



Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Daniel Salvador

Transições de Fase no Modelo de Potts com Modulação Aperiódica

Florianópolis

11 de setembro de 2025

Daniel Salvador

Transições de Fase no Modelo de Potts com Modulação Aperiódica

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Santa Ca-
tarina como requisito parcial para a obtenção do
título de Doutor em Física.

Orientador: Professor Dr. Marcelo Henrique Romano Tragtenberg

Florianópolis

11 de setembro de 2025

Ficha catalográfica gerada por meio de sistema automatizado gerenciado pela BU/UFSC.
Dados inseridos pelo próprio autor.

Salvador, Daniel

Transições de fase no modelo de Potts com modulação
aperiódica / Daniel Salvador ; orientador, Marcelo Henrique
Romano Tragtenberg, 2025.

86 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis, 2025.

Inclui referências.

1. Física. 2. transições de fase. 3. fenômenos críticos. 4.
métodos de Monte Carlo. 5. modelos magnéticos. I.
Tragtenberg, Marcelo Henrique Romano. II. Universidade
Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em
Física. III. Título.

Daniel Salvador

Transições de fase no modelo de Potts com modulação aperiódica

O presente trabalho em nível de doutorado foi avaliado e aprovado, em 20 de agosto de 2025, pela banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Roberto Fernandes Silva Andrade, Dr.
Universidade Federal da Bahia (UFBA)

Prof. André de Pinho Vieira, Dr
Universidade de São Paulo - Instituto de Física (USP/IF)

Prof. Nilton da Silva Branco, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de Doutor em Física.



Documento assinado digitalmente
Natalia Vale Asari
Data: 15/09/2025 14:09:11-0300
CPF: ***.497.091-**
Verifique as assinaturas em <https://v.ufsc.br>

Coordenação do Programa de Pós-Graduação



Documento assinado digitalmente
MARCELO HENRIQUE ROMANO TRAGTENBERG
Data: 13/09/2025 19:44:04-0300
CPF: ***.769.958-**
Verifique as assinaturas em <https://v.ufsc.br>

Prof. Marcelo Henrique Romano Tragtenberg, Dr.
Orientador

Florianópolis, 2025.

*Aos meus pais,
Pedro e
Norma (em memória).*

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais pelo apoio que sempre deram às minhas ideias e escolhas, me possibilitando chegar até aqui, e sabendo para onde quero ir.

Agradeço à minha esposa, Juliana, pelo amor, carinho, companheirismo e sua maneira de pensar e ver a vida.

Agradeço a meu irmão Marcelo, sempre esteve presente — na graduação, durante o mestrado e nos vários momentos deste doutorado, eterno amigo e companheiro de surf, um grande abraço.

Agradeço também a um grande amigo de infância, Dieguito, por estar presente durante o desenvolvimento deste trabalho, e também eterno companheiro de surf.

Presto um agradecimento muito especial ao meu orientador, o Professor Marcelo Tragtenberg, por ter aceitado me orientar e enfrentar o desafio que o problema abordado apresentava.

Aos colegas e amigos do Instituto Federal de Santa Catarina pelo apoio durante a realização de todo o trabalho.

Ao povo brasileiro (ainda que, muitas vezes sem saber) por financiar todo o trabalho de pesquisa realizado nas Universidades e Institutos Federais do Brasil.

Meus agradecimentos são direcionados ainda à comunidade do software livre, que tornou possível a redação integral desta tese com programas de alta qualidade, sem que houvesse qualquer custo para o autor. Esta tese foi escrita em $\text{\LaTeX}$ ¹, com o pacote *abnTeX*². Todos os gráficos foram gerados com o programa *gnuplot*³ e as figuras foram elaboradas com o programa *Inkscape*⁴ e *Gimp*⁵.

¹ <https://www.latex-project.org/>

² <http://www.abntex.net.br/>

³ <http://gnuplot.sourceforge.net/>

⁴ <https://inkscape.org/en/>

⁵ <https://www.gimp.org/>

Resumo

Estudamos o comportamento crítico do modelo de Potts ferromagnético em três dimensões, para dois e quatro estados, com ligações aperiódicas, das sequências Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro, por meio de simulações de Monte Carlo. As transições do modelo de Potts dependem da dimensionalidade do sistema, do número de estados e do tipo de ligação entre os spins. A determinação das temperaturas de transição é realizada por meio do método dos múltiplos histogramas que permite variar a temperatura com o grau de discretização desejado, sem a necessidade de novas simulações. Em três dimensões, o modelo de Potts sofre transições de primeira ordem para $q > 2$. Estimamos os expoentes críticos α , β , γ e ν para $q = 2$ (Ising), tanto na versão pura quanto com aperiodicidade. Variamos a intensidade da aperiodicidade por meio do parâmetro $r = \frac{J_b}{J_a}$. Para $r = 2$, a sequência Thue-Morse apresentou os mesmos expoentes da versão pura. Por outro lado, para essa mesma intensidade de aperiodicidade, as sequências Paper-Folding e Rudin-Shapiro apresentaram uma estrutura completamente diferente. Observamos uma estrutura de múltiplos picos, consistente com a chamada *Fase de Griffiths*. Verificamos que o tamanho ΔT dessa região depende tanto do expoente de flutuação ω quanto da intensidade r da aperiodicidade. O mesmo comportamento se observa quando um modelo de Potts de quatro estados tem suas constantes de troca dispostas segundo as mesmas sequências aperiódicas.

Palavras-chave: modelo de Potts; transições de fase; fenômenos críticos; métodos de Monte Carlo; modulação aperiódica; fase de Griffiths.

Abstract

We study the critical behavior of the ferromagnetic Potts model in three dimensions, for two and four states, with aperiodic couplings following the Thue-Morse, Paper-Folding, and Rudin-Shapiro sequences, through Monte Carlo simulations. The transitions of the Potts model depend on the system dimensionality, the number of states, and the type of coupling between spins. The determination of the transition temperatures is carried out using the multiple-histogram method, which allows varying the temperature with the desired degree of discretization without the need for additional simulations.

In three dimensions, the Potts model undergoes first-order transitions for $q > 2$. We estimated the critical exponents α , β , γ , and ν for $q = 2$ (Ising), both in the pure version and with aperiodicity. The intensity of the aperiodicity was varied through the parameter $r = \frac{J_b}{J_a}$. For $r = 2$, the Thue-Morse sequence yielded the same exponents as the pure version. On the other hand, for this same aperiodicity strength, the Paper-Folding and Rudin-Shapiro sequences presented a completely different structure. We observed a multi-peak structure, consistent with the so-called Griffiths Phase. We verified that the width ΔT of this region depends both on the fluctuation exponent ω and on the aperiodicity strength r . The same behavior is observed when a four-state Potts model has its exchange constants arranged according to the same aperiodic sequences.

Keywords: Potts model; phase transitions; critical phenomena; Monte Carlo methods; aperiodic modulation; Griffiths phase.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Diagrama de fases qualitativo de um fluido genérico	24
Figura 2 – Parâmetro de ordem e o diagrama de fases de uma ferromagneto	24
Figura 3 – Representação qualitativa da energia livre	25
Figura 4 – Transição de fase de primeira ordem	25
Figura 5 – Curvas de coexistência próximo a um ponto crítico	27
Figura 6 – Transformação de escala do tipo <i>coarse-graining</i>	28
Figura 7 – Comprimento de correlação de um sistema infinito, ξ_∞	33
Figura 8 – Efeito do tamanho finito sobre a localização da temperatura de transição. . .	33
Figura 9 – Distribuição de temperatura ao longo de um rede quadrada de comprimento de correlação ξ	34
Figura 10 – Criação de uma sequência aperiódica Thue-Morse	36
Figura 11 – Rede cúbica com interações aperiódicas Thue-Morse em um direção	37
Figura 12 – Valores críticos q_c em função da dimensionalidade do sistema	43
Figura 13 – Fases Griffiths induzidas por desordem correlacionada	44
Figura 14 – A importância da correta termalização em simulações de Monte Carlo	47
Figura 15 – Capacidade térmica por spin obtida a partir dos dados das Figuras 14a e 14b	47
Figura 16 – Funções de autocorrelação da energia e da magnetização	49
Figura 17 – Média de Blocos versus tamanho dos blocos	49
Figura 18 – O processo de agrupamento de dados — <i>data binning</i>	50
Figura 19 – Processo de criação de uma ilha pelo algoritmo de Wolff	52
Figura 20 – Representação gráfica das condições de contorno helicoidais	54
Figura 21 – Distribuição de energia determinadas pelo método do histograma simples	56
Figura 22 – Temperatura crítica obtida a partir de várias grandezas termodinâmicas.	63
Figura 23 – Expoente crítico do calor específico, α , do modelo puro.	64
Figura 24 – Expoente crítico da magnetização, β , do modelo puro.	65
Figura 25 – Expoente crítico da susceptibilidade, γ , do modelo puro.	65
Figura 26 – Temperatura crítica referente às diversas grandezas calculadas do modelo Thue-Morse.	67
Figura 27 – Expoente crítico do calor específico, α , do modelo Thue-Morse.	68
Figura 28 – Expoente crítico da magnetização, β , do modelo Thue-Morse.	68
Figura 29 – Expoente crítico da susceptibilidade magnética, γ , do modelo Thue-Morse.	69
Figura 30 – Magnetização média do modelo TM com intensidade da aperiodicidade $r = 8$	70
Figura 31 – Magnetização média do modelo TM com intensidade da aperiodicidade $r = 16$	70
Figura 32 – Diferentes histórias (inícios diferentes da sequência) do sistema RS.	71
Figura 33 – Capacidade térmica por spin, parâmetro de ordem e susceptibilidade magnética de sistemas aperiódicos Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro com $r = 8$	72
Figura 34 – Capacidade térmica por spin, parâmetro de ordem e susceptibilidade magnética de sistemas aperiódicos Rudin-Shapiro e diferentes valores de r	73
Figura 35 – Ajuste por lei de potência de χ^{-1} em função de L^{-1}	74

Figura 36 – Capacidade térmica e susceptibilidade magnética. Sequência RS em um paralelepípedo com $p = 64$ para diferentes tamanhos de rede.	76
Figura 37 – Capacidade térmica e susceptibilidade magnética. Sequência RS em um paralelepípedo com $p = 256$ para diferentes tamanhos de rede.	76
Figura 38 – Barreira de energia ΔF de um modelo de Potts de quatro estados	77
Figura 39 – Magnetização e susceptibilidade magnética do modelo de Potts aperiódico RS de quatro estados	78

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Grandezas termodinâmicas expressas em função de seus expoentes críticos ($H = 0$ e $t \rightarrow 0$).	27
Tabela 2	–	Relações entre os expoentes críticos apresentados na Tabela 1	27
Tabela 3	–	Sequências aperiódicas e suas principais características	39
Tabela 4	–	Parâmetros de ajustes e dados de correlação para estimativa do expoente do comprimento de correlação ν do modelo de Potts puro.	62
Tabela 5	–	Coeficientes de correlação $\rho_{ij} = \Gamma_{ij}/\sigma_i\sigma_j$ para estimativa do expoente do comprimento de correlação entre as estimativas do expoente crítico ν	62
Tabela 6	–	Valores da temperatura crítica obtidas pelo ajuste da Equação (5.2). Novamente o desvio relativo (Δ_{rel} é tomado em relação ao valor $K_c = 0,221\,654\,626(5)$ (Ferrenberg; Xu; Landau, 2018).	64
Tabela 7	–	Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo de dois estados em três dimensões.	66
Tabela 8	–	Parâmetros de ajustes e dados de correlação para estimativa do expoente do comprimento de correlação ν de uma modelo de Potts $3D$ e $q = 2$ com interações aperiódicas Thue-Morse de intensidade $r = 2$. Os ajustes foram realizados sem inclusão de campo irrelevante tomando $L_{\text{min}} = 32$. O desvio relativo (Δ_{rel}) de ν é tomado em relação ao valor $\bar{\nu}_{\text{puro}} = 0,629\,422(93)$	67
Tabela 9	–	Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo e Thue-Morse.	67
Tabela 10	–	Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo e Thue-Morse.	68

Lista de abreviaturas e siglas

GR	Grupo de Renormalização
FHG	Função Homogênea Generalizada
FSS	“ <i>Finite Size Scaling</i> ”
TM	Thue-Morse
PF	Paper-Folding
RS	Rudin-Shapiro
sMC	Simulação de Monte Carlo
GSL	GNU “ <i>Scientific Library</i> ”

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
2	TERMODINÂMICA E MECÂNICA ESTATÍSTICA	21
2.1	Fundamentos de Termodinâmica e Mecânica Estatística	21
2.2	Transições de Fase	23
2.3	Fenômenos Críticos	26
2.3.1	Grupo de Renormalização	28
2.3.2	Relações de Escala de Tamanho Finito	32
2.4	Desordem	33
2.4.1	Critério de Harris-Luck	33
2.4.2	Fase de Griffiths	35
2.4.3	Sequências Aperiódicas	36
2.4.3.1	Thue-Morse (TM)	37
2.4.3.2	Paper-Folding (PF)	38
2.4.3.3	Rudin-Shapiro (RS)	38
3	MODELO DE POTTS	41
3.1	O Hamiltoniano de Potts	41
3.2	Transições de Fase	42
3.2.1	O modelo aperiódico bidimensional	44
4	MÉTODO DE MONTE CARLO	45
4.1	Equilíbrio, autocorrelação e cálculo de incertezas	46
4.1.1	Equilíbrio	46
4.1.2	Função de autocorrelação	48
4.1.3	Método de agrupamento de dados – <i>data binning</i>	49
4.1.4	Cálculo de incertezas — procedimento jackknife	50
4.2	Algoritmo de Wolff	52
4.3	Método do Histograma Simples	54
4.4	Método dos Múltiplos Histogramas	56
4.5	Determinação da ordem de transição	58
4.6	Detalhes das Simulações	59
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	61
5.1	Modelo Homogêneo	61
5.2	Modelo Aperiódico	66
5.2.1	Thue-Morse	66
5.2.1.1	$r = 2$	66
5.2.1.2	$r = 8$ e 16	69

5.3	Fases de Griffiths	71
5.3.1	Influência do expoente de flutuação ω	71
5.3.2	Influência da intensidade da aperiodicidade – r	73
5.3.3	O efeito do número de iterações da sequência aperiódica	75
5.4	$q = 4$	77
 REFERÊNCIAS		 81

1 Introdução

Desde os primórdios a natureza fascina e desafia o intelecto humano. Desde o seu nascimento o homem vê-se em constante estado de procura e descoberta. Seja por puro prazer em descobrir e avançar ou apenas por necessidades que se apresentam ao desafiá-lo. Da mesma forma que uma criança descobre o mundo desvendando os seus mistérios, transpondo obstáculo por obstáculo, descoberta a descoberta, um cientista se comporta frente aos mistérios da natureza. Um fascínio pelo novo, por procurar explicações lógicas, antes relegadas ao misticismo, forças sobrenaturais, ao divino, fez com que a sociedade chegasse aos tempos atuais com tamanho conhecimento científico e desenvolvimento tecnológico.

Dentre a vasta gama de fenômenos naturais, o magnetismo faz parte de uma classe intrigante. Um mesmo material pode se comportar como um ímã, atraindo pequenos materiais compostos por ferro por exemplo, e logo em seguida, devido a variações de condições externas, não mais apresentar as propriedades de um ímã.

Embora os fenômenos magnéticos sejam conhecidos há séculos, foi só a partir do século XIX e início do século XX, com o surgimento da teoria quântica, que ele recebeu um tratamento teórico que possibilitou, além de seu entendimento, também sua aplicação. Sistemas magnéticos são extremamente importantes na sociedade moderna; do ponto de vista tecnológico, tem-se desde aparelhos utilizados para armazenamento de dados até grandes equipamentos utilizados em aceleradores de partículas. Por esse ponto de vista, estudar sistemas magnéticos é de extrema importância. Do ponto de vista científico, há questões teóricas de extrema relevância a serem resolvidas, como o comportamento do sistema próximo a sua temperatura crítica.

Fenômenos físicos são descritos por modelos matemáticos. Um dos modelos mais simples e amplamente estudados na descrição de fenômenos magnéticos (entre outros) é o modelo de Ising (Ising, 1925)¹, descrito por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum S_i, \quad (1.1)$$

em que $\mathcal{H}$ é o Hamiltoniano de Ising, $S_i = \pm 1$ define a orientação de spins, o primeiro somatório é realizado sobre todos os pares de primeiros vizinhos em uma rede e H é um campo magnético externo atuando sobre o i -ésimo spin da rede. Embora simples, este sistema apresenta solução exata, no que se refere a seu comportamento crítico, apenas em $1D$ e $2D$. Em $2D$, a solução exata da Equação 1.1, na ausência de campo externo, foi apresentada em 1944 por Lars Onsager (Onsager, 1944). Não há solução exata para o modelo bidimensional na presença de campo magnético externo e para o modelo tridimensional não há solução exata nem mesmo em campo magnético externo nulo.

Há uma vasta gama de modelos matemáticos para descrever sistemas magnéticos. Além do modelo de Ising, temos os de Heisenberg, XY, Potts, entre outros (Goldenfeld, 1992; Baxter,

¹ Uma versão traduzida do alemão para o inglês pode ser encontrada em https://www.hs-augsburg.de/~harsch/anglica/Chronology/20thC/Ising/isi_fm00.html

2007). O modelo de Potts (1952) surge como uma generalização do modelo de Ising para mais de dois estados, tendo sido proposto como tema de doutoramento a Potts, por Domb, em 1952. Na ausência de campo magnético externo, o modelo de Potts é dado pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (1.2)$$

e, novamente, o somatório acima é realizado sobre todos os pares de primeiros vizinhos, $\sigma_i = 1, \dots, q, \forall i$ e q é o número de estados (para $q = 2$ retomamos o modelo de Ising).

Um modelo deve ser capaz de descrever os comportamentos de um sistema físico real. Um sistema físico pode apresentar-se em diferentes condições de equilíbrio termodinâmico, constituindo fases termodinâmicas, que dependem das condições externas às quais são submetidos. A Mecânica Estatística, através dos constituintes microscópicos, faz a conexão com as grandezas macroscópicas estudadas pela Termodinâmica. Portanto, um modelo deve ser capaz de descrever as propriedades de equilíbrio e, nesse caso, ser capaz de gerar os diagramas de fases.

Um exemplo clássico, e talvez o mais comum, é o diagrama de fases da água, apresentando fases sólida, líquida e gasosa. Mudanças na temperatura ou pressão podem fazer a água transitar de uma determinada fase para outra. No século XIX, van der Waals, em sua tese de doutorado, propôs o que hoje conhecemos como equação de estado de van der Waals, exibindo características essenciais da transição líquido-vapor. Outro exemplo bastante comum refere-se a substâncias que apresentam propriedades magnéticas. Um determinado material inicialmente magnetizado perde sua magnetização se aquecido acima de uma determinada temperatura característica, chamada de temperatura de Curie para ferromagnetos. Quando apresenta magnetização diferente de zero diz-se que o material está na fase ferromagnética, caso contrário, a fase é dita paramagnética.

As mudanças ocorridas entre as diferentes fases supracitadas são classificadas em transições de primeira ordem ou transições contínuas. Essa classificação refere-se às descontinuidades apresentadas pelas derivadas da energia livre. Portanto, quando a primeira derivada da energia livre é descontínua a transição é dita de primeira ordem. Quando a primeira derivada é contínua e a descontinuidade ocorre em derivadas de ordem superior a transição é dita contínua.

Um sistema que apresenta uma transição contínua encontra-se em uma região crítica do diagrama de fases, caracterizando o que chamamos de fenômenos críticos. Portanto, fenômenos críticos são transições contínuas pelas quais passam os sistemas termodinâmicos. Nesse ponto, o parâmetro de ordem, que para sistemas ferromagnéticos é a magnetização, cresce continuamente a partir de zero à medida que diminuimos a temperatura abaixo de uma temperatura bem determinada (T_c , temperatura crítica). Próximo a esse ponto, um sistema pode ser caracterizado por alguns poucos parâmetros denominados expoentes críticos. Na região crítica diferentes sistemas podem apresentar comportamentos idênticos, ou universais, possuindo o mesmo conjunto de expoentes críticos. Nesse caso, sistemas físicos possuindo o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade.

Um tema de estudo interessante nesta área são os efeitos da introdução de impurezas em um sistema homogêneo, as quais podem afetar sua classe de universalidade (Harris, 1974). Em nosso trabalho, o sistema será não homogêneo, através de introdução de modulações aperiódicas. Essas modulações são implementadas através de sequências aperiódicas. Estas são sequências

geradas por uma regra determinística em que não é possível isolar uma unidade que se repita. Essas sequências podem mudar a classe de universalidade à qual pertence o sistema em relação ao caso puro, e ela é dita relevante, ou manter essa classe inalterada, sendo classificada como irrelevante. A determinação da relevância de uma sequência aperiódica é feita pelo critério de Harris-Luck (Luck, 1993b).

A introdução de desordem, além de mudanças na classe de universalidade, é capaz de alterar a ordem de transição. Em sistemas com desordem correlacionada pode haver a geração de fase de Griffiths (Griffiths, 1969; Chatelain, 2014a; Chatelain, 2014b). Encontramos evidências de que a transição realmente é alterada para sequências relevantes, e nossos dados preliminares sugerem que estamos diante de fases de Griffiths.

Os objetivos iniciais do trabalho podem ser resumidos em três aspectos principais. O primeiro consistia em determinar se a introdução de modulações aperiódicas em um modelo de Ising (equivalente ao modelo de Potts com dois estados) alteraria a classe de universalidade em comparação com sua versão pura. O segundo visava investigar se a presença de aperiodicidade em modelos de Potts com três e quatro estados poderia modificar a ordem da transição para contínua. Por fim, caso confirmado essa mudança de ordem, o terceiro objetivo era determinar os expoentes críticos associados ao novo comportamento crítico do modelo.

No entanto, no decorrer do trabalho, nos deparamos com um efeito diferente do esperado inicialmente. Quando a aperiodicidade foi introduzida no modelo de Ising, observou-se o desenvolvimento de uma estrutura de múltiplos picos na capacidade térmica; a magnetização passou a apresentar duas variações abruptas em seu valor — diferente do comportamento observado no modelo puro — e a susceptibilidade magnética exibiu um região alargada, em vez de um pico bem definido, como ocorre na versão sem modulação. Diante desses resultados, nos concentramos em estudar essas estruturas e os resultados desse estudo resultaram na publicação de um artigo.

Essa mudança de foco justifica o título da tese, bem como o fato de praticamente todas as referências utilizadas estarem relacionadas ao modelo de Potts, e não ao modelo de Ising. Apresentamos ao final da tese um estudo preliminar do modelo de Potts com quatro estados.

Esta tese está organizada da seguinte maneira: no [Capítulo 2](#) apresentamos as grandezas termodinâmicas de interesse fazendo uma breve revisão sobre transições de fase e fenômenos críticos. Discutimos o critério de Harris-Luck e os conceitos relativos às sequências aperiódicas fazendo uma breve discussão sobre invariância por escala e grupo de renormalização. No [Capítulo 3](#) apresentamos o modelo de Potts e as grandezas termodinâmicas de interesse. Discutimos ainda as transições de fase do modelo em que apresentamos as variáveis que influenciam tais transições como dimensionalidade do sistema e número de estados do modelo. No [Capítulo 4](#) apresentamos o método de Monte Carlo e os detalhes relacionados às simulações. Apresentamos os métodos de histograma simples e múltiplos e o método utilizado na análise de incertezas e combinação de grandezas que apresentam correlações.

O [Capítulo 5](#) é dedicado aos resultados obtidos. Apresentamos os resultados do modelo puro em que comparamos os expoentes obtidos com a literatura discutindo as possíveis causas de discrepância e apresentamos caminhos para corrigi-las. Na sequência apresentamos o modelo aperiódico

Thue-Morse com diferentes intensidades de aperiodicidade comparando os resultados com a versão homogênea. Os modelos aperiódicos Paper-Folding e Rudin-Shapiro são estudados para diferentes valores de intensidade da aperiodicidade em que um comportamento diverso daquele observado para o modelo puro e modelo aperiódico Thue-Morse se revela. Na sequência apresentamos os resultados sobre esse comportamento inesperado para as três sequências aperiódicas onde fazemos um estudo sistemático da influência das sequências e da intensidade da aperiodicidade sobre as grandezas termodinâmicas. Nossos dados indicam que o modelo Paper-Folding e Rudin-Shapiro desenvolvem fase de Griffiths.

Finalizamos a tese com as conclusões do trabalho e com perspectivas sobre futuros desenvolvimentos.

2 Termodinâmica e Mecânica Estatística

Neste capítulo apresentamos alguns dos principais conceitos da Termodinâmica, Mecânica Estatística e transições de fases. São apresentados ainda resultados do grupo de renormalização que fornecem as bases para o tratamento de escala de tamanho finito. Sistemas desordenados aleatórios e sistemas aperiódicos são discutidos ao final do capítulo com a relação entre desordem e o surgimento de fase de Griffiths.

2.1 Fundamentos de Termodinâmica e Mecânica Estatística

Suponha um sistema físico constituído por um número muito grande de partículas, todas elas contribuindo para o comportamento macroscópico do sistema físico observado. O estudo de sistemas macroscópicos, o campo de estudo da Termodinâmica, é realizado por meio de alguns poucos parâmetros, *e.g.*, temperatura, pressão e volume. Os valores dessas grandezas variam localmente muito rapidamente no tempo devido ao comportamento aleatório de seus constituintes microscópicos. Essas variações ocorrem por colisões internas ou ainda pela variação de algum parâmetro externo. Dessa forma, nossa percepção do mundo repousa em nossa incapacidade de perceber essas rápidas variações que ocorrem microscopicamente, nos sendo evidente apenas grandes variações que se estendem por todo o sistema ou ainda variações que ocorrem por períodos longos de tempo. Nossos sentidos trabalham com os valores médios dessas grandezas, portanto, grandes variações levam a modificações significativas dos valores médios levados em conta por nossos sentidos.

Em princípio, seria possível descrever o comportamento macroscópico de um sistema por meio de seus constituintes microscópicos. Bastaria apenas conhecer os potenciais envolvidos e então encontrar as equações de movimento e em seguida resolvê-las. No entanto, nos deparamos com um problema difícil de ser contornado. Um litro de um gás qualquer possui algo em torno de $N \approx 10^{23}$ partículas. Necessitaríamos, portanto, resolver uma equação diferencial para cada grau de liberdade de cada partícula, totalizando pelo menos $3N$ equações diferenciais de segunda ordem, tornando a tarefa praticamente impossível de ser realizada. E mesmo que o fosse, não seria de grande utilidade.

A Mecânica Estatística preocupa-se em obter médias de propriedades físicas de um determinado sistema termodinâmico, derivando daí o seu nome. Seu principal objetivo é obter relações entre os observáveis macroscópicos do sistema a partir de informações de seus constituintes microscópicos; sendo assim, trabalhamos com probabilidades.

Considere $\omega_\mu(t)$ a probabilidade de que um sistema físico seja encontrado no estado μ no instante t . No equilíbrio, em que $t \rightarrow \infty$, devemos ter

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_\mu(t). \quad (2.1)$$

Se o sistema estiver em contato com um reservatório térmico a probabilidade de encontrá-lo no

estado μ será dada por

$$p_\mu = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \mathcal{H}_\mu}, \quad (2.2)$$

em que

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}_\mu} \quad (2.3)$$

é a *função de partição*, $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. A soma na [Equação \(2.3\)](#) é realizada sobre todos os estados possíveis do sistema.

O potencial termodinâmico apropriado para sistemas magnéticos é a energia livre

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z} = U - TS, \quad (2.4)$$

em que U é a energia interna e S é a entropia. Toda a termodinâmica do sistema é obtida por meio das derivadas da [Equação \(2.4\)](#).

