

Índice

1	Modelo de Ising e expoentes críticos	1
1.1	Modelo de Ising 2D simples	1
1.2	Expoentes críticos	2
1.3	Escalonamento de tamanho finito	3
2	Autómato celular de Creutz	4
2.1	Algoritmo em pseudo-código	5
2.2	Resumo dos programas desenvolvidos	7
3	Resultados e análise	8
3.1	Efeitos do número de passos e número de bits	8
3.1.1	T, M , ao longo do tempo	8
3.1.2	$\langle T \rangle, \langle M \rangle, \langle M^2 \rangle$, para diferentes números de passos	8
3.1.3	$\langle T \rangle, \langle M \rangle, \langle M^2 \rangle$, para diferentes números de bits	9
3.2	Estudo dos valores médios e de efeitos de tamanho	10
3.2.1	$\langle T \rangle(E_t, N)$	10
3.2.2	$\langle T \rangle(E_t/N^2)$	10
3.2.3	$\langle T \rangle, \langle M \rangle$ de muitos ensaios	11
4	Determinação da temperatura e expoentes críticos	13
4.1	Determinação de T_c	13
4.1.1	Cumulante de Binder	13
4.2	Determinação de expoentes críticos	14
4.2.1	Determinação de θ	14
4.2.2	Expoente de e^C	15
4.2.3	Expoente de M em T_c :	15
5	Modificações ao algoritmo de Creutz	17
6	Conclusão e trabalho futuro	19

Lista de Figuras

3.1 Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 2.2$.	8
3.2 Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 1.4$.	9
3.3 Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 2.4$.	9
3.4 Média de T para diferentes números totais de iterações.	9
3.5 Média de M para diferentes números totais de iterações.	10
3.6 Média de M^2 para diferentes números totais de iterações.	10
3.7 Média de M para diferentes limites superiores de E_c .	10
3.8 Média de T para diferentes limites superiores de E_c .	11
3.9 Média de M^2 para diferentes limites superiores de E_c .	11
3.10 Média de T em função de E_c inicial para diferentes N .	11
3.11 Média de T em função de E_c/N^2 inicial para diferentes N .	12
3.12 $\langle T \rangle$ de 400 repetições.	12
3.13 $\langle M \rangle$ de 400 repetições.	12
3.14 $\langle M^2 \rangle$ de 400 repetições.	12
3.15 $\langle M(t, \{\text{conf. ini.}\}) \rangle$ dos pontos vermelhos da Fig. 3.2.3.	12
 4.1 Pontos do cumulante perto de T_c para vários N .	13
4.2 Polinómios interpoladores dos pontos da Fig. 4.1 e pontos de interseção.	14
4.3 Ajustes dos pontos de interseção do cumulante para cada N' .	14
4.4 Pontos de variância de M e respetivas interpolações de quarta ordem.	15
4.5 Determinação de θ por T do máximo de $\text{Var}(M)$ de vários N .	15
4.6 Pontos de capacidade calorífica e respetivas interpolações de 2º grau.	15
4.7 Determinação de θ e do EC de e^C pelos pontos $(T_{\max(C)}, C_{\max})$ de vários N .	16
4.8 Determinação do EC de e^C pelo valor em T_c de C de vários N .	16
4.9 EC de $\sqrt[k]{\langle M^k \rangle}$ e respetivos r^2 , com k no eixo das abcissas.	16
 5.1 Comparação dos resultados das modificações com resultados anteriores.	17
5.2 $\langle M \rangle$ da Fig. 3.2.3 junto com os novos resultados da modificação ao algoritmo.	18

Capítulo 1

Modelo de Ising e expoentes críticos

1.1 Modelo de Ising 2D simples

O Modelo de Ising 2D consiste numa grelha quadrada de spins, de lado N , com uma energia de interação associada a cada par de vizinhos próximos dada por

$$E_s = -S_a S_b, \quad (1.1)$$

em que S_a e S_b são os valores de spin de um par de spins vizinhos. Cada spin pode tomar os valores de ± 1 e é indexado por i, j que variam entre 1 e N . Usando condições de fronteira periódicas, ou seja, com os spins $i, j = N$ a interagir com os spins $i, j = 1$, respetivamente, a energia total para uma configuração da grelha de spins é

$$E_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N -S_{i,j}(S_{i+1,j} + S_{i,j+1}), \quad (1.2)$$

em que $S_{N+1,j} = S_{1,j}$ e $S_{i,N+1} = S_{i,1}$. Devido ao sinal negativo em (1.1), a situação de maior energia é a de spins antiparalelos, favorecendo assim o alinhamento dos spins. Trata-se por isso de um sistema ferromagnético. A magnetização M de uma grelha é definida como

$$M \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N S_{i,j}. \quad (1.3)$$

Considerando que o sistema troca calor com o exterior, mantendo uma temperatura T constante, e que a grelha é infinita, é possível resolver o modelo de Ising 2D calculando analiticamente a função de partição do sistema [1]. O resultado obtido desta forma para M é

$$M = \begin{cases} \left[1 - \left(\sinh \frac{2}{T} \right)^{-4} \right]^{\frac{1}{8}}, & x < T_c, \\ 0, & x > T_c. \end{cases} \quad (1.4)$$

O MI 2D apresenta uma transição de fase de 2^a ordem na temperatura crítica T_c ,

$$1 - \left(\sinh \frac{2}{T_c} \right)^{-4} = 0 \Leftrightarrow T_c = \frac{2}{\log(1 + \sqrt{2})} = 2.269185\dots \quad (1.5)$$

Os materiais ferromagnéticos apresentam uma magnetização espontânea, isto é, não induzida por um campo externo, abaixo de uma temperatura crítica específica do material. Em $T \approx T_c$, a capacidade calorífica é dada por [2]

$$C := \frac{dE}{dT} = \frac{8}{\pi T_c^2} \left[\log\left(\frac{T_c}{2}\right) - \log\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) - \frac{\pi}{4} - 1 \right], \quad (1.6)$$

que diverge para $+\infty$ em T_c . Uma quantidade que irá ser útil é o cumulante de Binder [3], dado por

$$C_B = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}, \quad (1.7)$$

onde $\langle \dots \rangle$ designa valor médio. C_B é igual a $2/3$ para $T < T_c$ e 0 para $T > T_c$, quando $N = \infty$. Para grelhas finitas, o valor de $C_B(T = T_c)$ será constante ou dependerá muito fracamente de N , permitindo estimar T_c por este ponto onde todos os tamanhos de grelha se intersetam.

1.2 Expoentes críticos [4]

O MI apresentado é passível de ser transformado sem perder as suas propriedades qualitativas. Por exemplo, poder-se-ia ter considerado que a constante de proporcionalidade na equação (1.1) fosse não -1 mas sim outra constante negativa, o que alteraria T_c mas manteria a transição de fase. Existem outras transformações mais drásticas que mantêm o mesmo tipo de transição de fase, por exemplo, uma reinterpretação física do modelo como sendo um modelo de moléculas de um fluido, em que agora S tem valores 0 ou 1 e nos diz se uma casa da grelha está ocupada e em que a grandeza análoga a M seria a densidade ρ do fluido. Cada quantidade termodinâmica de um modelo tem um equivalente no outro. Ambos apresentam uma transição de fase e existem quantidades do modelo de Ising que, por serem inerentes ao modelo, se revelam no caso dos spins e no caso do fluido, teoricamente e experimentalmente. Essas quantidades denominam-se expoentes críticos (EC) e caracterizam as transições de fase nos pontos críticos de um diagrama de fases. Para uma dada transição de fase, pode-se associar um EC a cada função termodinâmica A do sistema. Admitindo que as funções A divergem ou convergem para 0 em T_c , o expoente crítico a de A é definido por

$$a \equiv \lim_{T \rightarrow T_c^\pm} \frac{\log A(T)}{\log |T_c - T|}. \quad (1.8)$$

Por exemplo, se $A = a_0(T_c - T)^{a_1}$ para $T < T_c$, então, por definição, $a = a_1$. Contudo, a existência de um EC não significa que A seja proporcional a $(T_c - T)^a$. Por exemplo, se

$$A = a_0(T_c - T)^{a_1} + b_0(T_c - T)^{b_1},$$

a será o expoente menor. Pode-se dizer que A é assintoticamente proporcional a $(T_c - T)^a$, e escreve-se

$$A \sim (T_c - T)^a, \quad T \rightarrow T_c^- . \quad (1.9)$$

As funções C e M poderão apresentar o comportamento crítico referido acima:

$$C \sim (T_c - T)^{-\alpha}, \quad T \rightarrow T_c^-, \quad (1.10)$$

$$M \sim (T_c - T)^\beta, \quad T \rightarrow T_c^-. \quad (1.11)$$

Como se sabe que C vai divergir, pode-se colocar já o sinal no expoente. Calculando estes dois expoentes a partir de (1.4) e (1.6), obtém-se

$$\begin{aligned}\alpha &= 0 \quad (\text{divergência logarítmica}), \\ \beta &= 1/8.\end{aligned}$$

Como C cresce logaritmicamente à medida que T tende para T_c , não apresenta comportamento crítico, e como cresce mais lentamente do que uma potência, o resultado do limite é 0. Mas, se C cresce de forma logarítmica, então e^C apresentará comportamento crítico, que se verifica ser

$$e^C \sim (T_c - T)^{-\alpha'}, \quad T \rightarrow T_c^-, \quad (1.12)$$

$$\alpha' = \frac{8}{\pi T_c^2} = 0.49454... \quad (1.13)$$

1.3 Escalonamento de tamanho finito

Toda a discussão até agora foi acerca do MI com $N = \infty$, mas, como se pretende estimar os EC computacionalmente, precisa-se de saber como é que o modelo se irá comportar em tamanhos finitos. Em primeiro lugar, não existe transição de fase em T_c para N finito. Isto não quer dizer que não existe uma transição em M de 1 para 0, significa sim que irá ser uma transição progressiva, isto é, não se observará uma temperatura que separe claramente em duas zonas a magnetização, mas existirão várias funções A , como $\text{Var}(M)$ e C , que apresentam um máximo em certas temperaturas, e essas temperaturas dependerão de N da seguinte forma¹:

$$T_c - T_{\max(A)}(N) \propto N^{-\theta}. \quad (1.14)$$

Podemos já colocar o sinal negativo, de modo que θ seja positivo, pois a temperatura do máximo aproximar-se-á de T_c . Além da temperatura ser deslocada, o valor do máximo, A_{\max} , irá divergir ou convergir em 0 em forma de potência de N , em que agora o EC de A também está no expoente:

$$A_{\max} \propto N^{\pm a\theta}. \quad (1.15)$$

Espera-se o mesmo comportamento em T_c :

$$A(N) \propto N^{a\theta}, \quad T = T_c. \quad (1.16)$$

O escalonamento de tamanho finito do MI surge do estudo de divisões de lado N da grelha infinita² e basicamente diz que os valores em temperaturas críticas de funções que apresentem EC vão tender para o valor em $N = \infty$ em forma de potência de N com expoente $\text{EC} \times \theta$, em que θ pode ser visto como o EC responsável pela deslocalização de T_c . As duas dimensões, $\theta = 1$ é o valor que se espera obter³.

¹Aqui é utilizado θ em vez do expoente tradicional $1/\nu$.

²Ver [4] pág. 714-717.

³[4], pág. 673, equação 6.2.3.

Capítulo 2

Autómato celular de Creutz [5]

Num autómato celular (AC), temos uma grelha de células em que cada célula se encontra num estado pertencente a um conjunto finito de estados. No caso presente, serão os dois estados de spin. Definindo uma regra de atualização do autómato (por exemplo, o spin no estado seguinte será o contrário do spin atual) e partindo de um estado da grelha inicial, aplica-se a regra a todas as células e assim obtém-se iterativamente todos os estados futuros. Usualmente, a regra de atualização é aplicada a todas as células ao mesmo tempo, de modo que o estado t de cada célula depende somente de estados $(t - 1)$ de células. Nesse caso, diz-se que o AC é síncrono.

No AC de Creutz, cada spin tem um momento associado, ao qual corresponde uma energia cinética. Os valores possíveis de energia cinética são os números inteiros

$$E_c = 0, 4, 8, \dots, 4(2^n - 1). \quad (2.1)$$

A energia cinética é 4 vezes um número que se representa em binário com, no máximo, n bits. Associada à troca de um spin existe uma variação de energia magnética. Um spin com valor inicial $S_{i,j}$ tem associado a ele 4 interações com um total de energia magnética de $E_1 = -S_{i,j}S_{viz}$, onde S_{viz} é a soma dos 4 spins vizinhos. Após trocar, a energia passa a $E_2 = S_{i,j}S_{viz}$, o que nos dá uma variação de energia magnética devido à troca de um spin de

$$\Delta E_m = E_2 - E_1 = 2S_{i,j}S_{viz}. \quad (2.2)$$

A regra de atualização de Creutz diz que se a variação de E_m puder ser compensada por uma variação contrária de E_c , de modo que a energia total E_t seja constante, então a troca de spin e a troca de energia são realizadas. E_c não poderá acomodar a mudança de energia sempre, já que está limitada nos valores que pode tomar. Considerando todas as configurações possíveis dos spins da vizinhança, os valores possíveis de ΔE_m são -8, -4, 0, 4, e 8, o que explica porque é que E_c assume também valores múltiplos de 4 e o que significa que os limites 0 e $4(2^n - 1)$ de E_c . Com esta regra, a energia total $E_t = E_m + E_c$ é constante e é definida pela orientação inicial dos spins e pela energia cinética inicial, que são ambos parâmetros da simulação.

