tomando os produtos desses  $Q$ 's,

$$T_{xyz\dots}^i = \sum_{S_i} Q_{\alpha_1}(S_i, x) Q_{\alpha_2}(S_i, y) Q_{\alpha_3}(S_i, z) \dots \quad (2.21)$$

A ordem do tensor é igual ao número de ligações que interagem com o sítio  $i$ . Isto é, se o tensor estiver definido em uma rede quadrada, assim como está representado pela Figura 1.1, teremos nesse caso um tensor de ordem 4 e se o tensor estiver definido em uma rede Hexagonal (ver Figura 2.1.(b)) teremos um tensor de ordem 3.

De posse do tensor representado pela equação 2.21, temos uma representação da rede de tensores da função de partição dado por:

$$Z = Tr \prod_i T_{xyz\dots}^i. \quad (2.22)$$

Observe que  $W$  do modelo de Ising, dado pela equação 2.16, é uma matriz simétrica. E assim, podemos usar nesse caso a fatoração de Takagi [5]. Iremos obter nesse caso

$$U = V = \frac{1}{2^{1/2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

também teremos que

$$\lambda = \begin{pmatrix} 2 \cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta J) \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Pelo fato de  $U = V$ , temos também que  $Q_a = Q_b = Q$ , e assim

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_{11} = U_{11} \lambda_1^{1/2} \\ Q_{12} = U_{12} \lambda_2^{1/2} \\ Q_{21} = U_{21} \lambda_1^{1/2} \\ Q_{22} = U_{22} \lambda_2^{1/2}, \end{array} \right. \quad (2.25)$$

ou seja,

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J)} & \sqrt{\sinh(\beta J)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J)} & -\sqrt{\sinh(\beta J)} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

E assim temos,

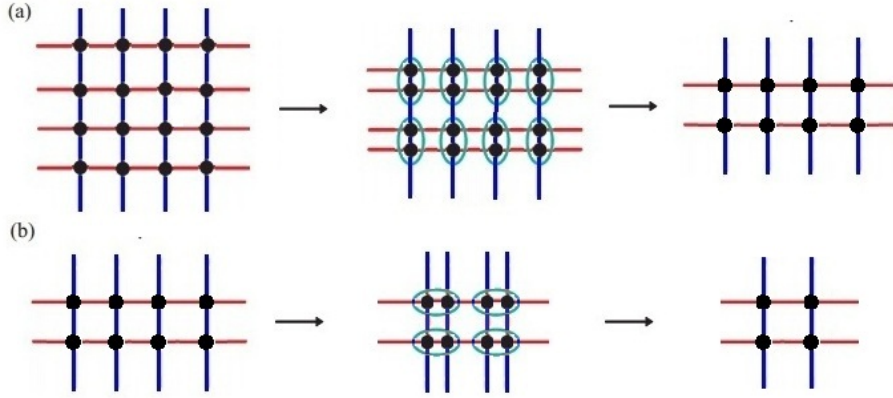
$$T_{xx'yy'}^i = \sum_{S_i} Q(S_i, x) Q(S_i, x') Q(S_i, y) Q(S_i, y'). \quad (2.27)$$

## 2.2 RENORMALIZAÇÃO DE REDES DE TENSORES PARA SISTEMAS BIDIMENSIONAIS

O objetivo de nosso trabalho, como sabemos, é estudar a termodinâmica do modelo de Ising e Potts ( $q = 3$ ) numa rede cúbica na presença de um campo magnético externo, usando o método HOTRG. Isso será feito e explicado mais adiante. Mas de forma a entender e assimilar melhor o método, iremos nessa seção analisar o modelo de Ising ( $h = 0$ ) em duas dimensões [3], tomando como base as ideias do grupo de renormalização. Sabemos que a função de partição é preservada por transformações de renormalizações. A ideia, é partir da rede de tensores e através de algumas renormalizações, efetuadas sobre os tensores locais, chega a uma convergência na energia livre por partícula e assim poder extrair informações relevantes sobre o sistema em questão.

Existem vários métodos de se trabalhar com os tensores locais, de modo a renormalizar a rede. Iremos trabalhar contraindo os tensores locais dois a dois de forma alternada nas direções vertical (direção-y) e horizontal (direção-x), até chegarmos a uma convergência na energia livre por partícula [3]. Podemos pensar nessa convergência da seguinte forma: Considere, por exemplo, uma rede quadrada. Iremos renormalizá-la iterativamente, contraindo os tensores dois a dois como citado anteriormente, de forma a obter em última estância uma rede  $2 \times 2$  (formado por quatro tensores fixados nos vértices de um quadrado). Considere agora que essa rede original seja uma rede  $4 \times 4$ . Ao passo de apenas uma renormalização (uma contração no sentido vertical seguido de outra na

horizontal, ou vice e versa), reduzindo assim nossa rede por um fator de quatro, chegaremos em nossa última estância, ou seja, em uma rede  $2 \times 2$  (ver Figura 2.3). Com isso calcularemos, usando relações de periodicidades para os tensores, nossa energia livre por partícula.



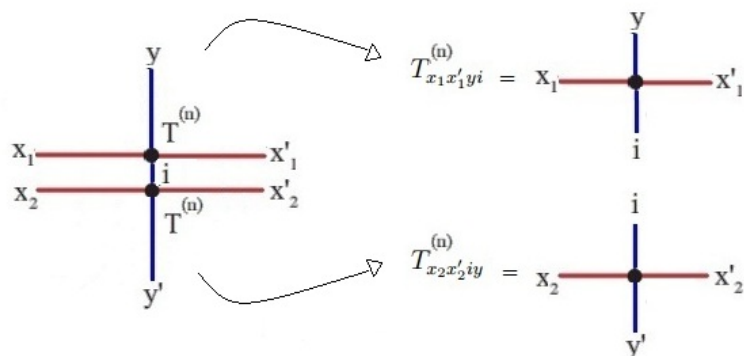
**Figura 2.3** Renormalização de uma rede  $4 \times 4$  (uma contrações do tensor no sentido vertical (a), seguida de uma na horizontal (b)).

Considere agora que em vez de uma rede  $4 \times 4$  tivermos uma rede  $16 \times 16$ , para chegarmos no último passo de nossa renormalização (uma rede  $2 \times 2$ ) precisamos renormalizar a rede duas vezes, e assim calcular essa nova energia. Iremos fazer esse procedimento de aumentar nossa rede até que a diferença entre as energias livre por partícula entre essas duas redes consecutivas sejam menor que um determinado  $\epsilon$  desejado. O que se faz é sempre calcular a energia livre por partícula a medida que as renormalizações são feitas, encarando sempre a nova rede renormalizada como uma rede  $2 \times 2$ , para poder então calcular sua energia livre por partícula. E quando a diferença dessas energias, entre duas redes consecutivas, for menor que um determinado valor, na qual chamamos de  $\epsilon$ , é por que o sistema convergiu.

Sabendo e partindo da rede de tensores do modelo de Ising em duas dimensões [3], ou seja, partindo de nossa equação 2.27, temos que a contração dos tensores locais no sentido vertical (ver Figura 2.5) será dado por:

$$M_{xx'yy'}^{(n)} = \sum_i T_{x_1x'_1yi}^{(n)} T_{x_2x'_2iy'}^{(n)}, \quad (2.28)$$

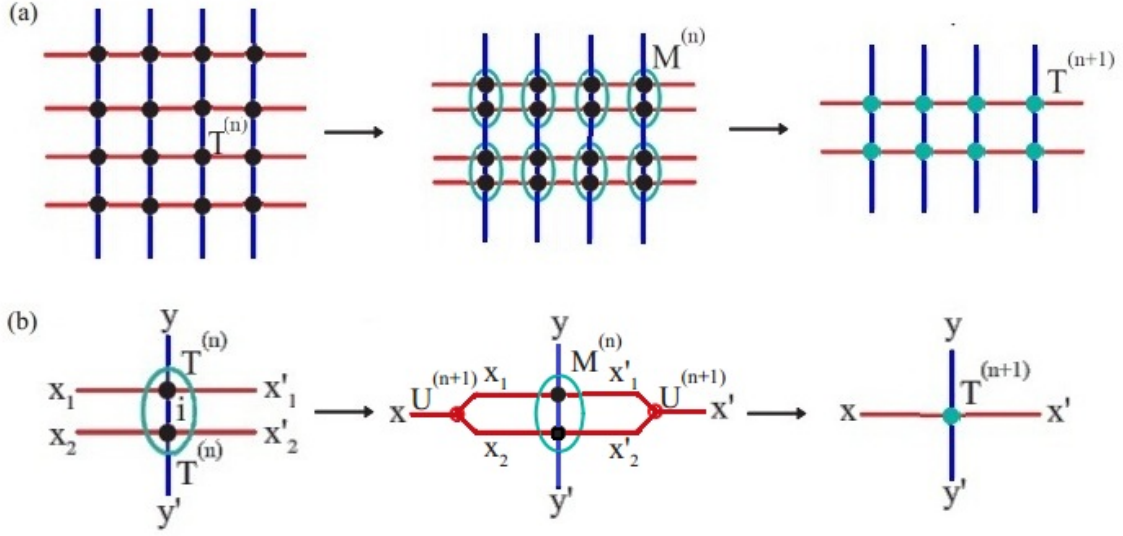
onde  $x$  e  $x'$  é definido respectivamente pelo produto direto dos índices  $x_1, x_2$  e  $x'_1, x'_2$ , ou seja,  $x = x_1 \otimes x_2$ ,  $x' = x'_1 \otimes x'_2$  e o subscrito  $n$  denota a  $n$ -ésima interação.



**Figura 2.4** Representação gráfica do tensor em cada sítio.

A figura 2.4 representa a notação usada para os índices dos tensores em cada sítio. Observe, pela equação 2.28, que a soma é feita sobre todas as ligações  $i$ , e que também cada índice dos tensores  $T^{(n)}$  assume, inicialmente, dois valores (devido a se tratar do modelo de Ising,  $q = 2$  estados). A medida que as contrações são feitas, e devido ao produto direto feito sobre os índices, os valores dos índices dos tensores irão sempre aumentar. Por limitações em termos de memória computacional, são fixados sempre uma dimensão máxima para esses índices, que chamamos de dimensão de corte ( $D_c$ ). Ou seja, qualquer contração que faça com que os índices ultrapassem essa dimensão de corte, são retornadas para as próximas contrações exatamente com a dimensão  $D_c$ .

Note também, pela equação 2.28, que a dimensão de  $M$  corresponde ao quadrado da dimensão de  $T$ . A medida que fazemos essas contrações de forma progressiva, contraindo alternadamente sobre as direções, a dimensão de nosso tensor contraído ( $M$ ) irá sempre crescer, devido ao produto direto de seus índices, ao ponto de ser necessário renormalizá-los ( $M^{(n)} \rightarrow T^{(n+1)}$ ). Essa renormalização dos tensores contraídos acontece devido a necessidade de truncarmos os mesmos, pois a medida que as contrações acontecem, a dimensão dos índices irá ultrapassar a dimensão de corte, o que se dar necessário a renormalização desses tensores. Esse é um dos principais motivos que o cálculo TRG não pode ser feito de forma exata (já para uma dimensão de corte pequena com  $D_c = 2$  o cálculo pode ser feito de forma exata [37]). Esse sistema de truncagem será dada pela decomposição HOSVD [11]. No próximo capítulo, iremos detalhar melhor como será feito essas contrações bem como o sistema de truncagem.