Seja $U \equiv U(S, H)$ a energia interna, S a entropia e H um campo magnético externo, a relação diferencial da energia interna pode ser escrita como ([Greiner et al., 1995](#); [Reif, 2009](#))

$$dU = T dS - M dH. \quad (2.5)$$

Derivando a [Equação \(2.4\)](#) e empregando a [Equação \(2.5\)](#), obtém-se

$$d\mathcal{F} = dU - T dS - S dT = -M dH - S dT, \quad (2.6)$$

que é a forma diferencial da energia livre. Dessa forma, obtemos a magnetização M do sistema

$$M = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H}\right)_T. \quad (2.7)$$

A susceptibilidade magnética é obtida pela derivação da [Equação \(2.7\)](#), portanto,

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0} = -\left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial H^2}\right)_{H=0}. \quad (2.8)$$

O calor específico a campo nulo é obtido por meio da primeira derivada de U , dessa forma:

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{H=0} = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_{H=0} = k_B \beta^2 \left(\frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta^2}\right)_{H=0}. \quad (2.9)$$

Considerando os momentos de uma distribuição

$$\langle \mathcal{O}^n \rangle = \sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu}^n p_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu}^n e^{-\beta \mathcal{H}_{\mu}}}{\mathcal{Z}}, \quad (2.10)$$

obtém-se o valor esperado de uma grandeza $\mathcal{O}$ para $n = 1$. Dessa forma

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu} p_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}_{\mu}}}{\mathcal{Z}}, \quad (2.11)$$

A energia interna está relacionada com o valor esperado da energia por meio da expressão

$$\langle E \rangle = U = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{E}_{\mu} e^{-\beta \mathcal{E}_{\mu}}}{\mathcal{Z}}. \quad (2.12)$$

E fazendo uso da [Equação \(2.3\)](#), a energia interna pode ser escrita como

$$U = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{E}_{\mu} e^{-\beta \mathcal{E}_{\mu}}}{\mathcal{Z}} = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}. \quad (2.13)$$

usada na última igualdade da [Equação \(2.9\)](#). O segundo momento, $n = 2$, é dado por

$$\langle \mathcal{O}^2 \rangle = \sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu}^2 p_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu}^2 e^{-\beta \mathcal{H}_{\mu}}}{\mathcal{Z}}. \quad (2.14)$$

É fácil mostrar que a capacidade térmica, [Equação \(2.9\)](#), e a susceptibilidade magnética, [Equação \(2.8\)](#), podem ser obtidas por meio do primeiro e segundo momentos. Sendo assim, temos:

$$C = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (2.15)$$

$$\chi = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (2.16)$$

As informações de um sistema obtidas por meio de simulações computacionais consistem em listas de dados. Sendo assim, a forma das [Equações \(2.15\) e \(2.16\)](#) é mais conveniente. Nenhuma derivada precisa ser calculada; apenas médias de valores de energia e magnetização são necessárias, por exemplo.

2.2 Transições de Fase

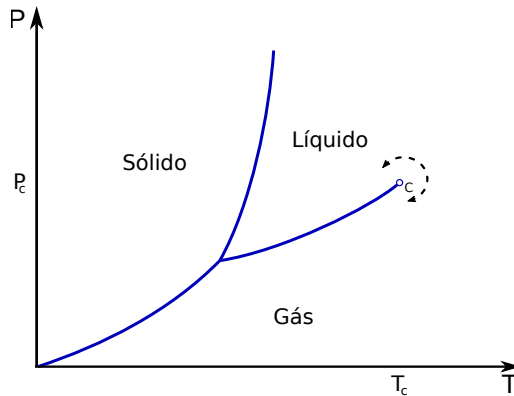
As fases da matéria constituem as regiões de equilíbrio de um sistema termodinâmico. Modificações nos parâmetros externos, tais como temperatura e campo magnético, geram instabilidade provocando inomogeneidades internas. A perda de homogeneidade dos sistemas termodinâmicos caracteriza uma transição de fase. Transições de fase constituem experiências do dia a dia, a água pode apresentar-se nas fases sólida, líquida e vapor. Resfriando-a à 0 °C ela se solidifica, na pressão atmosférica, sofrendo, portanto, uma transição de fase.

A [Figura 1](#) apresenta um diagrama de fases de um líquido genérico. Mantida uma das grandezas do diagrama constante é possível cruzar uma dessas linhas variando a outra grandeza. Cruzar uma dessas linhas, indo de uma fase para outra, *e.g.* da fase sólida para a fase líquida, tem-se o que se chama transição de fase.

Esse tipo de transição, em que é necessário atravessar uma linha de separação de fases – denominada linha de coexistência – é uma transição do tipo de *primeira ordem*. Sobre a linha de separação o sistema pode ser encontrado nas duas fases (líquido e sólido no exemplo acima). O ponto em que as três linhas se encontram é chamado de ponto triplo que para a água acontece a uma temperatura de 273,16 K e a uma pressão de 611,657 Pa ($\approx 6,037 \cdot 10^{-3}$ atm) ([Bruno; Haynes; Lide, 2016](#)).

Da mesma forma, na ausência de campo magnético externo, um ferromagneto pode apresentar-se em uma fase *ferromagnética* ou em uma fase *paramagnética*. E, nesse caso, teremos uma transição da fase ferro-para ao aumentarmos a temperatura. A fase ferromagnética compreende a fase em que os *spins* do sistema estão ordenados, ou seja tendem a apontar em uma dada direção e um dado sentido. Desta forma, o sistema apresenta magnetização diferente de zero. Já

Figura 1 – Diagrama de fases qualitativo de um fluido: P é a pressão e T é a temperatura. As linhas delimitam as diferentes fases apresentadas pela substância. A linha de separação sólido-líquido estende-se até altas pressões enquanto a separação líquido-gás termina no ponto crítico C . A linha tracejada indica a passagem de uma fase para outra sem que ocorra um cruzamento de uma linha de separação de fases.

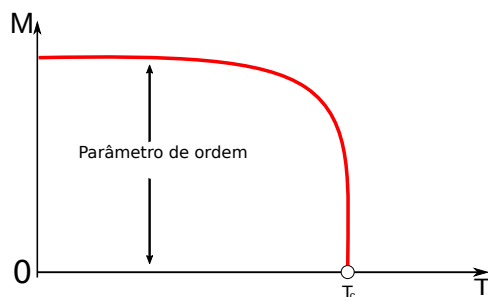


Fonte - Elaborado pelo autor.

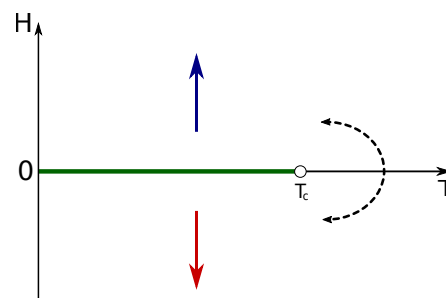
na fase paramagnética os *spins* encontram-se desordenados conferindo ao sistema magnetização nula. A fase desordenada, em que as direções dos spins encontram-se aleatoriamente distribuídas, apresenta simetria espacial invariante por rotações. A fase ferromagnética quebra a simetria perdendo a invariância rotacional: os spins encontram-se ordenados, *i.e.*, tendem a apontar na mesma direção.

Para caracterizar as fases ordenada e desordenada, Landau introduziu o termo *parâmetro de ordem* (Callen, 1985; Salinas, 2008), sendo nulo na fase desordenada e diferente de zero na fase ordenada. A Figura 2a apresenta a magnetização M — o parâmetro de ordem de sistemas ferromagnéticos — em função da temperatura. A magnetização aproxima-se de zero com o aumento da temperatura. A Figura 2b apresenta um diagrama de fases de um ferromagneto. O sistema encontra-se magnetizado na direção do campo aplicado indo a zero com o aumento da temperatura, mas sem singularidades a campo nulo. As linhas de separação de fase podem

Figura 2 – Parâmetro de ordem e o diagrama de fases de um ferromagneto.



(a) Parâmetro de Ordem, M , em função da temperatura, T , de uma material ferromagnético qualquer. O parâmetro de ordem é diferente de zero para $T < T_C$ e zero para $T > T_C$.



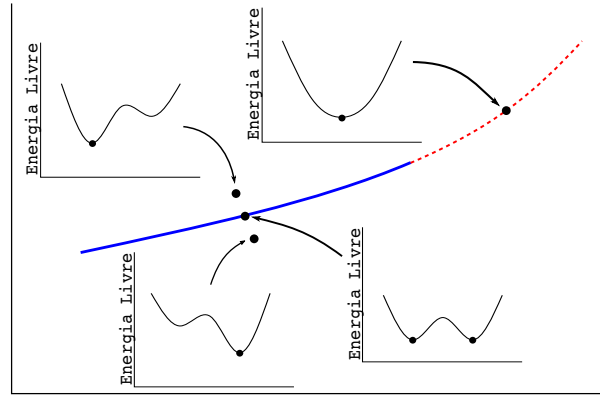
(b) Diagrama de fases de um ferromagneto no plano $H \times T$. Para $H = 0$, abaixo de T_C a magnetização é diferente de zero, ao cruzar a temperatura de transição a magnetização torna-se nula.

Fonte - Elaborado pelo autor.

encontrar um ponto limite, chamado de ponto crítico. Na Figura 1 ela aparece ao final da separação das fases líquida e gasosa e nas Figuras 2a e 2b, ao final da linha separando a fase ordenada da fase desordenada.

O potencial adequado para sistemas magnéticos é a energia livre, [Equação \(2.4\)](#). Uma descrição qualitativa das fases e transições de fase pode ser vista na [Figura 3](#).

Figura 3 – Representação qualitativa da energia livre nas diferentes fases de uma substância.

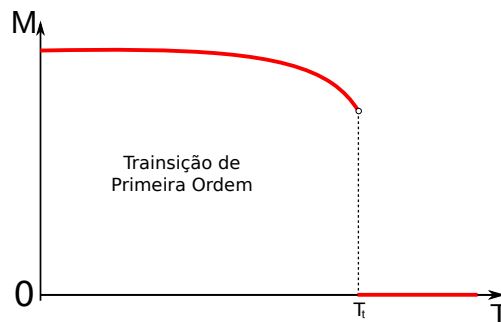


Fonte - Adaptado de [Callen \(1985\)](#).

Quando o sistema encontra-se em equilíbrio em uma determinada fase, a energia livre apresenta dois mínimos assimétricos, sendo o mais profundo deles correspondente à fase em que o sistema se encontra. Sobre a linha que separa duas fases, onde ocorre coexistência de fases, a energia livre apresenta dois mínimos de igual profundidade. Cruzando a linha de separação de fases o sistema desloca-se para o outro mínimo da energia livre, correspondendo ao mínimo da nova fase. Após cruzar o ponto crítico, a energia apresenta apenas um mínimo. Nessa região não é possível fazer distinção entre as fases envolvidas ([Callen, 1985](#); [Goldenfeld, 1992](#); [Reichl, 2016](#)).

As transições apresentadas acima são rotuladas de acordo com o comportamento da energia livre. Nas transformações em que ocorrem coexistência de fases elas são chamadas de transições de primeira ordem, [Figura 4](#), e são caracterizadas por uma singularidade na primeira derivada da energia livre. Nas transformações em que não há coexistência de fases o sistema sofre uma *transição de fase contínua*, [Figura 2a](#). Numa transição contínua a primeira derivada da energia livre é contínua e a divergência pode surgir em qualquer derivada de ordem superior.

Figura 4 – Representação de uma transição de fase de primeira ordem. Na temperatura de transição, a primeira derivada da energia livre em relação ao campo magnético externo é descontínua.



Fonte - Elaborado pelo autor.

2.3 Fenômenos Críticos

Uma transição contínua é caracterizada pela continuidade da primeira derivada da energia livre e descontinuidade em derivadas de ordem superior, conforme a temperatura se aproxima de um determinado valor $T = T_c$, chamada de temperatura crítica. Para a transição ferro-para, a divergência ocorre na susceptibilidade magnética, [Equação \(2.8\)](#), e no calor específico, [Equação \(2.9\)](#). O termo fenômeno crítico refere-se ao estudo de transições contínuas.

Costuma-se definir a temperatura reduzida

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.17)$$

que mede a “distância” entre a temperatura T em que o sistema se encontra e a temperatura crítica T_c . Próximo à criticalidade, o sistema encontra-se fortemente correlacionado. Para medir o quão fortes são essas correlações, define-se a função de correlação de pares, dada por:

$$G(\vec{r}_{ij}) = \langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle. \quad (2.18)$$

Para $t \rightarrow 0$, $G(\vec{r}_{ij})$ decai exponencialmente como

$$G(\vec{r}_{ij}) = \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}, \quad (2.19)$$

Quando $t = 0$ o decaimento da função de correlação deixa de ser exponencial e passa a ser descrito por uma lei de potência do tipo

$$G(\vec{r}_{ij}) \sim r^{-d+2-\eta}, \quad (2.20)$$

ou seja, nesse caso a correlação é de alcance infinito. A função de correlação mede o quanto um spin “sente” as flutuações em outro spin a uma distância r .

O expoente ξ que aparece na [Equação \(2.19\)](#) é chamado de comprimento de correlação, ele descreve de que forma as flutuações de uma determinada quantidade física em torno de seu valor médio estende-se ao longo das dimensões do sistema considerado. O comprimento de correlação é fortemente dependente da temperatura, próximo a uma transição contínua, divergindo na temperatura de transição.

Próximo ao ponto crítico o comportamento do sistema é universal, *i.e.*, permanece o mesmo para diferentes substâncias e diferentes modelos. Através da curva de coexistência em termos da temperatura reduzida (T/T_c) e densidade reduzida (ρ/ρ_c), [Figura 5](#), diferentes substâncias apresentam o mesmo comportamento, obedecendo a mesma equação de estado, chamado de *estados correspondentes*. Portanto, nas proximidades do ponto crítico é possível descrever certos observáveis, digamos $\mathcal{O}$, por uma lei de potência do tipo

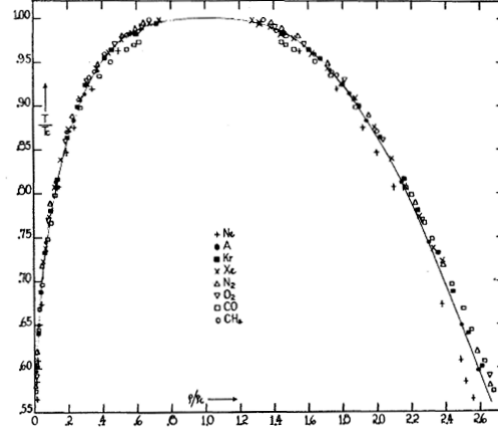
$$\mathcal{O} \sim t^\lambda, \quad (2.21)$$

em que λ é um expoente crítico. Os dados da [Figura 5](#) foram ajustados supondo $(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^\beta$, com $\beta \approx 1/3$, sendo ρ_l a densidade da fase líquida e ρ_g a densidade da fase gasosa.

Embora na criticalidade um sistema físico possa ser descrito por uma simples lei de potência a classe de universalidade do modelo, *i.e.*, os expoentes críticos, depende de alguns

parâmetros. Os expoentes críticos de um sistema com interação de curto alcance dependem da dimensionalidade e da simetria do parâmetro de ordem (Yeomans, 1992). Para o modelo de Ising em 2D tem-se $\nu = 1$ (Yeomans, 1992) enquanto em 3D tem-se $\nu = 0,629\,912(86)$ (Ferrenberg; Xu; Landau, 2018) em que o expoente ν é o expoente relacionado ao comprimento de correlação.

Figura 5 – Curvas de coexistência próximas ao ponto crítico em função das variáveis reduzidas T/T_c e ρ/ρ_c . Ajuste $(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^\beta$, com $\beta \approx 1/3$.



Fonte - (Guggenheim, 1945).

A Tabela 1 apresenta as relações entre algumas grandezas termodinâmicas e suas respectivas leis de potência. Dos expoentes apresentados na Tabela 1 apenas dois são independentes devido às relações de escala apresentadas na Tabela 2.

Tabela 1 – Grandezas termodinâmicas expressas em função de seus expoentes críticos ($H = 0$ e $t \rightarrow 0$).

Calor Específico	$c \sim t ^{-\alpha}$
Magnetização	$M \sim t^\beta$
Susceptibilidade	$\chi \sim t ^{-\gamma}$
Função de Correlação	$G(\vec{r}_{ij}) \sim r^{-d+2-\eta}$
Comprimento de Correlação	$\xi \sim t ^{-\nu}$

Fonte - Adaptado de Huang (1987, p. 396).

Nota - $\sim$ significa “a parte singular é proporcional à”.

Tabela 2 – Relações entre os expoentes críticos apresentados na Tabela 1

Fisher	$\gamma = \nu(2 - \eta)$
Rushbrooke	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Widom	$\gamma = \beta(\delta - 1)$
Josephson	$\nu d = 2 - \alpha$

Fonte - Adaptado de Huang (1987, p. 397).

Widom (1965b) introduziu a noção de escala, permitindo obter os valores dos expoentes apresentados por Guggenheim (1945). Widom descobriu que próximo ao ponto crítico a equação

de estado pode ser escrita por meio de funções homogêneas generalizadas ¹ de seus argumentos, na forma

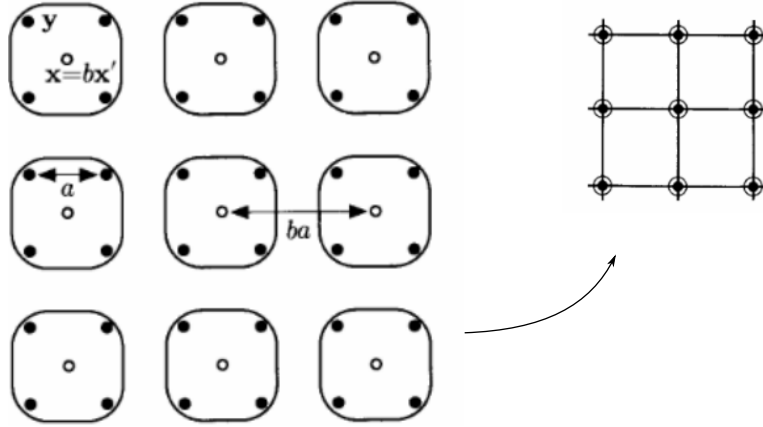
$$\Phi(x, y) = y^{f-1} \Phi(x/y, 1), \quad (2.22)$$

em que $(f - 1)$ indica o grau de homogeneidade da função (Widom, 1965a). Kadanoff propôs que a relação de escala de Widom, Equação (2.22), poderia ser explicada admitindo-se que, próximo ao ponto crítico, o sistema seja *quasi-invariante* por transformação de escala (Kadanoff, 1966). O argumento de Kadanoff, Seção 2.3.1, embora incorreto, forneceu as bases para o desenvolvimento da teoria de Wilson do Grupo de Renormalização (GR).

2.3.1 Grupo de Renormalização

Na tentativa de fornecer uma explicação ao argumento de escala de Widom, Kadanoff propôs que em diferentes escalas de tamanho, na criticalidade, um sistema físico pareceria sempre o mesmo. Seu argumento parte de uma transformação de escala na qual os graus de liberdade são reduzidos por uma transformação de blocos de spins. Os blocos de spins de Kadanoff, Figura 6, são construídos agrupando-se spins em células com um spin efetivo dado pela média dos spins agrupados. Dessa forma, o tamanho do sistema é reduzido por um fator b^d e o número total de spins da nova rede, N' , em relação ao número de spins da rede antiga, N , é reduzido pelo mesmo fator, $N' = b^{-d}N$. No caso da Figura 6 tem-se $b = 2$.

Figura 6 – Representação de uma transformação de escala do tipo *coarse-graining*. Os spins originais localizados no sítio y são agrupados em células chamadas de blocos de spin. No ponto crítico os blocos de spin devem apresentar a mesma correlação que os spins originais antes da transformação. Aqui o parâmetro de escala é $b = 2$.



Fonte - Adaptado de Chaikin (1995, p. 239) e Huang (1987, p. 442).

Wilson mostrou como as relações entre as constantes de acoplamento K em diferentes escalas de comprimento poderiam ser calculadas explicitamente, pelo menos aproximadamente; a teoria de Wilson — o Grupo de Renormalização (GR) — é capaz de fornecer uma estrutura na qual se pode entender a Universalidade.

A ideia básica do GR consiste na aplicação de uma transformação a fim de reduzir o número de graus de liberdade do sistema. Seja

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{H}}{k_B T} = \mathcal{H}[K] \quad (2.23)$$

¹ Uma função homogênea generalizada (FHG) de grau p é uma função do tipo $f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda^p f(x, y)$ (Stanley, 1971).

o Hamiltoniano reduzido, e K representa um conjunto de interações. A aplicação de uma transformação do GR gera um novo Hamiltoniano reduzido $\mathcal{H}' = \mathcal{H}[K']$, tal que:

$$\mathcal{H}' = R\mathcal{H}, \quad (2.24)$$

em que R , a transformação do GR, descreve como o sistema muda conforme as escalas de comprimento são modificadas. E supondo que sob a mesma transformação

$$K' = RK, \quad (2.25)$$

gere novos valores para os parâmetros K' a partir de K . É possível mostrar (Goldenfeld, 1992) que $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}[K]$, a função de partição, é invariante sob uma transformação do GR a menos de uma constante, *i.e.*,

$$\mathcal{Z}' \sim \mathcal{Z}, \quad (2.26)$$

em que $\mathcal{Z}' = \mathcal{Z}[K']$. Sendo a energia livre por spin $\mathcal{F} = \frac{1}{N} \log Z_N$ e $N = N'b^d$, tem-se

$$\frac{1}{N} \log \mathcal{Z}_N = \frac{1}{b^d} \left(\frac{1}{N'} \log \mathcal{Z}'_{N'} \right) \quad (2.27)$$

onde usamos a Equação (2.26), e a parte singular da energia livre transforma-se como ²

$$\mathcal{F}_{sing} = b^{-d} \mathcal{F}'_{sing} \quad (2.28)$$

em que $\mathcal{F}_{sing}$ é a parte singular da energia livre original e $\mathcal{F}'_{sing}$ é a parte singular da energia livre renormalizada. Após n aplicações de R ,

$$\begin{aligned} K' &= R_1 K \\ K'' &= R_2 K' \\ &= R_2(R_1 K) \\ &= R_{12} K \\ &\vdots \\ K^n &= R_n K, \end{aligned} \quad (2.29)$$

espera-se encontrar ponto fixos, *i.e.*,

$$K^n = K \equiv K^*, \quad (2.30)$$

em que $R_{12} = R_1 R_2$ e R_n é a n -ésima aplicação do GR R . Espera-se que sob uma transformação do GR o comprimento de correlação se transforme de acordo com

$$\xi' = b^{-1} \xi, \quad (2.31)$$

levando o sistema para longe da região crítica, enquanto no ponto fixo deve-se ter

$$\xi^* = b^{-1} \xi^*. \quad (2.32)$$

² Uma dedução da expressão em que a energia livre é a soma de uma termo regular com o termo singular pode ser encontrada em Huang (1987, p. 450).

Dessa forma o comprimento de correlação pode apresentar dois valores possíveis: $\xi^* = 0$, que é um ponto fixo trivial ou estável; $\xi^* = \infty$, ponto fixo crítico ou instável. Os pontos fixos estáveis descrevem as propriedades de uma dada fase do sistema permitindo determinar seu diagrama de fases e, portanto, as fases do sistema. Os pontos fixos instáveis, por outro lado, descrevem o comportamento singular do sistema permitindo calcular os expoentes críticos. Se uma transformação do GR for realizada sobre um ponto fixo instável, infere-se da [Equação \(2.32\)](#), que a transformação preserva as características do sistema. Esta propriedade é conhecida por invariância de escala. Com a aproximação assintótica da região crítica a parte singular da energia livre é uma função homogênea generalizada (FHG) ([Stanley, 1999](#)). Dessa forma o comportamento assintótico da energia livre pode ser escrito como

$$\mathcal{F}_{sing}(u_1, u_2, \dots, u_n) = b^{-d} \mathcal{F}_{sing}(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots, b^{\omega_n} u_n), \quad (2.33)$$

em que os u_i 's são chamados de campos de escala do Hamiltoniano, b^{y_1} , b^{y_2} e os b^{ω_i} 's são os autovalores do GR ([Goldenfeld, 1992](#)).

Os campos de escala são classificados de acordo com o comportamento do sistema nas vizinhanças de um ponto fixo sob uma transformação do GR. Se o sistema é levado em direção ao ponto fixo, o campo é dito irrelevante e, nesse caso, $y_i < 0$. Quando o sistema é levado para longe do ponto fixo o campo de escala é dito relevante e, nesse caso, $y_i > 0$. Para $y_i = 0$ o campo de escala é dito marginal, e este caso está relacionado com correções logarítmicas da escala e dependem das características do sistema.

Para sistemas ferromagnéticos os campos relevantes são aqueles associados à temperatura reduzida t e ao campo externo reduzido h . Neste contexto, os campos relevantes são $u_1 = t$ e $u_2 = h$ e os autovalores são $b^{y_1} = b^{y_t}$ e $b^{y_2} = b^{y_h}$, e estão relacionados aos expoentes críticos. Com essa definição, a [Equação \(2.33\)](#) pode ser escrita como

$$\mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i) = b^{-d} \mathcal{F}_{sing}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{\omega_i} u_i), \quad (2.34)$$

em que os u_i 's são os campos de escala irrelevantes com $i \neq t, h$ e os b^{ω_i} 's são os autovalores associados aos campos irrelevantes. Podemos reescrever a [Equação \(2.34\)](#) fixando o valor b por $b^{y_t} |t| = 1$ e obtemos:

$$\mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i) = t^{d/y_t} \mathcal{F}_{sing}((\pm), |t|^{-y_h/y_t} h, |t|^{-\omega_i/y_t} u_i), \quad (2.35)$$

e para $t \rightarrow 0$ o termo $|t|^{-\omega_i/y_t} u_i \rightarrow 0$, uma vez que $\omega_i < 0$, mostrando que [Equação \(2.35\)](#) e, consequentemente, a [Equação \(2.34\)](#), dependem apenas dos campos relevantes.

No início do [Capítulo 2](#) vimos que as grandezas termodinâmicas, tais como calor específico e susceptibilidade magnética, são obtidas por meio das derivadas da energia livre. Como a [Equação \(2.34\)](#) é uma FHG, uma transformação de Legendre também será uma FHG e, consequentemente, qualquer outro potencial termodinâmico e suas derivadas também serão ([Stanley, 1971](#)). Sendo assim, o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade, a campo nulo, tomam a forma:

$$C = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i)}{\partial t^2} \right)_{h=0} = b^{-(d-2y_t)} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}_{sing}(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{\omega_i} u_i)}{\partial t^2} \right)_{h=0}, \quad (2.36)$$

$$m = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i)}{\partial h} \right)_{h=0} = -b^{(y_h-d)} \left(\frac{\partial \mathcal{F}_{sing}(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{\omega_i}u_i)}{\partial h} \right)_{h=0}, \quad (2.37)$$

e

$$\chi = - \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i)}{\partial h^2} \right)_{h=0} = -b^{-(d-2y_h)} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}_{sing}(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{\omega_i}u_i)}{\partial h^2} \right)_{h=0}. \quad (2.38)$$

Uma discussão detalhada a respeito das contribuições dos campos irrelevantes pode ser encontrada em (Goldenfeld, 1992; Diaz, 2017).

Até o momento nada foi dito sobre o parâmetro b . A escala do sistema é reduzida pelo fator b , portanto, podemos escolher $b = L$ e considerando $h = 0$, a Equação (2.34) toma a forma

$$\mathcal{F}_{sing}(t, h, u_i) = L^{-d} \mathcal{F}_{sing}(L^{y_t}t). \quad (2.39)$$

Por motivo de clareza, os campos irrelevantes, que devem ser nulos no limite termodinâmico, foram suprimidos da Equação (2.39). As grandezas termodinâmicas adquirem a forma

$$C = L^{-(d-2y_t)} \partial_t^2 \mathcal{F}_{sing}(L^{y_t}t), \quad (2.40)$$

$$m = L^{(y_h-d)} \partial_h \mathcal{F}_{sing}(L^{y_t}t) \quad (2.41)$$

e

$$\chi = L^{-(d-2y_h)} \partial_h^2 \mathcal{F}_{sing}(L^{y_t}t) \quad (2.42)$$

em que ∂_t^2 denota a derivada parcial segunda em relação à variável t e ∂_h^n as derivadas parciais de ordem n em relação a h . Fazendo a escolha $L^{y_t}|t| = 1$ as expressões acima tomam a forma

$$C \sim |t|^{-(2y_t-d)/y_t}, \quad (2.43)$$

$$m \sim t^{(d-y_h)/y_t}, \quad (2.44)$$

$$\chi \sim |t|^{-(2y_h-d)/y_t} \quad (2.45)$$

e a partir da Tabela 1 identificamos os autovalores dos campos relevantes com os expoentes críticos:

$$\alpha = \frac{d-2y_t}{y_t}, \quad (2.46)$$

$$\beta = \frac{d-y_h}{y_t} \quad (2.47)$$

e

$$\gamma = \frac{d-2y_h}{y_t}. \quad (2.48)$$

Das expressões acima, facilmente se obtém a relação de Rushbrooke, $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, apresentada na Tabela 2. Na criticalidade, $\xi \rightarrow \infty$: portanto, em sistemas finitos devemos ter

$$\xi = L. \quad (2.49)$$

Pela escolha $L^{y_t}|t| = 1$ obtemos

$$\xi \sim |t|^{-1/y_t}, \quad (2.50)$$

comparando esse resultado com a Tabela 1 obtemos:

$$y_t = \frac{1}{\nu}. \quad (2.51)$$

2.3.2 Relações de Escala de Tamanho Finito

A abordagem computacional lida obrigatoriamente com sistemas de tamanho finito, *i.e.*, $L \ll \infty$ e o comportamento crítico ocorre para $L \rightarrow \infty$. Nesse sentido, o formalismo apresentado na [Seção 2.3.1](#) fornece as bases para que possamos estudar sistemas finitos e extrapolar para $L \rightarrow \infty$. Essa extrapolação é possível por meio do método conhecido por escala de tamanho finito (do inglês, *finite-size scaling* – FSS).