O AC de Creutz é um autómato determinista, dado que a regra de atualização não envolve números aleatórios. Isto apresenta-se como uma vantagem em relação ao método mais comum de simulação do modelo de Ising, em que a regra é estocástica. No AC de Creutz só serão necessários números aleatórios para distribuir a energia cinética inicial pelos spins.

A regra de atualização é assíncrona: a regra é aplicada em “tabuleiro de xadrez”, primeiro às peças de uma cor do tabuleiro e depois às da outra cor, de modo que

as modificações feitas na primeira cor afetam a atualização da segunda cor. Devido a esta regra de atualização e às condições de fronteira periódicas, só poderemos utilizar valores pares de N , para que dois spins que sejam vizinhos por periodicidade da grelha não sejam atualizados ao mesmo tempo. Escolhe-se como posição inicial dos spins todos para cima, que corresponde a um dos mínimos de energia magnética. Com esta posição inicial, para que algo aconteça no AC, ou seja, para que alguma troca ocorra na primeira iteração, é necessário pelo menos 1 spin com energia cinética maior ou igual a 8. O limite superior da E_c terá de ser no mínimo 8 ($n = 2$).

A temperatura neste sistema não é um parâmetro fixo que se escolhe inicialmente. A temperatura vai-se alterar ao longo da simulação dado que E_c também se vai alterar. T terá de ser calculada através do valor médio de E_c por partícula:

$$\frac{\langle E_c \rangle}{N^2} = \frac{\sum_{E_c} E_c \exp(-4k/T)}{Z} = \frac{\sum_{k=0}^{2^n-1} 4k \exp(-4k/T)}{\sum_{k=0}^{2^n-1} \exp(-4k/T)}. \quad (2.3)$$

Dado que a função $T(\langle E_c \rangle / N^2)$ não está definida explicitamente, é necessário utilizar um método numérico para calcular T . Neste trabalho utilizou-se o método de Newton.

Como E_c só pode tomar valores discretos, T só vai tomar valores em certas regiões contínuas, não em pontos discretos porque T depende da média de $\langle E_c \rangle$. Para utilizar toda a área acessível à temperatura, e assim aumentar a densidade de pontos num gráfico de, por exemplo, $M(T)$, temos de cobrir todos os valores possíveis de energia cinética inicial. A divisão mais pequena de E_c é 4, e portanto precisa-se de aumentar E_c de 4 em 4. Como são necessários spins com $E_c = 8$ para a simulação funcionar, escolheu-se distribuir energia cinética inicial igual a 8 num certo número de spins e, para atingir os pontos intermédios de E_c , adiciona-se ou não um spin com $E_c = 4$, de modo que os parâmetros do nosso programa para E_c são "quantos spins têm $E_c = 8$ " e "adiciona-se um spin com $E_c = 4?$ ". O resto dos spins tem $E_c = 0$. Com esta simulação conseguimos calcular um ponto nos gráficos de $\langle M \rangle(T)$, $\langle M^2 \rangle(T)$... Aqui, "ponto" refere-se ao resultado de uma simulação, ou seja, às médias calculadas a partir de uma distribuição inicial de E_c aleatória, para um E_t .

2.1 Algoritmo em pseudo-código

Dados:

$lim_sup \leftarrow 4(2^n - 1)$

$K \leftarrow$ Matriz $N \times N$ com E_c de cada spin

$S \leftarrow$ Matriz $N \times N$ com $S = \pm 1$ de cada spin

$passos \leftarrow$ nº de aplicações da regra

```

para  $t$  de 1 até passos faça
  para cada "cor" do tabuleiro faça
    para cada spin  $i,j$  dessa cor faça
       $\Delta E_m = 2S_{i,j}S_{viz};$ 
      se  $0 \leq K_{i,j} - \Delta E_m \leq lim\_sup$  então
         $S_{i,j} \leftarrow -S_{i,j};$ 
         $K_{i,j} \leftarrow K_{i,j} - \Delta E_m;$ 
      fim
    fim
  fim
   $\langle E_c \rangle \leftarrow \langle E_c \rangle + soma(K);$ 
   $\langle M \rangle \leftarrow \langle M \rangle + soma(S);$ 
   $\langle M^2 \rangle \leftarrow \langle M^2 \rangle + soma(S)^2;$ 
  ... outras médias;
fim
 $\langle E_c \rangle \leftarrow \frac{\langle E_c \rangle}{passosN^2};$ 
 $\langle M \rangle \leftarrow \frac{\langle M \rangle}{passosN^2};$ 
 $\langle M^2 \rangle \leftarrow \frac{\langle M^2 \rangle}{passosN^4};$ 
 $\langle T \rangle \leftarrow$  Método_de_Newton( $\langle E_c \rangle$ );
retorna  $\langle T \rangle, \langle M \rangle, \dots$ 

```

Algoritmo 1: AC de Creutz

Dados: $\langle E_c \rangle, n$

```

 $\beta_1 \leftarrow 10 \langle E_c \rangle$  // Estimativa inicial de  $\beta = 1/T$  ;
 $\beta_0 \leftarrow \beta_1 + 1;$ 
 $tol \leftarrow 10^{-8};$ 
enquanto  $|\beta_1 - \beta_0| \geq tol$  faça
   $Z_0 \leftarrow 1; Z_1 \leftarrow 0; Z_2 \leftarrow 0;$ 
  para  $i$  de 1 até  $(2^n - 1)$  faça
    para  $k$  de 0 até 2 faça
       $Z_k \leftarrow Z_k + (4i)^k e^{-4i\beta_1}$  //  $Z_k = \sum_{i=0}^{(2^n-1)} (4i)^k e^{-4i/T};$ 
    fim
  fim
   $\beta_0 \leftarrow \beta_1;$ 
   $\beta_1 \leftarrow \beta_1 + \frac{Z_1 - Z_0 \langle E_c \rangle}{Z_2 - Z_1^2 / Z_0}$  //
   $\beta_{n+1} - \beta_n = \frac{\langle E_c \rangle(\beta_n) - \langle E_c \rangle(\beta_\infty)}{\frac{d\langle E_c \rangle}{d\beta}(\beta_n)} = \frac{\frac{Z_1}{Z}(\beta_n) - \langle E_c \rangle(\beta_\infty)}{\frac{Z_2}{Z}(\beta_n) - \frac{Z_1^2}{Z^2}(\beta_n)};$ 
fim
 $\langle T \rangle \leftarrow \frac{1}{\beta_1};$ 
retorna  $\langle T \rangle$ 

```

Algoritmo 2: Método de Newton

2.2 Resumo dos programas desenvolvidos

Para calcular estes pontos, três programas com utilizações e paralelizações diferentes foram desenvolvidos em C, fazendo uso de bibliotecas MPI.

Cálculo de um só ponto

Os autómatos celulares podem ser paralelizados de modo a poder utilizar vários processadores para o cálculo de um único ponto. Por exemplo, podemos dividir a grelha em duas partes iguais, esquerda e direita, e um processador é responsável por aplicar a regra em cada parte. Cada processador precisa de saber o spin das células vizinhas ao seu domínio, que são a primeira e a última colunas do domínio do outro processador, devido às fronteiras periódicas. Após cada iteração, os processadores têm de comunicar entre si e enviar as novas fronteiras. Um programa foi desenvolvido utilizando este princípio, mas a divisão é feita em quadrados iguais, de modo que só se podem utilizar 1, 4, 9, 16, ... processadores.

Cálculo de um ponto por E_t , para várias E_t .

Para a construção de gráficos como $\langle M \rangle(T)$, tem de ser calculada uma sequência de pontos para diferentes E_t . Além disso, pretende-se calcular valores médios quando T tem valores específicos ($T_c, T_{\max(A)}(N)$), mas T não é um parâmetro do programa, é um resultado da simulação, e, como nem todo o intervalo de temperaturas está acessível, não haverá sempre um E_t que resulte no T pretendido, de modo que se decidiu calcular vários pontos em redor de uma temperatura e depois interpolar, a partir de uma regressão adequada, os valores das médias a esse T . O programa desenvolvido distribui o mais igualmente possível os valores de E_t entre os processadores. Uma paralelização deste tipo é mais simples de realizar e acaba por ser mais rápida pois os processadores executam programas que não precisam de comunicar uns com os outros.

Cálculo de vários pontos por E_t , para várias E_t .

Durante o trabalho surgiu a necessidade de calcular a média de vários pontos com a mesma E_t , mas diferentes distribuições iniciais, ou seja, calcular $\langle M(t, \{\text{dist. ini.}\}) \rangle$ em vez de $\langle M(t) \rangle$. Para este efeito poderíamos executar o programa acima várias vezes e depois fazer a média, mas foi mais conveniente modificar o programa da seguinte forma: todos os processadores irão percorrer os mesmos E_t , e em cada um irão calcular um número x de pontos, de modo que o número total de pontos calculados para cada E_t será $x \times n^o$ processadores. Daqui em diante “repetições” referir-se-á a este número total de pontos.

Num outro programa desenvolvido, é possível visualizar a matriz de spins e a matriz de E_c durante uma simulação. O programa utiliza para este efeito OpenGL e GLUT.

Capítulo 3

Resultados e análise

3.1 Efeitos do número de passos e número de bits

3.1.1 T , M , ao longo do tempo

Os gráficos da Fig. 3.1.1 mostram a evolução de T e M e das suas respetivas médias, para $N = 20$ e com 3 bits, durante 2×10^4 iterações. Pode-se separar a oscilação observada em duas componentes principais. Uma, de uma escala em iterações menor, mas sempre presente e de amplitude constante, que faz com que T e M se encontrem, na sua maioria, nos intervalos $2 < T < 2.4$ e $0.7 < M < 0.9$. Esta deve-se à constante aplicação da regra e à troca de spins. O período muito curto desta oscilação em comparação com a escala do gráfico forma, visualmente, uma banda de magnetização, que por sua vez sofre oscilações de uma escala maior, em termos da sua amplitude em M , e do período das suas ocorrências. Enquanto as primeiras oscilações estão sempre presentes, estas segundas oscilações não estão presentes na Fig. 3.1.1, quando $T < T_c$, aparecem como quedas bruscas mas curtas de M na Fig. 3.1.1, quando $T \approx T_c$, e, na Fig. 3.1.1, quando $T > T_c$, quebram a banda de M . Estas são as oscilações responsáveis pela queda de $\langle M \rangle$ e, consequentemente, pela transição de fase.

3.1.2 $\langle T \rangle$, $\langle M \rangle$, $\langle M^2 \rangle$, para diferentes números de passos

Não se observam variações significativas entre os resultados para diferentes números totais de passos nos gráficos das Figs. 3.1.2, de $\langle T \rangle$, e 3.1.2, de $\langle M^2 \rangle$. No gráfico da Fig. 3.1.2, o efeito do nº de passos é mais relevante. Observa-se que, quanto maior o nº de passos, menor é a temperatura onde M abandona a linha superior e começa a oscilar à volta de 0. Para um menor nº de passos, é mais provável existirem pontos que, na sua evolução temporal, ainda não chegaram a sofrer grandes variações na magnetização, como aquelas que se observam na Fig. 3.1.1. Isto significa que a estimativa de $T_c(N)$ não vai ser centrada, mas pode tender para o valor correto à medida que aumentamos o nº de passos. Não se consegue obter um bom valor para $T_c(N)$, mas o que se está a tentar determinar com $T_c(N)$ é o EC θ e, se, para um igual nº de passos, as diferenças $T_c - T_c(N)$ forem todas ampliadas por um fator de multiplicação comum, vão continuar a obedecer ao mesmo expoente. Contudo, outros tipos de desvios à diferença esperada não obedecerão à mesma relação de expoente crítico.

Observa-se uma grande oscilação de M na zona de transição, em $T = T_c(N)$. As simulações em T próximo de $T_c(N)$, para o mesmo E_t , dependem muito de quais spins têm inicialmente E_c . Para remover a dependência na configuração inicial, decidiu-se

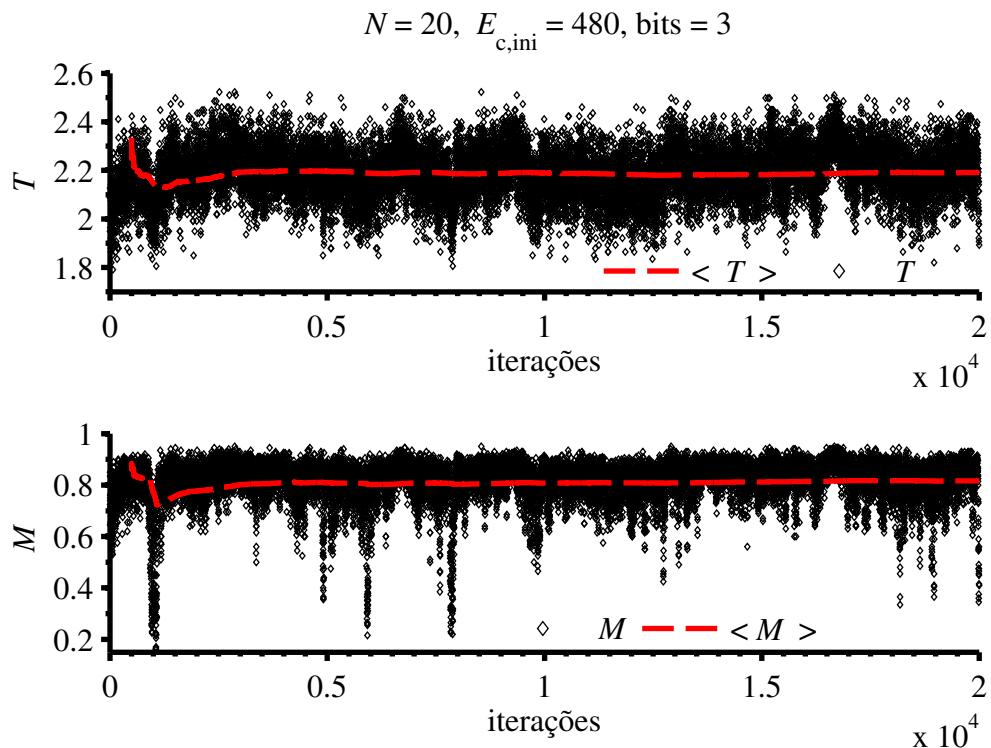


Figura 3.1: Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 2.2$.