**Figura 2.5** (a) Contração HOTRG do estado rede de tensores ao longo do eixo  $y$  da rede quadrada. (b) Passos de contração e renormalização de dois tensores locais.

Sendo assim, primeiro, iremos fazer um *HOSVD* para esse tensor dado pela equação 2.28 [3](rever Figura 1.2), ou seja,

$$M_{xx'yy'}^{(n)} = \sum_{ijkl} S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'j}^R U_{yk}^U U_{y'l}^D. \quad (2.29)$$

Onde temos as seguintes propriedades para qualquer índice  $j$ :

(1.) Ortogonalidade,

$$\langle S :, j, :, : | S :, j', :, : \rangle = 0, \quad \text{se } j \neq j', \quad (2.30)$$

onde  $\langle S :, j, :, : | S :, j', :, : \rangle$  é o produto interno de dois desses subtensores.

(2.) Pseudodiagonal,

$$|S :, j, :, :| \geq |S :, j', :, :|, \quad \text{se } j < j', \quad (2.31)$$

onde  $|S :, j, :, :|$  é a norma deste subtensor. Essas normas desempenha um papel similar ao dos valores singulares de uma matriz.

Nosso objetivo, a princípio, é determinar o tensor renormalizado ( $T^{n+1}$ ) ao passo de uma contração, como mostrado na Figura 2.5. A etapa chave de nossa *HOTRG*, é determinar as quatro matrizes unitárias do lado direito da equação 2.29. Iremos determinar essas matrizes utilizando a decomposição em valores singulares (*SVD*). Considere, por exemplo, que queremos determinar  $U^L$ . Para isso, primeiramente, devemos transformar



o tensor  $M_{xx'yy'}$  em uma matriz, e assim aplicar a SVD nela. Essa transformação é na verdade uma espécie de “matrização”, é onde transformamos o tensor em uma matriz. Ou seja, queremos transforma o tensor na forma:

$$M_{xx'yy'} = M'_{x,x'yy'}, \quad (2.32)$$

onde temos que  $M'_{x,x'yy'}$  é uma matriz cujo o primeiro índice ( $x$ ), é o índice das linhas e o segundo índice ( $x'yy'$ ), é o índice das colunas da matriz. Observe bem que fixamos o primeiro índice  $x$ , como sendo o índice das linhas da matriz, devido ao fato de estarmos interessados em determinar a matriz  $U^L$ . Se por acaso quisermos determinar  $U^R$ , fixaríamos nesse caso o índice  $x'$  como sendo o índice das linhas e faríamos os outros índices como sendo o índice das colunas da matriz. Para determinarmos  $U^L$ , faremos uma decomposição SVD, ou seja,

$$M'M'^{\dagger} = U^L \Lambda^L (U^L)^{\dagger}, \quad (2.33)$$

note que  $M'M'^{\dagger}$  é uma matriz simétrica, e assim temos na decomposição  $U = V$ . Como sabemos,  $\Lambda^L$  é uma matriz diagonal, cujo a diagonal está representado pelos autovalores de  $M'M'^{\dagger}$ . Além disso temos também que

$$|S_{i, :, :, :}| = \Lambda_i^L. \quad (2.34)$$

Observe também, que devido ao fato de estarmos contraindo os tensores na direção vertical (ver Figura 2.5), as direções  $y$  e  $y'$  não precisam ser normalizadas. Ou seja, só precisamos determinar na pratica as matrizes  $U^L$  e  $U^R$  para poder enfim se determinar o tensor renormalizado  $T^{(n+1)}$ . Como já havíamos comentado, devido ao fato do tensor  $M$  crescer com o quadrado da dimensão de  $T$ , é preciso que haja em algum momento uma espécie de truncamento [11], que se dar através da HOSVD, de forma a obter o tensor  $T^{(n+1)}$  renormalizado. A HOSVD fornece um esquema simples de minimizar o erro devido ao truncamento. A truncagem será feito por comparação dos seguintes valores:

$$\varepsilon_1 = \sum_{i>D} |S_{i, :, :, :}|^2 \quad (2.35)$$

e

$$\varepsilon_2 = \sum_{j>D} |S_{:, j, :, :}|^2. \quad (2.36)$$

Se  $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ , nós truncamos a primeira dimensão de  $S$  ou a segunda dimensão da  $U^L$  para  $D$  (correspondente ao índice  $i$ , ver equação 2.29). Caso contrário, nós truncamos a segunda dimensão de  $S$  ou a segunda dimensão da  $U^R$  para  $D$  (correspondente ao índice  $j$ , ver equação 2.29). Após o truncamento, podemos atualizar o tensor local da seguinte forma:

$$T_{xx'yy'}^{(n+1)} = \sum_{ij} U_{ix}^{(n+1)} M_{xx'yy'}^{(n)} U_{jx'}^{(n+1)}, \quad (2.37)$$

onde  $U^{(n+1)} = U^L$  (ou  $U^R$ ) se  $\varepsilon_1$  é menor (maior) do que  $\varepsilon_2$ .

Faremos o cálculo HOSVD acima de forma iterativa, até que haja uma convergência da energia livre ou de outra grandeza física desejada. Iremos mais adiante aplicar o método HOTRG ao modelo de Ising, na presença de um campo, e com isso detalhar melhor cada etapa do método.

### 3.1 MODELO DE ISING

Nessa seção iremos aplicar o método *HOTRG* ao modelo de Ising na presença de um campo magnético  $h$ , mostrando algumas etapas fundamentais de como procedemos na elaboração de nosso programa. Iremos com isso, tentar explicar e reproduzir sua termodinâmica usando o método *HOTRG*. É importante ressaltar que fixamos, tanto para o modelo de Ising quanto ao modelo de Potts, nossa dimensão de corte em  $D_c = 20$ . Veremos mais adiante nos resultados e discussões que essa escolha não foi arbitrária.

Considere o hamiltoniano do modelo dado por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (3.1)$$

A ideia, a princípio, é poder representar esse modelo na forma de rede de tensores. Iremos proceder da mesma forma que fizemos com o modelo de Ising ( $h = 0$ ) da seção anterior. Observe que precisamos primeiramente representar nossa matriz  $W$ , dada pela equação 2.15, para esse novo hamiltoniano, para poder enfim termos os tensores iniciais. Note ainda que para isso ser feito, através da equação 2.12, precisamos ter todos os termos do nosso hamiltoniano como função de  $S_i$  e  $S_j$ . Ou seja, precisamos fazer uma transformação no termo que acompanha o campo, para enfim poder representar nosso sistema na forma de rede de tensores. Em outras palavras, devemos fazer:

$$\sum_i S_i \longleftrightarrow \sum_{\langle i,j \rangle} f(S_i, S_j). \quad (3.2)$$

Para isso, considere a seguinte combinação linear

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i S_i = a \sum_i \delta(S_i, \bar{S}) + b \sum_j \delta(S_j, \bar{S}) + c \\ = a \sum_i \delta(S_i, 1) + b \sum_j \delta(S_j, 1) + c, \end{array} \right. \quad (3.3)$$

onde  $\delta$  é o delta de Kronecker,  $c$  é uma constante e que, devido ao campo magnético  $h$  se orientar no sentido positivo do eixo  $z$ , temos  $\bar{S} = 1$ . Como temos um sistema de dois estados ( $q = 2$ ), sabemos que  $S_i = \pm 1$ , e portanto

$$\sum_{i=1}^2 S_i = \left\{ \begin{array}{ll} = 2, & \text{se } S_i = S_j = 1 \\ = -2, & \text{se } S_i = S_j = -1 \\ = 0, & \text{se } S_i = 1 \text{ e } S_j = -1 \\ = 0, & \text{se } S_i = -1 \text{ e } S_j = 1 \end{array} \right. \quad (3.4)$$

e assim resolvendo o sistema temos que  $a = 2, b = 2$  e  $c = -2$ . E assim, generalizando para uma rede quadrada, temos

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{2h}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} [\delta(S_i, 1) + \delta(S_j, 1)] + 2Nh, \quad (3.5)$$

ou simplesmente,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{h}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [\delta(S_i, 1) + \delta(S_j, 1)], \quad (3.6)$$

Já que constante  $2Nh$  da equação 3.5 é irrelevante. E assim, podemos simplesmente trabalhar com a equação 3.6. Pois, como sabemos, a função de partição permanece invariante por transformação de escala. Isso implica dizer que:

$$\left\{ \begin{array}{l} Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} \\ = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta(H+E_0)} \\ = e^{-\beta E_0} \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} \\ Z' = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H}. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Com esse Hamiltoniano  $H$  (equação 3.6), temos:

$$H = \left\{ \begin{array}{ll} = -J - h, & \text{se } S_i = S_j = 1 \\ = J - h/2, & \text{se } S_i = 1 \text{ e } S_j = -1 \\ = J - h/2, & \text{se } S_i = -1 \text{ e } S_j = 1 \\ = -J, & \text{se } S_i = S_j = -1, \end{array} \right. \quad (3.8)$$

e assim temos a matriz  $W$  dada por:

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta(J-h/2)} \\ e^{-\beta(J-h/2)} & e^{\beta J} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Para determinar os tensores locais, como sabemos, precisamos decompor nossa matriz  $W$  em valores singulares (*SVD*) para poder determinar os  $Q$ 's. Isso pode ser feito de várias maneiras, e é bem simples essa obtenção usando recursos do MATLAB, que é um software interativo de alta performance voltado para o cálculo numérico, muito usado

para operações envolvendo matrizes. De posse desses tensores iniciais, começamos o processo de contrações e renormalizações. Nosso programa foi feito seguindo as seguintes ideias centrais:

Começamos entrando com o tensor inicial no programa, já que de posse da matriz  $W$  a sua obtenção é simples. E assim o programa segue contraindo esses tensores alternadamente nas direções vertical e horizontal. E a cada etapa de contração, renormalizamos os mesmos. Em suma, é necessário fazer a equação 2.28 indo em 2.37, ou seja,

$$M^{(n)} \longrightarrow T^{(n+1)}. \quad (3.10)$$

Isso pode ser feito e elaborado de várias maneiras e métodos, se resumindo basicamente a problemas de technicalidade. É importante novamente ressaltar que o método HOTRG é na verdade um método exato (necessitando nesse caso de uma dimensão de corte  $D_c$  muito pequena) [37]. No presente trabalho não é possível ser feito de forma exata, já que a dimensão foi fixada em  $D_c = 20$ .

Sobre essas ideias centrais temos três pontos importantes a destacar:

1. Em relação à renormalização:

Essas renormalizações irão acontecer tanto na direção horizontal ( $y$ ) quando na vertical ( $x$ ), e serão feitas seguindo o mesmo princípio. Vimos na sessão de fundamentos que a ideia seria obter o tensor dado pela equação 2.37, e para isso, seria necessário primeiramente "matrizar" o tensor  $M$  (equação 2.32) e a partir dele poder determinar as matrizes  $U^L$  e  $U^R$  para enfim atualizar o tensor (equação 2.37). Na prática, vimos que não precisamos calcular explicitamente a matriz  $M'$  para poder determinar as matrizes  $U^L$  e  $U^R$ , pois os mesmos são calculados usando decomposição em valores singulares, onde se recai basicamente em problemas de autovalor e autovetor. Sendo assim, o que fizemos foi em vez de se trabalhar com a matriz  $M'$  (onde se precisaria de uma memória computacional muito grande para explicitá-la, devido ao fato de sempre estarem aumentando a medida que as contrações são realizadas), trabalhamos com os índices dos tensores  $T$  da equação 2.28. E assim, por comparação dos valores de  $\varepsilon$  da equação 2.35 e 2.36 conseguimos determinar as matrizes  $U^L$  e  $U^R$ .