No desenvolvimento apresentado anteriormente não levamos em consideração a influência dos campos irrelevantes. Considerando apenas um campo irrelevante, tal que $z = L^\omega u$ e $b = L$, após expansão até primeira ordem em torno de $z = 0$, a [Equação \(2.34\)](#) ficará

$$\mathcal{F}(t, h, z) = \mathcal{F}(t, h, 0) + z \partial_z \mathcal{F}(t, h, z)_{z=0}. \quad (2.52)$$

Efetuando as derivações apropriadas sobre a [Equação \(2.52\)](#), é possível rederivar as grandezas termodinâmicas explicitando a dependência nos campos irrelevantes. A determinação da temperatura efetiva pode ser feita por meio da localização do máximo de alguma grandeza termodinâmica, como, por exemplo, a susceptibilidade. Assim, pode-se mostrar que a temperatura efetiva, $T_c(L)$, é dada por:

$$T_c(L) = T_c + L^{-1/\nu} (1 + \sum_i a_i L^{-\omega_i}). \quad (2.53)$$

A mesma relação é válida para a grandeza adimensional $K_c = \frac{J}{k_B T_c}$ ([Landau; Binder, 2009](#)), sendo dada por:

$$K_c(L) = K_c + L^{-1/\nu} (1 + \sum_i a'_i L^{-\omega_i}), \quad (2.54)$$

em que a' é uma nova constante. Com o mesmo procedimento, as demais grandezas termodinâmicas podem ser escritas como

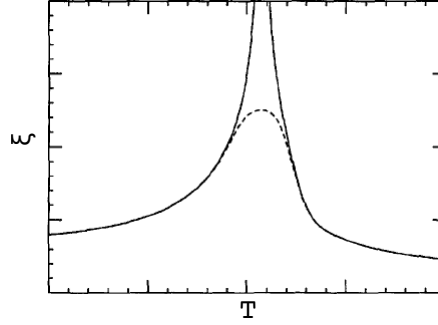
$$\mathcal{O}(L) = a L^{\lambda/\nu} (1 + \sum_i b_i L^{-\omega_i}), \quad (2.55)$$

em que a e b_i são parâmetros a serem determinados, e λ é o expoente crítico associado à grandeza $\mathcal{O}$.

Transições de fase ocorrem apenas no limite termodinâmico, $N = L^d \rightarrow \infty$, enquanto a abordagem computacional lida, necessariamente, com sistemas finitos. Por esse motivo, as divergências nas grandezas termodinâmicas são suprimidas, *i.e.*, o sistema é incapaz de atingir o regime assintótico de escala. Esse comportamento pode ser observado na [Figura 7](#), em que a temperatura de transição, T_{tr} , é deslocada para um valor diferente, denominada temperatura efetiva, T_{ef} .

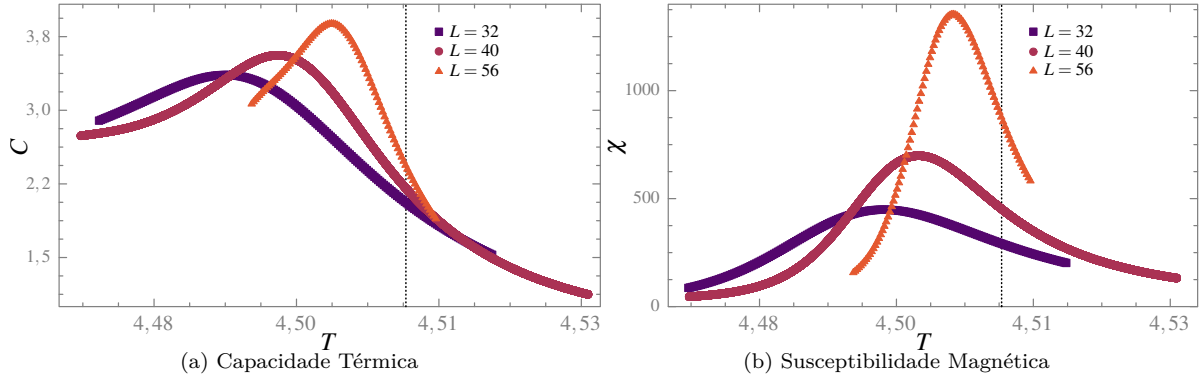
À medida que o sistema cresce, a temperatura efetiva se aproxima da verdadeira temperatura de transição, como mostrado na [Figura 8](#). No limite termodinâmico, espera-se que $T_{ef} \rightarrow T_{tr}$. As [Figuras 8a](#) e [8b](#) apresentam a variação de T_{ef} para o calor específico e para a susceptibilidade magnética, respectivamente. Os valores de T_{ef} são determinados pelos máximos dessas grandezas.

Figura 7 – Comprimento de correlação de um sistema infinito, ξ_∞ , linha cheia, e para uma rede de tamanho linear $L \ll \infty$, ξ_L , linha tracejada. Observa-se a ausência de divergência para ξ_L .



Fonte - Adaptado de Newman e Barkema (1999)

Figura 8 – Efeito do tamanho finito sobre a localização da temperatura de transição. Transições de fase só ocorrem em sistemas infinitos, portanto, a temperatura é deslocada se aproximando do valor de T_{tr} da rede infinita com o aumento da rede. A linha pontilhada vertical localizada em $T_c = 4,511\,523\,256$ corresponde a temperatura de transição do modelo de Ising, $K_c = 0,221\,654\,626(5)$ (Ferrenberg; Xu; Landau, 2018) ($T_c = \frac{J}{k_B K_c}$).



Fonte - Elaborado pelo autor.

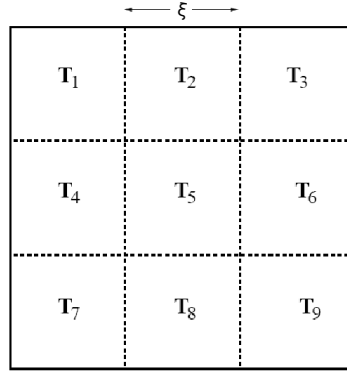
2.4 Desordem

A incapacidade do sistema termodinâmico em atingir o regime assintótico de escala quando $L \rightarrow \infty$ é conhecido como *crossover*. As causas para o crossover vão desde um campo residual presente em sistemas experimentais, efeito de anisotropia ou ainda devido a efeitos de desordem. Para o caso de desordem, nosso caso de interesse, o efeito é tratado por meio do critério de Harris (1974), e, mais especificamente para sistemas aperiódicos, pelo critério de Harris-Luck (Luck, 1993a).

2.4.1 Critério de Harris-Luck

Harris (1974) considerou que a desordem poderia ser vista como uma mudança local no número de interações de troca e portanto, a temperatura de transição varia de ponto a ponto. O argumento de Harris considera que devido às impurezas distribuídas aleatoriamente existirão regiões de comprimento ξ com temperaturas de transição T_c . Portanto, divide-se um sistema magnético em células de comprimento ξ tal que a concentração média de impurezas, x , seja bem definida e em cada uma dessas células a temperatura média de transições seja $T_c(x)$, Figura 9, e então calcula-se as flutuações de T_c de célula para célula.

É um resultado conhecido que a largura da distribuição, pelo teorema do limite central,

Figura 9 – Distribuição de temperatura ao longo de um rede quadrada de comprimento de correlação ξ .Fonte - Adaptado de [Harris \(2007\)](#)

é $\sigma \sim N^{-1/2}$ ($N = \xi^d$ é o volume do sistema). Denotando a largura da distribuição de T_c por δT_c , tem-se $\delta T_c \sim \xi^{-d/2}$, em que d é a dimensão do sistema e ξ^d é o volume. O comprimento de correlação escala como $|T - T_c|^{-\nu}$ e desde que $|T - T_c| < \delta T_c$, as flutuações em T_c não irão afetar o comportamento crítico do sistema. Essa condição leva à seguinte expressão

$$\frac{\delta T_c}{\Delta T} \sim \frac{\xi^{-d/2}}{\xi^{-1/\nu}} = \xi^{1/\nu - d/2} \quad (2.56)$$

que será satisfeita se $2 - \nu d > 0$ quando $\xi \rightarrow 0$. Utilizando a relação $2 - \alpha = \nu d$, a condição para que o comportamento crítico não seja alterado é dada por $\alpha < 0$ — nesse caso a introdução da desordem é dita irrelevante. Por outro lado, quando $\alpha > 0$ tem-se que a introdução de impurezas é relevante e o comportamento crítico do sistema é alterado.

[Luck \(1993a\)](#) ao estudar o comportamento crítico de uma cadeia de Ising quântica aperiódica em campo transversal, mostrou que o critério de Harris poderia ser estendido para sistemas aperiódicos. Essa extensão é conhecida como critério de Harris-Luck. Em um segundo trabalho, publicado no mesmo ano, Luck apresentou uma classificação dos fenômenos críticos em quasi-cristais e estruturas aperiódicas ([Luck, 1993b](#)). Em um artigo publicado meses antes, [Iglói \(1993\)](#) apresentou os mesmos resultados que Luck. Ao critério obtido por Luck, Iglói cunhou o expoente de cruzamento (“*crossover*”), dado por:

$$\Phi = 1 + d_a \nu_0 (\omega - 1), \quad (2.57)$$

em que d_a é o número de dimensões em que a aperiodicidade é introduzida, ω o expoente de flutuação que descreve o comportamento das flutuações nas letras das sequências, [Seção 2.4.3](#), ([Berge; Chatelain; Berche, 1998](#); [Chatelain; Berche; Berche, 1999](#); [Faria; Branco; Tragtenberg, 2008](#)) e ν_0 é o expoente associado ao comprimento de correlação do caso puro. Para $\Phi > 0$, a sequência é dita relevante, isso significa que a introdução da sequência altera a classe de universalidade; para $\Phi < 0$ ela é irrelevante, indicando que a introdução da sequência não altera a classe de universalidade.

Em termos do expoente de flutuação, a relevância da sequência — se relevante, irrelevante ou marginal — é determinada a partir de um valor crítico, ω_c , estabelecido em ([Luck, 1993b](#); [Vieira; Hoyos, 2018](#)), dado por:

$$\omega_c = \max\{0, 1 - (d_a \nu_0)^{-1}\}. \quad (2.58)$$

Dessa forma, para uma sequência aperiódica, tem-se que: se $\omega > \omega_c$, ela classificada como relevante; se $\omega < \omega_c$, como irrelevante; e, no caso em que $\omega = \omega_c$, como marginal.

Quando há desordem com correlação de longo alcance, o critério de Harris precisa ser generalizado. Nesse tipo de desordem assume-se que as correlações espaciais entre as constantes de acoplamento decaem com uma lei de potência do tipo $\overline{J_{ij}J_{kl}} - \overline{J_{ij}}\overline{J_{kl}} \sim |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-a}$. Obtém-se, dessa forma, uma extensão do critério de Harris, e a desordem será relevante quando $\nu < 2/a$ e $a < d$ (Weinrib; Halperin, 1983b; Chatelain, 2014a; Chatelain, 2014b).

2.4.2 Fase de Griffiths

Como visto na seção anterior, a desordem modifica a temperatura crítica em relação à versão pura. A temperatura crítica, T_c , do sistema desordenado ocorre abaixo da temperatura crítica da versão pura, T_c^0 .

Um sistema desordenado pode conter regiões que, embora raras, apresentam grande extensão espacial e originam uma região específica no diagrama de fases com propriedades críticas incomuns — geralmente localizada entre a fase ordenada e a desordenada. Griffiths (1969) e McCoy (1969) mostraram que essas regiões podem exibir comportamento não analítico, denominado *singularidade de Griffiths*.

Enquanto o sistema encontra-se em uma fase desordenada (ordenada), essas regiões — *regiões de Griffiths* ou *fase de Griffiths* — encontram-se na fase ordenada (desordenada). Dessa forma não existe apenas um ponto crítico, como usualmente ocorre para transições contínuas, mas sim uma região crítica em toda a faixa de temperatura $T_c < T < T_c^0$. Semelhantemente ao que ocorre próximo ao ponto crítico, a dinâmica do sistema nessa região é extremamente lenta (*critical slowing down*), (Vojta, 2003; Vojta, 2006).

A fase de Griffiths (FG) é uma fase na qual o sistema se comporta de forma crítica, apresentando divergência da suscetibilidade magnética. Ela ocorre em um intervalo de temperaturas entre o ponto crítico, onde a magnetização se anula, e a fase paramagnética (Bray, 1987; Narayanan et al., 1999). A FG emerge de regiões raras dentro do sistema. Essas regiões raras podem sofrer uma transição de fase enquanto o restante do sistema ainda se encontra em uma fase ordenada (desordenada). Embora a FG seja principalmente observada em sistemas magnéticos, ela não se restringe a esses, tendo sido identificada também em muitos outros sistemas, como redes complexas (Muñoz et al., 2010) e atividade cerebral (Girardi-Schappo et al., 2016; Ódor; Dickman; Ódor, 2015).

Luck especulou sobre a existência de uma fase de Griffiths induzida por interações aperiódicas, ao estudar os efeitos da aperiodicidade em uma cadeia de Ising quântica (Luck, 1993a). Iglói et al. (Iglói; Karevski; Rieger, 1998; Iglói; Karevski; Rieger, 1998) e Vieira (2005) demonstraram a inexistência de singularidades de Griffiths para sequências irrelevantes e relevantes em uma cadeia de Ising transversa quântica com interações aperiódicas.

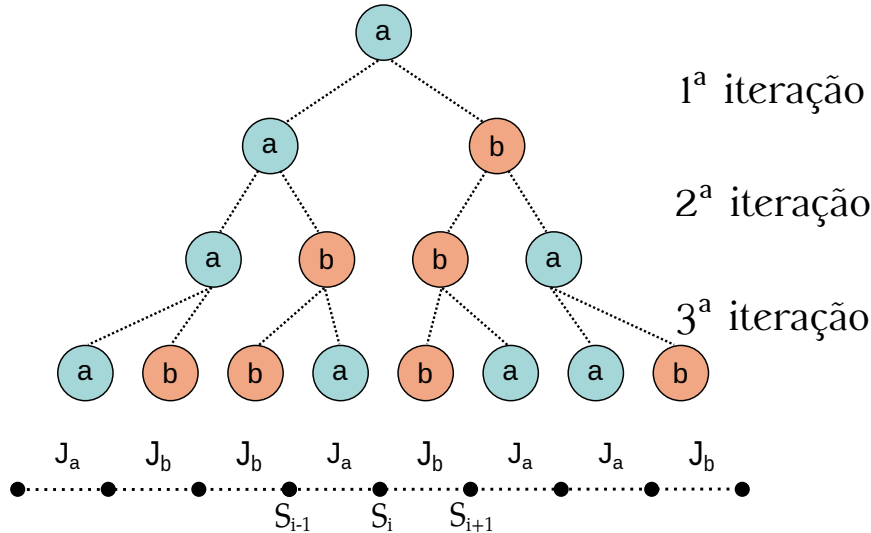
2.4.3 Sequências Aperiódicas

Um arranjo cristalino consiste da repetição periódica de átomos em uma estrutura regular, uma rede de *Bravais*. No entanto, existem estruturas que não se encaixam nessa definição, não apresentando uma estrutura repetida indefinidamente, são os chamados *quasi-cristais* (Levine; Steinhardt, 1984; Levine; Steinhardt, 1986). É possível criar, experimentalmente, um material aperiódico através de um processo *quenched* (temperado, em que o material é resfriado bruscamente), ou ainda através da deposição aperiódica de átomos na formação da estrutura.

Essas estruturas podem ser modeladas por ligações que seguem sequências aperiódicas. Uma sequência aperiódica possui a característica de não poder ser obtida pela repetição de um pedaço qualquer dessa sequência, mas ser construída por uma regra determinística. Exemplos de sequências aperiódicas são as sequência de *Fibonacci*, *Thue-Morse*, *Paper-Folding*, *Rudin-Shapiro*, *Three-Folding*. Dessa forma, nos interessa estudar os impactos dessas estruturas sobre as características e propriedades físicas do sistema modelado. Como por exemplo, mudança na classe de universalidade, alteração da ordem de transição (de primeira ordem para uma transição contínua).

Uma sequência aperiódica é obtidas através de certas regras, chamadas regras de substituição. Na Figura 10 podemos ver a geração de uma sequência a partir da aplicação da regra de substituição Thue-Morse ($a \rightarrow ab; b \rightarrow ba$), Seção 2.4.3.1. Após três iterações a sequência aperiódica **abbabaab** é obtida. As propriedades de um regra de substituição podem ser exploradas

Figura 10 – Criação de uma sequência aperiódica Thue-Morse. Partindo de um dígito **a**, por exemplo, após três aplicações da regra de substituição Thue-Morse, tem-se a seguinte sequência: **abbabaab**.



Fonte - Adaptado de (Salvador; Tragtenberg, 2025).

através de uma matriz de substituição da forma:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \# \text{ de } a\text{'s em } S(a) & \# \text{ de } a\text{'s em } S(b) \\ \# \text{ de } b\text{'s em } S(a) & \# \text{ de } b\text{'s em } S(b) \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

em que $S(a)$ representa a aplicação da regra de substituição à letra a , e $S(b)$ representa a aplicação da regra de substituição à letra b .

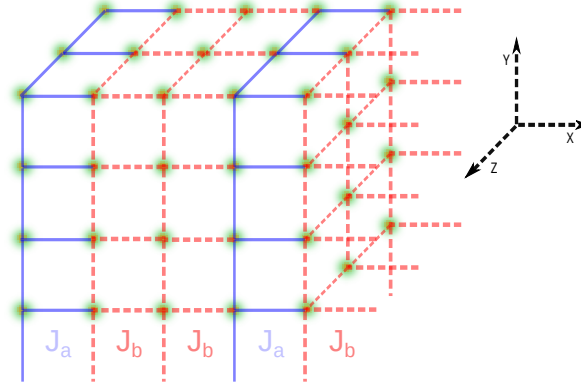
O expoente de flutuação, ω , é obtido a partir da matriz de substituição e dado por (Luck, 1993b; Chatelain; Berche; Berche, 1999; Faria, 2006)

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1}, \quad (2.60)$$

em que λ_1 é o maior autovalor e λ_2 o segundo maior autovalor.

Na Figura 11 ilustramos, esquematicamente, uma estrutura modelada aperiódicamente, em que as interações de troca, J_a e J_b , são introduzidas apenas em uma direção em uma rede cúbica. As ligações na direção x são determinadas por uma regra de substituição enquanto as ligações nas direções y e z recebem o mesmo valor da ligação na direção x à direita.

Figura 11 – Uma rede cúbica com ligações aperiódicas na direção x determinada por uma sequência Thue-Morse (Seção 2.4.3.1). As ligações nas direções y e z mantêm o mesmo valor da ligação na direção x a sua direita.



Fonte - Elaborado pelo autor.

Na próxima seção passamos a discutir as regras de substituição das **Thue-Morse**, **Paper-Folding** e **Rudin-Shapiro**.

2.4.3.1 Thue-Morse (TM)

A sequência TM é obtida através da seguinte regra de substituição

$$\begin{cases} S(a) \longrightarrow ab \\ S(b) \longrightarrow ba \end{cases},$$

e sua matriz de substituição é dada por

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

com autovalores: $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 0$. Dessa forma, por meio de Equação (2.60), temos:

$$\omega = \frac{\ln |0|}{\ln 2}, \quad (2.62)$$

resultando em $\omega = -\infty$, que, de acordo com a Equação (2.58), é uma sequência irrelevante. Por ser uma sequência irrelevante, ela será utilizada como uma sequência de controle, uma vez que a para $q = 2$ o modelo é equivalente ao modelo de Ising, Capítulo 3, os expoentes críticos não devem ser alterados.

2.4.3.2 Paper-Folding (PF)

A sequência PF é obtida através da seguinte regra de substituição

$$\begin{cases} S(aa) \longrightarrow baaa \\ S(ab) \longrightarrow baab \\ S(ba) \longrightarrow bbaa \\ S(bb) \longrightarrow bbab \end{cases},$$

e fazendo a substituição

$$\begin{cases} S(aa) = S(a) \longrightarrow ca \\ S(ab) = S(b) \longrightarrow cb \\ S(ba) = S(c) \longrightarrow da \\ S(bb) = S(d) \longrightarrow db \end{cases}$$

obtemos a matriz de substituição

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

com autovalores: $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$. Dessa forma, por meio da [Equação \(2.60\)](#), temos

$$\omega = \frac{\ln |1|}{\ln 2}, \quad (2.64)$$

resultando em $\omega = 0$. Novamente, de acordo com a [Equação \(2.58\)](#), essa é uma sequência relevante.

2.4.3.3 Rudin-Shapiro (RS)

A sequência RS é obtida através da seguinte regra de substituição

$$\begin{cases} S(00) \longrightarrow 0001 \\ S(01) \longrightarrow 0010 \\ S(10) \longrightarrow 1101 \\ S(11) \longrightarrow 1110 \end{cases},$$

e fazendo a substituição

$$\begin{cases} S(00) = S(a) \longrightarrow ab \\ S(01) = S(b) \longrightarrow ac \\ S(10) = S(c) \longrightarrow db \\ S(11) = S(d) \longrightarrow dc \end{cases}$$

e sua matriz de substituição é dada por

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

com autovalores: $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = \sqrt{2}$, $\lambda_3 = 0$ e $\lambda_4 = -\sqrt{2}$. Dessa forma, por meio da [Equação \(2.60\)](#), temos

$$\omega = \frac{\ln |\sqrt{2}|}{\ln 2}, \quad (2.66)$$

resultando em $\omega = \frac{1}{2}$, e portanto, essa é uma sequência relevante. A [Tabela 3](#) sumariza as características das sequências apresentadas.

Tabela 3 – Sequências aperiódicas e suas principais características

Sequência	Regra	ω	p
Thue-Morse (TM)	$S(a) \rightarrow aba$	$-\infty$	1
	$S(b) \rightarrow abb$		
Paper-Folding (PF)	$S(a) \rightarrow ca$	0	1
	$S(b) \rightarrow cb$		
	$S(c) \rightarrow da$		
	$S(d) \rightarrow db$		
Rudin-Shapiro (RS)	$S(a) \rightarrow ab$	$\frac{1}{2}$	1
	$S(b) \rightarrow ac$		
	$S(c) \rightarrow db$		
	$S(d) \rightarrow dc$		

Fonte - Elaborado pelo autor.

A quarta coluna da [Tabela 3](#) apresenta o valor p . Esse valor refere-se a possibilidade de escrever a estrutura não como uma cúbica simples, mas como uma estrutura em que a direção de aplicação da aperiodicidade é maior que o restante das direções, e vamos denominá-lo de fator de deformação.

Sendo assim, teríamos $L_x = pL$, $L_y = L_z = L$ e o número total de sítios na rede (ou volume) dado por $N = L_x L_y L_z = (pL) \times L \times L$. O objetivo em se estender a direção da aplicação da aperiodicidade é tornar mais evidente as modificações causadas pelas sequências às propriedades dos sistema em questão.

3 Modelo de Potts

Em 1952 C. Domb sugeriu a seu aluno de doutorado R. B. Potts uma generalização ao modelo de Ising para mais de dois estados (Potts, 1952). Diferentemente do modelo de Ising, somente contribuem para a energia os spins encontrados no mesmo estados. Portanto, a contribuição para a energia total de spins em estados diferentes é nula. Diferentes sistemas físicos podem ser modelados apenas variando o número de estados, como por exemplo estudo de atrito magnético (Li; Pleimling, 2016) e modelagem de crescimento de tumores (Szabó; Merks, 2013).

3.1 O Hamiltoniano de Potts

O Hamiltoniano de Potts é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - H \sum \delta_{\sigma_i, 1}^1 \quad (3.1)$$

em que J_{ij} é a constante de acoplamento entre os sítios i e j , para a qual temos:

$$J_{ij} = \begin{cases} > 0 & \text{ferromagnético} \\ < 0 & \text{antiferromagnético} \end{cases} \quad (3.2)$$

$\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ é a delta de Kronecker tal que:

$$\delta_{\sigma_i, \sigma_j} = \begin{cases} 1 & \text{para } \sigma_i = \sigma_j \\ 0 & \text{para } \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases} \quad (3.3)$$

$\sigma_i = 1, \dots, q, \forall i$, representa o estado do sítio i e $\langle ij \rangle$ significa que a soma deve ser realizada sobre todos os pares primeiros vizinhos. Em particular, o modelo de Ising é obtido para $q = 2$.

Multiplicando o primeiro termo do lado direito da Equação (3.1) por $\frac{J}{J}$ e definindo $\eta_{ij} = \frac{J_{ij}}{J}$, obtém-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \eta_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - H \sum \delta_{\sigma_i, 1}. \quad (3.4)$$

Multiplicando a Equação (3.4) por $\frac{1}{k_B T}$ e definindo $K = \frac{J}{k_B T}$ e $h = \frac{H}{k_B T}$ obtém-se o Hamiltoniano reduzido

$$\beta \mathcal{H} = \mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \eta_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - h \sum \delta_{\sigma_i, 1}. \quad (3.5)$$

A função de partição de Potts é dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mu} \exp \left[K \sum_{\langle ij \rangle} \eta_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} + h \sum \delta_{\sigma_i, 1} \right], \quad (3.6)$$

em que $\sum_{\mu}$ é a soma sobre todos os estados do sistema, μ .

¹ O modelo homogêneo é obtido fazendo $J_{ij} = J$, dessa forma a expressão apresenta-se na sua forma mais simples $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - H \sum \delta_{\sigma_i, 1}$.

Da mesma forma que o modelo de Ising, o parâmetro de ordem é definido como a densidade para o estado que possui o maior número de variáveis de spin. No caso de Ising, os estados podem ser spin para cima ($\uparrow$) ou spin para baixo ($\downarrow$). Um sistema descrito pelo modelo de Potts pode assumir q estados. Dessa forma, definimos o parâmetro de ordem, magnetização, por meio do estado que possui a maior densidade entre os possíveis q estados (Kim; Joseph, 1975), dessa forma:

$$m_L = \frac{q\rho_{max} - 1}{q - 1}, \quad (3.7)$$

em que $\rho_{max} = \max\{N_\sigma/N\}$ é a densidade de spins do estado mais populoso, N_σ é o número de spins no estado σ e $N = L^3$ é o número total de spins na rede. O calor específico e a susceptibilidade magnética são calculados de forma usual

$$C = k_B\beta^2 \left(\langle E_L^2 \rangle - \langle E_L \rangle^2 \right) \quad (3.8)$$

e

$$\chi = \beta N \left(\langle m_L^2 \rangle - \langle m_L \rangle^2 \right). \quad (3.9)$$

Além das grandezas mencionadas acima, estamos interessados em outras grandezas que nos permitirão obter expoentes críticos do modelo. São elas:

$$U_{2i} = 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle m^{2i} \rangle}{\langle m^i \rangle^2}, \quad (3.10)$$

em que U_{2i} são os cumulantes da magnetização e $i = 1, 2$ e 3 , e o logaritmo dos momentos da magnetização, $\ln \langle m^j \rangle$, em que $j = 1, 2, 3$ e 4 . Essas últimas 7 grandezas obedecem a mesma lei de escala, a saber

$$\left(\frac{dG}{dK} \right)_{\text{máx}} = G_0 L^{1/\nu}, \quad (3.11)$$

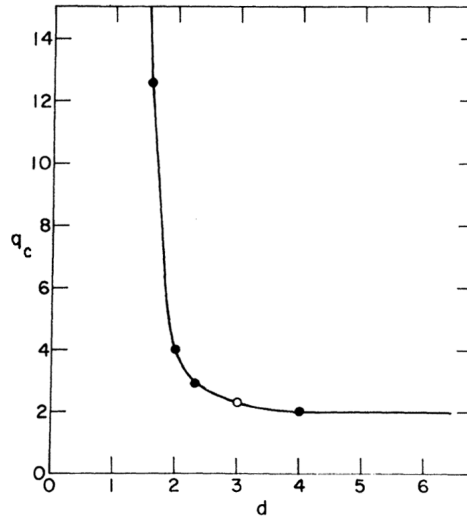
com $G = U_{2i}$, $\ln \langle m^j \rangle$, nos permitindo obter o expoente crítico do comprimento de correlação, ν .

3.2 Transições de Fase

As transições de fase do modelo de Potts dependem da dimensionalidade espacial do sistema, do número de estados do modelo e do tipo de interação entre os constituintes do sistema. Em duas dimensões o modelo de Potts sofre uma transição de primeira ordem para $q \geq 4$, enquanto abaixo desse valor a transição é contínua. Para um sistema tridimensional a transição é de primeira ordem para $q > 2$ – essa dependência pode ser vista na Figura 12.