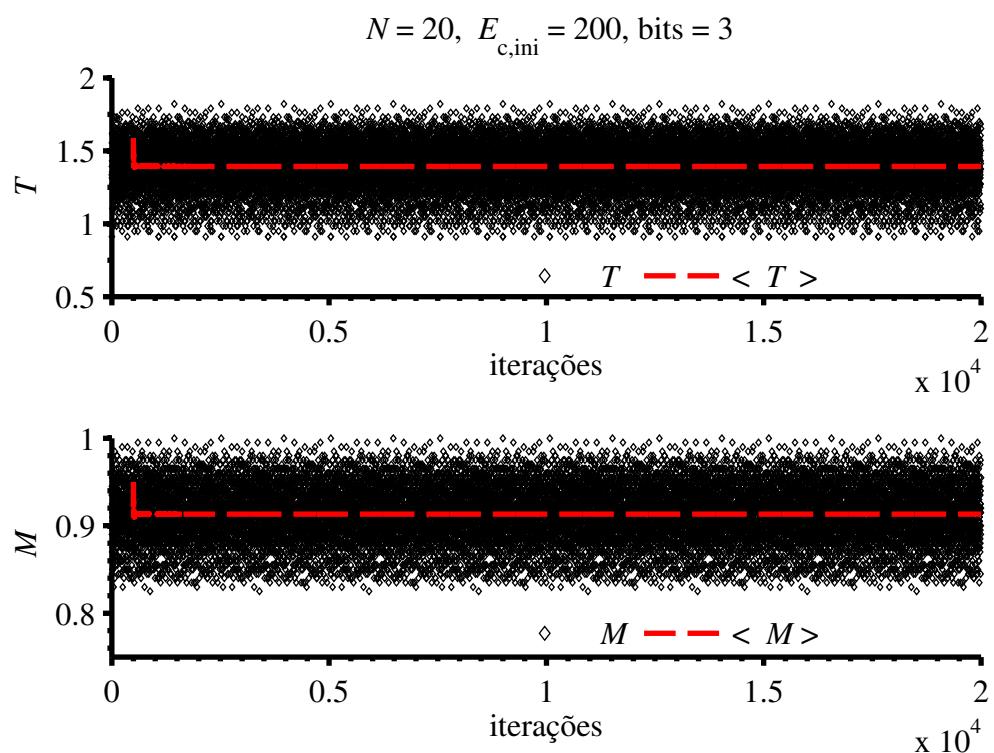


Figura 3.2: Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 1.4$.

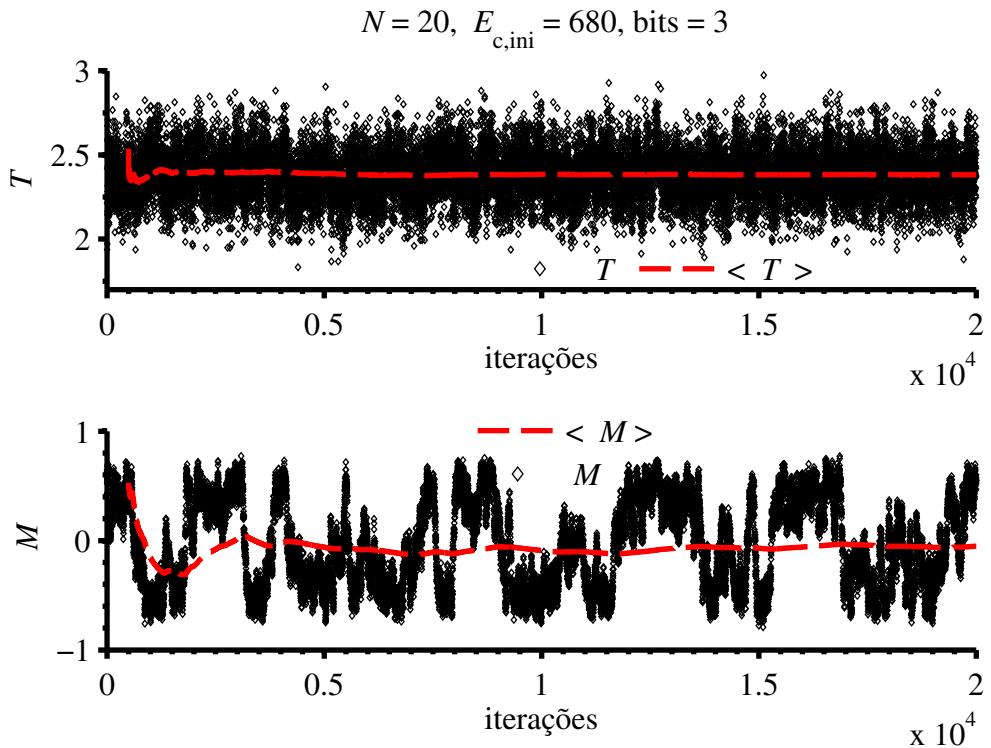


Figura 3.3: Evolução temporal de T e M quando $\langle T \rangle \approx 2.4$.

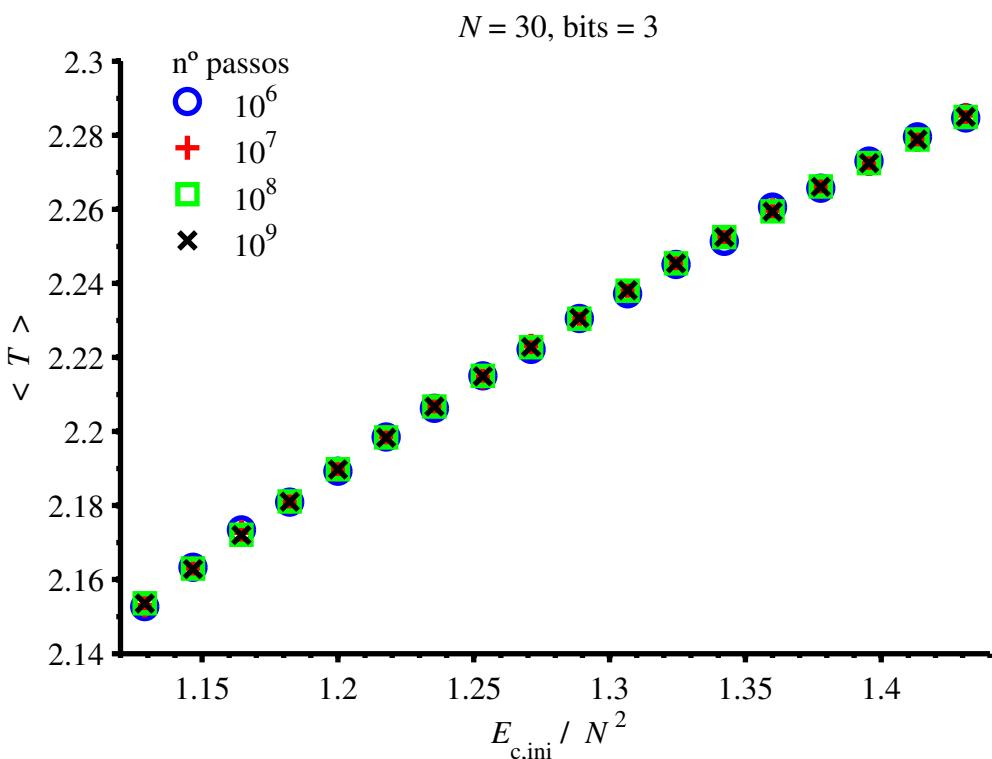


Figura 3.4: Média de T para diferentes números totais de iterações.

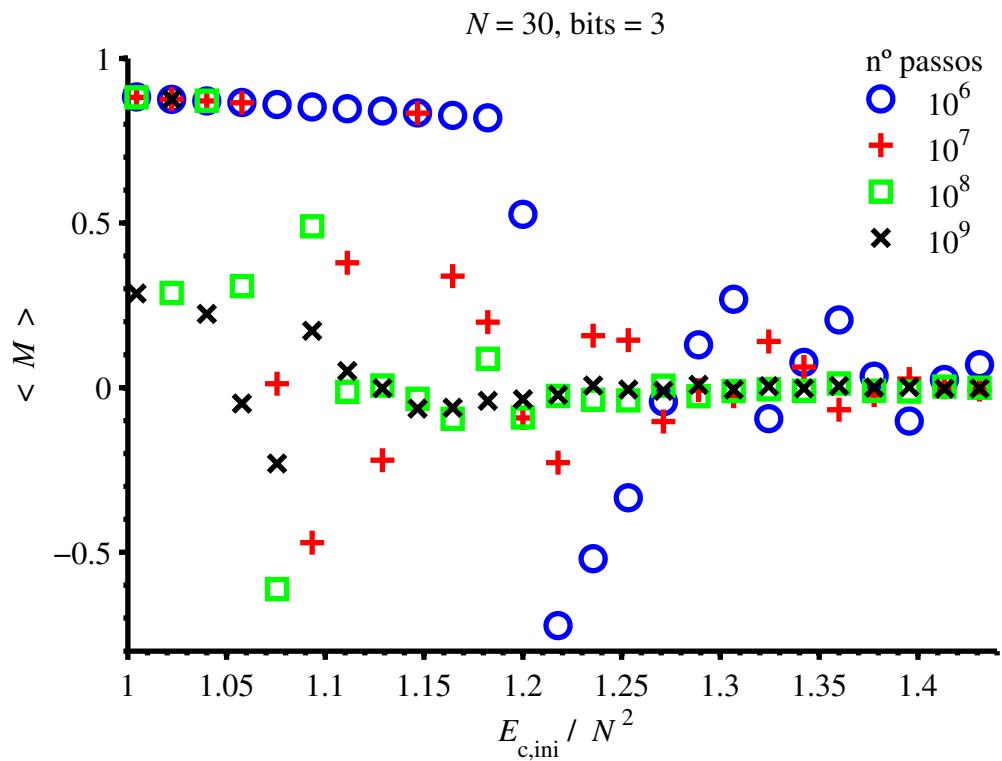


Figura 3.5: Média de M para diferentes números totais de iterações.

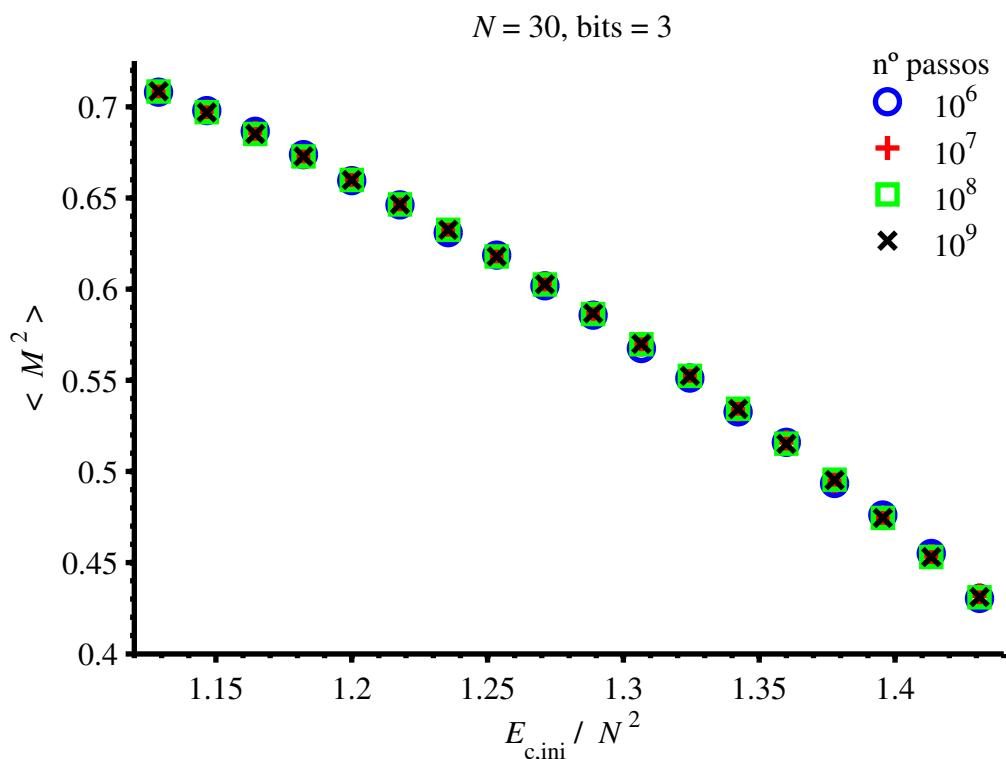


Figura 3.6: Média de M^2 para diferentes números totais de iterações.