2. Em relação ao cálculo da energia livre:

Como dissemos, ao passo de cada renormalização de rede (depois de contrair e renormalizar esses tensores alternadamente nas duas direções) calcularemos sempre nesse momento a energia livre por partícula. A ideia seria calcular a energia sempre que renormalizarmos a rede, como se essa renormalização fosse obter uma rede  $2 \times 2$ . Esse cálculo é dado da seguinte forma:

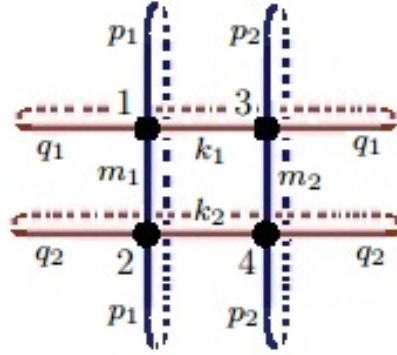
Partindo da função de partição,

$$Z = Tr \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i}, \quad (3.11)$$

iremos calcular de forma exata essa função de partição para uma rede  $2 \times 2$ , ou seja,

$$Z = Tr [T_{x_1 x'_1 y_1 y'_1} \cdot T_{x_2 x'_2 y_2 y'_2} \cdot T_{x_3 x'_3 y_3 y'_3} \cdot T_{x_4 x'_4 y_4 y'_4}]. \quad (3.12)$$

E usando condições periódicas de contorno para as ligações dos tensores (Figura 3.1), temos:



**Figura 3.1** Uma rede de tensores  $2 \times 2$  enumerada, bem como seus índices nas ligações, como forma de explicar a periodicidade de suas ligações.

$$\left\{ \begin{aligned} Z &= Tr [T_{x_1 x'_1 y_1 y'_1} \cdot T_{x_2 x'_2 y_2 y'_2} \cdot T_{x_3 x'_3 y_3 y'_3} \cdot T_{x_4 x'_4 y_4 y'_4}] \\ &= \left( \sum_{m_1} T_{x_1 x'_1 y_1 m_1} \cdot T_{x_2 x'_2 m_1 y'_2} \right) \left( \sum_{m_2} T_{x_3 x'_3 y_3 m_2} \cdot T_{x_4 x'_4 m_2 y'_4} \right) \quad (1) \\ &= \left( \sum_{p_1} \sum_{m_1} T_{x_1 x'_1 p_1 m_1} \cdot T_{x_2 x'_2 m_1 p_1} \right) \left( \sum_{p_2} \sum_{m_2} T_{x_3 x'_3 p_2 m_2} \cdot T_{x_4 x'_4 m_2 p_2} \right) \quad (2) \\ &= \sum_{p_1} \sum_{m_1} \sum_{p_2} \sum_{m_2} \left( \sum_{k_1} T_{x_1 k_1 p_1 m_1} \cdot T_{k_1 x'_3 p_2 m_2} \right) \left( \sum_{k_2} T_{x_2 k_2 m_1 p_1} \cdot T_{k_2 x'_4 m_2 p_2} \right) \quad (3) \\ &= \sum_{p_1} \sum_{m_1} \sum_{p_2} \sum_{m_2} \left( \sum_{q_1} \sum_{k_1} T_{q_1 k_1 p_1 m_1} \cdot T_{k_1 q_1 p_2 m_2} \right) \left( \sum_{q_2} \sum_{k_2} T_{q_2 k_2 m_1 p_1} \cdot T_{k_2 q_2 m_2 p_2} \right). \quad (4) \end{aligned} \right. \quad (3.13)$$

Na equação 3.13, os passos foram dados da seguinte forma: (1) e (2) foram as contrações na direção vertical, com (1) sendo a soma feita entre os sítios e (2) a soma foi feita seguindo a periodicidade. Nos passos (3) e (4) as contrações foram feitas na direção horizontal, com (3) sendo a soma feita entre os sítios e (4) a soma foi feita seguindo a periodicidade. E com isso, extraímos nossa energia por partícula. Na prática, não se calculou sempre esse energia, pois o termo correspondente a energia livre de Helmholtz por partícula relativo a uma rede  $2 \times 2$  irá a zero no limite termodinâmico como veremos logo adiante.

### 3. Em relação ao reescalonamento dos tensores:

É importante mais uma vez frisar que na prática, não precisamos estar calculando sempre a energia livre por partícula de uma rede  $2 \times 2$ . Isso se deve ao fato do termo relativo a energia livre por partícula de uma rede  $2 \times 2$  ir a zero no limite termodinâmico. Para melhor entendimento considere que o sistema convergiu partindo de uma rede  $N = 64$ . Ou seja, temos nesse caso,

$$Z = Tr \prod_{i=1}^{N=64} T_{x_i x'_i y_i y'_i}. \quad (3.14)$$

Devido os tensores sempre “aumentarem” a medida que as contrações são realizadas, houve a necessidade de sempre estarmos reescalando os mesmos. Ou seja, olhando para os elementos do tensor podemos dividi-lo pelo maior elemento desse tensor. Considere que esse maior elemento seja representado por  $a$ , sendo assim temos,

$$T_{x_i x'_i y_i y'_i} = a \cdot T'_{x_i x'_i y_i y'_i}, \quad (3.15)$$

com isso reduzimos o tensor  $T$  ficando com o tensor reescalado  $T'$ . E com isso a equação 3.14 ficará na forma

$$Z = s_0^N \cdot Tr \prod_{i=1}^{N=64} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(0)}. \quad (3.16)$$

Observe que nesse caso  $s_0$  é o maior elemento do tensor inicial. Nesse momento se inicia o processo de contração, por exemplo, com uma contração no sentido vertical (poderia ser iniciado no sentido horizontal). Depois da primeira contração a rede se reduz por um fator de dois ( $64 \rightarrow 32$ ) e nesse momento reescalamos novamente o tensor, e assim a equação 3.16 fica na forma

$$Z = s_0^N \cdot s_1^{N/2} \cdot Tr \prod_{i=1}^{N/2=32} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(1)}. \quad (3.17)$$

Observe que nesse momento  $s_1$  é o maior elemento do tensor obtido pela primeira contração. Pela necessidade de estarmos sempre reescalando os tensores a medida que as contrações são feitas, chegaremos ao fim desse processo com uma rede  $2 \times 2$  (correspondendo a uma rede com quatro tensores), ou seja, ficaremos por fim com

$$Z = s_0^N \cdot s_1^{N/2} \cdot s_2^{N/4} \cdot s_3^{N/8} \cdot s_4^{N/16} \cdot Tr \prod_{i=1}^{N/16=4} T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(4)}. \quad (3.18)$$

Podemos escrever a equação 3.18 como,

$$\left\{ \begin{aligned} Z &= \left( \prod_{n=0}^4 s_n^{N/2^n} \right) \cdot Tr \prod_{i=1}^4 T_{x_i x'_i y_i y'_i}^{(4)} \\ &= \left( \prod_{n=0}^4 s_n^{N/2^n} \right) \cdot Z_4, \end{aligned} \right. \quad (3.19)$$

com  $Z_4$  fazendo o papel do traço relativo a rede  $2 \times 2$ .

Foi considerado até o momento que o sistema convergiu com uma rede  $N = 64$ . Mas se ao invés de ter partido de uma rede  $N = 64$  tivermos partido de uma rede maior, como por exemplo  $N' = 256$ . Note que nesse caso, devido ao sistema ainda continuar por hipótese convergindo em  $N = 64$ , a equação 3.19 fica

$$Z = \left( \prod_{n=0}^4 s_n^{N/2^n} \right) \cdot \left( \prod_{n=5}^6 s_n^{N/2^n} \right) \cdot Z_4. \quad (3.20)$$

Observe que nesse caso devido o sistema continuar convergindo em  $N = 64$ , partir de uma rede maior é totalmente desnecessário, e isso faz com que os fatores de escala ( $s$ ) a partir de uma rede  $N = 64$  fiquem todos constantes (já que o sistema já convergiu).

Generalizando essa ideia para um sistema com rede  $N$ , vai ter um número de passos finito ( $n_R$ ) no qual o sistema convergiu, em que depois disso todos os fatores de escala vão ser constantes. Em outras palavras, a generalização da equação 3.20 fica na forma,

$$Z = \left( \prod_{n=0}^{n_R} s_n^{N/2^n} \right) \cdot \left( \prod_{n=n_R+1}^{n^*} s_n^{N/2^n} \right) \cdot Z_4, \quad (3.21)$$

onde  $n^*$  vai depender do tamanho da rede. Calculando a energia livre por partícula no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) temos,



$$\frac{1}{N} \ln Z = \left( \sum_{n=0}^{n_R} 2^{-n} \cdot \ln s_n \right) + \left( \ln s \cdot \sum_{n=n_R+1}^{n^*} 2^{-n} \right) + \frac{1}{N} \ln Z_4, \quad (3.22)$$

e assim no limite que  $N \rightarrow \infty$  temos a energia livre por partícula,

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \left( \sum_{n=0}^{n_R} 2^{-n} \cdot \ln s_n \right) + \left( \ln s \cdot \sum_{n=n_R+1}^{\infty} 2^{-n} \right). \quad (3.23)$$

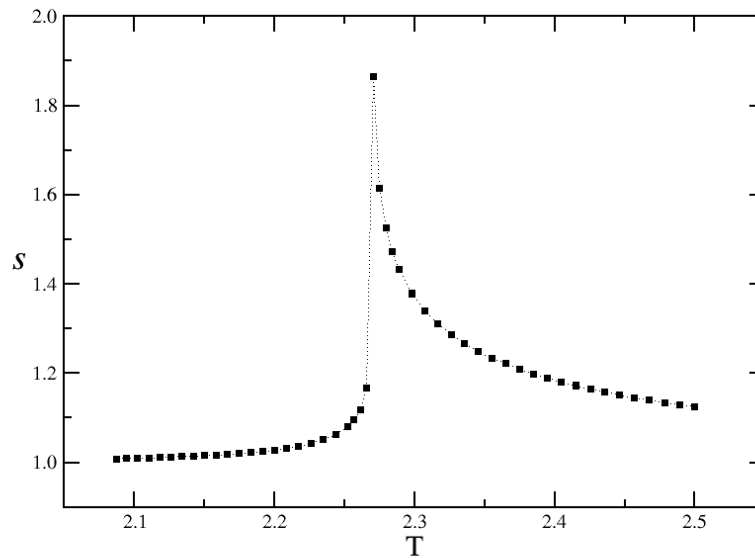
Não temos nenhum problema com a primeira soma da equação 3.23, já que  $n_R$  é finito. Já a segunda soma, relativo aos fatores de escala  $s$  na convergência do sistema, é onde se encontra a maior contribuição, em termos de novidade, do trabalho. É através do comportamento desses fatores de escala em que se consegue sinalizar a transição de fase do modelo em questão. É aparentemente nela que carrega toda informação contida no sistema. Observe ainda pelo segundo somatório, que temos uma progressão geométrica. Usando  $s = S$  e resolvendo essa progressão a equação 3.23 fica na forma,

$$f = \left( \sum_{n=0}^{n_R} 2^{-n} \ln s_n \right) + \left( \ln S \cdot \frac{1}{2^{n_R}} \right). \quad (3.24)$$