Considerando o sistema tridimensional, portanto, temos que o modelo de Potts, em sua versão pura, sofre uma transição contínua para $q = 2$ (compartilhando os mesmos expoentes críticos do modelo de Ising) e uma transição de primeira ordem para $q > 2$. No entanto, quando o sistema não é puro (introdução de impurezas ou ainda um sistema formado por dois ou mais átomos distintos), podemos ter modificações importantes nas propriedades termodinâmicas. Um sistema que sofre uma transição contínua pode ter sua classe de universalidade alterada, e novos expoentes críticos são obtidos. Sistemas com desordem descorrelacionada (Berche et al., 2004) ou com modulações aperiódicas (Girardi, 2010), são exemplos em que a classe de universalidade é modificada.

Figura 12 – Valores críticos q_c em função da dimensão do sistema para o qual uma transição contínua passa a ser de primeira ordem.



Fonte - Nienhuis, Riedel e Schick (1981).

Se a transição é de primeira ordem, mudanças mais drásticas podem ocorrer, e o sistema pode ter a ordem de transição modificada de primeira ordem para contínua. Sistemas bidimensionais com modulações aperiódicas (Berche; Chatelain; Berche, 1998; Chatelain; Berche; Berche, 1999; Girardi; Branco, 2011) ou ainda sistemas tridimensionais com desordem descorrelacionada (Chatelain; Berche; Janke, 2002; Chatelain et al., 2005), são exemplos dessa modificação na ordem de transição.

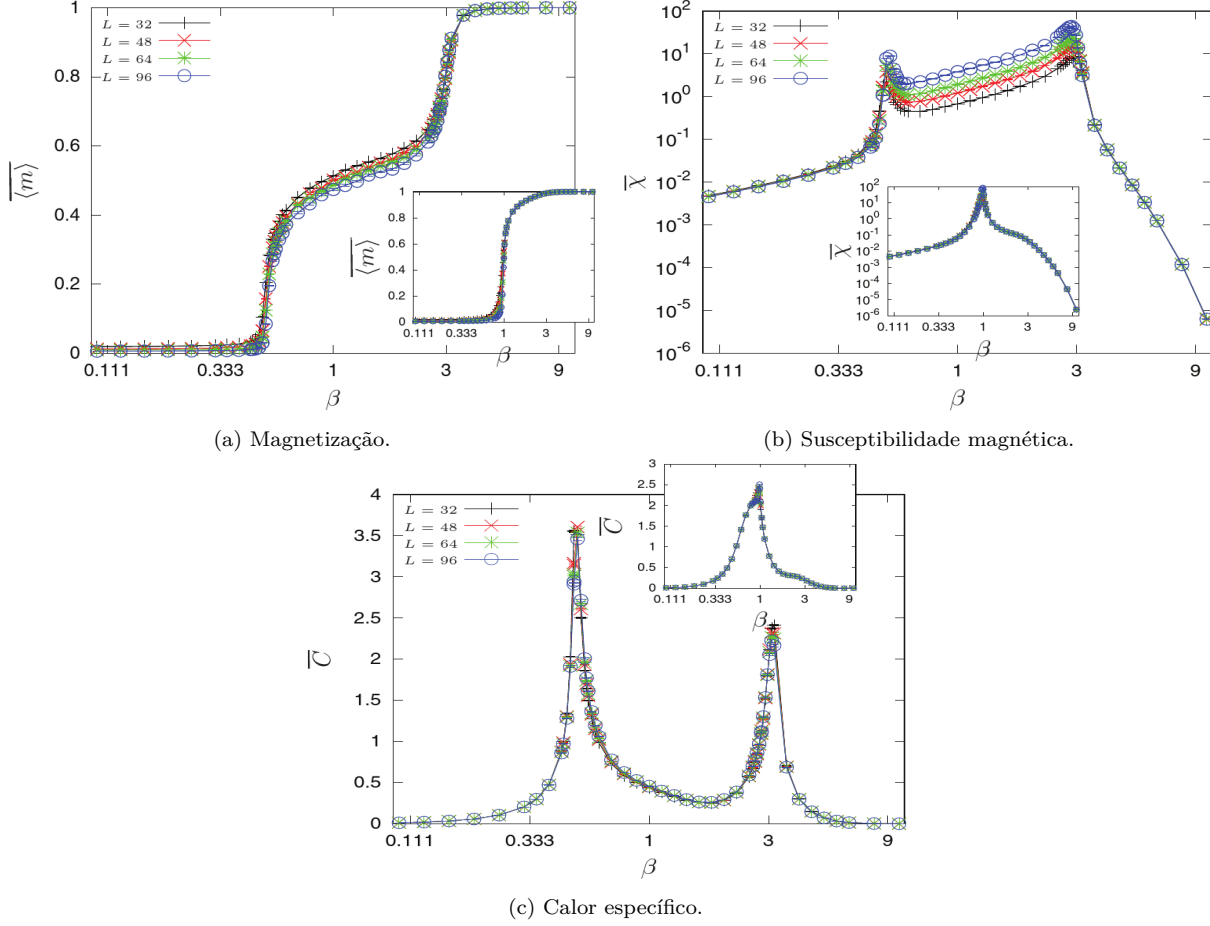
Chatelain (Chatelain, 2014a; Chatelain, 2014b) demonstrou a existência de FG no modelo de Ising bidimensional com desordem correlacionada de longo alcance. Em todas as temperaturas dentro da FG, o expoente crítico magnético não depende da intensidade da desordem. Além disso, o expoente crítico do parâmetro de ordem viola levemente a relação de hiperscala.

A Figura 13 apresenta o comportamento da magnetização, da susceptibilidade magnética e do calor específico; observe que a susceptibilidade é apresentada com o eixo vertical em escala logarítmica. O sistema apresentado é um modelo de Potts de oito estados com desordem correlacionada e as figuras menores no interior referem-se à desordem sem correlação. A variação abrupta da magnetização, Figura 13a, é acompanhada por dois picos na susceptibilidade, Figura 13b. O mesmo comportamento é observado para o calor específico, Figura 13c. Diferentemente da susceptibilidade, o calor específico parece ser independente do tamanho do sistema, em que a amplitude dos picos se mantém praticamente constante com o aumento da rede, como pode ser visto nas Figura 13c.

Essa estrutura de múltiplos picos no calor específico já havia sido relatada em estudos anteriores por Chen, Ferrenberg e Landau (1995) estudando o modelo de Potts bidimensional com ligações aleatórias e por Yaşar e Dilaver (2009) no estudo do modelo de Potts também em duas dimensões mas com distribuições periódicas. Nesses trabalhos os autores não relatam dificuldades com grandezas referentes a magnetização e por ser um sistema bidimensional a temperatura de transição é conhecida exatamente. Os autores argumentam que o sistema se comporta como se ele estivesse se dividindo em sub-redes com agrupamentos de ligações fortes e

fracas. Em (Chen; Ferrenberg; Landau, 1995) os autores mencionam ainda que não é possível determinar qual é a “verdadeira” temperatura de transição.

Figura 13 – Grandezas termodinâmicas com desordem descorrelacionada (figuras menores) e desordem correlacionada. A desordem correlacionada parece induzir aparecimento de uma fase de Griffiths



Fonte - (Chatelain, 2014a).

Chippari, Picco e Santachiara (2023) estudaram o mesmo modelo e obtiveram os mesmos expoentes críticos, mas não observaram a existência da FG.

3.2.1 O modelo aperiódico bidimensional

Os trabalhos mencionados acima referem-se a modelos bidimensionais com desordem correlacionada. Girardi (2010), em sua tese de Doutorado, menciona o aparecimento de dois máximos no calor específico e também nas derivadas logarítmicas da magnetização no modelo aperiódico bidimensional.

Observamos que o calor específico apresenta dois máximos, bem como as derivadas logarítmicas da magnetização (Girardi, 2010, p. 61).

Essa estrutura de dois ou mais máximos nas grandezas termodinâmicas relatadas para sequências aperiódicas podem estar relacionadas com o exposto na Seção 3.2 e que temos encontrado tanto para as sequências irrelevantes (com r elevado) quanto para as sequências relevantes.

4 Método de Monte Carlo

A determinação das propriedades termodinâmicas de um sistema físico a partir das equações de movimento de seus constituintes é uma tarefa praticamente impossível. Uma das formas de obter os valores das grandezas termodinâmicas de interesse consiste em utilizar simulações de Monte Carlo. Uma simulação de Monte Carlo (sMC) faz uso de números aleatórios para simular as flutuações térmicas aleatórias do sistema em questão.

Como visto anteriormente, o valor médio de um observável é dado pela expressão:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{O}_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}. \quad (4.1)$$

A Equação (4.1) não é, em geral, tratável exatamente. Uma opção é dividir o sistema em subsistemas, e escolhermos um conjunto de estados com uma probabilidade p_{μ} para a escolha do estado μ . Dessa forma, a melhor estimativa para a quantidade $\mathcal{O}$ é dada pela expressão:

$$\mathcal{O}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^n p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (4.2)$$

A escolha dos n estados deve ser realizada de forma que $\mathcal{O}_n$ seja uma estimativa a mais precisa possível de $\langle \mathcal{O} \rangle$. A forma mais simples de se fazer isso é escolher os estados n com igual probabilidade. Isto significa fazer os p_{μ} 's iguais. Com esta escolha, a Equação (4.2) torna-se:

$$\mathcal{O}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^n e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (4.3)$$

O objetivo de uma sMC, portanto, é obter uma estimativa de $\langle \mathcal{O} \rangle$ por meio da geração de um número finito de estados de equilíbrio. Embora a forma mais simples de escolher p_{μ} seja determinando que todos sejam iguais, um sistema típico tem um número de estados a ser percorrido muito elevado (Newman; Barkema, 1999) e com esse procedimento corre-se o risco de não escolher os estados mais importantes. Portanto, ao invés de amostrarmos os n estados do sistemas com igual probabilidade, a amostragem é feita por meio da distribuição de probabilidade de Boltzmann. Essa é a chamada amostragem por importância (Newman; Barkema, 1999). Portanto, temos a seguinte estratégia: um estado μ particular é escolhido por meio de $p_{\mu} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta E_{\mu}}$. Dessa forma, a Equação (4.3) se torna apenas:

$$\mathcal{O}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i \quad (4.4)$$

A grandeza $\mathcal{O}_n$, portanto, fornece uma estimativa para o valor esperado $\langle \mathcal{O} \rangle$; dessa forma:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{O}_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathcal{O}_i. \quad (4.5)$$

O problema a ser resolvido a partir desse momento consiste na geração dos n estados contidos na Equação (4.4). Partindo de um estado μ , a simulação gera um outro estado ν . A

probabilidade do sistema ser encontrado em um estado particular μ em um tempo t é dado por $\omega_\mu(t)$. O processo pelo qual os estados são gerados é descrito por um equação mestra da forma:

$$\frac{d\omega_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu \left(\omega_\nu(t) \mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)} - \omega_\mu(t) \mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)} \right), \quad (4.6)$$

em que $\mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)}$ é a probabilidade de transição de um estado μ para um estado ν . A geração dos estados ν é feita através de um processo de Markov. Neste processo, o estado gerado depende apenas do estado imediatamente anterior, não apresentando dependências com outros estados anteriores do sistemas (ausência de memória).

No equilíbrio, as probabilidades de ocorrência dos estados não mais dependem do tempo e temos então:

$$\frac{d\omega_\mu(t)}{dt} = 0, \quad (4.7)$$

o que nos leva a

$$\sum_\nu \left(p_\nu \mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)} - p_\mu \mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)} \right) = 0. \quad (4.8)$$

A igualdade na [Equação \(4.8\)](#) pode ser satisfeita por um conjunto de soluções tal que

$$p_\nu \mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)} - p_\mu \mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)} = 0, \quad (4.9)$$

conhecido como *balanço detalhado*.

Estamos interessados em amostrar os estados de acordo com p_μ . Dessa forma, rescrevendo a [Equação \(4.8\)](#) e utilizando a [Equação \(2.2\)](#), a condição de balanço detalhado é reduzida a

$$\frac{\mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)}}{\mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)}} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (4.10)$$

O algoritmo a ser utilizado depende da dinâmica e dos $\mathcal{P}$'s escolhidos, e deve satisfazer a condição de balanço detalhado, [Equação \(4.10\)](#), e a ergodicidade. Satisfazer a ergodicidade significa que, em um tempo suficientemente longo, o algoritmo deve ser capaz de acessar todos os estado possíveis do sistema.

4.1 Equilíbrio, autocorrelação e cálculo de incertezas

Nesta seção apresentamos as formas de tratar a autocorrelação presente em sMC através do cálculo da função de autocorrelação bem como a aplicação da técnica de agrupamento de dados (*data binning*). Por último o método utilizado ao longo do trabalho para o cálculo das incertezas, o método *jackknife*.

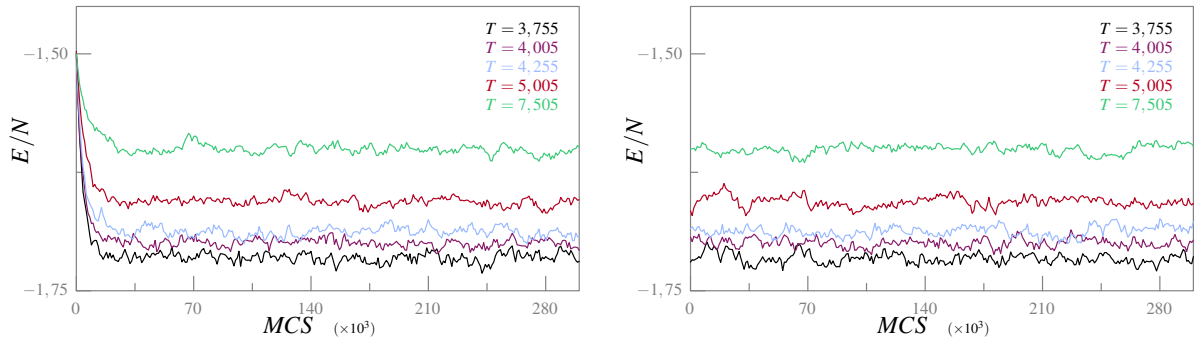
4.1.1 Equilíbrio

As propriedades do sistema de interesse são obtidas a partir dos dados simulados. A primeira questão que deve ser tratada refere-se ao equilíbrio, ou termalização. O sistema deve ser preparado em um determinada configuração inicial. As duas configurações mais simples a serem implementadas são: configuração aleatória, que constitui uma configuração de alta temperatura ($T = \infty$); configuração em que todos os spins encontram-se alinhados (no mesmo estado, para

cima, no modelo de Ising, por exemplo), constituindo uma configuração de baixa temperatura ($T = 0$). Ao iniciar a simulação o sistema gasta um tempo (alguns passos de Monte Carlo) para que os dados correspondam à distribuição desejada (distribuição de Boltzmann, por exemplo).

Esse tempo, o tempo de equilíbrio, está ilustrado na Figura 14 para o modelo de Ising em uma rede cúbica de tamanho linear $L = 32$, considerando uma configuração inicial aleatória e um total de $5 \cdot 10^5$ configurações geradas. Observa-se, a partir da Figura 14a, que o tempo de equilíbrio depende da temperatura, situando-se em torno de $MCS \approx 70 \cdot 10^3$. A Figura 14b apresenta os dados de energia obtidos após o equilíbrio ter sido atingido, com o descarte das configurações iniciais.

Figura 14 – Energia por spin de um modelo de Ising puro em uma rede cúbica de tamanho linear $L = 32$. O tempo de equilíbrio (termalização) é dependente da temperatura. O tempo necessário para equilibrar diminui conforme a temperatura é reduzida.

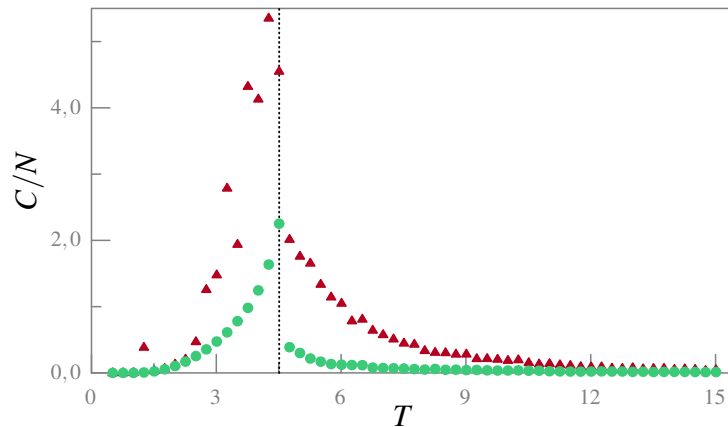


(a) Energia por spin em função dos passos de Monte Carlo. Sistema não equilibrado. (b) Energia por spin em função dos passos de Monte Carlo. Sistema equilibrado.

Fonte - Elaborado pelo autor.

Um dos efeitos de não se considerar adequadamente o tempo de equilíbrio está ilustrado na Figura 15, onde são apresentadas as curvas da capacidade térmica obtidas fora do equilíbrio (triângulos vermelhos, correspondentes a Figura 14a) e no equilíbrio (círculos verdes, correspondentes a Figura 14b). No caso em equilíbrio, a curva apresenta um pico bem definido, localizado muito próximo da temperatura crítica, $T_c \approx 4,5115$. Por outro lado, observa-se um

Figura 15 – Capacidade térmica por spin obtida a partir dos dados das Figuras 14a e 14b. Os triângulos vermelhos representam a capacidade térmica calculada com os dados não equilibrados. Os círculos verdes correspondem a capacidade térmica calculada com o sistema em equilíbrio. A linha traceja indica a temperatura crítica do modelo de Ising em três dimensões — $T_c \approx 4,5115$



Fonte - Elaborado pelo autor.

comportamento irregular quando o equilíbrio não é considerado, com o máximo deslocado em

relação ao resultado de equilíbrio. Esse efeito torna-se mais pronunciado à medida que aumenta a discrepância entre o tempo total de simulação, medido em passos de Monte Carlo, e o tempo necessário para que o sistema atinja o equilíbrio.

4.1.2 Função de autocorrelação

Como visto anteriormente, um sistema próximo a um ponto crítico apresenta divergência em seu comprimento de correlação. As sMC sofrem de um grave problema no estudo dos fenômenos críticos: ao se aproximarem de T_c , as simulações tendem a ficar demoradas em decorrência da divergência em ξ , fenômeno conhecido como *critical slowing down*. O tempo de correlação é caracterizado pelo expoente dinâmico z , e pode ser escrito na forma:

$$\tau \sim \xi^z. \quad (4.11)$$

τ nos fornece o tempo necessário para que uma nova configuração estatisticamente independente seja gerada.

Como uma simulação é realizada em uma rede finita, a [Equação \(4.11\)](#) torna-se apenas:

$$\tau \sim L^z \quad (4.12)$$

próximo ao ponto crítico. O tempo de correlação depende, entre outros fatores, do algoritmo utilizado na geração dos estados subsequentes. Portanto, quanto menor o expoente z mais eficiente será o algoritmo.

A medida desse expoente se dá da seguinte forma: a cada novo estado gerado por uma simulação, as quantidades de interesse são calculadas. Portanto, cada estado gerado é dependente do estado anterior; essa dependência reflete-se também nos observáveis medidos, sendo medida pela função de autocorrelação. Dada a medida de uma grandeza $\mathcal{O}(t')$ realizada em um tempo t' , e $\mathcal{O}(t' + t)$ realizada em um tempo $t' + t$, define-se a função de autocorrelação no tempo t' e $t' + t$ por ([Newman; Barkema, 1999](#)):

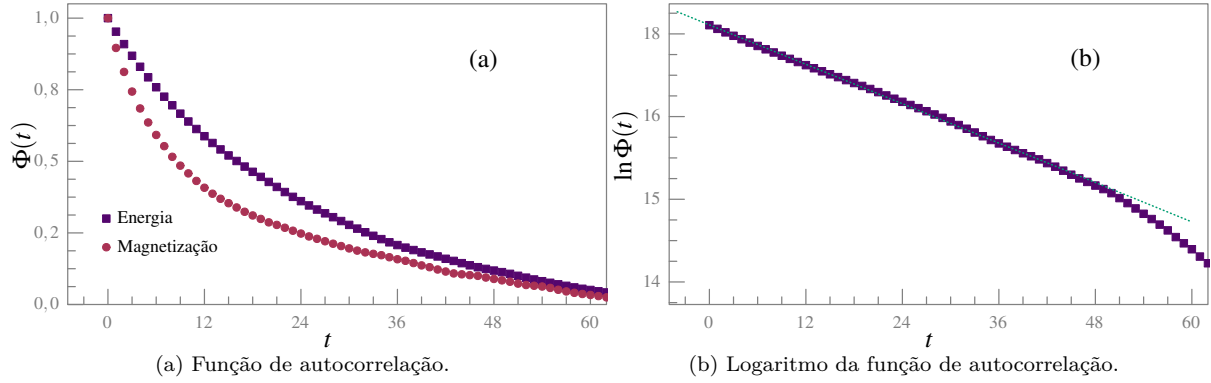
$$\begin{aligned} \Phi(t) = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} \mathcal{O}(t')\mathcal{O}(t' + t) - \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} \mathcal{O}(t') \times \\ \times \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t''=0}^{t_{max}-t} \mathcal{O}(t'' + t) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Nesse contexto, t representa o tempo e não deve ser confundido com a temperatura reduzida t , [Equação \(2.17\)](#). Salientamos ainda que o tempo em uma simulação refere-se à ordem em que as configurações são geradas, portanto, não possui qualquer relação com o tempo real. A [Figura 16a](#) mostra o comportamento da [Equação \(4.13\)](#). Espera-se um decaimento do tipo

$$\Phi \sim e^{-t/\tau}. \quad (4.14)$$

O tempo de autocorrelação, τ , pode ser obtido através do ajuste linear do logaritmo da função de autocorrelação, [Figura 16b](#). As grandezas calculadas a partir das sMC são obtidas através de medidas descorrelacionadas. Se realizarmos medidas com distância temporal de $\Delta t = 2\tau$, garantimos que os dados obtidos são estatisticamente descorrelacionados ([Landau; Binder, 2009](#)).

Figura 16 – Figura 16a Funções de autocorrelação da energia e da magnetização (círculos). Figura 16b logaritmo da função de autocorrelação da energia. A linha pontilha na Figura 16b corresponde ao ajuste da Equação (4.13).



Fonte - Elaborado pelo autor.

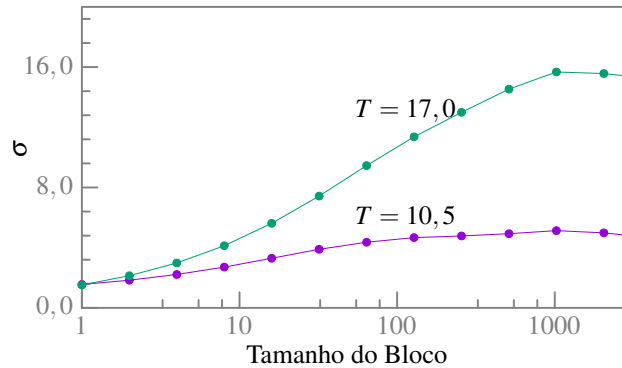
4.1.3 Método de agrupamento de dados – *data binning*

O método de agrupamento de dados, ou média de blocos (*block average*), permite obter dados estatisticamente descorrelacionados, dispensando o cálculo explícito do tempo de autocorrelação. Ainda assim, caso se deseje determinar esse tempo com o objetivo de calcular o expoente dinâmico z , ele pode ser estimado com baixo custo computacional.

O método é de fácil implementação e consiste na seguinte rotina: considere uma série temporal contendo N dados. Agrupe pares consecutivos de dados, formando blocos com dois dados cada. O valor associado a cada bloco é a média aritmética dos dois dados agrupados, resultando em uma nova série temporal, agora formada por $\frac{N}{2}$ dados. Em seguida, calcula-se o erro estatístico (desvio padrão) dessa nova série. Na etapa seguinte, repete-se o agrupamento em pares — agora agrupando os blocos formados na etapa anterior — e calcula-se novamente o erro estatístico.

Esse procedimento é repetido sucessivamente até que o erro estatístico se estabilize, indicando que o sistema alcançou um regime de equilíbrio. A convergência para esse regime pode ser observada por meio de um gráfico do desvio padrão σ em função do tamanho dos blocos n . A Figura 17 apresenta o comportamento de σ em função de n , calculado a partir da energia interna de um modelo aperiódico com tamanho linear $L = 32$. Observa-se que o regime

Figura 17 – Média de blocos contra o tamanho dos blocos de dados. As curvas correspondem a um sistema aperiódico RS com $r = 8$ e tamanho linear da rede $L = 32$. A simulação para $T = 10,5$ alcança um platô em torno de 100 enquanto para $T = 17,0$ a região de platô ocorre em torno de 1000. As linhas cheias são apenas guias para os olhos.



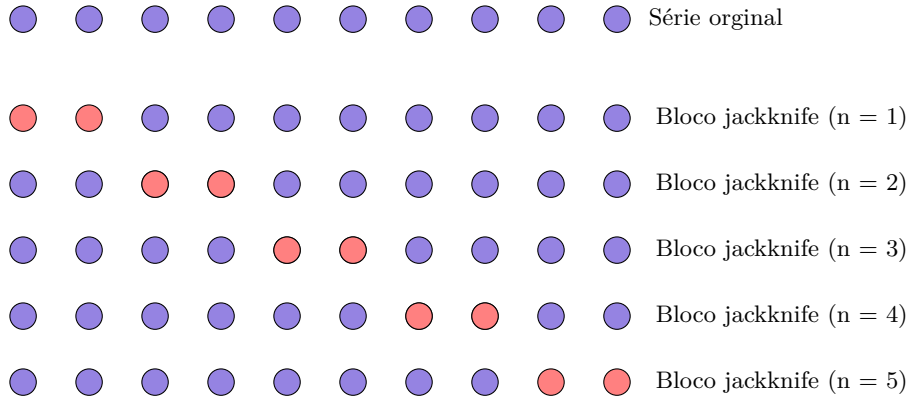
Fonte - Elaborado pelo autor.

de equilíbrio depende da temperatura da simulação: ele é atingido quando o tamanho dos blocos corresponde a cerca de 200 dados agrupados para $T = 10,5$ e aproximadamente 1000 dados agrupados para $T = 17,0$.

Todo o processo de agrupamento de dados foi realizado de forma um pouco diferente do exposto acima. Nesse trabalho, seguimos o procedimento apresentado por (Weigel; Janke, 2009; Weigel; Janke, 2010; Ferrenberg; Xu; Landau, 2018).

Cada bloco de dados, bloco jackknife, consiste na remoção de um bloco de dados. Os dados restantes são utilizados para calcular um estimador (o valor médio, por exemplo) restrito ao bloco jackknife correspondente. O processo de formação dos blocos jackknife pode ser visualizado na Figura 18. De um total $N = 10$ dados da série temporal original, são criados $n = 5$ blocos jackknife. Dessa forma, o tamanho de cada bloco jackknife é constituído por $N_J = N - \frac{N}{n} = 10 - \frac{10}{5} = 8$ dados.

Figura 18 – A partir de uma série original de N dados são geradas séries Jackknife. Em cada uma das séries são retirados um único dado ou um conjunto de dados. Para $n = 5$ cada série jackknife contém $N_J = \left(N - \frac{N}{n}\right)$ dados. No exemplo $N = 10$ e $n = 5$ tem-se $N_J = 8$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

4.1.4 Cálculo de incertezas — procedimento jackknife

O método jackknife (Efron, 1979; Efron, 1982) foi utilizado ao longo do trabalho com três objetivos: (i) determinar as incertezas no cálculo das grandezas observadas diretamente das simulações, como energia média $\langle E \rangle$ e magnetização média, $\langle m \rangle$; (ii) obter as incertezas de grandezas calculadas a partir dos valores de magnetização provenientes das simulações (grandezas não lineares, como susceptibilidade, por exemplo); (iii) combinar grandezas obtidas por diversas estimativas a fim de evitar correlações cruzadas (o expoente ν é obtido por 7 estimativas diferentes e então combinadas para o valor mais próximo do real e também obter a incerteza do valor combinado).

Com base no procedimento de formação de blocos jackknife descrito na seção anterior, pode-se estimar a variância das estimativas calculadas a partir dos diferentes blocos jackknife.

Considere o valor médio $\hat{\theta}$ como estimador. A média correspondente a cada bloco jackknife

é definida por

$$\hat{\theta}_i = \frac{1}{N_J} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \hat{\theta}_j, \quad (4.15)$$

em que $\hat{\theta}_j$ representa a estimativa obtida na ausência do j -ésimo bloco jackknife. A média jackknife, que corresponde à média sobre todos os n blocos jackknife, é então dada por

$$\hat{\theta}(\cdot) = \frac{1}{n} \sum_i^n \hat{\theta}_i. \quad (4.16)$$

A variância jackknife associada ao estimador $\hat{\theta}$ é definida por

$$\hat{\sigma}_{Jack} = \left[\frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\hat{\theta}_i - \hat{\theta}(\cdot) \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (4.17)$$

em que $\hat{\theta}_i$ e $\hat{\theta}(\cdot)$ são definidos nas [Equações \(4.15\)](#) e [\(4.16\)](#), respectivamente.