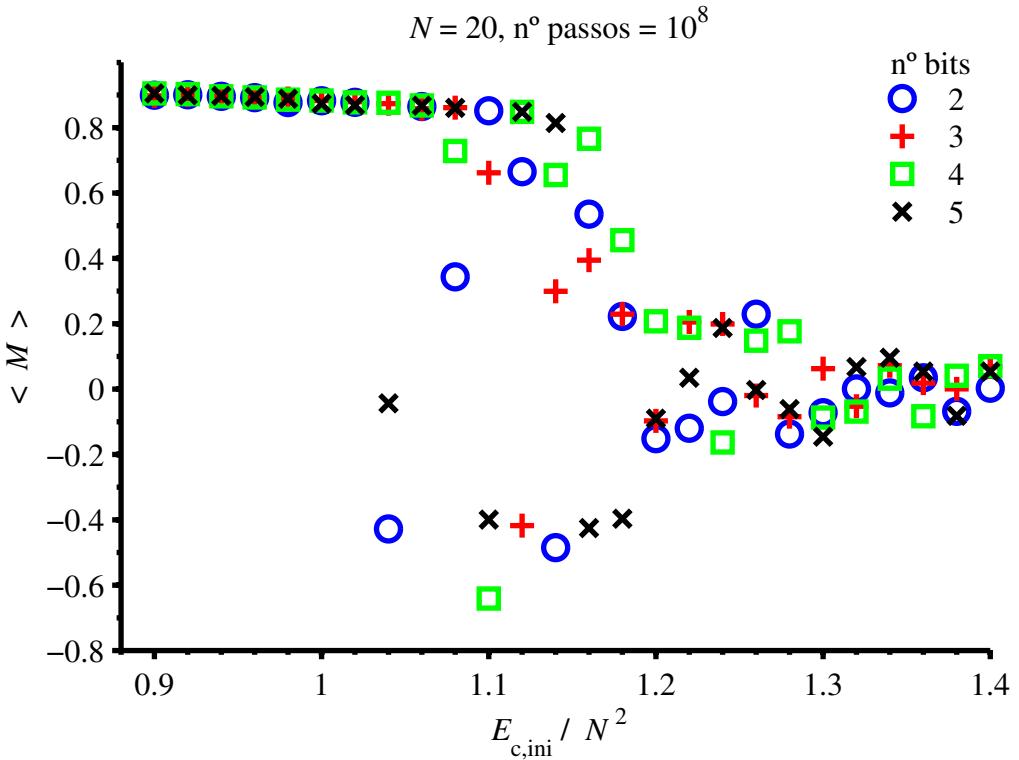


Figura 3.7: Média de M para diferentes limites superiores de E_c .

calcular vários pontos para um mesmo E_t e depois calcular a sua média. Estes resultados apresentam-se na Secção 3.2.3. Escolheu-se utilizar 10^8 passos para todas as simulações como compromisso entre precisão e tempo de simulação.

3.1.3 $\langle T \rangle, \langle M \rangle, \langle M^2 \rangle$, para diferentes números de bits

Não se encontram diferenças entre resultados para diferentes números de bits na Fig. 3.7. Nas Figs. 3.8 e 3.9 existem 2 linhas, uma de 2 bits e outra dos restantes, o que significa que o limite superior de 12 ($n = 2$) está a ser atingido, e que por vezes se tenta ultrapassar este limite. Será então melhor utilizar n^o bits ≥ 2 . Escolheu-se utilizar 3 bits. Todas as simulações a partir daqui utilizaram este n^o de bits, o que significa um limite superior para E_c de 28. Na verdade, embora não se fosse observar nenhuma diferença com um n^o de bits maior, pois é extremamente improvável um spin conseguir um E_c superior a 28, esta não foi a escolha mais lógica. Idealmente, não se utilizaria limite superior para E_c . Por um lado, não existe nenhuma razão física para que, neste modelo, um spin não possa tomar qualquer valor de E_c acima de um limite. Por outro, a remoção do limite superior aceleraria a simulação, pois seria uma verificação a menos que teria de ser feita na regra de atualização do Algoritmo 1. Limitar E_c a um certo número de bits faz sentido se se utilizar no programa otimizações ao nível dos bits. Com 3 bits para E_c , só são precisos 4 bits para representar o estado de um spin. Se se souber utilizar uma linguagem de programação de modo a tirar proveito disto, diminuindo a utilização de memória e acelerando o programa, limitar E_c apresenta-se como uma vantagem. Otimizações deste tipo não foram realizadas nos programas desenvolvidos. Aliás, cada spin está a utilizar 8 bytes(!) para representar o seu estado, 4 bytes para E_c , o que significa que se poderia ter definido o limite de E_c como sendo

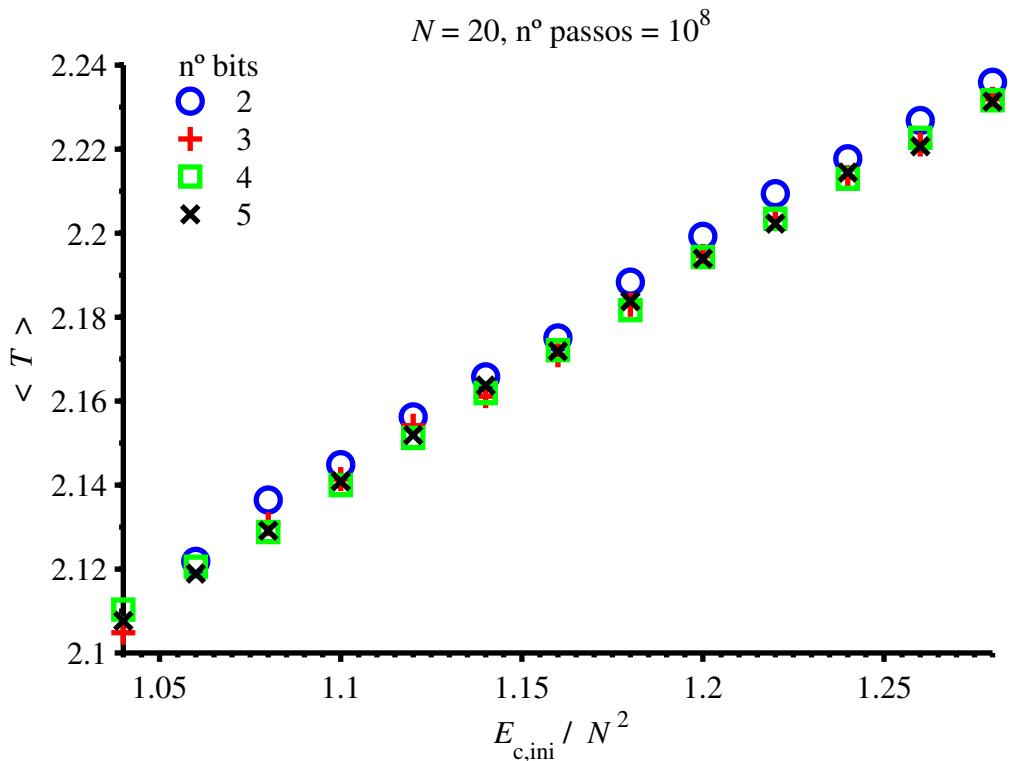


Figura 3.8: Média de T para diferentes limites superiores de E_c .

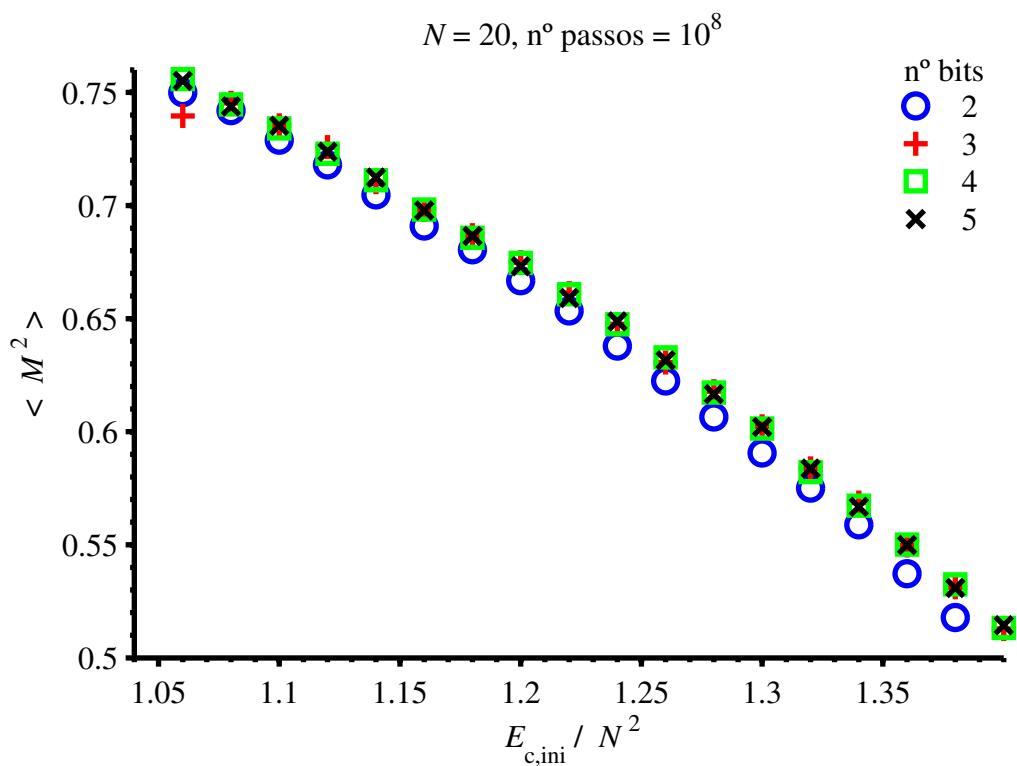


Figura 3.9: Média de M^2 para diferentes limites superiores de E_c .

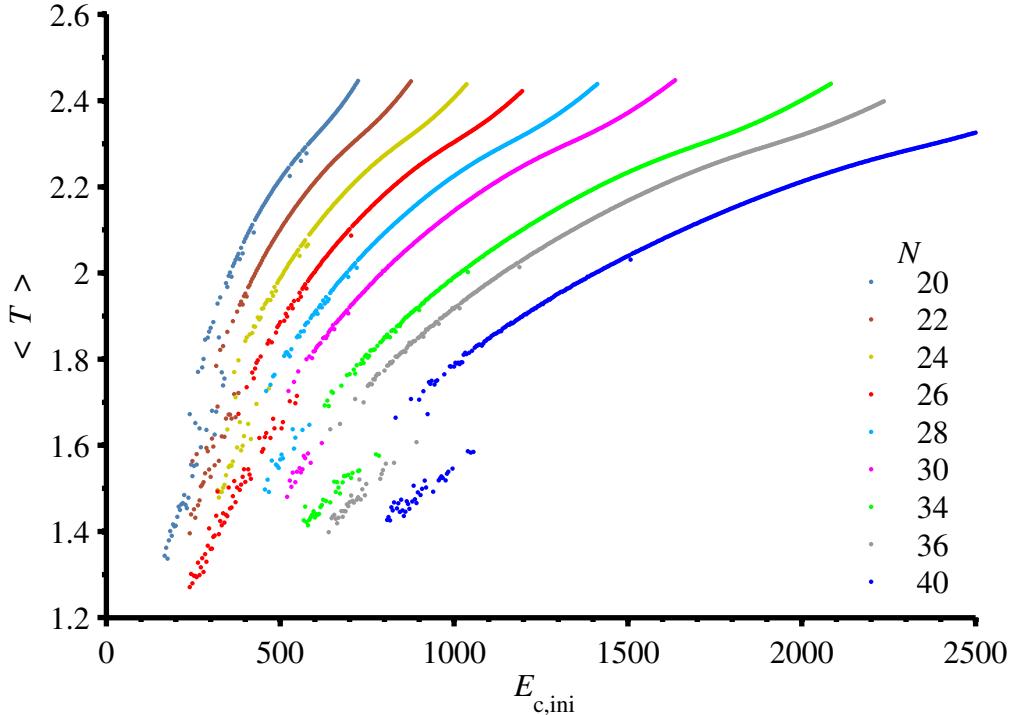


Figura 3.10: Média de T em função de E_c inicial para diferentes N .

o inteiro máximo representável com 4 bytes, ou então remover o limite superior sem algum receio de alguma vez a E_c atingir este máximo.