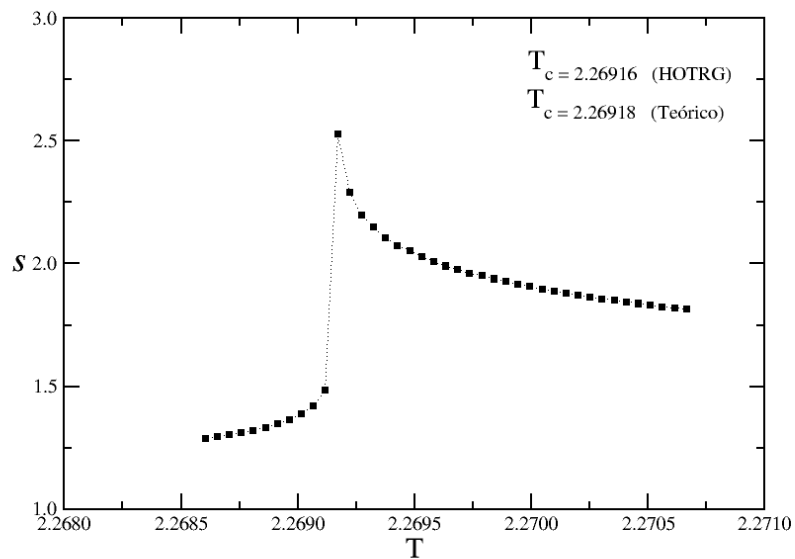
### 3.1.1 Resultados e Discussão do Modelo de Ising

Usando o método HOTRG, conseguimos representar bem a termodinâmica do modelo de Ising. Conseguimos resultados bastante precisos para sua temperatura crítica  $T_c$ , além de obter resultados satisfatórios dos seus expoentes críticos. Representamos os gráficos usando sempre a constante de Boltzmann e a energia de troca igual a um ( $k_B = J = 1$ ).

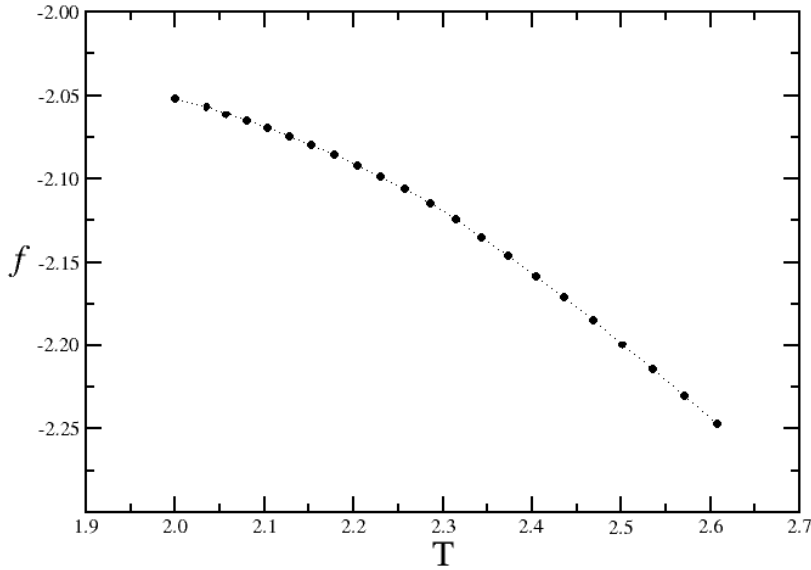
Analisando os fatores de escala na convergência do sistema em função da temperatura para o modelo de Ising, conseguimos determinar com uma ótima precisão sua temperatura crítica. A Figura 3.2, mostra o comportamento desses fatores para vários valores de temperaturas. Podemos perceber que numa região perto da criticalidade esse comportamento dá um salto, indicando a transição de fase do sistema. Percebe-se ainda que fora dessa região, para altas e baixas temperaturas, o sistema tende a uma constante. A Figura 3.3 foi obtida pela Figura 3.2 numa região de melhor visualização dessa temperatura crítica, onde obtemos  $T_c = 2.26916$ , que difere de seu valor exato na sua quinta casa decimal. Podemos dizer que são resultados muito bons em relação ao seu valor exato.



**Figura 3.2** Gráfico dos fatores de escala na convergência do sistema em função da temperatura para o modelo de Ising. Onde se percebe um salto no gráfico próximo a  $T_c$ .



**Figura 3.3** Fatores de escala do modelo de Ising, na convergência, em função da temperatura. Onde se determinou a temperatura crítica pelo método HOTRG, e se fez uma comparação com seu valor exato.

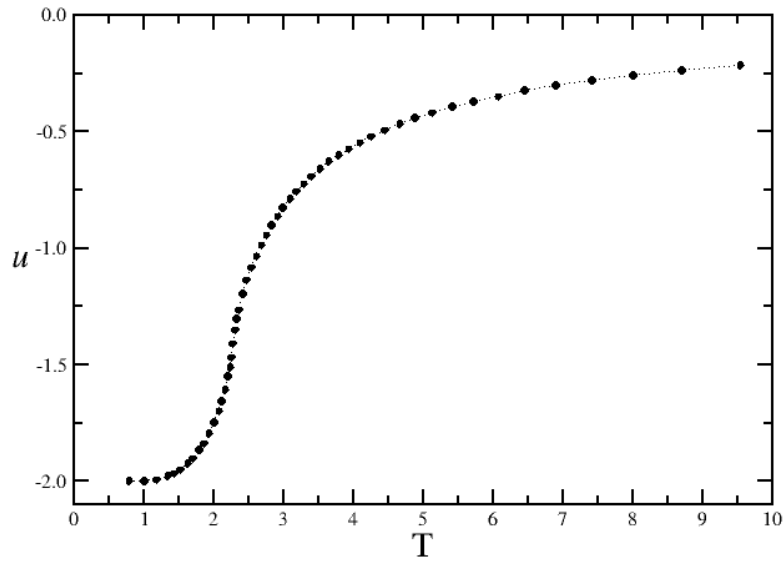


**Figura 3.4** Comportamento da Energia Livre de Helmholtz do Modelo de Ising usando o método HOTRG.

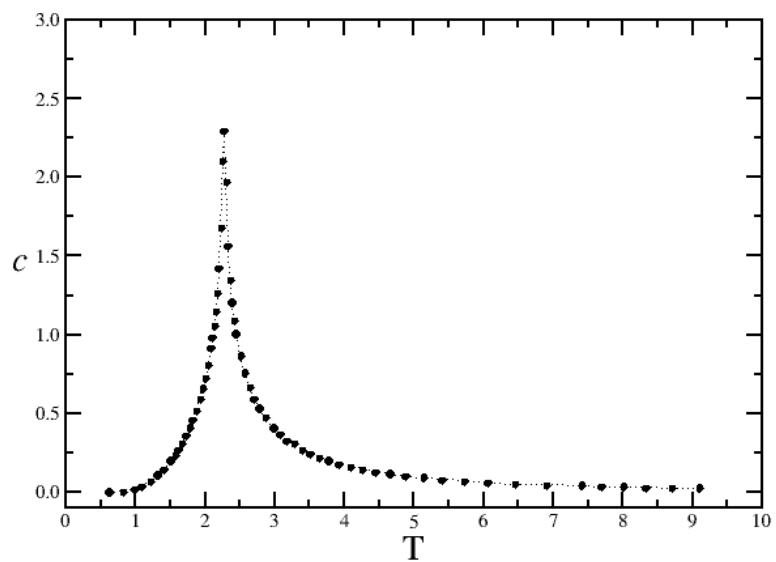
Conhecendo a energia livre de Helmholtz pelo gráfico da Figura 3.4, ou simplesmente conhecendo a função termodinâmica descrita pela equação 1.26, podemos determinar o comportamento das outras grandezas termodinâmicas como energia interna (Figura 3.5) e calor específico (Figura 3.6), usando as relações das equações 1.27 e 1.28 respectivamente. Note, tanto pelo gráfico da energia interna quanto do calor específico, que próximos a temperatura crítica, o comportamento dessas grandezas mudam. Em relação a energia interna, na temperatura crítica temos um ponto de inflexão (antes de  $T_c$  está com a concavidade voltada para cima e depois para baixo), já no calor específico, temos um salto do gráfico, indicando sua transição.

Observe pela figura 3.7, para valores grandes de campo  $h$ , que sua magnetização (em unidades apropriadas) é igual a  $+1$  (ou  $-1$  para valores baixos de  $h$ , devido ao sistema ser invariante por inversão),  $m(T) = \lim_{h \rightarrow 0^+} m(h, T)$ . E para os casos de baixas temperaturas  $T < T_c$ , como é o caso por exemplo de  $\beta = 0.46$  ( $\beta = T^{-1}$ ), ao fazermos o campo indo a zero ( $h = 0$ ) sua magnetização irá diminuir, mas não até zero. Em vez disso, a campo zero, ele terá uma magnetização espontânea  $m_0$ . Sendo assim, para baixas temperaturas,  $m(h)$  apresenta uma descontinuidade em  $h = 0$ .

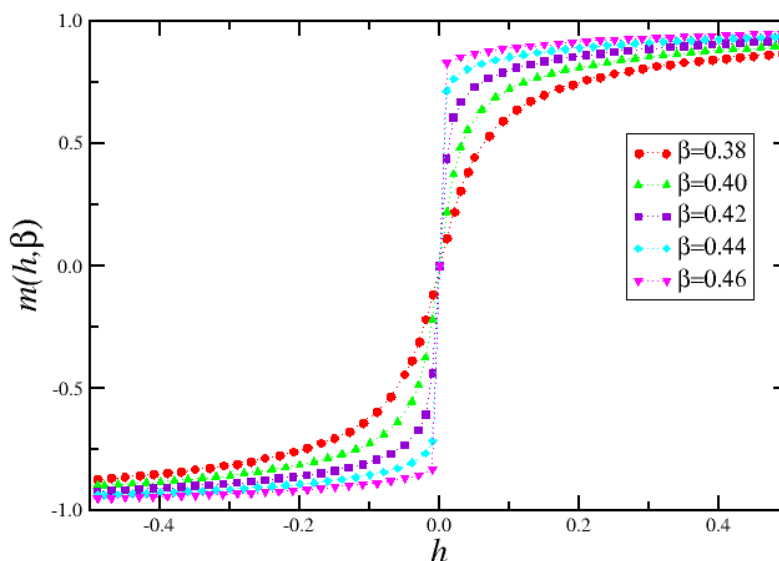
Note ainda, que se a temperatura for ligeiramente aumentada, observa-se que o gráfico continua sendo bem semelhante, apenas com  $m_0$  sendo diminuído. E se aumentarmos ainda mais a temperatura, como é no caso por exemplo de  $\beta = 0.38$  ( $\beta = T^{-1}$ ),  $m(h)$  torna-se uma função analítica em  $h = 0$ . O comportamento de nossa magnetização está totalmente de acordo com os resultados encontrados na literatura, como citados em [15].