Grandezas obtidas pela combinação de outras variáveis carregam correlações cruzadas que podem ser eliminadas pelo uso do método jackknife ([Weigel; Janke, 2009](#); [Weigel; Janke, 2010](#); [Ferrenberg; Xu; Landau, 2018](#)). O expoente do comprimento de correlação ν , calculado no [Capítulo 5](#), é obtido pela combinação dos valores encontrados por meio dos cumulantes $U_{2i}, i = 1, 2$ e 3 e $\log(m^j), j = 1, 2, 3$ e 4 . Dessa forma, tem-se 7 estimativas para o expoente ν calculadas a partir das mesmas séries temporais da magnetização.

Para k diferentes estimadores $\hat{\mathcal{O}}_k$ (e.g., $\hat{\mathcal{O}}_i = \hat{\nu}_i$) com o mesmo valor esperado, a combinação de k estimadores para $\hat{\mathcal{O}}$ pode ser obtida por meio de uma combinação linear

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_i \alpha_i \hat{\mathcal{O}}_i, \quad (4.18)$$

em que se impõe o vínculo $\sum_i \alpha_i = 1$ para garantir a minimização da variância

$$\hat{\sigma}(\hat{\mathcal{O}}) = \sum_{i,j=1}^k \alpha_i \alpha_j \left[\langle \hat{\mathcal{O}}_i \hat{\mathcal{O}}_j \rangle - \langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle \langle \hat{\mathcal{O}}_j \rangle \right] = \sum_{i,j=1}^k \alpha_i \alpha_j \Gamma_{ij}(\hat{\mathcal{O}}). \quad (4.19)$$

Com o vínculo $\sum_i \alpha_i = 1$, a escolha ótima dos α_i 's que minimizam a [Equação \(4.19\)](#) é dada por

$$\alpha_i = Z^{-1} \sum_{j=1}^k \left[\Gamma(\hat{\mathcal{O}})^{-1} \right]_{ij}, \quad (4.20)$$

em que $\Gamma_{ij}(\mathcal{O}) = \langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_j \rangle - \langle \mathcal{O}_i \rangle \langle \mathcal{O}_j \rangle$ é a matriz de covariância e $Z = \sum_{i,j=1}^k \left[\Gamma(\hat{\mathcal{O}})^{-1} \right]_{ij}$.

$\Gamma(\hat{\mathcal{O}})$ pode ser calculada a partir da matriz de covariância não paramétrica. Fazendo $\hat{\mathcal{O}}_i = \hat{\nu}_i$, tem-se

$$\hat{\mathcal{C}}(\hat{\nu}_i, \hat{\nu}_j) = \frac{n-1}{n} \sum_{s=1}^n [\hat{\nu}_i(s) - \hat{\nu}_i(\cdot)] [\hat{\nu}_j(s) - \hat{\nu}_j(\cdot)]. \quad (4.21)$$

A partir da escolha ótima dos α_i , a variância é dada por

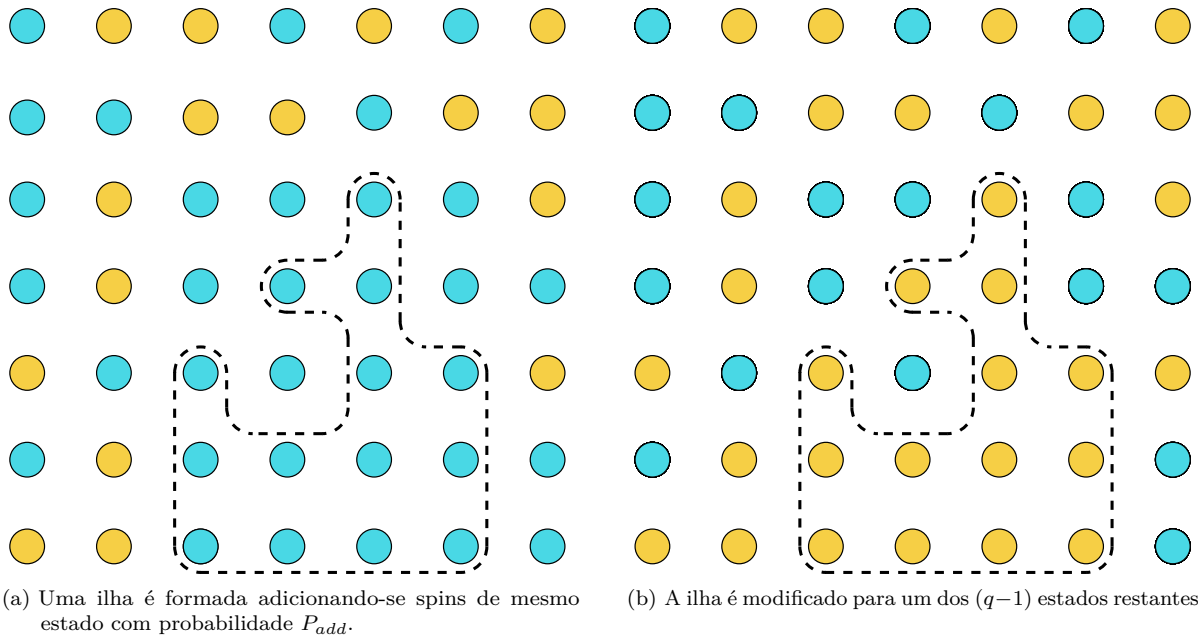
$$\hat{\sigma}(\hat{\mathcal{O}}) = \frac{1}{\sum_{i,j=1}^k \left[\Gamma(\hat{\mathcal{O}})^{-1} \right]_{ij}}. \quad (4.22)$$

4.2 Algoritmo de Wolff

O efeito de *critical slowing down* pode ser minimizado com a implementação de algoritmos de ilha. Como o nome indica, esses algoritmos alteram o estado de um conjunto de spins, diferentemente do que ocorre no algoritmo de Metrópolis, em que apenas um spin é modificado a cada atualização. O expoente dinâmico do algoritmo de Metrópolis para um modelo de Potts bidimensional de três estados vale 2,2 (Newman; Barkema, 1999) enquanto o mesmo sistema simulado com o algoritmo de Wolff vale 0,60(2) (Baillie; Coddington, 1991), uma diferença bastante significativa.

O algoritmo de Wolff funciona da seguinte forma: escolhe-se um spin da rede e adicionam-se os vizinhos que estejam no mesmo estado (ligações satisfeitas) com probabilidade P_{add} , formando um ilha. Para cada vizinho adicionado, verificam-se os estados de seus vizinhos, que são adicionados à ilha com probabilidade P_{add} , repetindo o processo recursivamente. Encerrado o processo de formação da ilha — quando todos os spins vizinhos pertencentes a ela já foram verificados — Figura 19a, a ilha é “virada” — seu estado é modificado para um dos $(q-1)$ estados restantes — Figura 19b. Por ser modificado o estado de uma única ilha por vez, o algoritmo de Wolff é denominado **algoritmo de ilha única**.

Figura 19 – Geração de uma ilha pelo algoritmo de Wolff para o modelo de Potts. Um sítio escolhido aleatoriamente adiciona os vizinhos do mesmo estado com probabilidade $P_{add} = 1 - e^{-\beta J}$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

A diferença de energia entre a ilha formada e os spins não adicionados deve-se às ligações quebradas — vizinhos no mesmo estado que não foram adicionados — e às ligações satisfeitas — vizinhos que permanecem no mesmo estado da ilha após a inversão. Essa diferença ocorre apenas nas bordas da ilha, uma vez que o estado dos spins no interior da ilha é alterado de forma coerente e simultânea.

Considere P_{add} a probabilidade de um sítio ser adicionado à ilha durante a transição

$(\mu \rightarrow \nu)$. Assim, a probabilidade de um spin não ser adicionado à ilha é dada por $(1 - P_{add})$ e, portanto, a probabilidade de que nenhum dos m spins seja adicionado é $(1 - P_{add})^m$, em que m é o número de ligações satisfeitas com os primeiros vizinhos. De forma análoga, se n ligações forem quebradas no sentido inverso, a probabilidade de que nenhum dos n spins seja adicionado é $(1 - P_{add})^n$.

Como o algoritmo gera uma configuração ν a partir de uma configuração anterior μ , podemos escrever a probabilidade de transição da seguinte forma:

$$\mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)} = g_{(\mu \rightarrow \nu)} A_{(\mu \rightarrow \nu)}, \quad (4.23)$$

em que $g_{(\mu \rightarrow \nu)}$ é a probabilidade de seleção — isto é, probabilidade de um estado ν ser gerado a partir de um estado inicial μ — e $A_{(\mu \rightarrow \nu)}$ é a taxa de aceite, que indica a frequência com que o algoritmo aceita o novo estado gerado. Quando o algoritmo não aceita o novo estado, o sistema permanece em μ . Substituindo a [Equação \(4.23\)](#) na equação do balanço detalhado, [Equação \(4.10\)](#), obtemos:

$$\frac{\mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)}}{\mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)}} = \frac{g_{(\mu \rightarrow \nu)} A_{(\mu \rightarrow \nu)}}{g_{(\nu \rightarrow \mu)} A_{(\nu \rightarrow \mu)}} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (4.24)$$

Como a probabilidade de gerar uma configuração ν a partir de uma configuração μ é proporcional a $g_{(\mu \rightarrow \nu)}$ e a constante de proporcionalidade é a mesma nos dois sentidos, a [Equação \(4.23\)](#) torna-se:

$$\frac{\mathcal{P}_{(\mu \rightarrow \nu)}}{\mathcal{P}_{(\nu \rightarrow \mu)}} = \frac{(1 - P_{add})^m A_{(\mu \rightarrow \nu)}}{(1 - P_{add})^n A_{(\nu \rightarrow \mu)}} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{A_{(\mu \rightarrow \nu)}}{A_{(\nu \rightarrow \mu)}} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (4.25)$$

Rearranjando a [Equação \(4.25\)](#) e considerando que a variação de energia é proporcional ao número m de ligações quebradas e ao número n de novas ligações feitas, $E_\nu - E_\mu = J(m - n)$, temos:

$$\frac{A_{(\mu \rightarrow \nu)}}{A_{(\nu \rightarrow \mu)}} = [e^{\beta J} (1 - P_{add})]^{n-m}. \quad (4.26)$$

Portanto, se escolhermos $P_{add} = 1 - e^{-\beta J}$ para o modelo de Potts, o lado direito da [Equação \(4.26\)](#) será igual a 1. Além disso, devido à liberdade na escolha dos $A(\nu \rightarrow \mu)$'s, podemos fixá-los também em 1, o que satisfaz a condição de balanço detalhado. A ergodicidade do algoritmo é garantida, pois sempre poderemos criar uma ilha contendo apenas um único spin; dessa forma, é possível ir de qualquer configuração a outra, e, em um tempo suficientemente longo, percorrer todas as configurações acessíveis ao sistema.

O algoritmo de Wolff para o modelo de Potts pode ser resumido na seguinte rotina:

1. Escolhe-se aleatoriamente um sítio da rede.
2. Verifica-se se os vizinhos estão no mesmo estado do sítio escolhido, adicionando-os à ilha com probabilidade $P_{add} = 1 - e^{-\beta J}$.
3. Para cada spin adicionado, repete-se o passo 2.
4. Quando não houver mais vizinhos a serem adicionados, a ilha completa é invertida.

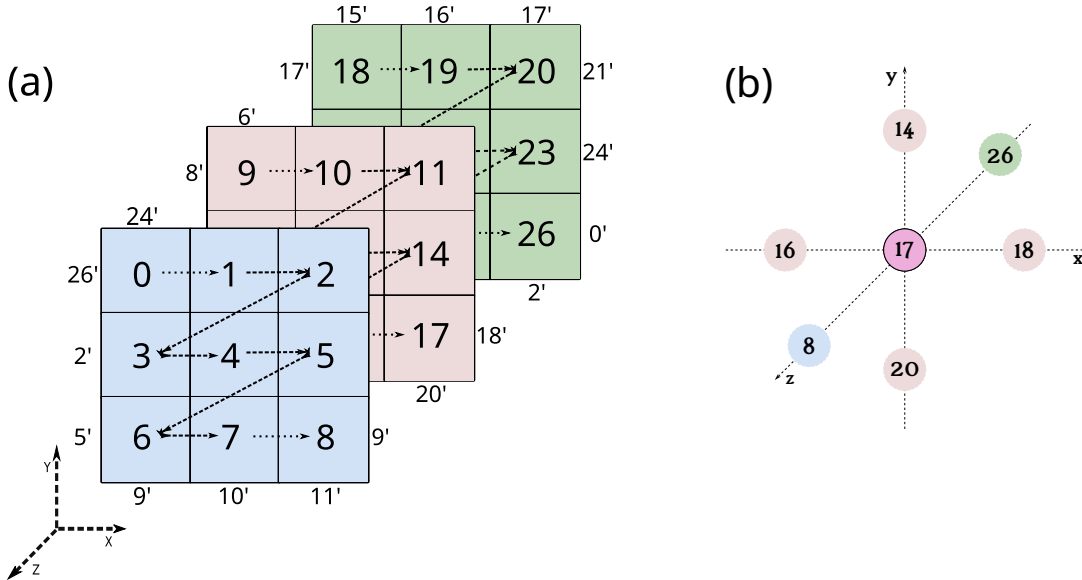
5. Retorna-se ao passo 1.

Nesse trabalho, usamos condições de contorno helicoidais. Os 6 primeiros vizinhos do sítio i são definidos através das equações:

$$\begin{aligned} \text{vizinhos na direção } x &= \begin{cases} (i + 1) \bmod N \\ (i - 1 + N) \bmod N \end{cases} \\ \text{vizinhos na direção } y &= \begin{cases} (i + L) \bmod N \\ (i - L + N) \bmod N \end{cases} \\ \text{vizinhos na direção } z &= \begin{cases} (i + L^2) \bmod N \\ (i - L^2 + N) \bmod N \end{cases} \end{aligned} \quad (4.27)$$

em que L é o tamanho linear da rede, $N = L^3$, $(\dots) \bmod N$ retorna o resto da divisão de $(\dots)$ por N e $i = 0, 1, \dots, N - 1$ (os códigos desse trabalho foram escritos em linguagem C; por essa razão o índice i inicia em zero e vai até $(N - 1)$). Considere uma rede de tamanho linear $L = 3$, [Figura 20a](#). Os seis primeiros vizinhos do sítio $i = 17$, determinados por meio da [Equação \(4.27\)](#), são: 16 e 18 na direção x ; 14 e 20 na direção y ; e 8 e 26, na direção z , conforme ilustrado na [Figura 20b](#).

Figura 20 – Condições de contorno helicoidais indicando os primeiros vizinhos de cada sítio de um rede de tamanho linear $L = 3$. Aplicando a [Equação \(4.27\)](#) ao sítio $i = 17$, seus 6 primeiros vizinhos são: 16 e 18, na direção x ; 14 e 20, na direção y ; e 8 e 26 na direção z .



Fonte - [Figura 20a](#) adaptada de (Salvador; Tragtenberg, 2025). [Figura 20b](#) elaborado pelo autor.

4.3 Método do Histograma Simples

O método do histograma simples é um método de repesagem. Realiza-se uma simulação em uma determinada temperatura e, por meio do método do histograma simples, extrapola-se para temperaturas vizinhas dentro de um intervalo ΔT (Newman; Barkema, 1999; Landau;

Binder, 2009; Diaz, 2009). Na Equação (4.3) utiliza-se a distribuição de Boltzmann para amostrar os estados até que o sistema atinja o equilíbrio. Seja o fator de Boltzmann para uma temperatura T_0 , próxima à temperatura de interesse. A distribuição de Boltzmann para essa temperatura é expressa por

$$p_{\mu_i} = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta_0 E_{\mu_i}}, \quad (4.28)$$

em que $\beta_0 = \frac{1}{k_B T_0}$. Substituindo a Equação (4.28) na Equação (4.2), teremos:

$$\mathcal{O}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \mathcal{O}_{\mu_i} e^{-(\beta-\beta_0)E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^n e^{-(\beta-\beta_0)E_{\mu_j}}}, \quad (4.29)$$

que é a equação básica do método do histograma simples. Consideremos o caso da energia interna, portanto, $\mathcal{O} = E$; podemos reescrever a Equação (4.29) como segue:

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_E E \eta(E) e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E \eta(E) e^{-(\beta-\beta_0)E}}. \quad (4.30)$$

As somas da Equação (4.30) são realizadas sobre todos os valores possíveis de E do estado em questão, $\eta(E)$ é o número de vezes que a energia E ocorreu durante a simulação, sendo esse conjunto de números o próprio histograma da energia, o que nos possibilita escrever a distribuição de probabilidades da energia. Sendo assim:

$$P = \frac{\eta(E) e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E \eta(E) e^{-(\beta-\beta_0)E}} \quad (4.31)$$

Podemos, assim, calcular o valor da energia através da Equação (4.31) como segue:

$$U = \sum_E P E. \quad (4.32)$$

Quão distante da temperatura simulada podemos chegar, a fim de termos uma estimativa confiável dada pelo método do histograma?

Uma forma de obter essa resposta é considerar que o método é bom enquanto o histograma obtido para a temperatura T , tenha uma interseção com o histograma original (histograma calculado em T_0) com um número elevado de amostras. Considera-se que a diferença entre a energia interna calculada em T e a energia interna calculada em T_0 seja menor que a largura da distribuição tomada a meia altura. Portanto, o desvio padrão σ_E do histograma obtido em T é dado por (Newman; Barkema, 1999)

$$|U(T) - U(T_0)| \leq \sigma_E. \quad (4.33)$$

Considerando que $\sigma_E^2 = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{C}{k_B \beta^2}$, em que C é o calor específico, obtemos

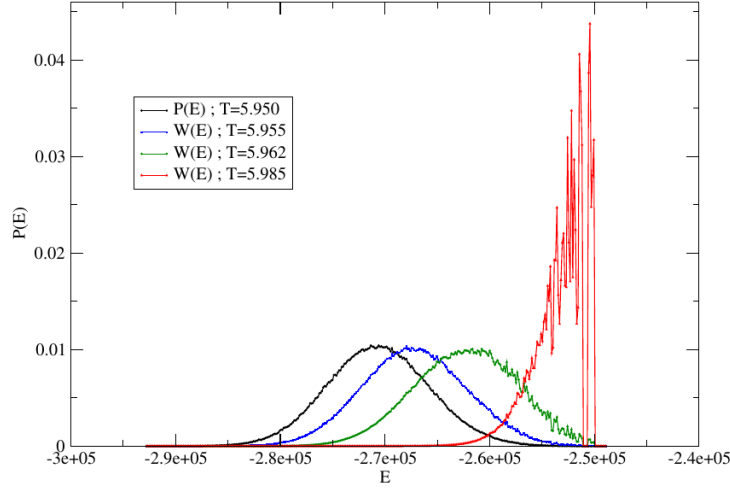
$$U(T) - U(T_0) \simeq \left. \frac{dU}{dT} \right|_{T_0} (T - T_0) = C(T_0) \Delta T, \quad (4.34)$$

e portanto

$$\left[\frac{\Delta T}{T_0} \right]^2 \leq \frac{k_B}{C(T_0)}. \quad (4.35)$$

A Figura 21 exibe uma simulação realizada em $T_0 = 5,950$ (curva preta). As demais curvas foram obtidas pelo método do histograma. Observa-se que, à medida que a diferença de temperatura aumenta, os erros estatísticos tornam-se significativamente maiores (Diaz, 2009).

Figura 21 – Distribuição de energia. As distribuições determinadas pelo método do histograma simples tendem a ficar cada vez menos suaves conforme a temperatura extrapolada se afasta da temperatura simulada.



Fonte - (Diaz, 2009).

4.4 Método dos Múltiplos Histogramas

O método do histograma simples faz uso de uma única simulação realizada em T_0 para extrapolar a temperaturas em seu entorno, a uma distância ΔT dado pela Equação (4.35). No entanto, para encontrar a temperatura de transição por essa técnica seria necessário que T_0 , a temperatura em que a simulação é realizada, estivesse muito próxima do valor “correto”. O valor de ΔT diminui com a proximidade da temperatura de transição e com o aumento da rede. O método dos múltiplos histogramas utiliza não apenas uma simulação mas várias simulações em diferentes temperaturas permitindo a determinação da temperatura de transição mesmo não estando tão próximo dela.

No método dos múltiplos histogramas cada simulação fornece uma estimativa de uma determinada grandeza $\mathcal{O}$. Combina-se cada simulação para fornecer uma estimativa cada vez melhor de $\mathcal{O}$. Procura-se determinar a melhor estimativa para a densidade de estados $\rho(E)$ e, a partir dessa estimativa determinar qualquer outro observável.

Seja a probabilidade $p(E)$ de gerar um estado de energia E dado por

$$p(E) = \rho(E) \frac{e^{-\beta E}}{\mathcal{Z}}, \quad (4.36)$$

em que $\rho(E)$ é a densidade de estados — é o número de estados do sistema com energia E — e $\mathcal{Z}$ é a função de partição. Se realizarmos n medidas independentes na temperatura β ¹, a probabilidade de encontrarmos o sistema com energia E será dada por

$$p(E) = \frac{\eta(E)}{n}, \quad (4.37)$$

em que $\eta(E)$ é o histograma da energia e n é o número de medidas independentes. Combinando a Equação (4.36) com a Equação (4.37), obtemos a densidade de estados

$$\rho(E) = \frac{\eta(E)}{n} \frac{\mathcal{Z}}{e^{-\beta E}}, \quad (4.38)$$

¹ Utilizamos o termo temperatura para nos referirmos ao inverso da temperatura — $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

e para várias simulações em diferentes temperaturas β_i , obtemos

$$\rho_i(E) = \frac{\eta_i(E)}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-\beta_i E}}. \quad (4.39)$$

A melhor estimativa para a densidade de estados ocorrerá para os histogramas com o maior número de amostras. Sendo assim, a melhor estimativa para a densidade de estados deverá ser obtida por uma média ponderada das estimativas de $\rho_i(E)$ (Newman; Barkema, 1999; Taylor, 1997) dada por

$$\langle \rho_i(E) \rangle = \frac{\sum_i \rho_i(E) / \sigma_i^2}{\sum_j 1 / \sigma_j^2}. \quad (4.40)$$

Uma vez que $\rho_i(E)$ só depende do sistema e não da temperatura, o cálculo de $\rho_i(E)$ é uma estimativa do próprio $\rho(E)$ sendo a única fonte de erro a determinação do próprio histograma $\eta(E)$. A contagem dos estados com energia E que fornece o histograma desejado é um processo aleatório das simulações em cada temperatura. Sendo assim, é seguro supor que $\eta(E)$ será aproximado por uma distribuição de Poisson (Taylor, 1997) e o erro $\Delta\eta(E)$, portanto, será Poissoniano (Newman; Barkema, 1999). Sendo assim,

$$\Delta\eta_i(E) = \sqrt{N_i(E)} \quad (4.41)$$

e, dessa forma, o erro envolvido na Equação (4.39) é dado por

$$\sigma_i = \frac{\sqrt{\eta_i(E)}}{n_i} \frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-\beta_i E}} \quad (4.42)$$

e variância

$$\sigma_i^2 = \frac{\overline{\eta_i(E)}}{n_i^2} \left[\frac{\mathcal{Z}_i}{e^{-\beta_i E}} \right]^2 = \frac{\rho(E) \mathcal{Z}_i}{n_i e^{-\beta_i E}}. \quad (4.43)$$

Substituindo a Equação (4.42) na Equação (4.40) e fazendo uso da Equação (4.39) obtemos

$$\langle \rho(E) \rangle = \frac{\sum_i \eta_i(E)}{\sum_j n_j \mathcal{Z}_j^{-1} e^{-\beta_j E}} \quad (4.44)$$

e a função de partição $\mathcal{Z}_k = \sum_E \rho(E) e^{-\beta_k E}$ pode ser estimada através da expressão

$$\mathcal{Z}_k = \sum_E \frac{\sum_i \eta_i(E)}{\sum_j n_j \mathcal{Z}_j^{-1} e^{(\beta_k - \beta_j) E}} \quad (4.45)$$

em que $\rho(E) = \langle \rho(E) \rangle$.

A Equação (4.45) deve ser resolvida iterativamente e o valor inicial para a função de partição não é importante caso seja maior do que 1 (Newman; Barkema, 1999). Como a função de partição é resolvida iterativamente é necessário ainda escolher um critério de convergência. Sendo assim, estima-se o quanto a função de partição foi modificada em relação ao valor anterior até que ela seja menor que um valor estabelecido. Essa estimativa é dada pela equação

$$\Delta^2 = \sum_k \left[\frac{\mathcal{Z}_k^{(m)} - \mathcal{Z}_k^{(m-1)}}{\mathcal{Z}_k^{(m)}} \right]^2 \quad (4.46)$$

em que $\mathcal{Z}_k^{(m)}$ é o valor de $\mathcal{Z}_k$ da m -ésima iteração (Newman; Barkema, 1999). Adotamos $\Delta = 10^{-7}$ como critério de parada das iterações.

Não é necessário explicitar todos os histogramas na [Equação \(4.45\)](#) sendo mais conveniente escrever a função de partição em termos da energia em cada estado de cada simulação, $E_{i,s}$. Escrevendo $\sum_E \sum_i \eta_i(E) = \sum_{i,s}(1)$ a [Equação \(4.45\)](#) torna-se

$$\mathcal{Z}_k = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j n_j \mathcal{Z}_j^{-1} e^{(\beta_k - \beta_j) E_{i,s}}}, \quad (4.47)$$

em que $E_{i,s}$ é o valor da energia no s -ésimo estado da i -ésima simulação.

Após obtidas as $\mathcal{Z}_k$ para as temperaturas simuladas, é possível estimar a função de partição para qualquer outra temperatura desejada apenas generalizando a [Equação \(4.47\)](#):

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{i,s} \frac{1}{\sum_j n_j \mathcal{Z}_j^{-1} e^{(\beta - \beta_j) E_{i,s}}}; \quad (4.48)$$

pode-se então obter o valor de qualquer outro observável da seguinte forma:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{i,s} \frac{\mathcal{O}_{i,s}}{\sum_j n_j \mathcal{Z}_j^{-1} e^{(\beta - \beta_j) E_{i,s}}}. \quad (4.49)$$

4.5 Determinação da ordem de transição

Simulações computacionais envolvem sistemas finitos, sendo que transições de fase são observadas apenas no limite termodinâmico. Sendo assim, é necessário algum método que permita distinguir uma transição de primeira ordem de uma transição contínua. [Challa, Landau e Binder \(1986\)](#) admitiram que a energia, calculada em intervalos de tempo regulares e em diferentes temperaturas, possa ser descrita por uma distribuição gaussiana centrada na energia da rede infinita E_0 . Para uma transição contínua, a distribuição de energia $P_L(E)$ pode ser escrita por apenas uma gaussiana. Já para uma transição de primeira ordem, $P_L(E)$ é descrita por duas gaussianas. Dessa forma, um gráfico da distribuição de energia apresentará um único pico para uma transição contínua e dois picos para uma distribuição de primeira ordem.

Uma forma conveniente e precisa de identificação da ordem da transição é feita através do método devido a [Lee e Kosterlitz \(1990\)](#). Em uma transição de primeira ordem, a energia livre do sistema,

$$F = \ln P_L(E), \quad (4.50)$$

apresenta dois mínimos de igual tamanho separados por um pico, onde $P_L(E_1)$ e $P_L(E_2)$ são as probabilidades dos valores máximo e mínimo, respectivamente, exatamente como visto na [Figura 3, Seção 2.2](#). Define-se então, a barreira de energia livre, ΔF , como sendo a diferença entre o mínimo e o pico da energia livre.

$$\Delta F = \ln \frac{P_L(E_1)}{P_L(E_2)}. \quad (4.51)$$

O procedimento é repetido para valores de L cada vez maiores: se ΔF aumentar com L^{-1} a transição será de primeira ordem; se ΔF for constante caracteriza um ponto crítico e para ΔF decrescente a transição será contínua.

4.6 Detalhes das Simulações

Estudamos o Hamiltoniano de Potts, [Equação \(3.5\)](#), em três dimensões, para dois estados homogêneos e com ligações aperiódicas, por meio de simulações de Monte Carlo. Utilizamos o gerador de números pseudoaleatórios RANLUX (mais especificamente o ranlux389), disponível na biblioteca GSL (*GNU Scientific Library*²). Para evitar o efeito de *critical slowing down* implementamos o algoritmo de ilha única de Wolff com condições de contorno helicoidais.

Os primeiros $10N = 10(L_x \times L \times L)$ passos foram descartados. Esse procedimento visa garantir que os dados armazenados pertençam ao regime de equilíbrio, como discutido na [Seção 4.1.1](#). Ressaltamos que, nesse momento, os dados ainda não são estatisticamente decorrelacionados. Após o equilíbrio, os dados de E e m foram registrados. A quantidade de dados de cada simulação foi monitorada de forma a garantir um número mínimo de medidas, conforme descrito na [Seção 4.1.3](#).