3.2 Estudo dos valores médios e de efeitos de tamanho

3.2.1 $\langle T \rangle(E_t, N)$

Na Fig. 3.10, para cada tamanho, observa-se uma transição de uma linha, em baixo, que acaba em $T \approx 1.6$, para uma linha, em cima, que começa em $T \approx 1.8$. Além disso, cada linha da zona inferior parece pertencer à linha superior de um outro N maior, isto é, as duas partes, com origens em simulações de tamanhos diferentes, parecem pertencer a simulações com um tamanho comum. O que está a acontecer é que a energia cinética está muito dispersa pelos spins, isto é, há poucos grupos de spins com E_c que estejam a uma distância suficientemente pequena para se conseguirem influenciar, de modo que a maior parte de spins vão estar num ciclo periódico em que só participam um número reduzido de spins vizinhos. À medida que se aumenta E_t , os ciclos vão abranger uma área cada vez maior, até que estas áreas vão conseguir comunicar todas entre si, formando uma sequência de estados de spin muito mais complexa, que resulta na linha superior observada. Esta hipótese é apoiada por observações de simulações com o programa de visualização, onde se observa a periodicidade nos estados de spin e as “ilhas” de E_c , isoladas umas das outras. Observando atentamente, a periodicidade manifesta-se na Fig. 3.1.1 dos gráficos de evolução temporal, onde $\langle T \rangle$ cai no ramo de baixo. As modificações realizadas ao algoritmo no Capítulo 5 também sugerem esta hipótese. Parece estar explicado porque é que se observa uma separação, mas o facto

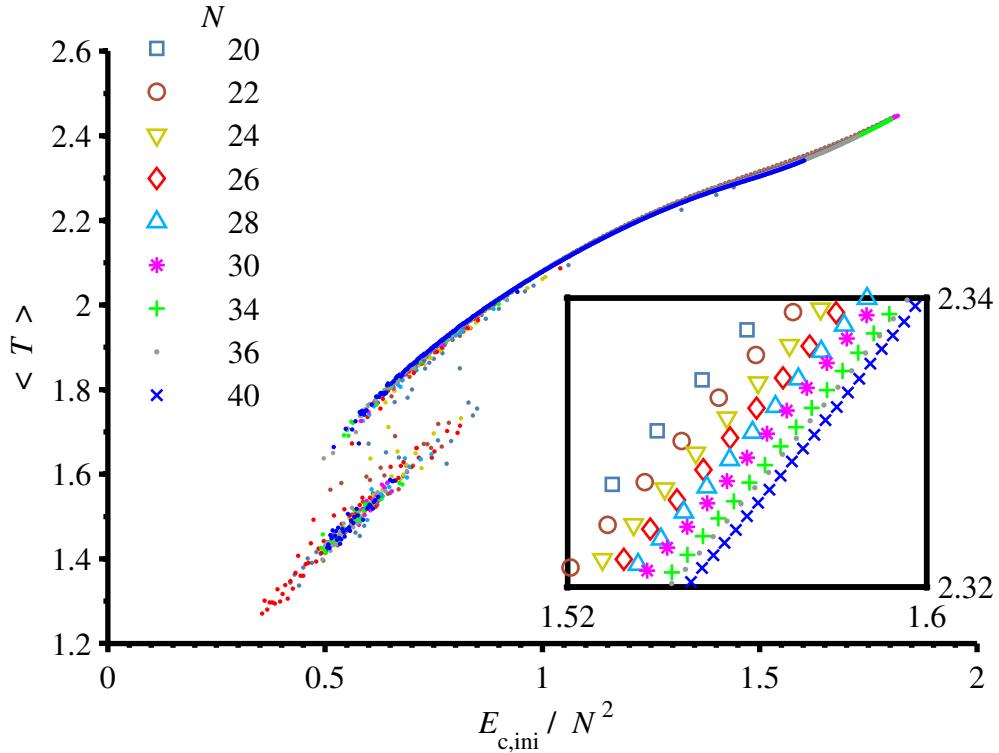


Figura 3.11: Média de T em função de E_c/N^2 inicial para diferentes N .

de cada linha de baixo coincidir com uma linha de cima de um tamanho maior sugere que há algo mais a dizer sobre esta transição.

3.2.2 $\langle T \rangle(E_t/N^2)$

A Fig. 3.2.2 revela que T depende de N por N^{-2} , aproximadamente, o que é muito útil para, dado $T(E_t) = T_c$ de um tamanho, determinar os E_t que devem ser utilizados para outro tamanho para coincidir com um intervalo de temperaturas perto de T_c , embora seja perto de T_c onde se observa uma maior variação com o tamanho. Observa-se também uma mudança no declive perto de T_c , que corresponde a um mínimo na derivada. Esta maior variação era de esperar, dado que $C = dE/dT$, que é o inverso da derivada do gráfico em 3.2.2, é máximo em T_c quando $N = \infty$. A capacidade calorífica vai ser calculada a partir da relação $T(E_t/N^2)$.

3.2.3 $\langle T \rangle, \langle M \rangle$ de muitos ensaios

Como já se observou na escolha de um nº de passos, a magnetização, perto de $T_c(N)$, depende muito da distribuição inicial de E_c , o que significa que, para obter um bom valor de $\langle M \rangle$, tem de se fazer uma média nas distribuições iniciais também, ou seja, calcular $\langle M(t, \{\text{dist. ini.}\}) \rangle$.

Nos gráficos das Figs. 3.2.3, 3.2.3 e 3.2.3 estão representados os resultados de $\langle T \rangle, \langle M \rangle$ e $\langle M^2 \rangle$ de simulações com $N = 24, 400$ repetições por E_t . Na Fig. 3.2.3, além de ser visível a zona já estudada em $T \approx 1.7$, existem diferentes linhas na zona acima dessa temperatura, sendo a linha vermelha aquela onde convergiu um número significativamente maior de pontos. Na Fig. 3.2.3 vê-se que os pontos pretos nunca

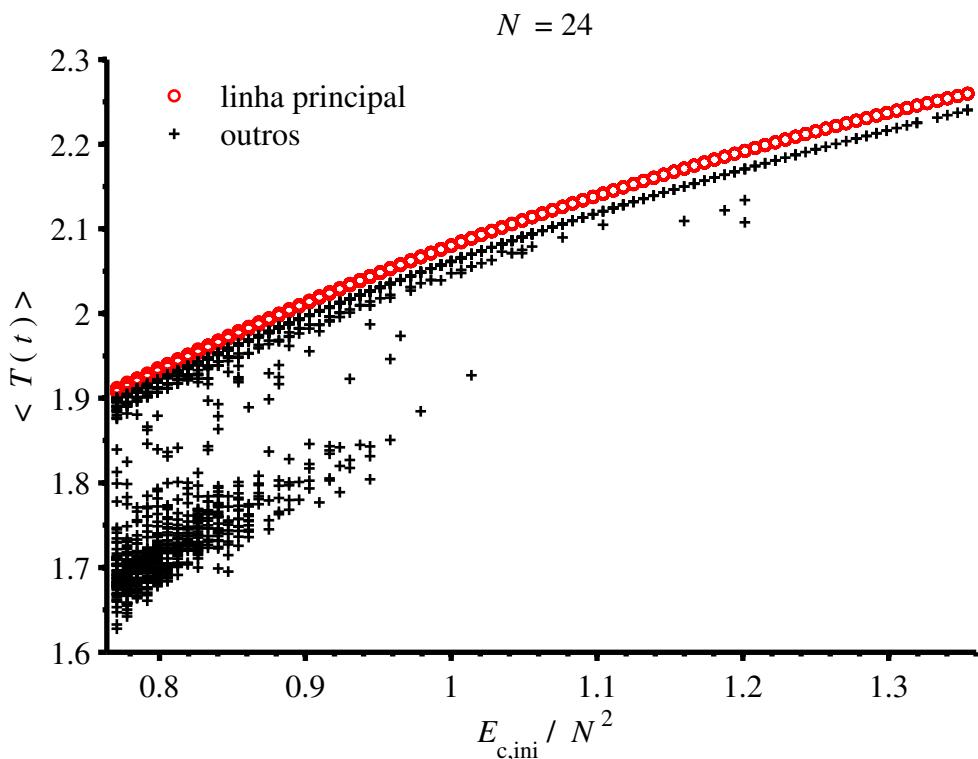


Figura 3.12: $\langle T \rangle$ de 400 repetições.

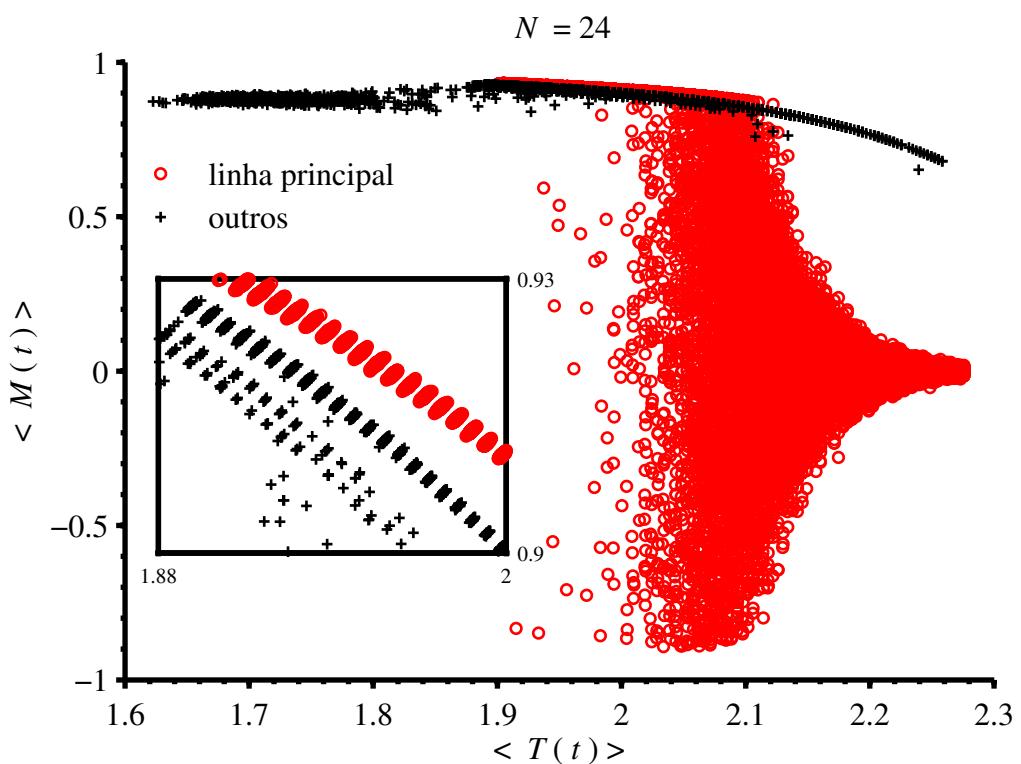


Figura 3.13: $\langle M \rangle$ de 400 repetições.

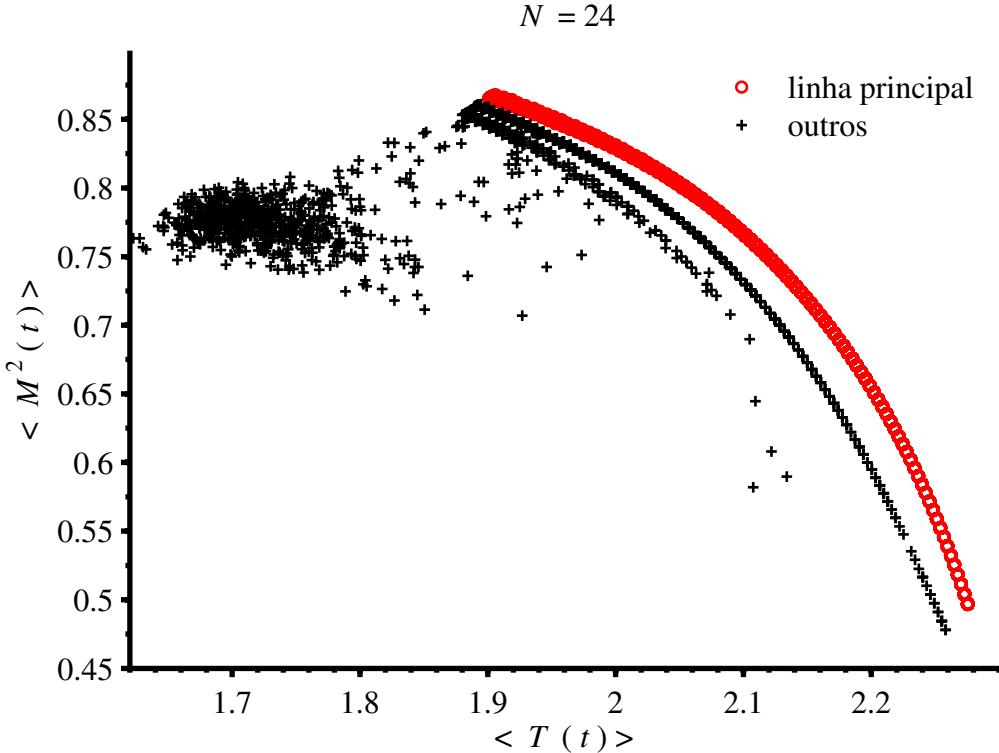


Figura 3.14: $\langle M^2 \rangle$ de 400 repetições.

abandonam uma zona superior de magnetização, enquanto os vermelhos caem e oscilam à volta do 0. Os pontos pretos formam várias linhas abaixo da linha superior vermelha, cada linha com menos pontos que a sua superior. A densidade de pontos das linhas inferiores (pontos pretos) diminui quando se aumenta E_t .