**Figura 3.5** Comportamento da Energia Interna do Modelo de Ising usando o método HOTRG.



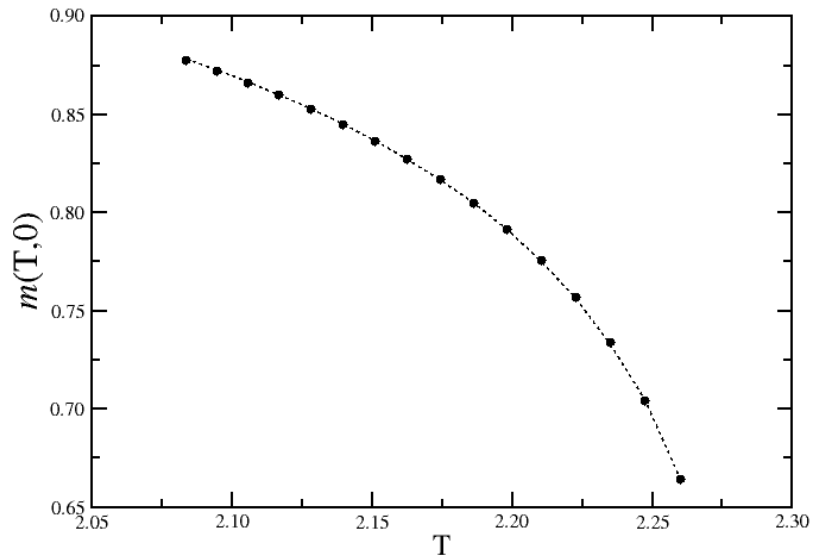
**Figura 3.6** Comportamento do Calor Específico do Modelo de Ising usando o método HOTRG.



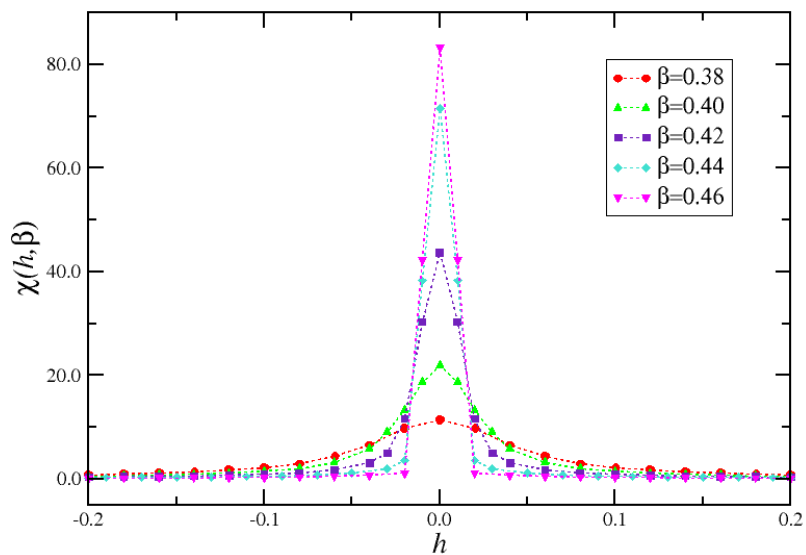
**Figura 3.7** Comportamento da Magnetização em função do campo magnéticos para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG. Em  $h = 0$ , para baixas temperaturas, nota-se o aparecimento de uma magnetização espontânea.

Para determinar os expoentes críticos  $\beta$  e  $\gamma$ , relativos a magnetização e susceptibilidade ( $m_0(T) \sim (-t)^\beta$ , quando  $t \rightarrow 0^-$ , e  $\chi(0, T) \sim (t)^{-\gamma}$  quando  $t \rightarrow 0^+$ ), o procedimento é simples e é feito seguindo o mesmo princípio. Para o caso da magnetização, e como o expoente crítico  $\beta$  é obtido em  $h = 0$ , esboçamos um gráfico da magnetização em função da temperatura quando  $h = 0$  (figura 3.8). Depois disso, através do gráfico  $\log_{10} m$  versus  $\log_{10}(1 - T/T_c)$ , conseguimos determinar o expoente crítico  $\beta = 0.108$  através da inclinação da reta ajustada, figura 3.9.

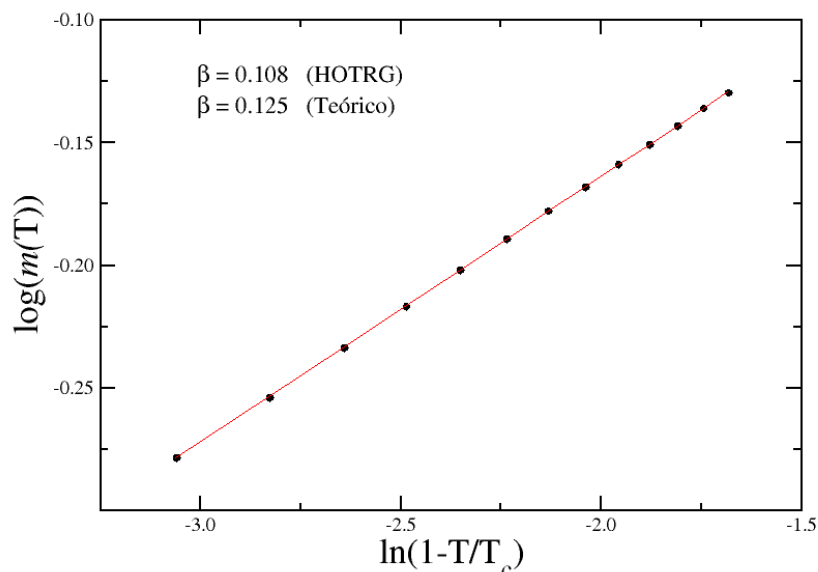
Ainda comentando sobre o gráfico 3.8, observe que ele está de acordo com o esperado para seu comportamento [15]. Podemos observar e esperar pelo nosso gráfico, que a magnetização espontânea vá a zero em  $T_c$ . Observe também pelo gráfico, figura 3.8, que sua magnetização vai para 1 a medida que a temperatura diminui. Isso pode ser observado também pelo gráfico da figura 3.7, onde nota-se que a medida que diminuimos a temperatura, a magnetização espontânea vai a 1. Esses resultados estão de acordo como citados em [15].



**Figura 3.8** Comportamento da magnetização em função da temperatura do modelo de Ising ( $h = 0$ ). Indicando uma queda abrupta a medida que se aproxima da temperatura crítica e sua magnetização espontânea tendendo a 1 a medida que a temperatura diminui.



**Figura 3.10** Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG.

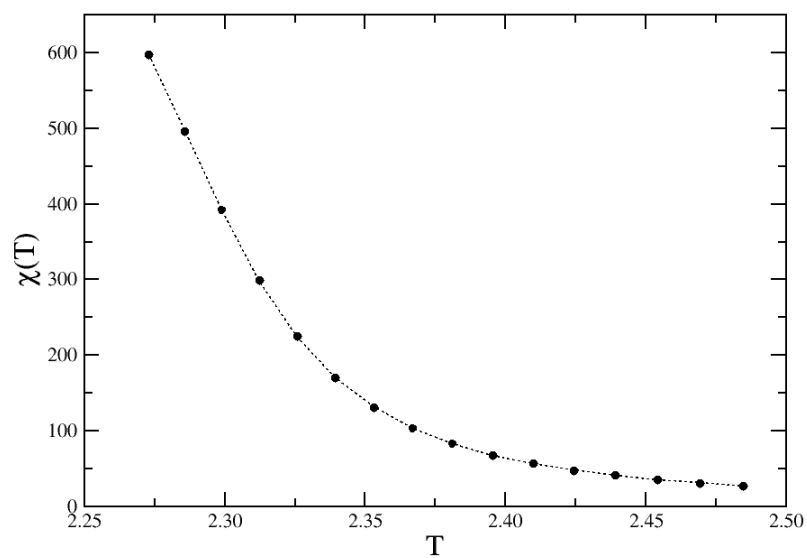


**Figura 3.9** Gráfico  $\log_{10}m$  versus  $\log_{10}(1 - T/T_c)$ . Onde se obteve, através do coeficiente angular da curva linearizada, o expoente crítico  $\beta$  para o Modelo de Ising usando o método HOTRG e que se fez uma comparação com seu valor teórico.

Para o expoente  $\gamma$ , procedemos de forma semelhante. Pelo gráfico da figura 3.12, determinamos o expoente crítico  $\gamma = 1.65$ . Conseguimos determinar o expoente crítico através do gráfico da figura 3.11 (semelhante ao caso da magnetização), que pode ser obtido pelo comportamento da susceptibilidade em função do campo magnético em  $h = 0$ , ver figura 3.10.

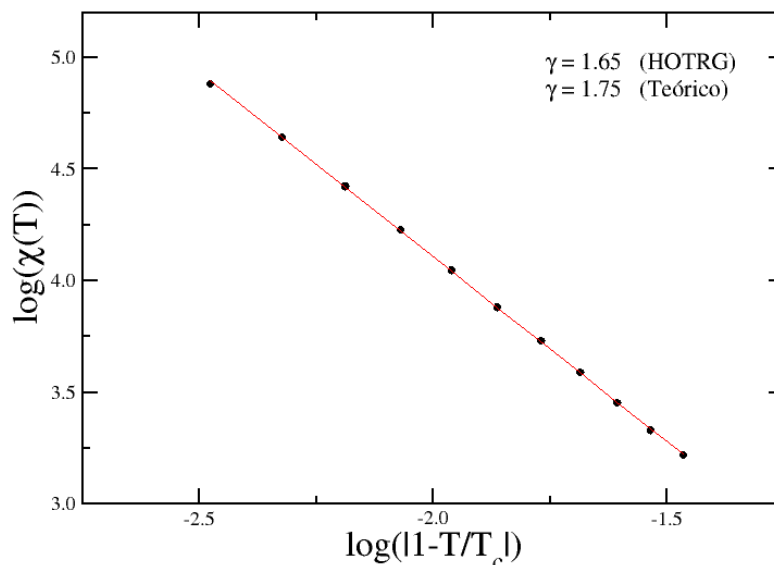
Observe pela figura 3.11 que a medida que nos aproximamos da temperatura crítica ( $T \rightarrow T_c^+$ ) o gráfico diverge para mais infinito. Isso se deve ao fato da susceptibilidade divergir em  $T_c$ . É importante ressaltar que existe também uma divergência em  $T \rightarrow T_c^-$  para mais infinito, apesar de nosso gráfico não mostrar no limite em que  $T \rightarrow T_c^-$ . Toda análise feita está em perfeito acordo com os resultados encontrados na literatura, como citados por exemplo em [15].

Usando as relações já conhecidas (equação 1.31), podemos determinar os outros expoentes críticos. Assim, usando o método HOTRG, temos os valores dos expoentes críticos para o modelo de Ising dados pela tabela 3.1. Falando um pouco sobre os expoentes críticos obtidos pelos método HOTRG, podemos perceber que são resultados relativamente bons. Observe novamente pela tabela que alguns resultados são realmente muito próximos, como é o caso por exemplo do  $\nu$ , que está relacionado com o comprimento de correlação do sistema.