As expressões $\mathcal{O} = \mathcal{O}_0 L^\lambda$ e $\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial L} = \mathcal{A}_0 L^{1/\nu}$ foram ajustadas por meio do método dos mínimos quadrados. Devido ao efeito de tamanho finito, o ajuste dessas curvas foi realizado retirando-se os menores valores de L . Esse procedimento consiste em remover progressivamente a menor rede e calcular o χ^2/nlg . O processo é repetindo até encontrar o valor de L que minimiza χ^2/nlg ([Taylor, 1997](#)).

² <https://www.gnu.org/software/gsl/>

5 Resultados e Discussões

Neste capítulo, apresentamos os resultados para o modelo de Ising puro, Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro. O modelo de Potts aperiódico de quatro estados é apresentado ao final do capítulo. Na seção [Seção 5.1](#) são discutidos os resultados do modelo de Ising ($q = 2$). A [Seção 5.2.1](#) é dedicada aos resultados do modelo aperiódico Thue-Morse. Os resultados apresentados na [Seções 5.3.1](#) e [5.3.3](#) foram publicados no periódico *Physical Review E* ([Salvador; Tragtenberg, 2025](#)).

5.1 Modelo Homogêneo

Para que se tenha confiança nos dados gerados e no posterior tratamento e análise dos resultados, faz-se necessário um processo de validação. Nesta seção discutimos o modelo de Ising homogêneo ($J_{ij} = J$). Obtivemos a temperatura crítica, T_c , e os expoentes críticos (ν , α , β e γ) do modelo. A relação entre a temperatura de Ising e de modelo de Potts é dada por

$$T_{\text{Ising}} = 2T_{\text{Potts}}, \quad (5.1)$$

em que T_{Ising} é a temperatura do modelo de Ising e T_{Potts} é a temperatura do modelo de Potts. Para efeito de comparação com [Ferrenberg, Xu e Landau \(2018\)](#), apresentamos também os valores de K_c .

A partir do método dos múltiplos histogramas, fomos capazes de determinar a temperatura de transição do modelo considerando os máximos das grandezas C , χ , $\frac{d\langle m \rangle}{dK}$, $\frac{dU_{2i}}{dK}$ ($i = 1, 2$ e 3) e $\frac{d \ln \langle m^j \rangle}{dK}$ ($j = 1, 2, 3$ e 4). Obtivemos os expoentes críticos e temperatura crítica por meio das expressões já discutidas nos capítulos anteriores, reapresentadas abaixo, por conveniência.

$$K_c(L) = Kc(\infty) + aL^{1/\bar{\nu}}, \quad (5.2)$$

$$\left(\frac{dG}{dK} \right)_{\text{Máx}} = G_0 L^{1/\nu}, \quad (5.3)$$

com $G = U_{2i}$, $\ln \langle m^j \rangle$, $i = 1, 2, 3$ e $j = 1, 2, 3, 4$, e

$$\mathcal{O}(L) = \mathcal{O}_0 L^{\lambda/\nu} \quad (5.4)$$

em que $\mathcal{O}_0$ é uma constante, $\lambda = \alpha$, β e γ são os expoentes críticos do calor específico, da magnetização e da susceptibilidade magnética, respectivamente. T_c e K_c apresentam a mesma relação de escala.

A [Tabela 4](#) apresenta as estimativas do expoente ν para cada uma das grandezas estudadas e também o valor combinado $\bar{\nu}$, que é obtido pela combinação linear dos ν_i 's realizado via [Equação \(4.18\)](#). O desvio relativo, $\Delta_{\text{rel}}(\%)$, é determinado por

$$\Delta_{\text{rel}}(\%) = \frac{|\nu_0 - \bar{\nu}|}{\nu_0} \times 100, \quad (5.5)$$

Tabela 4 – Parâmetros de ajustes e dados de correlação para estimativa do expoente do comprimento de correlação ν de uma modelo de Potts $3D$ e $q = 2$ homogêneo. Os ajustes foram realizados sem inclusão de campo irrelevante tomando $L_{\min} = 32$. O desvio relativo (Δ_{rel} de ν é tomado relação ao valor $\nu_0 = 0,62995(16)$ (Ferrenberg; Xu; Landau, 2018))

	ν	σ	$\Delta_{rel}(\%)$
$\frac{dU_2}{dK}$	0,6351	0,0003	0,82
$\frac{dU_4}{dK}$	0,6365	0,0004	1,04
$\frac{dU_6}{dK}$	0,6373	0,0005	1,17
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK}$	0,6320	0,0002	0,33
$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK}$	0,6318	0,0001	0,29
$\frac{d \ln \langle m^3 \rangle}{dK}$	0,6317	0,0001	0,28
$\frac{d \ln \langle m^4 \rangle}{dK}$	0,6312	0,0001	0,20
$\bar{\nu}$	0,6294	0,0001	0,09

Fonte - Elaborado pelo autor.

em que ν_0 representa o valor teórico, (Ferrenberg; Xu; Landau, 2018), e $\bar{\nu}$ o valor combinado.

A Equação (5.3) desconsidera os campos irrelevantes, e o ajuste é realizado eliminando-se as menores redes uma a uma monitorando o valor do χ^2 do ajuste. Todas as grandezas foram ajustadas com $L_{\min} = 32$. Observamos que os valores obtidos para as grandezas referentes a $\frac{dU_{2i}}{dK}$ apresentam as maiores variações sugerindo, portanto, a necessidade do aumento de $L_{\min}$, procedimento que torna-se inviável devido aos valores proibitivos de L . Outra alternativa seria acrescentar um campo irrelevante (Equação (2.55)), que sofre do mesmo problema da solução anterior com a vantagem de que não são necessárias redes maiores mas apenas mais redes (simulando tamanhos de redes intermediários).

Tabela 5 – Coeficientes de correlação $\rho_{ij} = \Gamma_{ij}/\sigma_i\sigma_j$ para estimativa do expoente do comprimento de correlação entre as estimativas do expoente crítico ν de um modelo de Potts em três dimensões e $q = 2$. A linhas da parte mais baixa da tabela indicam os pesos α_i das estimativas individuais.

	$\frac{dU_2}{dK}$	$\frac{dU_4}{dK}$	$\frac{dU_6}{dK}$	$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK}$	$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK}$	$\frac{d \ln \langle m^3 \rangle}{dK}$	$\frac{d \ln \langle m^4 \rangle}{dK}$
$\frac{dU_2}{dK}$	1,0000	0,9273	0,6950	0,8201	0,7140	0,6059	0,5339
$\frac{dU_4}{dK}$	0,9273	1,0000	0,8546	0,7064	0,6155	0,4977	0,4124
$\frac{dU_6}{dK}$	0,6950	0,8546	1,0000	0,4900	0,4201	0,3147	0,2433
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK}$	0,8201	0,7064	0,4900	1,0000	0,9835	0,9449	0,9150
$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK}$	0,7140	0,6155	0,4201	0,9835	1,0000	0,9851	0,9673
$\frac{d \ln \langle m^3 \rangle}{dK}$	0,6059	0,4977	0,3147	0,9449	0,9851	1,0000	0,9912
$\frac{d \ln \langle m^4 \rangle}{dK}$	0,5339	0,4124	0,2433	0,9150	0,9673	0,9912	1,0000
α_i	-1,7274	1,0006	-0,1020	9,1241	-10,1600	-1,7277	4,6024

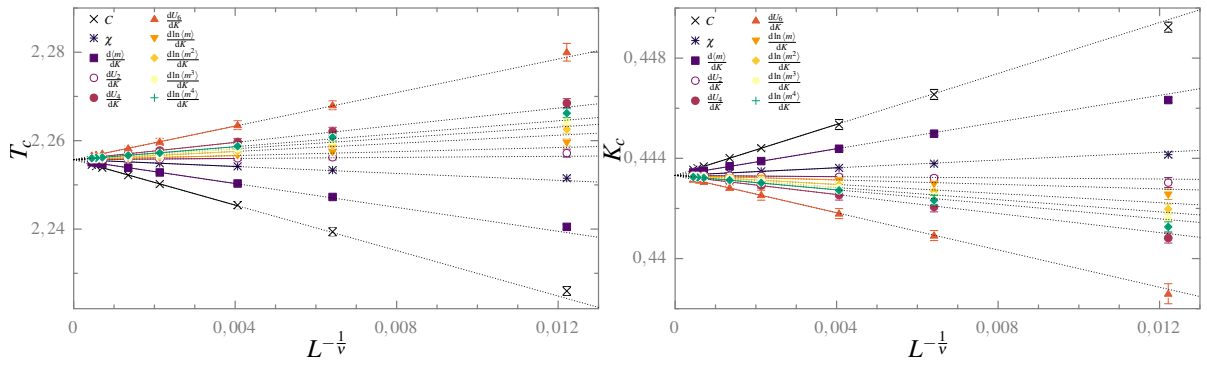
Fonte - Elaborado pelo autor.

A Tabela 5 apresenta os coeficientes de correlação entre as grandezas utilizadas para o cálculo de ν . Todas as grandezas utilizadas para o cálculo do expoente ν são obtidas do mesmo observável,

$\langle m \rangle$. Por esse motivo, é de se esperar uma forte correlação entre as estimativas de ν . Weigel e Janke (2009), Weigel e Janke (2010) mostraram que o ajuste linear, Equação (4.18), apresenta menores flutuações do que qualquer medida individual do expoente ν . Esse resultado também pode ser visto em nossa estimativa, em que $\sigma = 0,0001$.

Ajustou-se Equação (5.2) utilizando $\bar{\nu} = 0,6294$, calculado anteriormente. Na Figura 22, apresentamos as curvas dos ajustes obtidos para as diversas grandezas estudadas. Combinando os valores de temperatura crítica extraídos de de cada grandeza, obtém-se $K_c = 0,443\,317\,2(5)$. Aplicando a Equação (5.1), chega-se a $K_c^{\text{Ising}} = 0,221\,658\,6(2)$.

Figura 22 – Temperatura crítica referente às diversas grandezas calculadas. As linhas cheias referem-se ao ajuste realizado entre $L_{\min} = 32$ e $L = 128$ obtido pela Equação (5.2) enquanto as linhas pontilhadas são um prologamento dos ajustes. Note o desvio do ajuste em relação às redes menores.



Fonte - Elaborado pelo autor.

A Tabela 6 sumariza os dados do ajuste apresentando os valores de K_c^{Ising} (listamos os valores da temperatura de Ising no lugar de Potts para facilitar a comparação com os valores da literatura), o erro padrão e o desvio relativo ($\Delta_{\text{rel}}(\%)$). As linhas cheias referem-se ao ajuste realizado entre $L_{\min} = 32$ e $L = 128$ enquanto as linhas pontilhadas são um prologamento dos ajustes. Note o desvio do ajuste em relação às redes menores.

Como mencionado acima, determinamos os expoentes críticos por meio da Equação (2.55) (sem inclusão de campo irrelevante). Esses ajustes são mostrados nas Figuras 23 a 25.

A Tabela 7 sumariza os valores dos expoentes críticos obtidos para o modelo de Potts puro de dois estados. Como pode ser visto, temos excelente concordância entre os valores da temperatura, K_c , e do expoente crítico do comprimento de correlação, ν .

Podemos listar três possíveis fatores que diminuem a exatidão dos expoentes α/ν , β/ν e γ/ν quando comparados com os valores da literatura utilizados aqui:

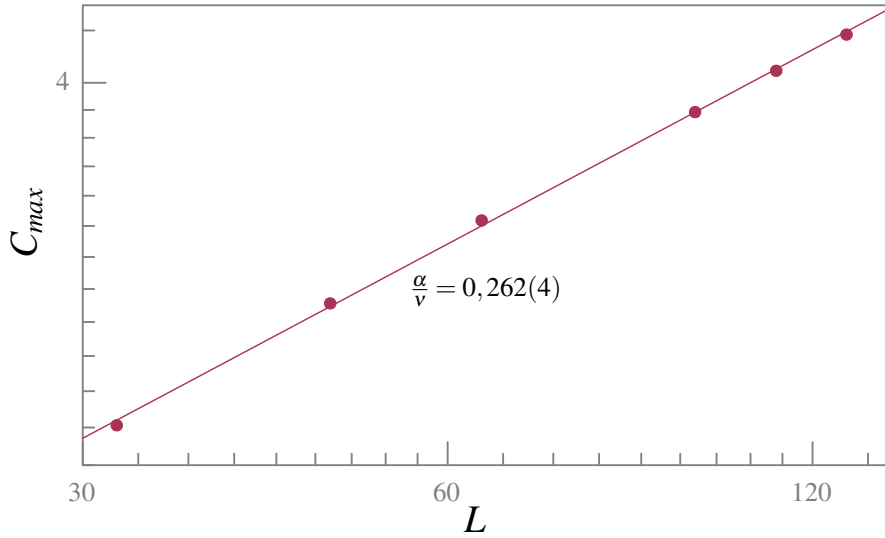
- (i) **Número reduzido de dados estatisticamente descorrelacionados.** Esse problema pode ser resolvido facilmente executando novas simulações com número maior de dados. Os novos dados são, então, adicionados aos dados já obtidos.
- (ii) **Tamanho do sistema ($L_{\text{Máx}} = 128$).** Este é um problema difícil de contornar dado o tempo limitado para realização do trabalho. Como mencionado anteriormente, próximo ao ponto crítico, as SMC sofrem do problema de *critical slowing down*. Dessa forma, sistemas maiores torna-se proibitivos.

Tabela 6 – Valores da temperatura crítica obtidas pelo ajuste da [Equação \(5.2\)](#). Novamente o desvio relativo (Δ_{rel} é tomado em relação ao valor $K_c = 0,221\,654\,626(5)$ ([Ferrenberg; Xu; Landau, 2018](#)).

	K_c	σ	$\Delta_{rel}(\%)$
C	0,221 659	0,000 002	0,002
χ	0,221 657 6	0,000 000 5	0,001
$\langle m \rangle$	0,221 659	0,000 001	0,002
$\frac{dU_2}{dK}$	0,221 658 0	0,000 000 5	0,002
$\frac{dU_4}{dK}$	0,221 657 9	0,000 000 5	0,001
$\frac{dU_6}{dK}$	0,221 659	0,000 002	0,002
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK}$	0,221 659 2	0,000 005	0,002
$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK}$	0,221 660	0,000 001	0,002
$\frac{d \ln \langle m^3 \rangle}{dK}$	0,221 661	0,000 001	0,003
$\frac{d \ln \langle m^4 \rangle}{dK}$	0,221 661	0,000 001	0,003
K_c	0,221 658 6	0,000 000 2	0,002
T_c	4,511 440	0,000 005	0,002

Fonte - Elaborado pelo autor.

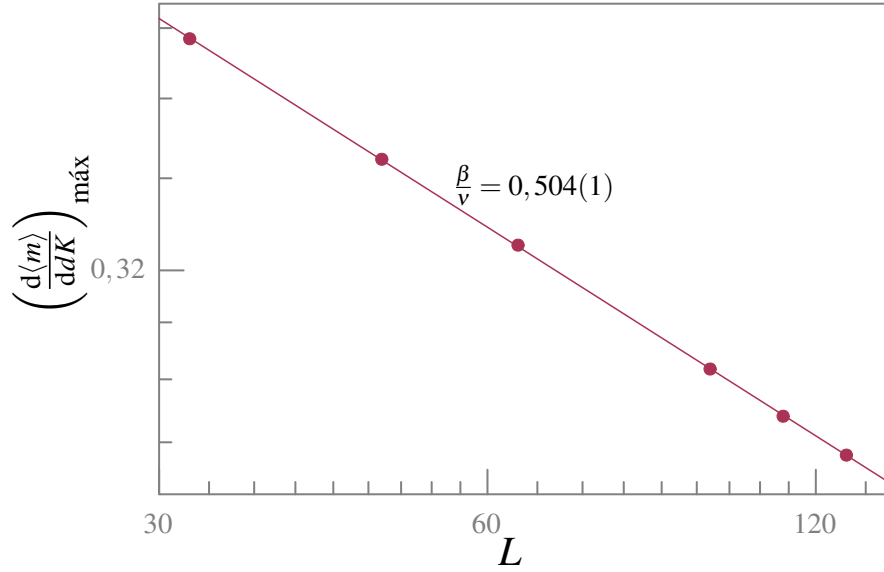
Figura 23 – Expoente crítico do calor específico, α . Os pontos representam os valores máximos de C e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da [Equação \(2.55\)](#) considerando $L_{min} = 32$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

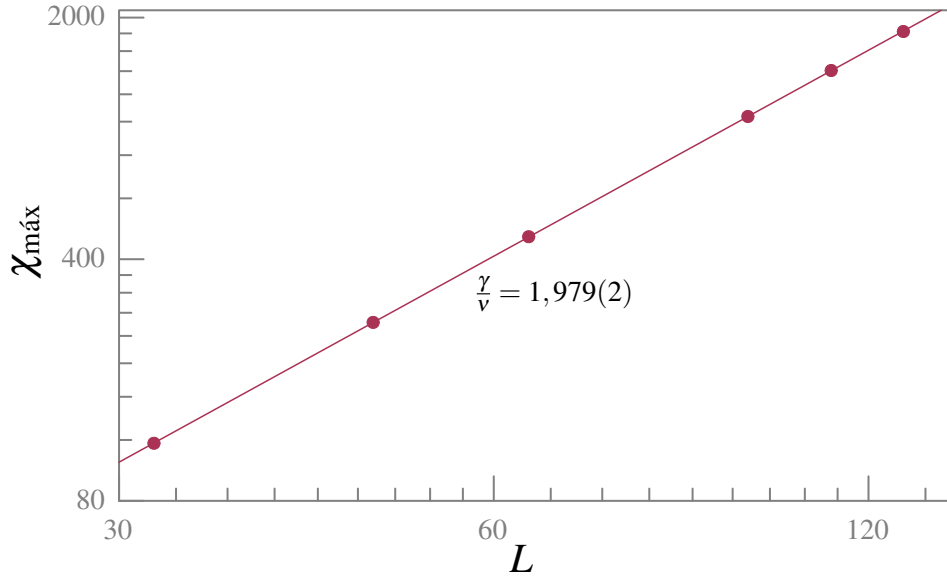
- (iii) **Tamanho das séries jackknife.** Esse problema está relacionado ao próprio método. O número de séries jackknife deve ser monitorado para garantir que as flutuações nos valores do desvio padrão sejam pequenas — mais precisamente, que tais flutuações atinjam um platô em função do tamanho da série. Um número reduzido de séries jackknife implica na subestimação dos desvios. Para isso, torna-se obrigatória a execução da solução apresentada em (i), pois aumentar o número de séries implica redução no número de dados de cada série (há um compromisso entre o número de dados em uma série e o tempo de autocorrelação — $N_J \gg \tau$).

Figura 24 – Expoente crítico da magnetização, β . Os pontos representam os valores máximos de $\frac{d\langle m \rangle}{dk}$ e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da Equação (2.55) considerando $L_{\min} = 32$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 25 – Expoente crítico da susceptibilidade, γ . Os pontos representam os valores máximos de χ e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da Equação (2.55) considerando $L_{\min} = 32$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

A inclusão de um campo irrelevante aos ajustes nos permitiria utilizar as redes menores ($L = 8, 16$ e 24). A inclusão de um campo irrelevante introduz mais uma variável de ajuste, o que pode torná-lo instável devido à redução dos graus de liberdade do ajuste. No entanto, é possível contornar essa redução simulando redes de tamanhos intermediários aos que já temos. Dessa forma, aumentamos o número de redes sem necessariamente aumentar o tamanho do sistema estudado.

Em nosso trabalho utilizamos 100 séries Jackknife seguindo (Weigel; Janke, 2009; Weigel; Janke, 2010). A principal diferença está no número de configurações independentes. Temos 100 000 configurações independentes enquanto no trabalho citado os autores utilizaram até 400 000

Tabela 7 – Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo de dois estados em três dimensões.

	ν	α/ν	β/ν	γ/ν
(Ferrenberg; Xu; Landau, 2018)	0,629 95(16)	-	0,518 01(35)	1,963 90(45)
(Weigel; Janke, 2010)	0,6300(17)	-	0,518 17(58)	1,96968(?)
Homogêneo	0,6294(1)	0,262(4)	0,504(1)	1,979(2)

Fonte - Elaborado pelo autor.

configurações.

5.2 Modelo Aperiódico

Realizamos simulações do modelo aperiódico por meio das sequências discutidas na [Seção 2.4.3](#). Os modelos aperiódicos foram estudados em diferentes intensidades da aperiodicidade. Para $r = 2$ o modelo aperiódico Thue-Morse apresenta comportamento compatível como o modelo puro, no entanto, os modelos Rudin-Shapiro e Paper-Folding apresentam comportamento diferente do observado para o modelo puro.

5.2.1 Thue-Morse

Nessa seção apresentamos os resultados para o modelo aperiódico Thue-Morse de dois estados. As intensidades de aperiodicidade consideradas são $r = 2, 8$ e 16 .

5.2.1.1 $r = 2$

Por se tratar de um modelo de dois estados, a transição é contínua. Os expoentes críticos da sequência Thue-Morse (TM) foram obtidos com os métodos utilizados anteriormente para o modelo puro. A [Tabela 8](#) apresenta os valores dos ajustes individuais e o valor combinado do expoente do comprimento de correlação ν para um modelo aperiódico TM de intensidade $r = 2$. Assim como na [Seção 5.1](#), os ajustes foram realizados com $L_{\min} = 32$, sem a inclusão de campo irrelevante.

Ajustamos a [Equação \(5.2\)](#) para determinar a temperatura crítica do modelo, utilizando o valor $\nu = 0,6289(7)$. O ajuste correspondente está apresentado na [Figura 26](#). Combinando as temperaturas obtidas a partir das diferentes grandezas analisadas, estimamos $T_c = 3,577\,69(9)$ e $K_c = 0,279\,509(7)$.

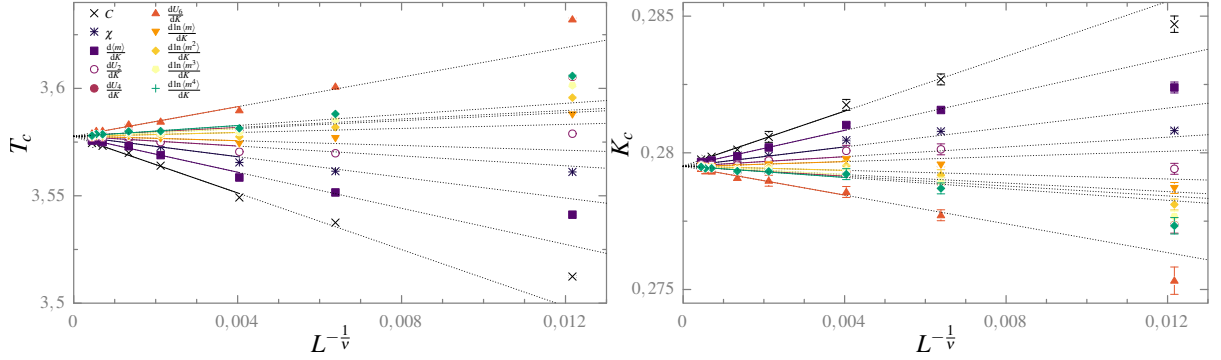
As [Figuras 27 a 29](#) mostram os ajustes realizados para obtenção dos expoentes α/ν , β/ν e γ/ν juntamente com os valores correspondentes do modelo puro. Observa-se uma discrepância acentuada nos expoentes da magnetização e susceptibilidade magnética. As mesmas observações feitas anteriormente para o sistema puro aplicam-se também ao caso TM. Para a intensidade da aperiodicidade considerada, $r = 2$, o comportamento do modelo TM se aproxima claramente daquele observado no sistema puro.

Tabela 8 – Parâmetros de ajustes e dados de correlação para estimativa do expoente do comprimento de correlação ν de uma modelo de Potts 3D e $q = 2$ com interações aperiódicas Thue-Morse de intensidade $r = 2$. Os ajustes foram realizados sem inclusão de campo irrelevante tomando $L_{\min} = 32$. O desvio relativo (Δ_{rel}) de ν é tomado em relação ao valor $\bar{\nu}_{\text{puro}} = 0,629\,422(93)$.

	ν	σ	$\Delta_{\text{rel}}(\%)$
$\frac{dU_2}{dK}$	0,6259	0,0002	0,6
$\frac{dU_4}{dK}$	0,6287	0,0003	0,1
$\frac{dU_6}{dK}$	0,6306	0,0003	0,3
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK}$	0,6282	0,0001	0,2
$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK}$	0,6290	0,0001	0,07
$\frac{d \ln \langle m^3 \rangle}{dK}$	0,6294	0,0001	0,004
$\frac{d \ln \langle m^4 \rangle}{dK}$	0,6296	0,0001	0,03
$\bar{\nu}$	0,6289	0,0007	0,09

Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 26 – Temperatura crítica referente às diversas grandezas calculadas. As linhas cheias referem-se ao ajuste realizado entre $L_{\min} = 32$ e $L = 128$ obtido pela Equação (5.2) enquanto as linhas pontilhadas são um prologamento dos ajustes. Note o desvio do ajuste em relação as redes menores.



Fonte - Elaborado pelo autor.

A Tabela 9 apresenta os valores dos expoentes críticos do modelo puro e aperiódico Thue-Morse. O expoente crítico do comprimento de correlação está em boa concordância com os valores reportados na literatura. Dentre todos os expoentes analisados, ν é aquele que apresenta a maior compatibilidade com os resultados disponíveis.

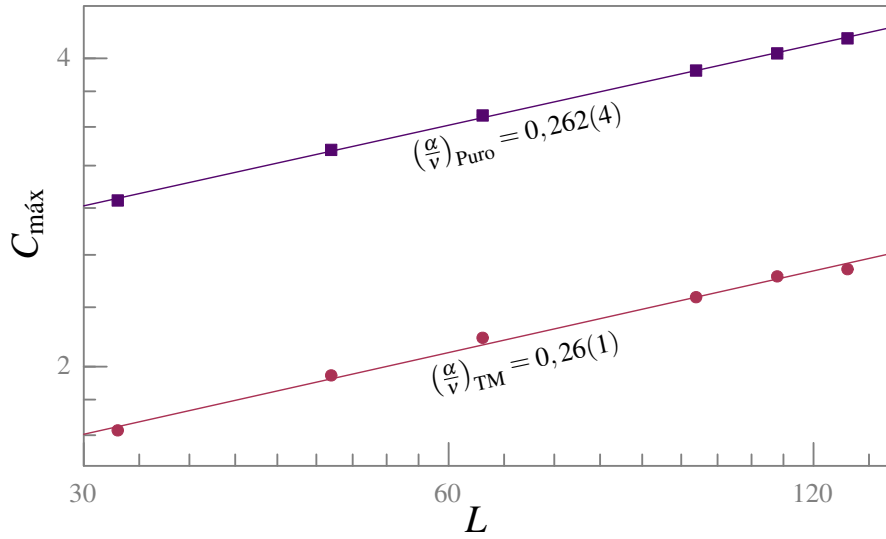
Como o modelo aperiódico TM e o modelo homogêneo foram gerados e analisados com os mesmos programas, a comparação direta entre eles é particularmente relevante. A Tabela 10 mostra essa comparação, destacando que o expoente ν exibe o menor desvio relativo entre os dois casos.

Tabela 9 – Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo e Thue-Morse em três dimensões de 2 estados com $r = 2$ para o modelo aperiódico.

	ν	α/ν	β/ν	γ/ν
(Ferrenberg; Xu; Landau, 2018)	0,629 95(16)	-	0,518 01(35)	1,963 90(45)
(Weigel; Janke, 2010)	0,6300(17)	-	0,518 17(58)	1,96968(?)
Homogêneo	0,6294(1)	0,262(4)	0,504(1)	1,979(2)
Thue-Morse	0,6286(9)	0,26(1)	0,475(3)	2,004(9)

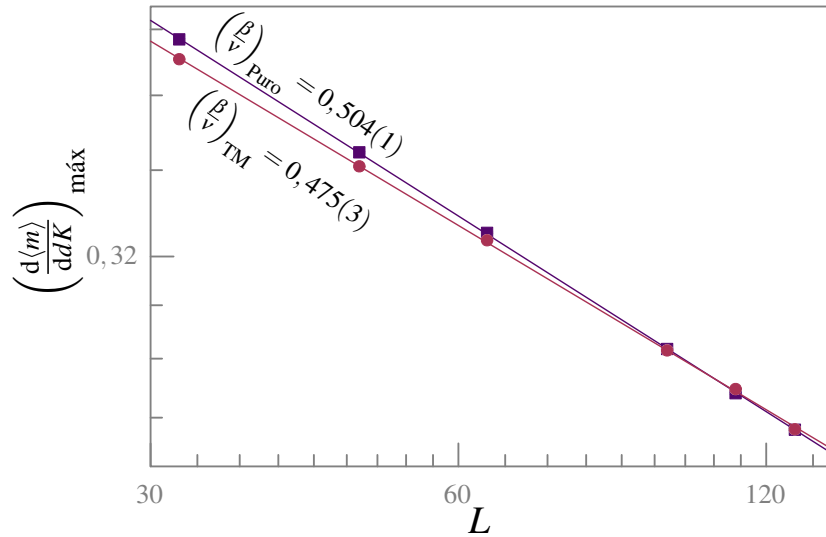
Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 27 – Expoente crítico do calor específico, α . Os pontos representam os valores máximos de C e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da Equação (2.55) considerando $L_{\min} = 32$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 28 – Expoente crítico da magnetização, β . Os pontos representam os valores máximos de $\frac{d\langle m \rangle}{dk}$ e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da Equação (2.55) considerando $L_{\min} = 32$.