Note-se que não existem pontos entre as várias linhas, o que quer dizer que não ocorre o caso de uma simulação assumir valores de (T, M) pertencentes a uma linha durante algumas iterações e depois mudar o seu comportamento e passar para (T, M) de uma outra linha, de modo que no final o ponto se encontra numa posição média entre dois pontos de duas linhas vizinhas. Como se trata de um processo determinista, alguns estados iniciais resultam em pontos de uma linha e outros estados iniciais nos de outra linha. Isto quer dizer também que cada ponto de uma linha assume estados exclusivos dele. Estes conjuntos de estados nunca comunicam entre si, ou seja, com a regra de atualização presente, um estado de um conjunto nunca resultará num estado de outro conjunto.

Não se sabe quais as peculiaridades de cada conjunto de estados que os faz serem diferentes e convergirem em pontos de (T, M) diferentes, mas não faria sentido considerar para a média as várias linhas de pontos quando revelam ter naturezas diferentes. Devido ao seu maior número, à queda na magnetização que apresentam e aos bons resultados que forneceram, os pontos vermelhos destacaram-se e foram os escolhidos. As médias de M e T dos pontos vermelhos encontram-se na Fig. 3.2.3.

Os resultados de $\langle T \rangle$ e $\langle M^2 \rangle$ são muito similares. Para N maiores, o nº de pontos nas linhas pretas reduz-se.

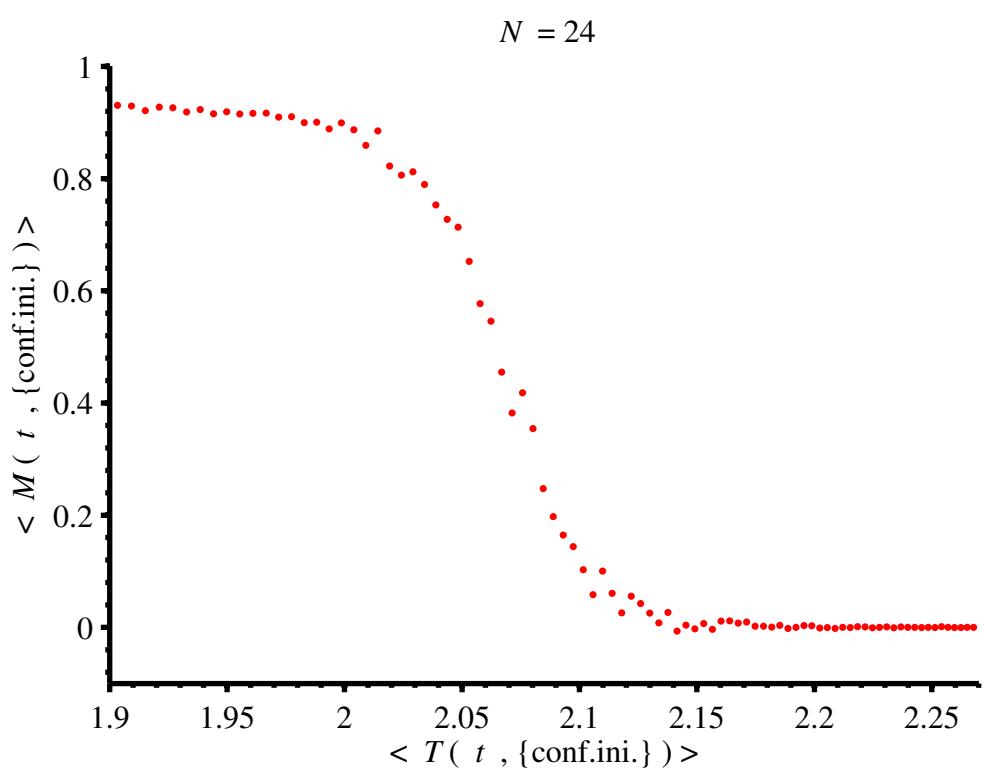


Figura 3.15: $\langle M(t, \{conf. ini.\}) \rangle$ dos pontos vermelhos da Fig. 3.2.3.

Capítulo 4

Determinação da temperatura e expoentes críticos

Agora analisar-se-á o cumulante de Binder e calcular-se-ão a T_c e os EC. O cálculo dos expoentes críticos depende do conhecimento de T_c , e também é necessário conhecer θ para obter os outros expoentes. Podem-se utilizar os valores determinados de T_c e θ para os cálculos que dependem deles, mas também se podem utilizar os valores já conhecidos teoricamente. Se se utilizar os valores teóricos, o erro apresentado nos cálculos dependentes provém só do método usado. Dado que, neste caso, os valores teóricos já são conhecidos, é mais interessante saber se estes métodos conseguem obter bons resultados do que saber o valor dos expoentes determinados exclusivamente a partir da experiência. Por isso, escolheu-se utilizar sempre os valores teóricos para cálculos dependentes. É mais importante estudar os métodos em si pois eles podem ser úteis em dimensões maiores, especificamente a 3D, onde não há resultados teóricos, exceto para θ . Isto acaba por ser uma motivação acrescida deste trabalho.

4.1 Determinação de T_c

4.1.1 Cumulante de Binder

Calcularam-se vários pontos do cumulante de Binder perto de T_c para vários N , com 50 repetições por E_t . No gráfico dos resultados, na Fig. 4.1, pode-se ver que as interseções das curvas ocorrem todas numa zona à esquerda de T_c . Vê-se que as curvas estão ordenadas por tamanho, de modo que, para maior N , as curvas têm um maior declive (em valor absoluto) na zona de interseção, o que concorda com o limite esperado para o cumulante quando $N = \infty$, cujo valor é $2/3$ à esquerda de T_c e 0 à direita, com declive (-)infinito em T_c . Conclui-se que não se obterá uma estimativa centrada para T_c calculando a média das interseções. Por isso, as interseções serão estudadas melhor de seguida de modo a obter um método para a determinação de T_c .

Analizando melhor os pontos de interseção, que se mostram na Fig. 4.1.1, obtidos através do cruzamento de linhas polinomiais de ajuste, vê-se que os pontos estão ordenados por tamanhos, devido à organização por tamanhos das linhas. Por exemplo, o ponto no extremo superior esquerdo corresponde à interseção dos dois N mais pequenos, 20 e 24, enquanto na outra ponta se intersetam 60 e 80. Se nos centrarmos nos pontos sobre uma linha N' , vemos que, à medida que aumentamos o tamanho N da linha que a intersetava, aproximamo-nos cada vez mais de T_c . Os pontos de in-

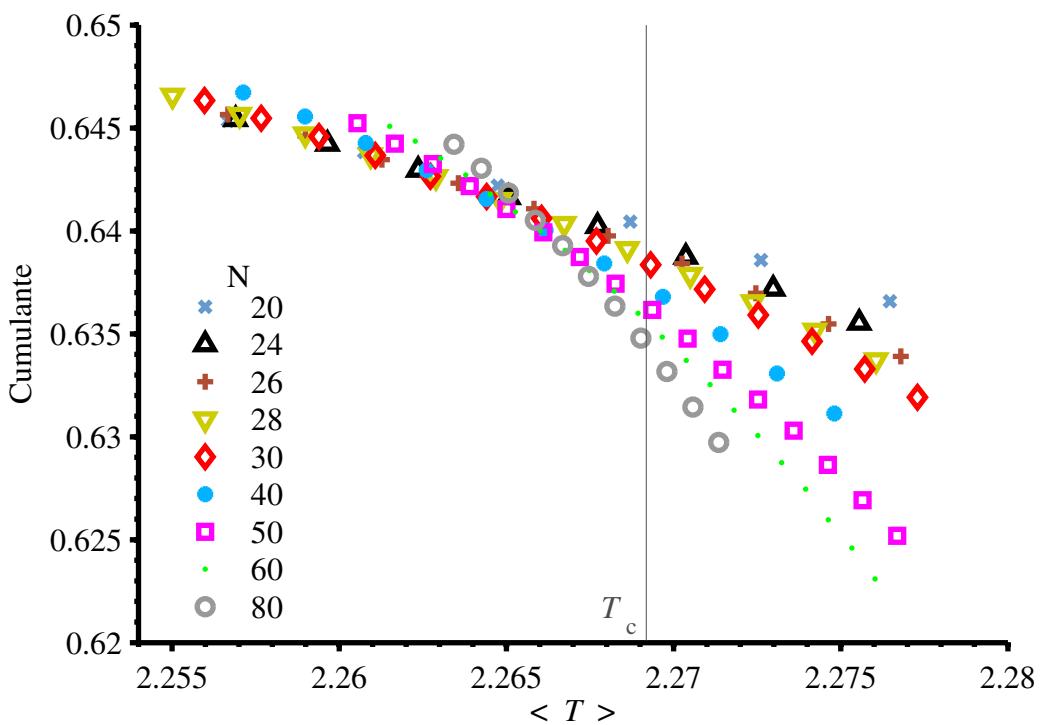


Figura 4.1: Pontos do cumulante perto de T_c para vários N .

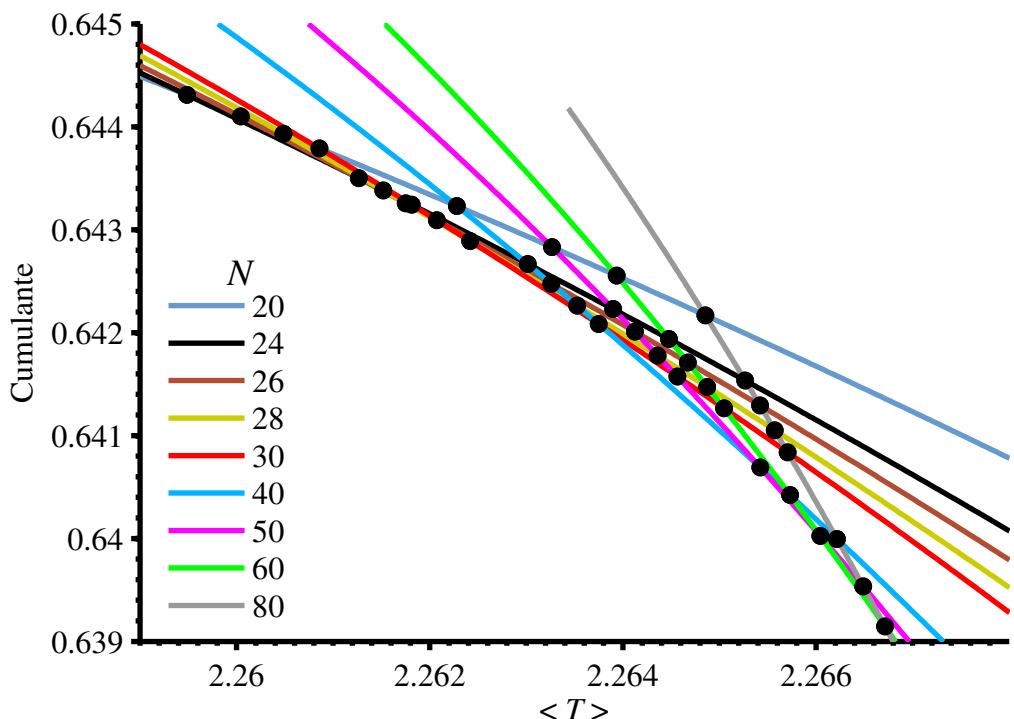


Figura 4.2: Polinómios interpoladores dos pontos da Fig. 4.1 e pontos de interseção.

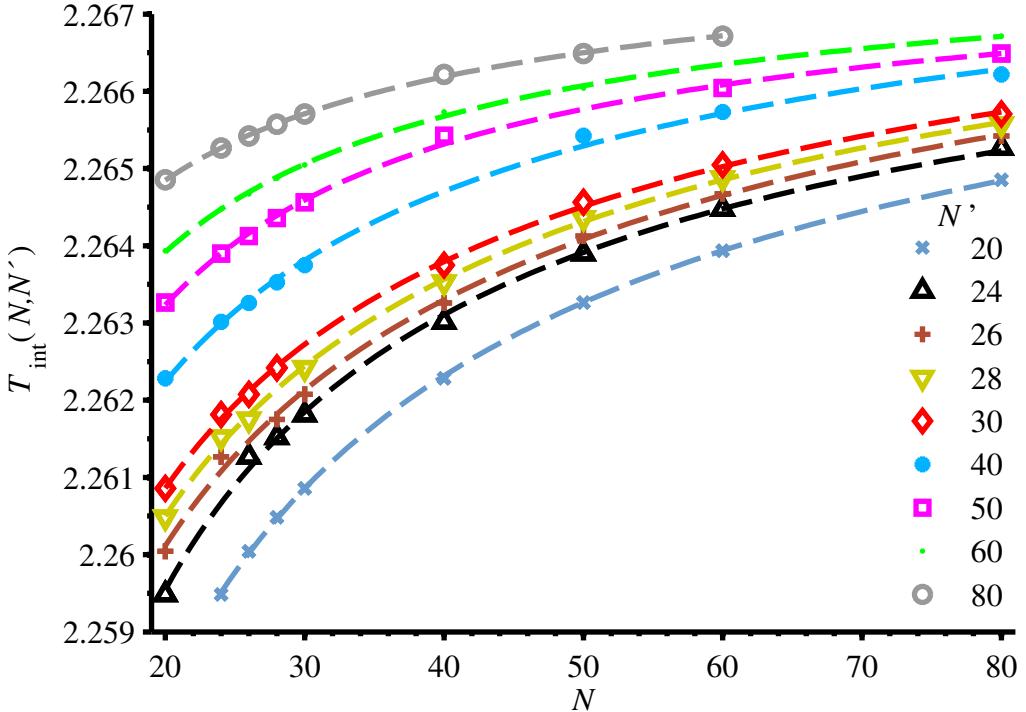


Figura 4.3: Ajustes dos pontos de interseção do cumulante para cada N' .

terseção apresentam uma dependência nos dois tamanhos que os definem, N e N' . Se essa dependência for descoberta, então podemos tentar ajustar estes pontos de modo a estimar T_c . Considerando N' fixo, as temperaturas de interseção parecem obedecer a uma relação do mesmo tipo da relação de $T_c(N)$ e do expoente θ , ou seja:

$$T_c - T_{N'}(N) \propto N^b. \quad (4.1)$$

Os ajustes dos pontos de interseção com esta expressão encontram-se na Fig. 4.1.1. Para este efeito, linearizou-se a expressão para diversos b , utilizando N^b como abcissa e $T_{N'}(N)$ como ordenada, de modo a obter um gráfico do coeficiente de determinação $r^2(b)$. Este gráfico apresenta um maximizante que é determinado. Utilizando este valor para uma nova linearização, determinou-se o declive e a ordenada na origem, T_c . A forma mais geral da expressão será

$$T_c - T_{\text{inter}}(N, N') = A(N')N^{b(N')} = A(N)N'^{b(N)}. \quad (4.2)$$

Pode-se então obter uma estimativa por N para T_c e depois fazer a média de todas elas. As interseções entre linhas de N vizinhos foram ignoradas, já que, para N muito próximos, a diferença de declives é mínima, de modo que o erro do ponto de interseção é máximo. Obteve-se o valor de 2.269167 ± 0.000046 em comparação com o valor exato de $2.269185\dots$. A utilização de um grande número de N (9) e valores maiores de N (80) permitiu obter um valor muito preciso.