**Figura 3.11** Comportamento da susceptibilidade em função da temperatura do modelo de Ising ( $h = 0$ ). Indicando que a susceptibilidade vai a zero para temperaturas muito altas e que seu valor cresce muito a medida que a temperatura se aproxima da temperatura crítica.



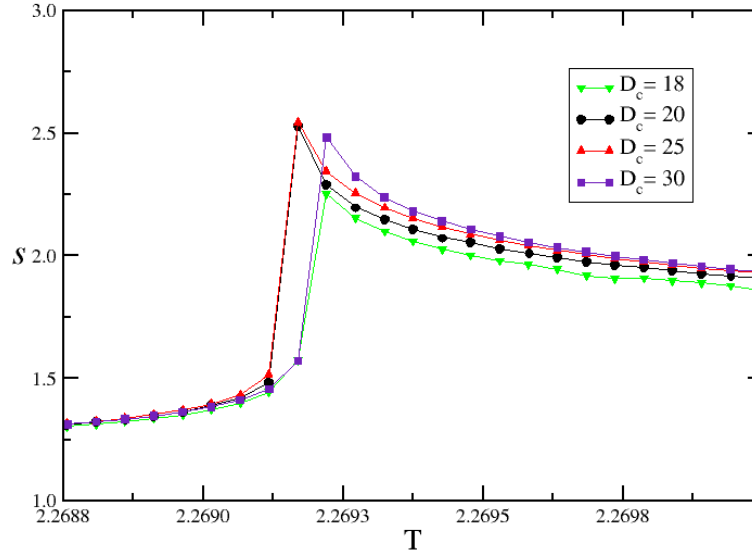


**Figura 3.12** Gráfico  $\log_{10}\chi$  versus  $\log_{10}(|1 - T/T_c|)$ . Onde se obteve, através do coeficiente angular da curva linearizada, o expoente crítico  $\gamma$  para o Modelo de Ising usando o método HOTRG e que se fez uma comparação com seu valor teórico.

**Tabela 3.1** Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Ising exato e usando o método HOTRG (2D).

| Modelo   | Ising - Exato | Ising - HOTRG |
|----------|---------------|---------------|
| $\alpha$ | $0(\log)$     | 0.134         |
| $\beta$  | 1.25          | 0.108         |
| $\gamma$ | 1.75          | 1.65          |
| $\delta$ | 15            | 16            |
| $\nu$    | 1             | 0.933         |
| $\eta$   | 0.25          | 0.23          |

A figura 3.13, mostra o como os fatores de escala na convergência varia em função da temperatura para alguns valores da dimensão de corte  $D_c$ . Mostrando como a temperatura crítica do modelo de Ising varia com essa dimensão. Note que ao aumentar nossa dimensão de corte, isso não implica necessariamente em resultados mais precisos para essas temperaturas. Os resultados com uma boa aproximação, unidos de um tempo computacional satisfatório, foram utilizando uma dimensão de corte  $D_c = 20$ .



**Figura 3.13** Comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Ising variando a dimensão de corte  $D_c$ .

### 3.2 MODELO DE POTTS

Iremos proceder de forma bastante similar ao que foi feito na seção anterior. O hamiltoniano do sistema será dado nesse caso por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j) + \frac{h}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} [\delta(S_i, 0) + \delta(S_j, 0)], \quad (3.25)$$

note que nesse caso o campo está desfavorecendo o estado  $S_i = 0$ . Usando sempre a equação 2.15 para representar a matriz  $W$ , temos:

1. Para o caso  $q = 3$ , temos:

$$H = \begin{cases} = -J + h/2, & \text{se } S_i = S_j = 0 \\ = h/4, & \text{se } S_i = 1 \text{ e } S_j = 0 \\ = h/4, & \text{se } S_i = 2 \text{ e } S_j = 0 \\ = h/4, & \text{se } S_i = 0 \text{ e } S_j = 1, \\ = -J, & \text{se } S_i = S_j = 1 \\ = 0, & \text{se } S_i = 2 \text{ e } S_j = 1, \\ = h/4, & \text{se } S_i = 0 \text{ e } S_j = 2, \\ = 0, & \text{se } S_i = 1 \text{ e } S_j = 2 \\ = -J, & \text{se } S_i = S_j = 2, \end{cases} \quad (3.26)$$

e assim temos a matriz  $W$  dada por:

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta(J-h/2)} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} \\ e^{-\beta h/4} & e^{\beta J} & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & e^{\beta J} \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Com a matriz escrita na equação 3.27, iremos proceder de forma semelhante como mostrado anteriormente. Iremos, com o auxílio de uma rotina em MATLAB, determinar os tensores iniciais, e a partir daí iniciar o processo de renormalização da rede.

2. De forma semelhante, para os casos  $q = 4$  e  $q = 5$ , temos:

$$(i) \quad W(q = 4) = \begin{pmatrix} e^{\beta(J-h/2)} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} \\ e^{-\beta h/4} & e^{\beta J} & 1 & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & e^{\beta J} & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & 1 & e^{\beta J} \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

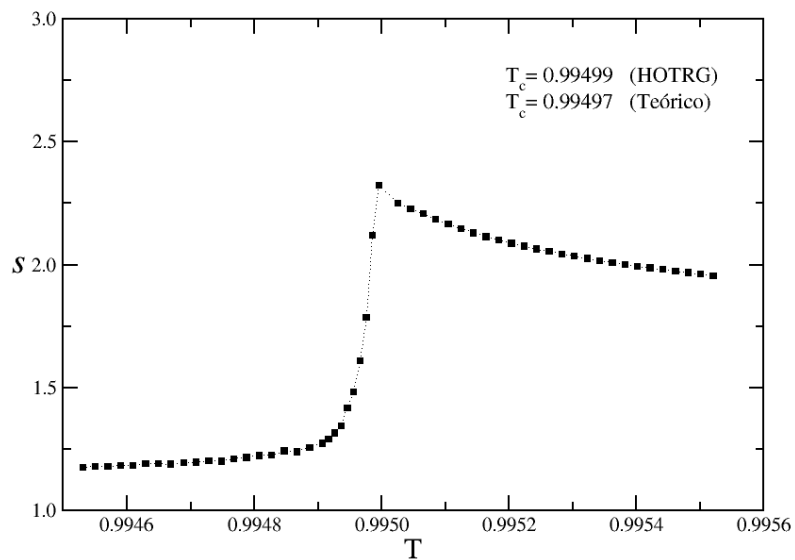
$$(ii) \quad W(q = 5) = \begin{pmatrix} e^{\beta(J-h/2)} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} & e^{-\beta h/4} \\ e^{-\beta h/4} & e^{\beta J} & 1 & 1 & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & e^{\beta J} & 1 & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & 1 & e^{\beta J} & 1 \\ e^{-\beta h/4} & 1 & 1 & 1 & e^{\beta J} \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

### 3.2.1 Resultados e Discussão do Modelo de Potts

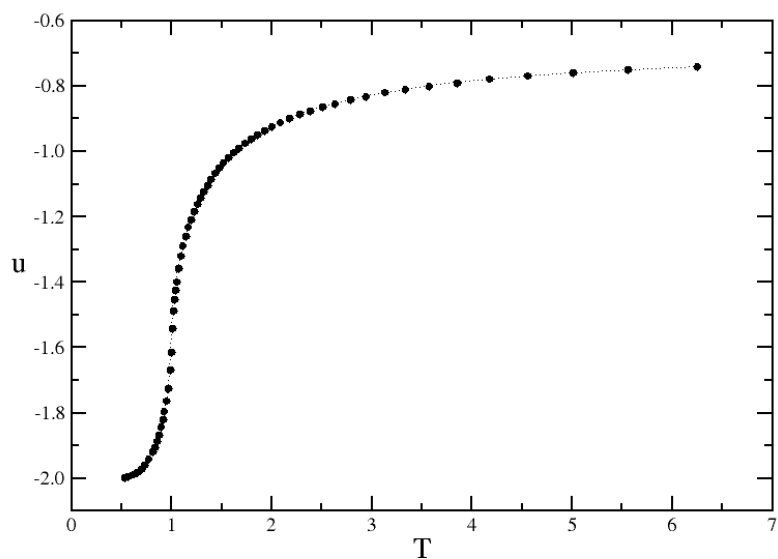
1. Para o caso  $q = 3$ :

Usando o método HOTRG, conseguimos representar bem o comportamento termodinâmico do modelo Potts. Consideramos a constante de Boltzmann ( $k_B$ ) e a energia de troca ( $J$ ) sempre igual a um. Analisando o comportamento dos fatores de escala em sua convergência, conseguimos obter de forma bastante precisa sua temperatura na transição. Observando o gráfico da figura 3.14, foi possível determinar de forma bem precisa, mas não exata, a temperatura crítica do modelo. Com resultados diferindo na quinta casa decimal, em relação ao valor exato (obtida através da equação 1.36).

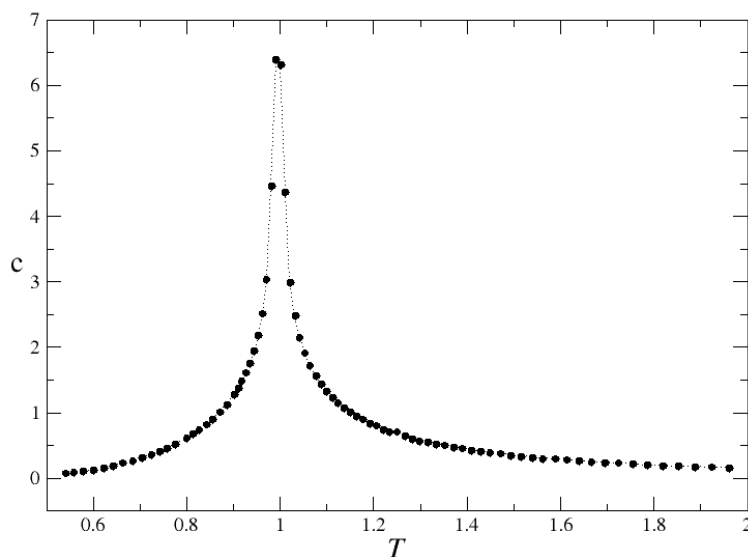
Pelos gráficos da energia interna (figura 3.15) e do calor específico (figura 3.16), foi possível notar uma mudança em seu comportamento na região da transição. Na energia interna com uma mudança de sua concavidade em  $T_c$  e no calor específico com um ponto de máximo.



**Figura 3.14** Determinação da temperatura crítica  $T_c$  usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts  $q = 3$ .