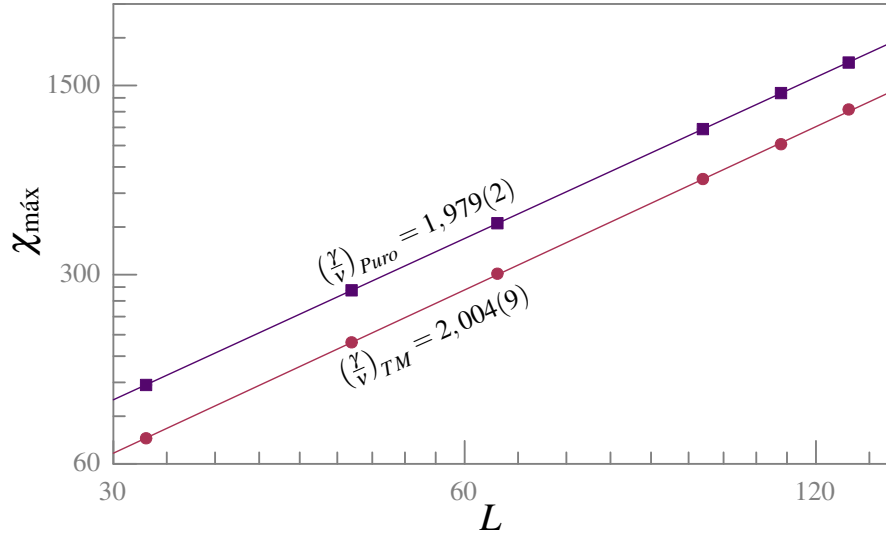
Fonte - Elaborado pelo autor.

Tabela 10 – Expoentes críticos do modelo de Potts homogêneo e Thue-Morse em três dimensões 2 estados com $r = 2$ para o modelo aperiódico e os respectivos desvios relativos ($\Delta_{\text{rel}}(\%)$).

	ν	α/ν	β/ν	γ/ν
Homogêneo	0,6294(1)	0,262(4)	0,504(1)	1,979(2)
Thue-Morse	0,6286(9)	0,26(1)	0,475(3)	2,004(9)
$\Delta_{\text{rel}}(\%)$	0,13	0,76	5,75	1,26

Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 29 – Expoente crítico da susceptibilidade magnética, γ . Os pontos representam os valores máximos de χ e as linhas cheias correspondem ao ajuste realizado através da Equação (2.55) considerando $L_{\min} = 32$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

Os desvios observados nas demais grandezas podem estar relacionados ao desenvolvimento de uma estrutura de múltiplos picos em quantidades termodinâmicas, como o calor específico e a susceptibilidade magnética. A magnetização apresenta uma região intermediária entre duas variações abruptas, correspondendo a um intervalo de temperatura ΔT). Como será discutido adiante na Seção 5.2.1.2, essa região parece diminuir com o aumento do sistema, sugerindo que os tamanhos lineares L utilizados para o modelo TM com $r = 2$ podem não ser suficientemente grandes.

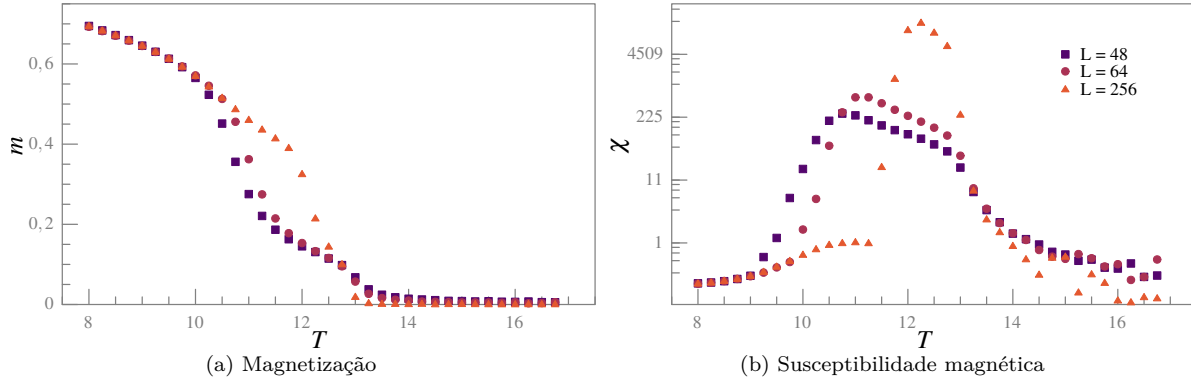
5.2.1.2 $r = 8$ e 16

Para $r = 8$ e 16 o modelo TM apresenta comportamento completamente diferente do modelo em $r = 2$. Como pode ser visto na Figura 30a existe uma região entre duas variações abruptas da magnetização, entre duas temperaturas.

A região ΔT é bastante pronunciada iniciando em $T \approx 8,5$ estendendo-se até $T \approx 14,0$. Esse comportamento é bastante pronunciado para as redes de tamanho linear $L = 48$ e 64, como pode ser visto na Figura 30a. Com o aumento da rede, essa região parece diminuir, sugerindo que no limite $L \rightarrow \infty$, $\Delta T \rightarrow 0$, Figura 30b.

Para $r = 16$ tem-se a formação do platô em temperaturas diferentes daquelas observadas para $r = 8$, Figura 31. No entanto, para essa intensidade não é possível determinar se a região $\Delta T \rightarrow 0$ para os sistemas estudados até o momento. Observamos que a magnetização tem seu valor reduzido de forma acentuada em $T \approx 20$ e $T \approx 25$, tornando essas mudanças bastante nítidas.

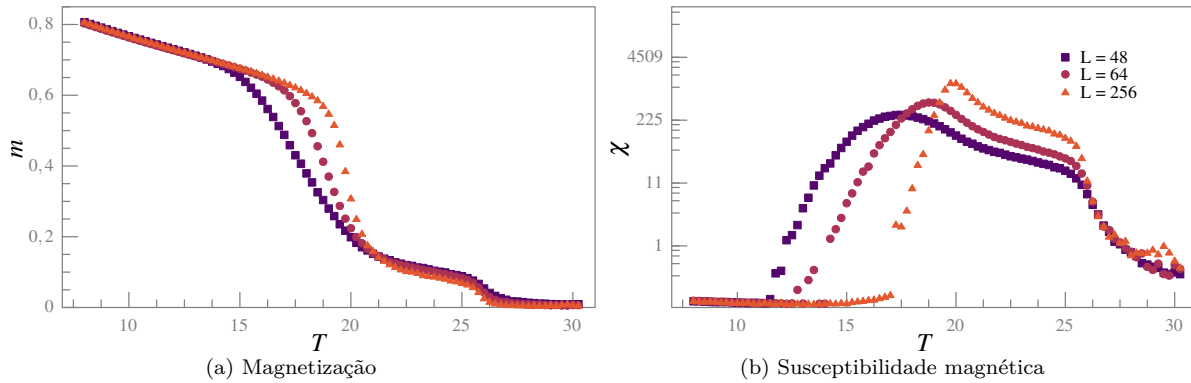
Figura 30 – Magnetização média do modelo TM com intensidade da aperiodicidade $r = 8$, para $L = 48$ (quadrados), $L = 64$ (círculos) e $L = 256$ (triângulos).



Fonte - Elaborado pelo autor.

Os sistemas menores apresentam um alargamento da susceptibilidade. A redução no tamanho da região ΔT , mencionada acima pode ser observada na redução da largura da susceptibilidade, sugerindo que para $L \rightarrow \infty$, o sistema recupera o comportamento do tipo puro. Como pode ser observado no gráfico da susceptibilidade magnética, [Figura 31b](#), com o aumento do sistema o pico da susceptibilidade tende a valores cada vez maiores, mas não é possível observar uma diminuição do alargamento do pico.

Figura 31 – Magnetização média do modelo TM com intensidade da aperiodicidade $r = 16$, para $L = 48$ (quadrados), $L = 64$ (círculos) e $L = 96$ (triângulos).



Fonte - Elaborado pelo autor.

Como discutido na [Seção 2.4.3.1](#), a sequência TM é irrelevante (lembramos que esse critério diz respeito à mudança de classe de universalidade – transições contínuas). O comportamento observado até o momento parece estar relacionado com o apresentado por ([Chatelain, 2014a](#); [Chatelain, 2014b](#)) com desordem aleatória. No entanto, os dados encontrados por nós são muito semelhantes. É de se esperar que sistemas aperiódicos apresentem características semelhantes, visto que as sequências aperiódicas utilizadas neste trabalho são obtidas por regras de substituição e as constantes de troca nas direções não aperiódicas dependam da aperiodicidade introduzida em uma das direções.

O comportamento observado para a sequência TM também surgiu nos modelos Paper-Folding e Rudin-Shapiro e foram sistematicamente estudados. Nas seções seguintes apresentamos os resultados desses estudos.

5.3 Fases de Griffiths

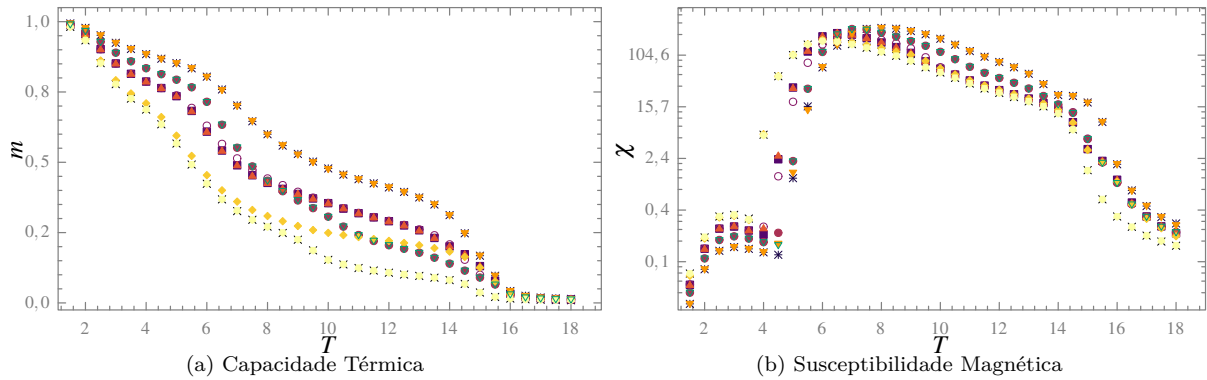
Uma questão que surgiu durante a qualificação de tese sobre o efeito discutido ao final da seção anterior ser devido ao pedaço da sequência utilizado para gerar os dados. Uma rede de tamanho linear $L = 8$ estará presente nos primeiros 8 dígitos da rede de tamanho linear $L = 16$, em vermelho na [Equação \(5.6\)](#), por exemplo.

$$\begin{aligned} & a \ a \ a \ b \ a \ a \ b \ a \\ & a \ a \ a \ b \ a \ a \ b \ a \ a \ a \ b \ b \ b \ a \ b \end{aligned} \quad (5.6)$$

Sendo essa uma questão de extrema importância realizamos um teste em uma rede de tamanho linear $L = 32$. Para esse tamanho de rede os efeitos surgem de forma apreciável. As constantes de acoplamento, $J_b = 8J_a$, foram distribuídas seguindo a sequência Rudin-Shapiro. A sequência “infinita”, constituída de 8 388 608 dígitos, foi gerada e para cada simulação (história) um pedaço dela, com 32 dígitos (correspondente ao tamanho linear da rede) foi aleatoriamente selecionado.

Os resultados desse estudo são apresentados na [Figura 32](#). Como pode ser observado, a magnetização, [Figura 32a](#), não apresenta uma variação abrupta em uma temperatura crítica, como ocorre no caso puro, para todas as histórias analisadas. De forma semelhante, a susceptibilidade também não exibe um pico acentuado na temperatura de transição; em vez disso, apresenta uma região alargada, [Figura 32b](#), que se estende por uma ampla faixa de temperaturas, iniciando em $T \approx 4$ e indo até $T \approx 16$.

Figura 32 – Diferentes pontos iniciais (histórias) da sequência Rudin-Shapiro. A intensidade da aperiodicidade é $r = 8$ e o tamanho linear da rede $L = 32$, para as dez histórias.



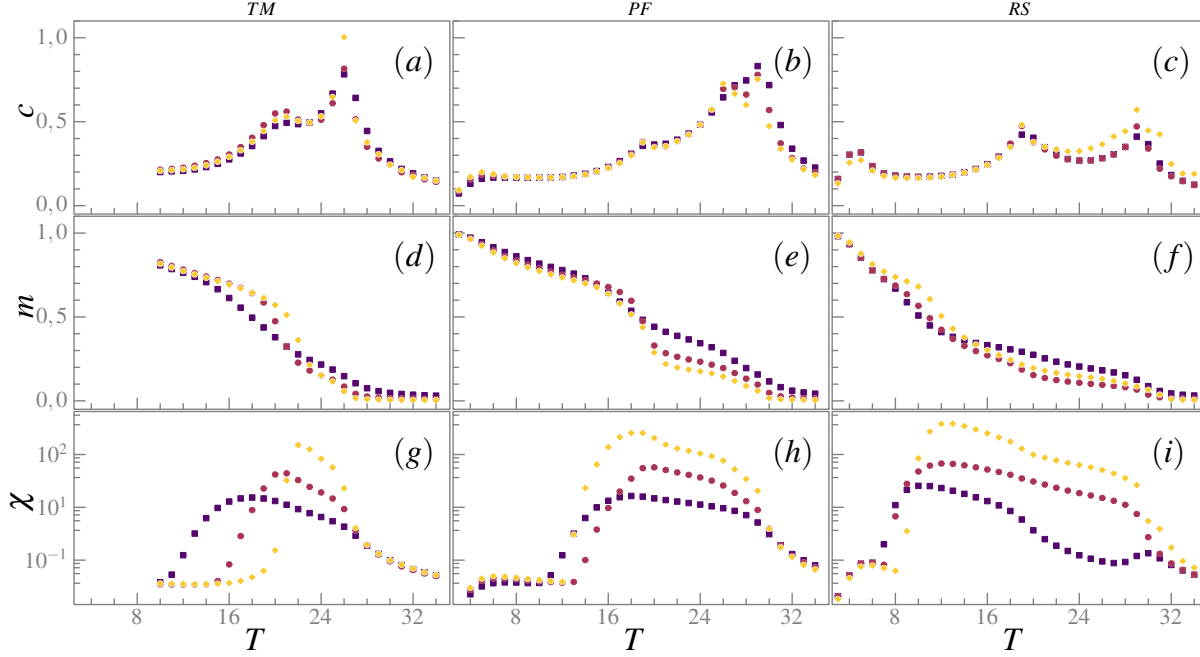
Fonte - Elaborado pelo autor.

Os resultados apresentados na [Figura 32](#) referem-se a apenas 10 histórias. Cada história corresponde a um ponto inicial da sequência, escolhido aleatoriamente. A partir desse ponto, os $L - 1$ dígitos adjacentes da sequência são utilizados para compor a rede de tamanho linear $L = 32$.

5.3.1 Influência do expoente de flutuação ω .

O comportamento das sequências TM, PF e RS para $r = 8$ são apresentados na [Figura 33](#). A capacidade térmica desenvolve uma estrutura de múltiplos picos, [Figs. 33a a 33c](#). Como mencionado anteriormente, essa estrutura já havia sido encontrada em um modelo de Potts

Figura 33 – Capacidade térmica por spin, parâmetro de ordem e susceptibilidade magnética (observe a escala logarítmica no eixo y) de sistemas aperiódicos Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro com $r = 8$. Tamanhos lineares $L = 16$ (quadrados), $L = 32$ (círculos) e $L = 64$ (losangos). As barras de erro são menores que os símbolos.



Fonte - Adaptado de (Salvador; Tragtenberg, 2025)

bidimensional com ligações aleatórias por [Chen, Ferrenberg e Landau \(1995\)](#) e em um modelo de Potts bidimensional com ligações bimodais distribuídas periodicamente por [Yaşar e Dilaver \(2009\)](#). Os modelos PF e RS apresentam essa mesma estrutura de forma bastante pronunciada em que três picos são desenvolvidos, [Figuras 33b e 33c](#).

Diferentemente do modelo puro, não é possível distinguir a temperatura de transição a partir do parâmetro de ordem m . Ao invés de uma única variação abrupta, como visto no caso puro, temos duas dessas variações, [Figs. 33d a 33f](#). Como podemos inferir das figuras, a largura ΔT depende da intensidade r da aperiodicidade.

Esse comportamento é melhor visualizado através da susceptibilidade magnética, [Figs. 33g a 33i](#). Em um sistema puro, em que temos uma transição contínua, a extinção da magnetização é sinalizada por um acentuado pico da susceptibilidade. No entanto, temos um região alargada da susceptibilidade coincidindo como as regiões de variações abruptas da magnetização. A região ΔT parece ir a zero com o aumento de L para o modelo TM, como pode ser observado na [Figura 33g](#). Dessa forma, o comportamento do tipo puro é recuperado.

Por outro lado, quando olhamos para os modelos PF e RS, um comportamento mais interessante se mostra. Conforme L cresce, a região ΔT persiste assim como a divergência da susceptibilidade dentro dessa região, [Figuras 33h e 33i](#). Essa divergência em um região de temperatura é consistente com uma Fase de Griffiths.

Os três modelos aperiódicos estudados, apresentados na [Figura 33](#), analisam a influência do expoente de flutuação ω sobre a região ΔT , que se mostrou tanto maior quanto maior ω . A seguir analisamos os efeitos de r sobre essa região.

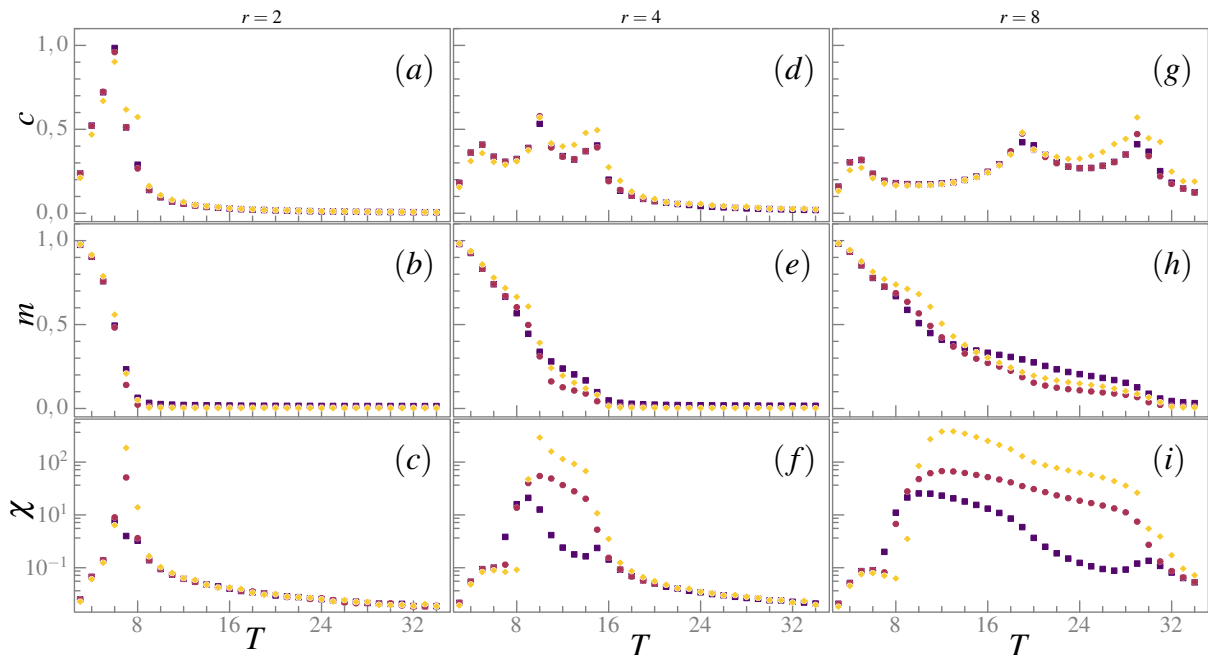
5.3.2 Influência da intensidade da aperiodicidade – r .

Para entender como a intensidade r da aperiodicidade afeta os sistemas aperiódicos, focamos nossa atenção em um modelo RS. Essa influência foi estudada para três valores: $r = 2, 4$ e 8 . Os resultados para os três valores de r são apresentados na Figura 34. O modelo PF apresenta o mesmo comportamento do caso puro: a capacidade térmica apresenta um único pico, Figura 34a; a magnetização apresenta uma única variação abrupta, Figura 34b; e a susceptibilidade desenvolve um pico bem definido conforme L cresce, Figura 34c, consistente com uma transição de fase contínua. Inspeccionando visualmente as Figs. 34a a 34c, podemos estimar a temperatura de transição em $T \approx 7,0$.

Para $r = 4$, o comportamento muda significativamente. A capacidade térmica apresenta três picos, Figura 34d, o que impossibilita a identificação clara da temperatura de transição. A magnetização exibe duas variações abruptas, Figura 34e, entre $T \approx 8$ e $T \approx 16$. Entre essas temperaturas, a susceptibilidade apresenta uma região alargada, Figura 34f, ao invés de um pico bem definido como era de se esperar para uma transição contínua.

A capacidade térmica do modelo RS com intensidade $r = 8$ desenvolve três picos, semelhante ao modelo de intensidade $r = 4$, Figura 34g. Novamente a magnetização apresenta duas variações abruptas em torno de $T \approx 8$ e $T \approx 32$, Figura 34h. Essas regiões são melhores visualizadas a partir da susceptibilidade magnética, Figura 34i; novamente, a susceptibilidade não apresenta um pico nítido como em uma transição contínua, o que vemos é uma região de temperatura com χ crescendo conforme L cresce, consistente com uma região de Griffiths.

Figura 34 – Capacidade térmica por spin, parâmetro de ordem e susceptibilidade magnética (observe a escala logarítmica no eixo y) de sistemas aperiódicos Rudin-Shapiro. Para $r = 2$, o sistema apresenta comportamento do tipo puro em que uma nítida transição se apresenta. Com o aumento de r , tem-se uma transição de fase suavizada (*smearred phase*) de $T \approx 8$ a $T \approx 16$ e $T \approx 32$ para $r = 4$ e $r = 8$, respectivamente. Tamanhos lineares $L = 16$ (quadrados), $L = 32$ (círculos) e $L = 64$ (losangos). As barras de erro são menores que os símbolos.

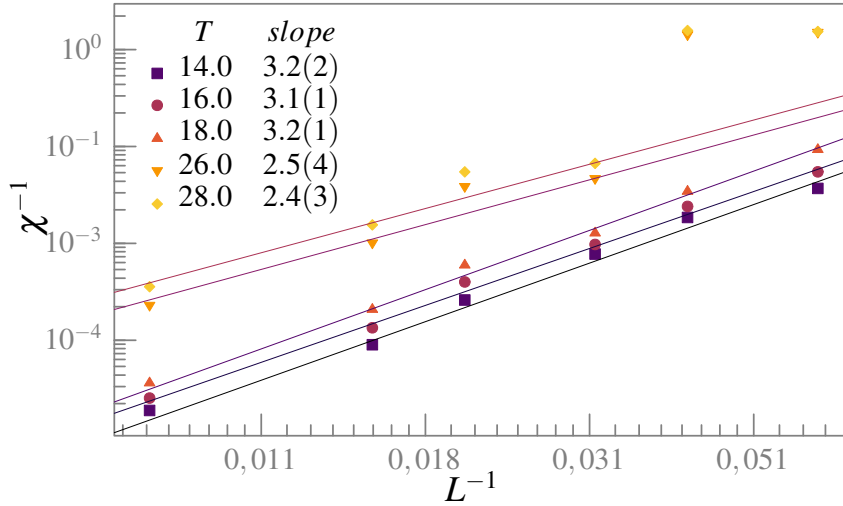


Fonte - Adaptado de (Salvador; Tragtenberg, 2025)

A susceptibilidade magnética, quando $r = 2$, apresenta um comportamento consistente com uma transição de fases contínua, [Figura 34c](#). Diferentemente de $r = 2$, conforme L cresce, a região ΔT persiste quando $r = 4$ e 8. Isso indica uma região ΔT finita de susceptibilidade infinita, a assinatura de uma fase de Griffiths. A faixa de temperaturas correspondente a ΔT parece depender de r , uma vez que $\Delta T(r = 8)$ é maior do que $\Delta T(r = 4)$.

A divergência da susceptibilidade do modelo aperiódico RS foi estudada com a escolha de temperaturas no interior de ΔT , conforme L cresce, [Figura 35](#). Seleccionamos três temperaturas dentro dessa região e incluímos também seus extremos: 14, 16, 18, 26 e 28. Essas temperaturas fornecem uma análise representativa da região ΔT como um todo.

Figura 35 – Ajuste por lei de potência de χ^{-1} em função de L^{-1} (note o uso de escala logarítmica dupla). Os dados correspondem a $L = 16, 24, 32, 48, 64$ e 128 para cinco temperaturas diferentes. Para as temperaturas $T = 26$ e $T = 28$, os valores correspondentes às duas menores redes foram excluídos do ajuste por serem pontos fora da tendência (outliers).



Fonte - Adaptado de ([Salvador; Tragtenberg, 2025](#))

As curvas apresentadas no gráfico de χ^{-1} em função de L^{-1} para $L = 16, 24, 32, 48, 64$ e 128, nas cinco temperaturas analisadas, foram ajustadas e apresentam um comportamento do tipo lei de potência. Isso indica que a susceptibilidade diverge com o aumento de L nessas temperaturas, confirmando que a divergência ocorre em toda a região ΔT , o que caracteriza a existência de uma fase de Griffiths.

A divergência da susceptibilidade mostrada na [Figura 35](#) é consistente com o que foi reportado por ([Chatelain, 2014a](#)) na Fig.2, em que foi observada uma divergência para L grande em um intervalo finito de temperaturas, ΔT .

Além disso, considerando as incertezas, os valores da razão γ/ν , obtidos a partir da [Figura 35](#), são praticamente os mesmos para diferentes temperaturas nesta região. Isso também é consistente com os valores da razão γ/ν reportados na Tabela IV de ([Chatelain, 2014a](#)), que coincidem dentro das incertezas. Naturalmente, os valores obtidos em nosso modelo diferem dos de ([Chatelain, 2014a](#)), uma vez que a dimensionalidade, as interações e o tipo de desordem são distintos. No trabalho de Chatelain, a desordem nas interações ferromagnéticas era de longo alcance. A capacidade térmica do modelo de Ising apresenta uma estrutura de duplo pico,

similar ao observado em nosso sistema aperiódico. Observa-se também uma variação abrupta da magnetização como função da temperatura, diferindo do caso puro. Entre a fase paramagnética e a fase ferromagnética, está presente uma região de lenta variação. A susceptibilidade magnética desenvolve dois picos que coincidem com as variações abruptas encontradas na magnetização. Entre esses dois picos, a susceptibilidade diverge algebricamente com o tamanho da rede para todas as temperaturas dentro da região ΔT . O autor conclui que o sistema desenvolve uma fase de Griffiths. Chantelain também mostra que a largura da região de Griffiths é controlada pela intensidade da desordem (Chatelain, 2014b), como o encontrado em nosso trabalho e pode ser visto nas Figuras 34f e 34i.

5.3.3 O efeito do número de iterações da sequência aperiódica

Até o momento, todas as simulações foram realizadas em um rede cúbica simples e, portanto, o número de iterações da sequência foi limitado pelo tamanho do sistema cúbico. Considere n o número de dígitos da sequência aperiódica após i iterações e observe que $n = L_x$ (lembrando que L_x é o número de sítios na direção x). O número de iterações da sequência é, portanto,

$$i = (\log_2 L_x) - 1. \quad (5.7)$$

O tamanho da rede cresce como uma potência de 2, daí a razão do logaritmo de base 2. A partir da Equação (5.7), podemos ver que o número máximo de iterações em nosso trabalho é 6 ($n = L_x = 128$). Surge, portanto, a seguinte questão importante: esse pequeno número de iterações não poderia ser a causa dos efeitos observados acima? Essa dúvida surge devido ao fato de que as flutuações da sequência aperiódica decaem algebricamente com o tamanho linear da rede, como $L^{-\omega}$, apenas no limite $L \rightarrow \infty$. Portanto, para sequências pequenas as flutuações poderiam se comportar de forma diferente. Trata-se de questão relevante e que merece atenção especial. Com esse intuito, simulamos um sistema aperiódico RS com a forma de um paralelepípedo reto, para $L = 8, 16$ e 32 e intensidade da aperiodicidade $r = 8$, com $p = 64$ e 256 .