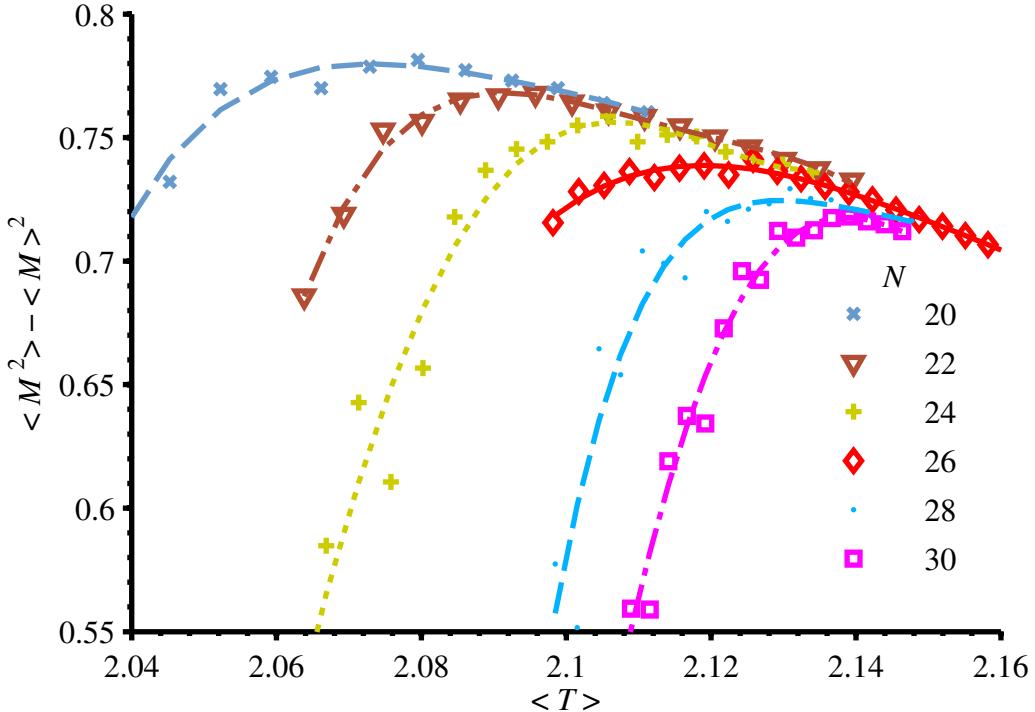


Figura 4.4: Pontos de variância de M e respetivas interpolações de quarta ordem.

4.2 Determinação de expoentes críticos

4.2.1 Determinação de θ

por $\text{Var}(M)$:

Para identificar $T_c(N)$, assumiu-se que é em $T_c(N)$ que a variância de M , $\text{Var}(M)$, é máxima. Para calcular $\text{Var}(M) = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ com precisão, teve-se de calcular a média de M no tempo e em configurações iniciais. Calcularam-se 400 repetições para cada N . Os resultados de $\text{Var}(M)$ encontram-se na Fig. 4.4. Utilizaram-se interpolações por polinómio de 4º grau para determinar a posição do máximo das curvas. Tendo $T_c(N)$, linearizou-se a expressão (1.14), como se mostra na Fig. 4.2.1, e obteve-se um valor de θ de 1.005 ± 0.008 , que concorda com o valor esperado de 1.

por C :

A temperatura do máximo de C deverá obedecer à relação (1.14), que também permitirá estimar θ . Como o sistema tem E_t constante, C pode ser calculado a partir da definição, que, por diferenças finitas, se pode aproximar por

$$C := \frac{dE}{dT} \approx \frac{\Delta E_t}{T(i+1) - T(i-1)}, \quad (4.3)$$

para um conjunto de pontos com espaçamento constante em E_t , que é sempre o caso presente. Os resultados obtidos para a capacidade encontram-se na Fig. 4.6. Desta vez, os máximos encontram-se acima de T_c e aproximam-se desta à medida que N aumenta. Calculou-se θ da mesma forma que para $\text{Var}(M)$, como se mostra no gráfico da esquerda na Fig. 4.2.1, e obteve-se 1.019 ± 0.011 .

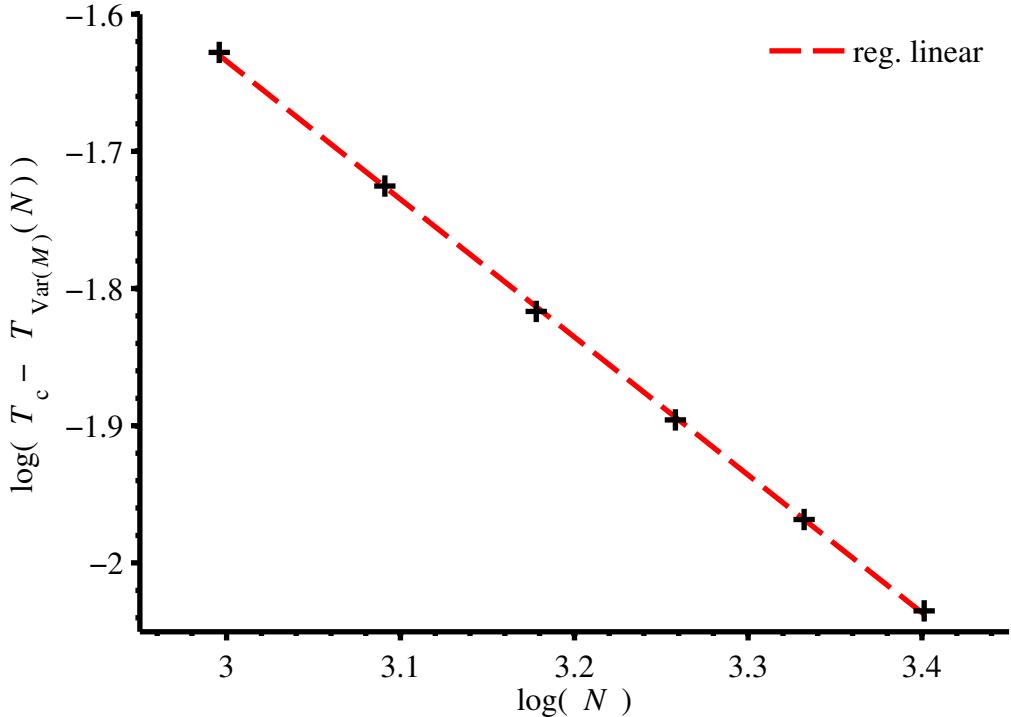


Figura 4.5: Determinação de θ por T do máximo de $\text{Var}(M)$ de vários N .

4.2.2 Exponente de e^C

em $T_{\max(C)}$:

Através dos valores dos máximos na Fig. 4.6, aplicando logaritmos na expressão (1.15) e linearizando, tal como se mostra no gráfico da direita na Fig. 4.2.1, obtém-se um valor de $\alpha' = 0.386 \pm 0.003$, bastante afastado do valor esperado de 0.4945.

em T_c :

Aplicando logaritmos na expressão (1.16) e linearizando, tal como se mostra na Fig. 4.2.2, obtém-se um valor para o expoente de e^C de $\alpha' = 0.4788 \pm 0.0009$, que está mais de acordo com o esperado. A linearidade do gráfico confirma o comportamento de expoente crítico de e^C , e, como consequência, o comportamento logarítmico de C .

4.2.3 Exponente de M em T_c :

O expoente de M , β , não poderá ser estimado a partir de $\langle M \rangle$, pois, para T próximo de T_c e para todos os N considerados aqui, o valor de M oscila à volta de 0, e, por isso, o valor de M interpolado em T_c não apresenta um comportamento do tipo EC.

Verificou-se se médias do tipo $\langle |M|^k \rangle^{1/k}$, $k = 1, 2, 3, \dots$ apresentam comportamento de expoente crítico. Calculando até $k = 10$, observa-se uma ordenação decrescente dos expoentes críticos com k , mas atravessando o valor 0.125, o que significa que, se existir uma relação bem definida entre β e k , não será uma relação assintótica como a de θ . Calcularam-se $\langle M(t, \{\text{conf. ini.}\})^k \rangle^{1/k}$ para k de 2 a 296, espaçados de 6 (2,8,14...), para $N = \{20, 22, 24, 26, 28, 30, 40, 50\}$, 160 repetições, e, a partir daí, calcularam-se os β correspondentes de cada k , tal como se mostra na Fig. 4.9.

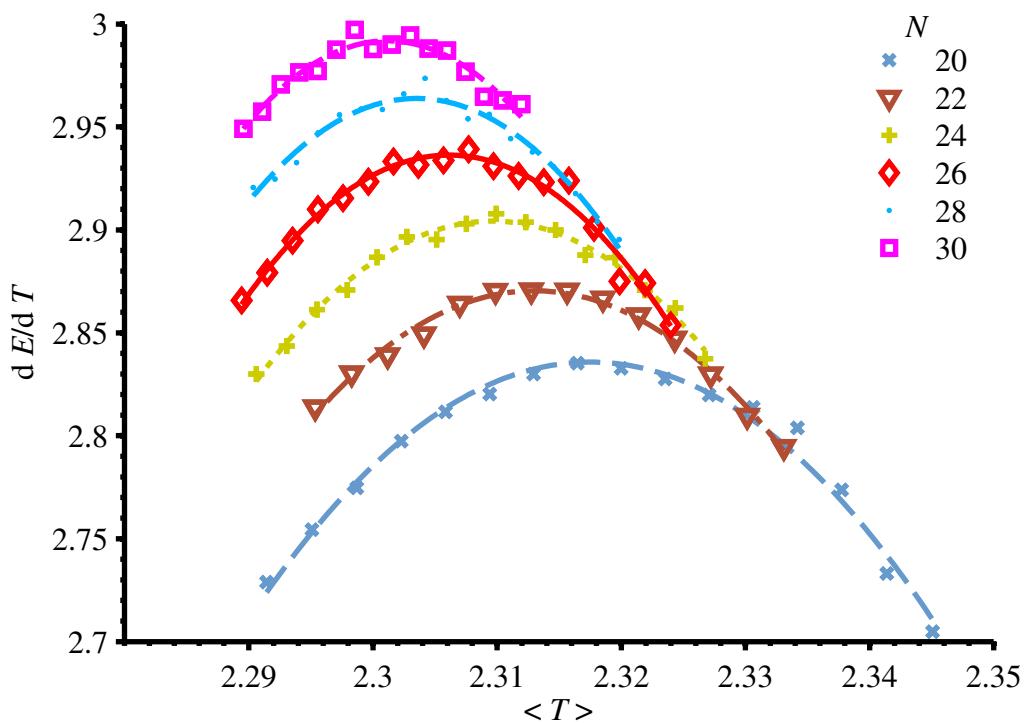


Figura 4.6: Pontos de capacidade calorífica e respetivas interpolações de 2ºgrau.