**Figura 3.15** Energia Interna do Modelo de Potts  $q = 3$  usando o método HOTRG.

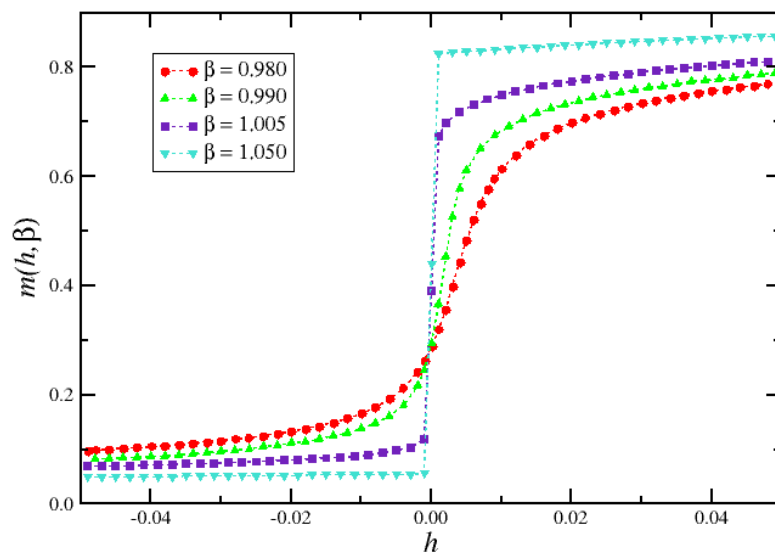


**Figura 3.16** Calor Específico do Modelo de Potts  $q = 3$  usando o método HOTRG.

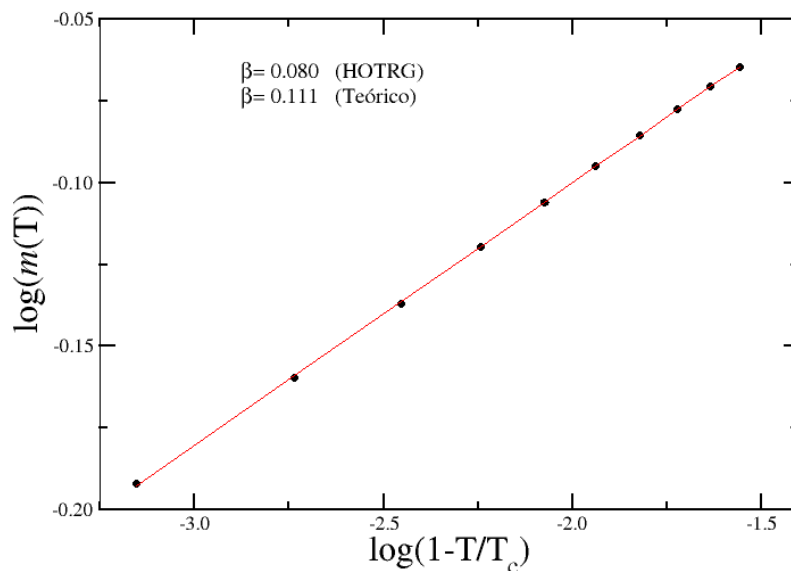
No gráfico da magnetização em função do campo magnético para o modelo de Potts com  $q = 3$ , note que é semelhante ao do modelo de Ising visto anteriormente. Note que, diferentemente do modelo de Ising, o sistema não apresenta uma certa simetria em torno de  $h = 0$ . Isso se deve ao fato do sistema ter três estados. Os expoentes críticos  $\beta$  e  $\gamma$  foram obtidos de forma análoga ao feito anteriormente no modelo de Ising. Através do gráfico da magnetização 3.17 quando  $h \rightarrow 0^+$ , construímos o gráfico  $\log_{10}m$  versus  $\log_{10}(1 - T/T_c)$ , ver figura 3.18, e através do ajuste da curva conseguimos determinar o expoente crítico  $\beta = 0.080$ .

De modo semelhante ao da magnetização, observando o gráfico da susceptibilidade em  $h = 0$ , figura 3.19, conseguimos pelo gráfico 3.20 determinar o expoente crítico  $\gamma = 1.429$ . Valor bem próximo do exato (tabela 3.2).

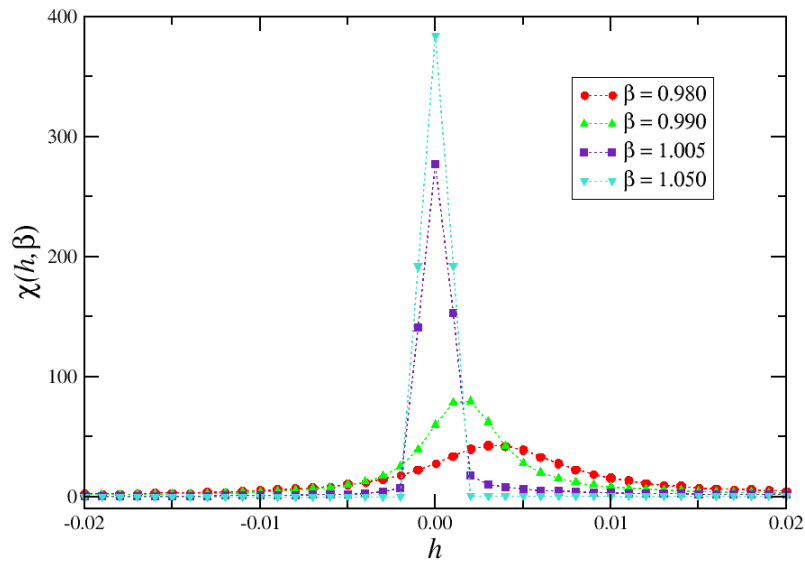
Usando as relações da equação 1.31, podemos determinar os outros expoentes críticos. E assim, para o modelo de Potts  $q = 3$  usando o método HOTRG, temos pela tabela 3.2



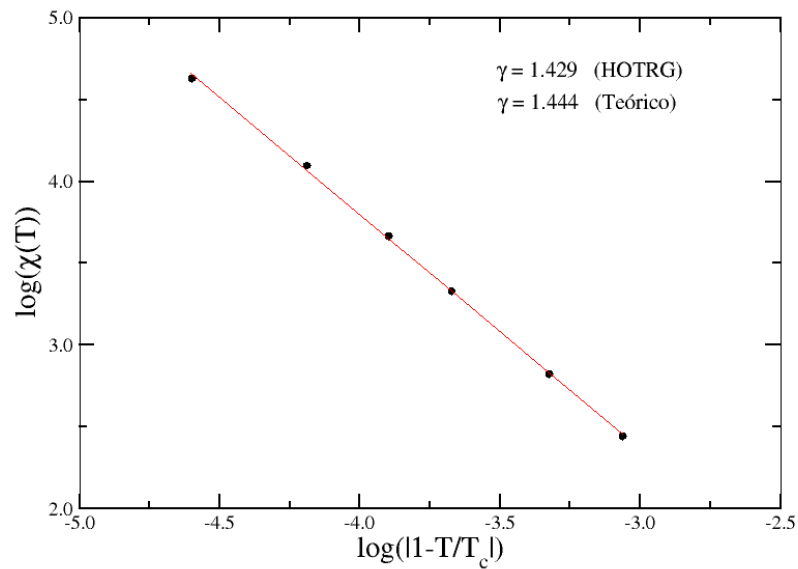
**Figura 3.17** Comportamento da Magnetização em função do campo magnético para o modelo de Potts com  $q = 3$  para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG.



**Figura 3.18** Expoente crítico  $\beta$  do Modelo de Potts  $q = 3$  usando o método HOTRG. Expoente obtido através da inclinação da reta linearizada.



**Figura 3.19** Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para o modelo de Potts com  $q = 3$  para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG.

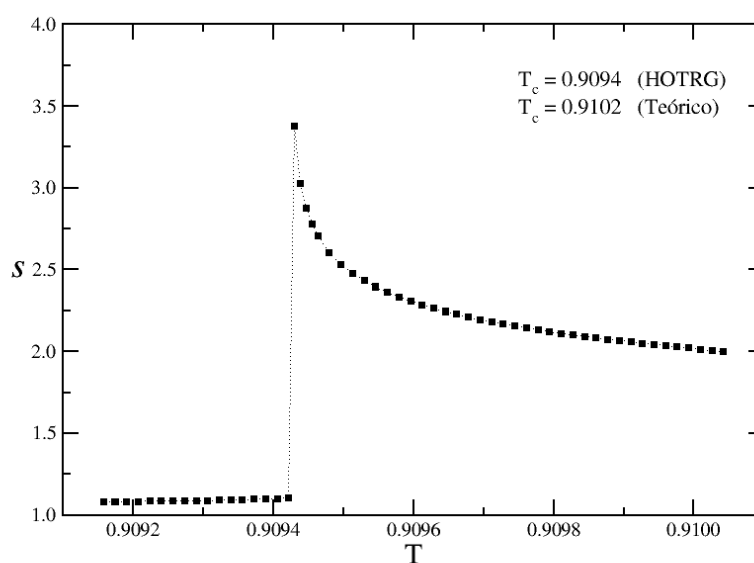


**Figura 3.20** Expoente crítico  $\gamma$  do Modelo de Potts  $q = 3$  usando o método HOTRG. Expoente obtido através da inclinação da reta lineariza.

**Tabela 3.2** Comparação entre os expoentes críticos do modelo de Potts ( $q = 3$ ) exatos e usando o método HOTRG (2D).

| Modelo de Potts | $q = 3$ (Exato) | $q = 3$ (HOTRG) |
|-----------------|-----------------|-----------------|
| $\alpha$        | $1/3 = 0.333$   | 0.411           |
| $\beta$         | $1/9 = 0.111$   | 0.080           |
| $\gamma$        | $13/9 = 1.444$  | 1.429           |
| $\delta$        | 14              | 18.8            |
| $\nu$           | $5/6 = 0.8333$  | 0.7945          |
| $\eta$          | $4/15 = 0.266$  | 0.201           |

2. Para os caso  $q = 4$ , restringimos nossa análise apenas na temperatura crítica de transição de fase. E mais uma vez, analisando o comportamento dos fatores de escala na convergência, ver figura 3.21, conseguimos determinar a temperatura de transição.



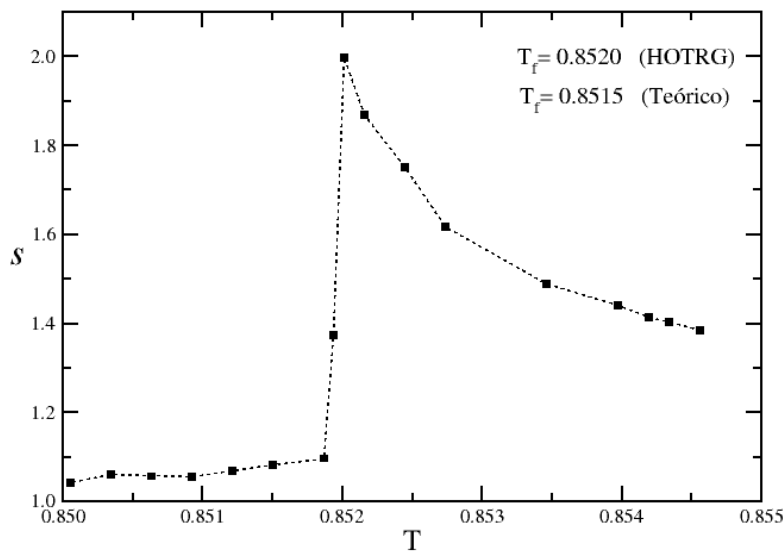
**Figura 3.21** Determinação da temperatura crítica  $T_c$  usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts  $q = 4$ .

3. Para os caso  $q = 5$ :

Figura 3.22 mostra a temperatura de transição de fase do modelo de Potts para  $q = 5$ . Com resultados muito bons em relação ao seu valor exato.