$p = 64$

Considerando $p = 64$, temos $L_x = 512, 1024$ e 2048 , e, a partir da Equação (5.7), obtemos $i = 8, 9$ e 10 iterações, respectivamente, Figura 36.

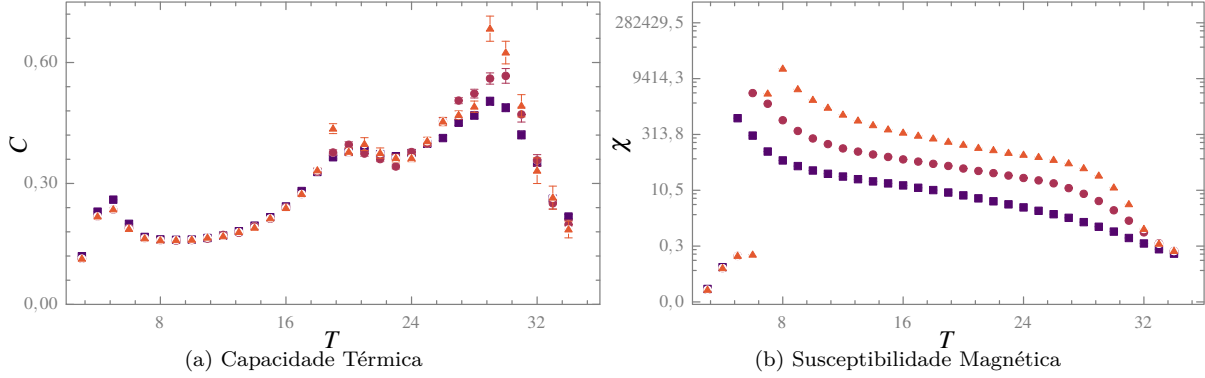
Novamente, podemos observar uma estrutura de três picos na capacidade térmica, com intensidades independentes do tamanho da rede, Figura 36a. Diferentemente do modelo puro, a susceptibilidade magnética apresenta uma região divergente na faixa ΔT , Figura 36b.

$p = 256$

Considerando $p = 256$, temos $L_x = 2048, 4096$ e 8192 , e, a partir da Equação (5.7), obtemos $i = 10, 11$ e 12 iterações, respectivamente, Figura 37.

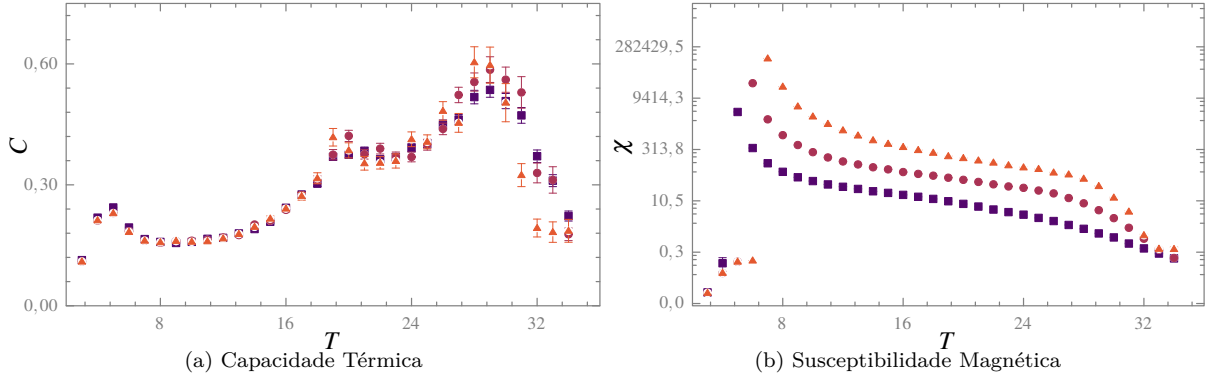
Novamente, podemos observar uma estrutura de três picos na capacidade térmica, com intensidades independentes do tamanho da rede, Figura 37a. Diferentemente do modelo puro, a susceptibilidade magnética apresenta uma região divergente na faixa ΔT , Figura 37b.

Figura 36 – Capacidade térmica e susceptibilidade magnética. Sequência RS em um paralelepípedo com $p = 64$ de tamanho linear $L = 8$ ($Lx = pL = 512$ - quadrados roxos), $L = 16$ ($Lx = pL = 1024$ - círculos vermelhos) e $L = 32$ ($Lx = pL = 2048$ - triângulos laranjas).



Fonte - Elaborado pelo autor.

Figura 37 – Capacidade térmica e susceptibilidade magnética. Sequência RS em um paralelepípedo com $p = 256$ de tamanho linear $L = 8$ ($Lx = pL = 2048$ - quadrados roxos), $L = 16$ ($Lx = pL = 4096$ - círculos vermelhos) e $L = 32$ ($Lx = pL = 8192$ - triângulos laranjas).



Fonte - Elaborado pelo autor.

Um dos trabalhos citados em nosso estudo, que discutia modelos aperiódicos quânticos em 1D (equivalente ao modelo 2D clássico), utilizava 8 iterações da sequência aperiódica. Os resultados apresentados nessa seção não deixam dúvidas em relação aos apresentados nas seções anteriores.

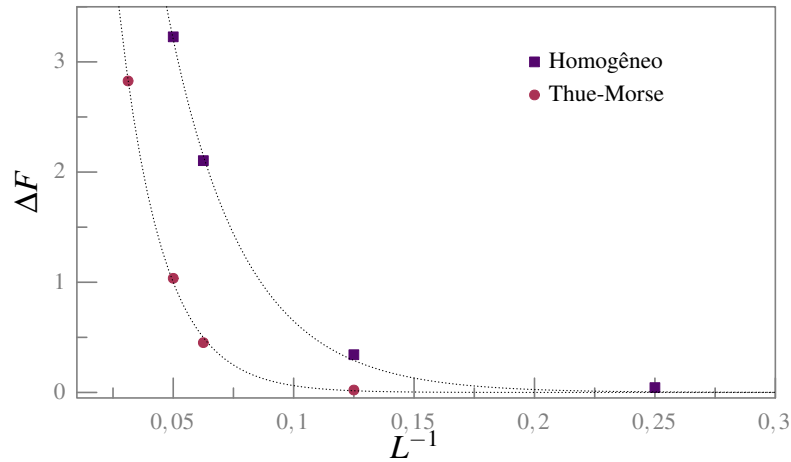
Assim encerramos esse seção com a seguinte afirmação: o número de iterações utilizadas em nosso trabalho foram adequados e os efeitos encontrados não se devem a um número insuficiente de iterações da sequência aperiódica.

5.4 $q = 4$

Em três dimensões, o modelo de Potts puro apresenta uma transição de primeira ordem, [Seção 3.2](#). A questão que procurávamos responder no início deste trabalho era se uma modulação aperiódica poderia alterar a ordem da transição em um sistema tridimensional. Optamos por utilizar o algoritmo de Wolff, apesar de sua ineficiência no estudo de transições de primeira ordem — nesse contexto, o algoritmo de *parallel tempering* seria mais apropriado. Nesses casos, o sistema tende a ficar “preso” em regiões do diagrama de fases e, para que se obtenha uma estatística representativa, é necessário que ele transite repetidamente entre diferentes estados de equilíbrio [Figura 3](#). Gráficos da magnetização em função dos passos de Monte Carlo exibem dois platôs distintos, correspondentes aos estados de equilíbrio coexistentes no diagrama de fases. Esperávamos observar esse tipo de comportamento caso as sequências aperiódicas não alterassem a classe de universalidade do modelo. Esse comportamento foi observado, de fato, apenas para a sequência TM, como será discutido a seguir. No entanto, para as sequências PF e RS, foi observado um comportamento semelhante ao discutido na [Seção 5.3](#).

O modelo aperiódico de quatro estados com sequência TM foi investigado em uma rede do tipo paralelepípedo, com intensidade de aperiodicidade $r = \frac{4}{3}$ e fator de deformação $p = 2$. Utilizando o método de Lee-Kosterlitz, descrito na [Seção 4.5](#), fomos capazes de determinar a ordem da transição. A [Figura 38](#) mostra a barreira de energia ΔF em função de L^{-1} para diferentes temperaturas. Observa-se claramente que ΔF diverge tanto para o modelo homogêneo quanto para a sequência TM, caracterizando uma transição de primeira ordem.

Figura 38 – Barreira de energia ΔF para o modelo de Potts de 4 estados em uma rede retangular com $p = 2$ ($N = pL \times L \times L$). A intensidade da aperiodicidade do modelo TM é $r = \frac{4}{3}$.

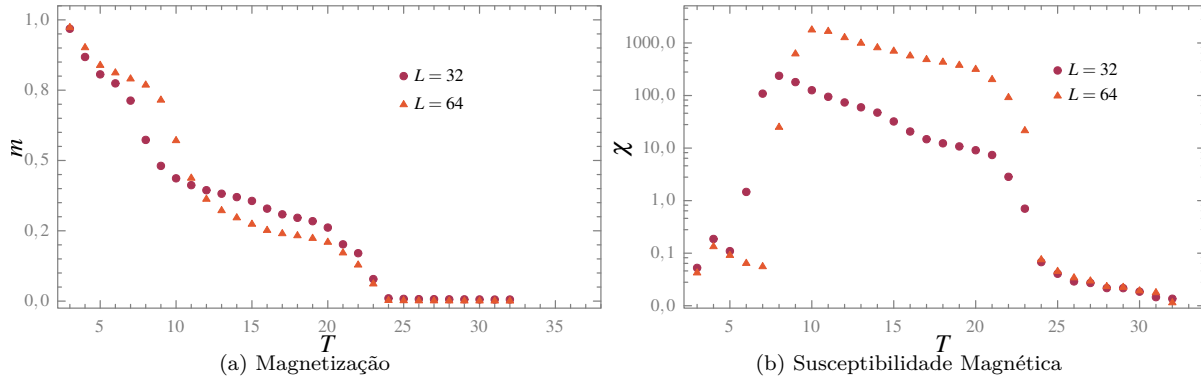


Fonte - Elaborado pelo autor.

Uma sequência aperiódica RS, com intensidade de aperiodicidade $r = 8$, foi aplicada ao modelo com tamanho linear $L = 32$. Esse valor de L foi escolhido porque, nesse tamanho, os efeitos da aperiodicidade já são expressivos. Os resultados são apresentados na [Figura 39](#).

Como podemos ver, e de forma semelhante ao discutido na [Seção 5.3](#), a magnetização apresenta duas variações abruptas, diferentemente do que ocorre na versão pura de quatro estados, [Figura 39a](#).

Figura 39 – Magnetização e susceptibilidade magnética do modelo de Potts aperiódico de quatro estados RS. O sistema é uma rede cúbica ($p = 1$) de tamanho linear $L = 32$ e aperioidicidade de intensidade $r = 8$.



Fonte - Elaborado pelo autor.

Ao observarmos a susceptibilidade magnética, notamos novamente o mesmo comportamento descrito na [Seção 5.3](#). Existe uma região ΔT em que a susceptibilidade difere daquela do modelo puro. Considerando toda a discussão apresentada na [Seção 5.3](#), podemos afirmar que o sistema analisado nessa seção desenvolve uma FG. No entanto, essa afirmação deve ser feita com cautela, uma vez que a [Figura 39](#) apresente resultados para apenas dois tamanhos de rede.

Conclusões e perspectivas

Estudamos o modelo de Potts de dois e quatro estados puro e aperiódico com as sequências aperiódicas Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro em três dimensões. O objetivo inicial do trabalho era estudar os modelos de Potts aperiódicos Thue-Morse, Paper-Folding e Rudin-Shapiro de dois, três e quatro estados em três dimensões. Esse objetivo inicial era uma sequência natural dos trabalhos realizados em duas dimensões. Considerando que esses modelos, em suas versões puras, sofrem transições de fase contínua quando $q = 2$ e sofrem transições de fase de primeira ordem para $q > 2$, nosso foco, portanto era: (a) determinar se o modelo de dois estados mudaria sua classe de universalidade; (b) os modelos de três e quatro estados mudariam a transição de primeira ordem para contínua; (c) caso houvesse essa mudança, determinar a classe de universalidade do modelo.

Os resultados do modelo puro foram consistentes com os encontrados na literatura nos dando confiança no restante dos modelos estudados. A sequência Thue-Morse apresentou os mesmos expoentes que a versão puro quando a intensidade da aperiodicidade era pequena, $r = 2$. No entanto, quando essa intensidade foi aumentada, uma estrutura atípica se desenvolveu (fazendo com que o objetivo inicial fosse alterado). Nossos resultados mostram que essa estrutura atípica parece sumir com o aumento linear da rede quando lidamos com o modelo aperiódico Thue-Morse.

Essa estrutura atípica também foi observada nos modelos Paper-Folding e Rudin-Shapiro. No entanto, para essas sequências, ela não dá sinais de desaparecer com o aumento do tamanho da rede. Essa estrutura está relacionada ao surgimento de uma fase de Griffiths.

Estudamos a influência do expoente de flutuação ω e da intensidade da aperiodicidade r sobre essa região atípica, ΔT . Nossos resultados mostram claramente que essa região, a fase de Griffiths, é dependente tanto de ω quanto de r .

Demonstramos que o número de iterações das sequências adotado ao longo do trabalho foi suficiente. Isso foi possível ao estudar o comportamento do sistema em uma rede em forma de paralelepípedo. Aumentando, dessa forma, o número de iterações da sequência sem que o tamanho total do sistema fosse aumentado consideravelmente ($N = L^3$).

Por fim, estudamos um modelo aperiódico Rudin-Shapiro de quatro estados. Embora os dados apresentados sejam de apenas uma rede de tamanho linear $L = 32$, os dados são consistentes com o encontrado para o modelo de dois estados. Simulações para redes maiores estão sendo realizadas.

Como perspectivas pretendemos aumentar os tamanhos lineares das redes. Estender o estudo para o modelo de três estados. Simular redes maiores, com os mesmos tamanhos estudados para o modelo de dois estados, para determinar se o comportamento observado na [Seção 5.4](#) se manterá. Estudar sistematicamente o modelo 2D, pois como mencionado, a capacidade térmica e algumas grandezas relacionadas à magnetização apresentaram a estrutura de múltiplos picos

(uma vez que o sistema é bidimensional, podemos realizar simulações com tamanhos lineares muito maiores).

Referências

- BAILLIE, C. F.; CODDINGTON, P. D. Comparison of cluster algorithms for two-dimensional Potts models. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 43, n. 13, p. 10617–10621, may 1991. Citado na página 52.
- BAXTER, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, Inc, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.
- BERCHE, P. E.; CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Aperiodicity-Induced Second-Order Phase Transition in the 8-State Potts Model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 80, p. 297–300, 01 1998. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.80.297>. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 43.
- BERCHE, P.-E. et al. Bond dilution in the 3D Ising model: a Monte Carlo study. *Eur. Phys. J. B*, v. 38, n. 3, p. 463–474, Apr 2004. ISSN 1434-6036. Disponível em: <https://doi.org/10.1140/epjb/e2004-00141-x>. Citado na página 42.
- BRAY, A. J. Nature of the Griffiths phase. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 59, p. 586–589, 08 1987. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.586>. Citado na página 35.
- BRUNO, T. J.; HAYNES, W. M.; LIDE, D. R. *CRC handbook of chemistry and physics: a ready-reference book of chemical and physical data*. 97th. ed. Boca Raton: CRC Press, 2016. Citado na página 23.
- CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Second edition. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- CHAIKIN, T. C. L. P. M. *Principles of Condensed Matter Physics*. 1st. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. Citado na página 28.
- CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P.; BINDER, K. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 34, p. 1841–1852, ago. 1986. Citado na página 58.
- CHATELAIN, C. Griffiths phase and critical behavior of the two-dimensional Potts models with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 89, p. 032105, 03 2014. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.032105>. Citado 6 vezes nas páginas 19, 35, 43, 44, 70 e 74.
- CHATELAIN, C. Stability of the Griffiths phase in a 2D Potts model with correlated disorder. *Condensed Matter Physics*, v. 17, n. 3, p. 33601, 2014. Citado 5 vezes nas páginas 19, 35, 43, 70 e 75.
- CHATELAIN, C. et al. Monte Carlo study of phase transitions in the bond-diluted 3D 4-state Potts model. *Nucl. Phys. B*, v. 719, n. 3, p. 275–311, 2005. ISSN 0550-3213. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321305003780>. Citado na página 43.
- CHATELAIN, C.; BERCHE, P.; BERCHE, B. Second-order phase transition induced by deterministic fluctuations in aperiodic eight-state Potts models. *Eur. Phys. J. B*, v. 7, n. 3, p. 439–449, 02 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s100510050632>. Citado 3 vezes nas páginas 34, 37 e 43.

CHATELAIN, C.; BERCHE, P. E.; JANKE, W. 3D bond-diluted 4-state Potts model: a Monte Carlo study. *Nucl. Phys. B - Proc. Suppl.*, v. 106-107, p. 899–901, 2002. ISSN 0920-5632. LATTICE 2001 Proceedings of the XIXth International Symposium on Lattice Field Theory. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920563201018795>. Citado na página 43.

CHEN, S.; FERRENBURG, A. M.; LANDAU, D. P. Monte Carlo simulation of phase transitions in a two-dimensional random-bond Potts model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 52, p. 1377–1386, 08 1995. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.52.1377>. Citado 3 vezes nas páginas 43, 44 e 72.

CHIPPARI, F.; PICCO, M.; SANTACHIARA, R. Long-range quenched bond disorder in the bidimensional Potts model. *J. Stat. Mech.: Theory Exp.*, IOP Publishing, v. 2023, n. 4, p. 043301, 04 2023. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/acc72a>. Citado na página 44.

DIAZ, I. J. *Propriedades Magnéticas e Comportamento Crítico de Ligas Binárias de $Fe_{1-x}Ru_x$* . Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 54, 55 e 56.

DIAZ, I. J. *Temperatura de Compensação e Comportamento Crítico de Modelos de Ising em Camadas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2017. Citado na página 31.

EFRON, B. Bootstrap methods: Another look at the jackknife. *The Annals of Statistics*, v. 7, n. 1, p. 1–26, 1979. Citado na página 50.

EFRON, B. *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans*. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1982. Citado na página 50.

FARIA, M. S. *Efeitos de Aperiodicidade no Comportamento Crítico de Modelos Magnéticos na rede de Bethe*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2006. Citado na página 37.

FARIA, M. S.; BRANCO, N. S.; TRAGTENBERG, M. H. R. Nonuniversal behavior for aperiodic interactions within a mean-field approximation. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 77, p. 041113, 04 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.041113>. Citado na página 34.

FERRENBURG, A. M.; XU, J.; LANDAU, D. P. Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 97, p. 043301, 04 2018. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.043301>. Citado 10 vezes nas páginas 11, 27, 33, 50, 51, 61, 62, 64, 66 e 67.

GIRARDI, D. *Simulação Numérica: Comportamento Dinâmico do Algoritmo de Niedermayer e Comportamento Crítico de Sistemas Aperiódicos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 44.

GIRARDI, D.; BRANCO, N. d. S. Influence of aperiodic modulations on first-order transitions: Numerical study of the two-dimensional Potts model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 83, p. 061127, Jun 2011. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.061127>. Citado na página 43.

GIRARDI-SCHAPPO, M. et al. Griffiths phase and long-range correlations in a biologically motivated visual cortex model. *Sci Rep*, American Physical Society, v. 6, p. 29561, 01 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/srep29561>. Citado na página 35.

- GOLDENFELD, N. *Lectures on phase transitions and critical phenomena*. [S.l.]: Westview Press, 1992. v. 85. (Frontiers in Physics, v. 85). Citado 6 vezes nas páginas 17, 18, 25, 29, 30 e 31.
- GREINER, W. et al. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. New York: Springer-Verlag New York, Inc, 1995. (Classical Theoretical Physics). Citado na página 22.
- GRIFFITHS, R. B. Nonanalytic Behavior Above the Critical Point in a Random Ising Ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 23, p. 17–19, 07 1969. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.23.17>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 35.
- GUGGENHEIM, E. A. The principle of corresponding states. *J. Chem. Phys.*, v. 13, n. 7, p. 253–261, 07 1945. ISSN 0021-9606. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1724033>. Citado na página 27.
- HARRIS, A. B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *J. Phys. C*, IOP Publishing, v. 7, n. 9, p. 1671–1692, 05 1974. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0022-3719/7/9/009>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 33.
- HARRIS, A. B. A brief history of the Harris criterion. In: *APS March Meeting Abstracts*. [s.n.], 2007. v. 52, n. 1. Disponível em: <http://meetings.aps.org/link/BAPS.2007.MAR.D3.3>. Citado na página 34.
- HUANG, K. *Statistical Mechanics*. Second edition. New York: John Wiley & Sons, 1987. Citado 3 vezes nas páginas 27, 28 e 29.
- IGLÓI, F. Critical behaviour in aperiodic systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 26, n. 15, 1993. Citado na página 34.
- IGLÓI, F.; KAREVSKI, D.; RIEGER, H. Random and aperiodic quantum spin chains: A comparative study. *Eur. Phys. J. B*, v. 1, n. 4, p. 513–517, 03 1998. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s100510050213>. Citado na página 35.
- IGLÓI, F.; KAREVSKI, D.; RIEGER, H. Comparative study of the critical behavior in one-dimensional random and aperiodic environments. *Eur. Phys. J. B*, v. 5, n. 3, p. 613–625, 10 1998. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/s100510050486>. Citado na página 35.
- ISING, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 31, n. 1, p. 253–258, 02 1925. ISSN 0044-3328. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02980577>. Citado na página 17.
- KADANOFF, L. P. Scaling laws for Ising models near T_c . *Physics Physique Fizika*, American Physical Society, v. 2, p. 263–272, Jun 1966. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.2.263>. Citado na página 28.
- KIM, D.; JOSEPH, R. I. High-temperature series study of the q-component Potts model in two and three dimensions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, IOP Publishing, v. 8, n. 6, p. 891–904, 06 1975. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/8/6/008>. Citado na página 42.
- LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 3. ed. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2009. ISBN 9780511994944. Citado 4 vezes nas páginas 32, 48, 54 e 55.
- LEE, J.; KOSTERLITZ, J. M. New numerical method to study phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 65, p. 137–140, jul. 1990. Citado na página 58.
- LEVINE, D.; STEINHARDT, P. J. Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 53, p. 2477–2480, Dec 1984. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.53.2477>. Citado na página 36.

- LEVINE, D.; STEINHARDT, P. J. Quasicrystals. I. Definition and structure. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 34, p. 596–616, Jul 1986. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.596>. Citado na página 36.
- LI, L.; PLEIMLING, M. Three-dimensional nonequilibrium Potts systems with magnetic friction. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 93, p. 042122, Apr 2016. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.042122>. Citado na página 41.
- LUCK, J.-M. A Classification of Critical Phenomena on Quasi-Crystals and Other Aperiodic Structures. *Europhys. Lett.*, IOP Publishing, v. 24, n. 5, p. 359–364, 1993. Disponível em: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/24/5/007>. Citado 3 vezes nas páginas 33, 34 e 35.
- LUCK, J.-M. Critical behavior of the aperiodic quantum Ising chain in a transverse magnetic field. *J. Stat. Phys.*, v. 72, n. 3-4, p. 417–458, 08 1993. Disponível em: <http://link.springer.com/10.1007/BF01048019>. Citado 3 vezes nas páginas 19, 34 e 37.
- MCCOY, B. M. Incompleteness of the Critical Exponent Description for Ferromagnetic Systems Containing Random Impurities. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 23, p. 383–386, 08 1969. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.23.383>. Citado na página 35.
- MUÑOZ, M. A. et al. Griffiths Phases on Complex Networks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 105, p. 128701, 09 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.128701>. Citado na página 35.
- NARAYANAN, R. et al. Influence of Rare Regions on Magnetic Quantum Phase Transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 82, p. 5132–5135, 06 1999. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.5132>. Citado na página 35.
- NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. 1. ed. Oxford University Press, Oxford, 1999. ISBN 9780198517962. Disponível em: <https://doi.org/10.1093/oso/9780198517962.001.0001>. Citado 7 vezes nas páginas 33, 45, 48, 52, 54, 55 e 57.
- NIENHUIS, B.; RIEDEL, E. K.; SCHICK, M. q -state Potts model in general dimension. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 23, p. 6055–6060, 06 1981. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.6055>. Citado na página 43.
- ÓDOR, G.; DICKMAN, R.; ÓDOR, G. Griffiths phases and localization in hierarchical modular networks. *Scientific Reports*, v. 5, n. 1, p. 14451, 09 2015. ISSN 2045-2322. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/srep14451>. Citado na página 35.
- ONSAGER, L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>. Citado na página 17.
- POTTS, R. B. Some generalized order-disorder transformations. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, Cambridge University Press, v. 48, n. 01, p. 106 – 109, 1952. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0305004100027419>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 41.
- REICHL, L. E. *A Modern Course in Statistical Physics*. Fourth revised and updated edition. Weinheim, Germany: [s.n.], 2016. Citado na página 25.
- REIF, F. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. 2. ed. Illinois: [s.n.], 2009. (McGraw-Hill series in fundamentals of physics). Citado na página 22.

- SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2. ed. São Paulo: Edusp - Editora da Universidade de São Paulo, 2008. Citado na página 24.
- SALVADOR, D.; TRAGTENBERG, M. H. R. Griffiths phase in a three-dimensional Ising model with aperiodic interactions. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 111, p. 054123, May 2025. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.111.054123>. Citado 6 vezes nas páginas 36, 54, 61, 72, 73 e 74.
- STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. First edition. London: Oxford University Press, 1971. (Monographs on Physics). Citado 2 vezes nas páginas 28 e 30.
- STANLEY, H. E. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 71, p. S358–S366, mar. 1999. Citado na página 30.
- SZABÓ, A.; MERKS, R. M. Cellular Potts Modeling of Tumor Growth, Tumor Invasion, and Tumor Evolution. *Front. Oncol.*, v. 3, p. 87, 2013. ISSN 2234-943X. Disponível em: <https://www.frontiersin.org/journals/oncology/articles/10.3389/fonc.2013.00087>. Citado na página 41.
- TAYLOR, J. R. *Introdução à Análise de Erros: O estudo de incertezas em medições físicas*. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 59.
- VIEIRA, A. P. Aperiodic quantum XXZ chains: Renormalization-group results. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 134408, 04 2005. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.134408>. Citado na página 35.
- VIEIRA, A. P.; HOYOS, J. A. Emergent dimerization and localization in disordered quantum chains. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 98, p. 1–12, 09 2018. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.104203>. Citado na página 34.
- VOJTA, T. Smearing of the phase transition in Ising systems with planar defects. *J. Phys. A: Math. Gen.*, IOP Publishing, v. 36, n. 43, p. 10921–10935, 10 2003. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/36/43/017>. Citado na página 35.
- VOJTA, T. Rare region effects at classical, quantum and nonequilibrium phase transitions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 39, n. 22, p. R143, 05 2006. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/39/22/R01>. Citado na página 35.
- WEIGEL, M.; JANKE, W. Cross correlations in scaling analyses of phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 102, n. 10, 03 2009. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.100601>. Citado 4 vezes nas páginas 50, 51, 63 e 65.
- WEIGEL, M.; JANKE, W. Error estimation and reduction with cross correlations. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 81, p. 066701, Jun 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.81.066701>. Citado 6 vezes nas páginas 50, 51, 63, 65, 66 e 67.
- WEINRIB, A.; HALPERIN, B. I. Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 27, p. 413–427, 01 1983. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.27.413>. Nenhuma citação no texto.
- WEINRIB, A.; HALPERIN, B. I. Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 27, p. 413–427, jan. 1983. Citado na página 35.

WIDOM, B. Equation of state in the neighborhood of the critical point. *J. Chem. Phys.*, v. 43, n. 11, p. 3898–3905, 12 1965. ISSN 0021-9606. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1696618>. Citado na página 28.

WIDOM, B. Surface tension and molecular correlations near the critical point. *J. Chem. Phys.*, v. 43, n. 11, p. 3892–3897, 12 1965. ISSN 0021-9606. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1696617>. Citado na página 27.

YAŞAR, F.; DILAVER, M. The study of phase transition by periodic distribution of bimodal bonds in 2D Potts model. *Int. J. Mod. Phys. C*, v. 20, n. 02, p. 223–236, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/S012918310901356X>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 72.

YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. 1. ed. Oxford: Clarendon Press, Oxford University Press, 1992. ISBN 9780198517290. Disponível em: <https://doi.org/10.1093/oso/9780198517290.001.0001>. Citado na página 27.