Os gráficos das figuras 3.23 e 3.24 mostra, respectivamente, o comportamento da magnetização e susceptibilidade em função do campo magnético do modelo de





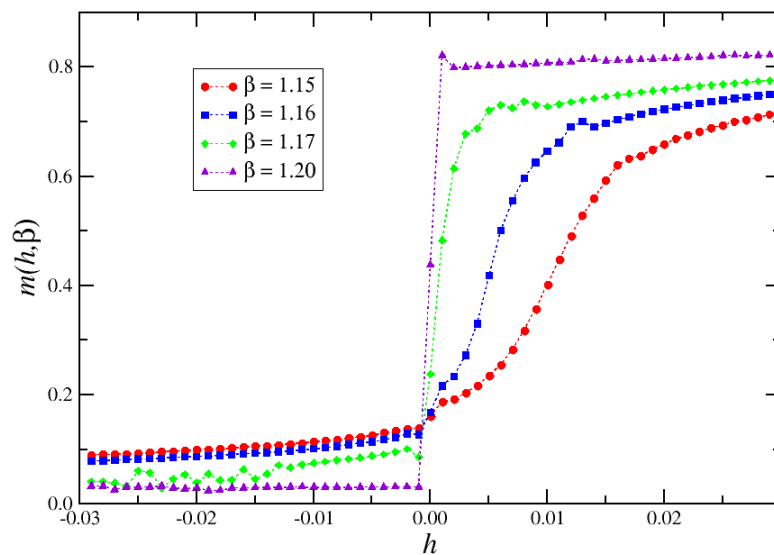
**Figura 3.22** Determinação da temperatura de transição de fase  $T_f$  usando o comportamento dos fatores de escala, em sua convergência, do modelo de Potts  $q = 5$ .

Potts para  $q = 5$  usando o método HOTRG. No qual, como sabemos, apresenta uma transição de fase de primeira ordem.

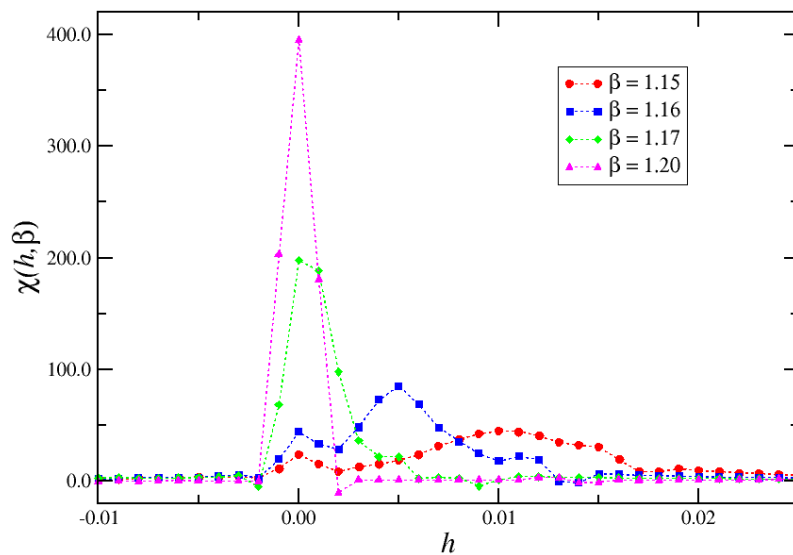
A tabela 3.3 mostra as temperaturas de transição de fase para o modelo de Ising e Potts.

| Modelo  | HOTRG   | Teórico |
|---------|---------|---------|
| Ising   | 2.26916 | 2.26918 |
| $q = 3$ | 0.99499 | 0.99497 |
| $q = 4$ | 0.9094  | 0.9102  |
| $q = 5$ | 0.8520  | 0.8515  |

**Tabela 3.3** Comparação entre as temperaturas de transição de fase do método HOTRG e Teóricos para os modelo de Ising e Potts ( $q = 3, 4, 5$ ).



**Figura 3.23** Comportamento da Magnetização em função do campo magnético para o modelo de Potts com  $q = 5$  para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG.



**Figura 3.24** Comportamento da Susceptibilidade em função do campo magnéticos para o modelo de Potts com  $q = 5$  para alguns valores de  $\beta$  ( $\beta = 1/k_B T$ ) usando o método HOTRG.

## CONCLUSÕES

Usando o método HOTRG, conseguimos reproduzir bem a termodinâmica do modelo de Ising e do modelo de Potts ( $q = 3$  e  $q = 5$ ). Determinamos os expoentes críticos pelo modelo HOTRG e comparamos com os resultados exatos (ver Tabelas 3.1,3.2). Determinamos, com a análise dos fatores de escala dos respectivos estados na convergência do sistema, a temperatura de transição de fase para os modelos de Ising e Potts ( $q = 3, 4$  e  $5$ ), ver Tabela 3.3. Com resultados bem precisos para essas temperaturas. Usando a equação 1.36, que nos fornece a temperatura crítica para qualquer  $q$ -estados do modelo de Potts, e com isso refinando melhor o intervalo ao qual fazemos o programa variar, conseguimos determinar, de forma relativamente rápida (algo em torno de  $15/20mim$ , com precisão de  $10^{-5}$ ), à temperatura crítica com uma ótima precisão numérica. Esse fato em partícula, na qual conseguimos determinar de forma bem precisa as temperaturas de transições dos modelos analisando esses fatores de escala, foi sem dúvida a melhor contribuição, em termos de novidade, deste trabalho.

Outro ponto importante, foi que fixamos a dimensão de corte em  $D_c = 20$ , além de precisar de um maior tempo de processamento computacional para obter os resultados utilizando uma dimensão maior que essa, percebemos, através de nossa análise (ver Figura 3.13), que aumentar essa dimensão de corte não implica necessariamente em obter resultados melhores. Por esse motivo fixamos essa dimensão de corte em 20, no qual já conseguimos resultados muito bons em relação as temperaturas de transição de fase dos modelos. O que seria natural de se esperar, ao aumentar a dimensão de corte, era dos resultados serem melhores, mais precisos. Mas, como já havíamos dito, isso não se verificou. Sendo assim, isso pode ser um limitador do método ou do modo de elaboração do programa. Precisaria de um tempo maior de investigação para se poder tirar alguma conclusão a respeito disso.

Podemos dizer, através das inúmeras contribuições e publicações na qual o método HOTRG foi responsável, bem como através dos resultados deste trabalho, que se trata de uma técnica muito poderosa e de alta precisão. Onde conseguimos extrair resultados bem significativos a respeito do modelos de Ising e Potts. Reproduzindo bem o comportamento da energia interna, calor específico, magnetização e susceptibilidade. Fizemos nossa análise, e estudo do método HOTRG, para sistemas que apresentam transições de fase de primeira ordem, como é o caso do modelo de Potts para  $q = 5$ , e os que apresentam transição de fase de segunda ordem, como é os casos do modelo de Ising e Potts com  $q = 3$ .

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] H. Eugene Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. International Series of Monographs on Physics. Oxford University Press, USA, 1987.
- [2] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang. Renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. B*, 81:174411, May 2010.
- [3] Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang. Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition. *Phys. Rev. B*, 86:045139, Jul 2012.
- [4] W.D. McComb. *Renormalization Methods: A Guide For Beginners*. OUP Oxford, 2004.
- [5] Teiji TAKAGI. On an algebraic problem related to an analytic theorem of carathéodory and fejér and on an allied theorem of landau. *Japanese journal of mathematics :transactions and abstracts*, 1:83–93, 1924.
- [6] V. Klema and A.J. Laub. The singular value decomposition: Its computation and some applications. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 25(2):164–176, Apr 1980.
- [7] Bjørn Ursin and Yuying Zheng. Identification of Seismic Reflections Using Singular Value Decomposition. *Modeling, Identification and Control*, 7(1):1–23, 1986.
- [8] S. Freire and T. Ulrych. Application of singular value decomposition to vertical seismic profiling. *GEOPHYSICS*, 53(6):778–785, 1988.
- [9] G. Jackson, I. Mason, and S. Greenhalgh. Principal component transforms of triaxial recordings by singular value decomposition. *GEOPHYSICS*, 56(4):528–533, 1991.
- [10] Efi Efrati, Zhe Wang, Amy Kolan, and Leo P. Kadanoff. Real-space renormalization in statistical mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 86:647–667, May 2014.
- [11] L. De Lathauwer, B. De Moor, and J. Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 21(4):1253–1278, 2000.
- [12] G.W. Stewart. *Introduction to matrix computations*. Computer science and applied mathematics. Academic Press, 1973.

- [13] Alexander M. Chebotarev and Alexander E. Teretenkov. Singular value decomposition for the takagi factorization of symmetric matrices. *Applied Mathematics and Computation*, 234(0):380 – 384, 2014.
- [14] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925.
- [15] R.J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, 1982.
- [16] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 2007.
- [17] R. Peierls. On ising’s model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32:477–481, 10 1936.
- [18] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports-review Section of Physics Letters*, 368:549–727, 2002.
- [19] David Sherrington. Spin glasses: A perspective. In Erwin Bolthausen and Anton Bovier, editors, *Spin Glasses*, volume 1900 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 45–62. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [20] J. Ashkin and E. Teller. Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.*, 64:178–184, Sep 1943.
- [21] C Domb. Configurational studies of the potts models. *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, 7(11):1335, 1974.
- [22] R. B. Potts. Some generalized order-disorder transformations. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 48:106–109, 1 1952.
- [23] F. Y. Wu. The potts model. *Rev. Mod. Phys.*, 54:235–268, Jan 1982.
- [24] R J Baxter. Potts model at the critical temperature. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(23):L445, 1973.
- [25] R. J. Baxter, H. N. V. Temperley, and S. E. Ashley. Triangular Potts Model at its Transition Temperature, and Related Models. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 358:535–559, January 1978.
- [26] K. Binder. Static and dynamic critical phenomena of the two-dimensionalq-state potts model. *Journal of Statistical Physics*, 24(1):69–86, 1981.
- [27] H. J. Herrmann. Monte Carlo simulation of the three-dimensional Potts model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 35:171–175, June 1979.
- [28] S. J. Knak Jensen and O. G. Mouritsen. Is the phase transition of the three-state potts model continuous in three dimensions? *Phys. Rev. Lett.*, 43:1736–1739, Dec 1979.

- [29] H. W. J. Blöte and R. H. Swendsen. First-order phase transitions and the three-state potts model. *Phys. Rev. Lett.*, 43:799–802, Sep 1979.
- [30] J.M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [31] L.P. Kadanoff. Notes on Migdal’s Recursion Formulas. *Annals Phys.*, 100:359–394, 1976.
- [32] R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Elsevier Science, 1996.
- [33] Kenneth G. Wilson. Renormalization group and strong interactions. *Phys. Rev. D*, 3:1818–1846, Apr 1971.
- [34] Kenneth G. Wilson. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Phys. Rev. B*, 4:3174–3183, Nov 1971.
- [35] J. Binney. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford Science Publ. Clarendon Press, 1992.
- [36] Michael Levin and Cody P. Nave. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120601, Sep 2007.
- [37] Y. Meurice. Accurate exponents from approximate tensor renormalizations. *Phys. Rev. B*, 87:064422, Feb 2013.
- [38] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, Nov 1992.