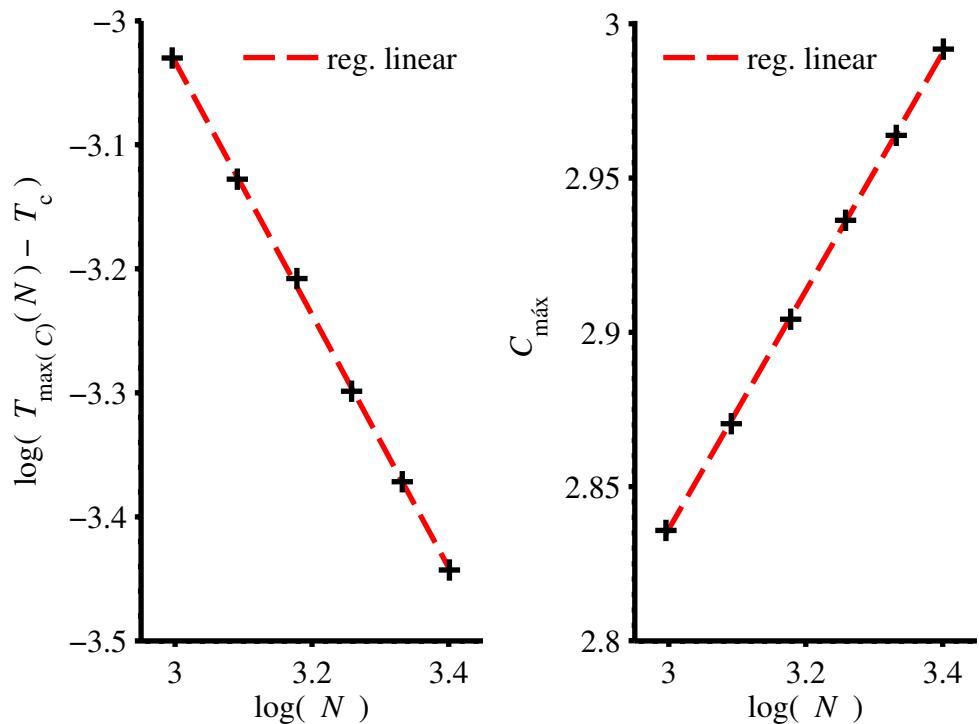


Figura 4.7: Determinação de θ e do EC de e^C pelos pontos $(T_{\max(C)}, C_{\max})$ de vários N .

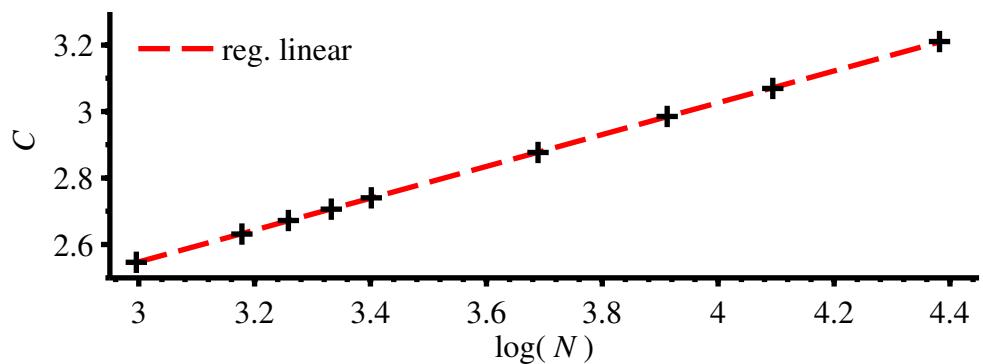


Figura 4.8: Determinação do EC de e^C pelo valor em T_c de C de vários N .

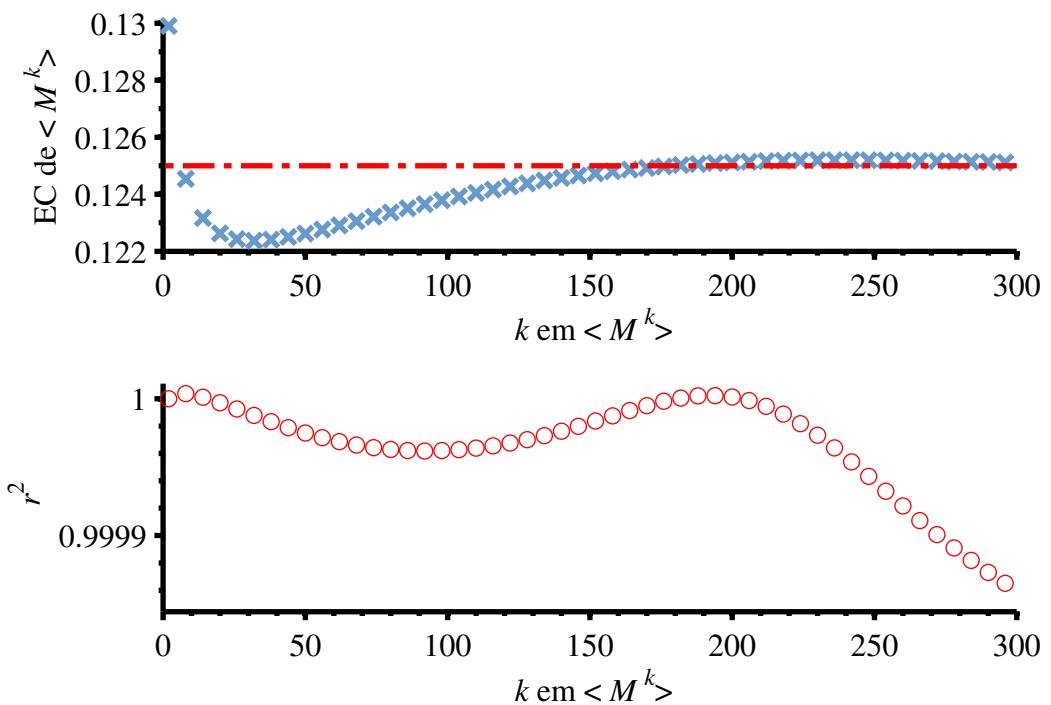


Figura 4.9: EC de $\sqrt[k]{\langle M^k \rangle}$ e respectivos r^2 , com k no eixo das abscissas.

O primeiro comentário é que, se se escolhesse um ponto como estimativa de β de entre todos os calculados, a escolha de $\langle M^2 \rangle^{1/2}$ daria a pior estimativa. A melhor forma de estimar β seria utilizando uma função de ajuste para esta curva, mas nenhuma função de ajuste razoável se encontrou. Analisou-se a qualidade da linearização log – log de cada expoente a partir dos respetivos coeficientes de determinação r^2 , que se mostram no gráfico de baixo da Fig. 4.9. r^2 apresenta dois máximos locais, em $k = 8, 194$, ambos muito próximos dos pontos de interseção da curva de EC com a reta horizontal de valor 0.125. Portanto, será possível que, numa situação ideal, os máximos de um gráfico de $r^2(k)$ correspondam sempre aos pontos de interseção da curva de $EC_\beta(k)$ com o valor do expoente correto. Se isto for verdade, então $EC_\beta(k_{\max(r^2)})$ seriam os melhores estimadores que se poderia encontrar. Para $k = 8, 194$ obtém-se $\beta = 0.12454, 0.12509$. Se se tivesse calculado o EC para todos os valores possíveis de $k = 1, 2, 3, \dots$ encontrasse-iam os máximos de r^2 noutras k próximas de 8 e 194. Aliás, como o máximo de r^2 não se encontrará em k inteiro, poder-se-ia interpolar os pontos de $r^2(k)$ e $EC_\beta(k)$ e utilizar k entre inteiros para obter uma melhor estimativa. Isto melhoraria o resultado de $k = 8$ pois, como se observa na Fig. 4.9, o declive é muito grande perto desse ponto, o que faz com que um pequeno erro em k seja ampliado. É possível que para k maiores o erro do EC se agrave devido a erros cometidos no cálculo de M^k . Por exemplo, $0.01^{200} = 10^{-400}$, que, em precisão dupla, excede o expoente máximo e se iguala a 0. Alguma forma de evitar estes erros de cálculos numéricos deveria ser utilizada antes de estudar esta curva para maiores k .

Capítulo 5

Modificações ao algoritmo de Creutz

Devido à presença da transição em $T \approx 1.7$ na Fig. 3.2.2 e às várias linhas de T e M nas Figs. 3.2.3 e 3.2.3, propuseram-se e estudaram-se duas modificações do algoritmo de Creutz. Para resolver o problema de E_c estar muito disperso será necessário encontrar alguma forma de quebrar os ciclos periódicos em que os spins se encontram e/ou de permitir que as ilhas de spins comuniquem e se influenciem. Para as linhas contíguas de T e M , já se verificou que cada ponto de cada linha tem associado a ele um conjunto de estados exclusivos, que, devido à sua evolução determinista, as simulações nunca irão abandonar. Mantendo a regra de Creutz, para conseguir quebrar as barreiras entre conjuntos de estados pode-se interferir diretamente num estado, alterá-lo, e esperar que o novo estado pertença à linha superior de T e M , que é a hipótese mais provável, pois, como se viu na Secção 3.2.3, a linha superior é a que tem a grande maioria dos pontos. Para alterar um estado, pode-se modificar a matriz de S ou a de E_c , mas E_t deve ser mantido constante e a regra de atualização deve ser respeitada.

Aplicações da regra num spin aleatório

As alterações viáveis à matriz S são bastante limitadas, pois não se pode virar um spin sem verificar a regra de Creutz e realizar a transferência de energia, nem se pode trocar os estados de dois spins sem calcular a consequência energética dessa ação e compensá-la. A proposta mais simples parece ser aplicar a regra de Creutz de x em x iterações do AC a um spin escolhido aleatoriamente.

Trocas de E_c entre spins

Tem-se mais liberdade na modificação da matriz de E_c , pois pode-se reorganizar E_c de cada spin independentemente do estado de spin. Optou-se por trocar os valores de E_c entre dois spins com uma certa frequência.

A primeira observação é que, embora a regra de Creutz não tenha sido alterada, as propostas envolvem escolhas aleatórias de spins, o que significa que, em ambos os casos, o autómato deixa de ser determinístico. Realizaram-se simulações para cada proposta e compararam-se os resultados com o método sem alterações na Fig. 5. As alterações propostas aplicaram-se a cada 10^4 iterações. Para o algoritmo com aplicações da regra em spins aleatórios, observa-se uma subida na posição da linha inferior de T , que

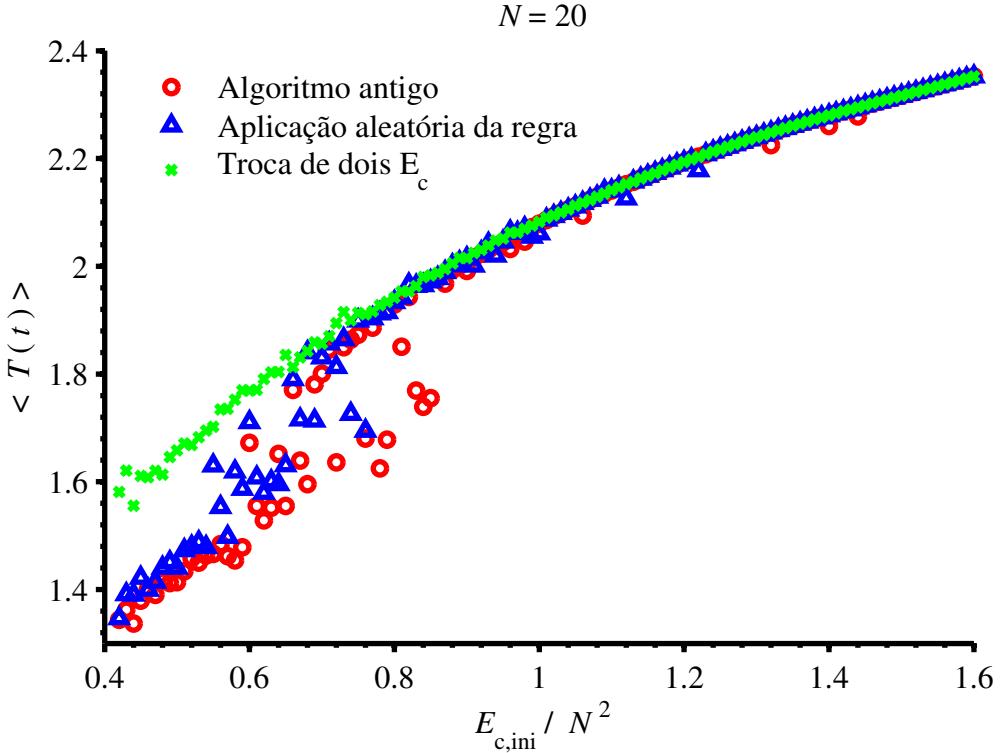


Figura 5.1: Comparação dos resultados das modificações com resultados anteriores.

provavelmente poderá subir ainda mais se a regra for aplicada com maior frequência, mas ainda se observam alguns pontos pertencentes a linhas superiores secundárias. Esta alteração estará a interferir nos ciclos periódicos de magnetização, reduzindo assim a diferença entre a linha de $T < 1.7$ e a de $T > 1.7$.

A troca de E_c parece resolver os dois problemas. Embora apresentem uma variação maior do que os pontos de T maiores, os pontos da linha inferior juntaram-se à linha superior e não se observam pontos de linhas secundárias. Esta alteração estará a permitir a comunicação entre as ilhas de spins com E_c , o que resultou ser mais efetivo na eliminação do primeiro problema.

Por ser a modificação que se revelou mais efetiva e para confirmar que os pontos de linhas secundárias já não aparecem, realizou-se uma simulação do mesmo tipo das simulações da Secção 3.2.3, e compararam-se na Fig. 5 os resultados antigos da Fig. 3.2.3 com estes novos. Os pontos da nova simulação (verdes) apresentam uma variância maior para temperaturas menores, devido aos pontos pretos que abandonaram a mancha de magnetização observada para se juntarem à linha superior. Para temperaturas maiores, não se observam diferenças entre os pontos vermelhos e verdes. A nova simulação não apresenta nenhuma linha secundária por baixo da linha superior.

Para cada 10^4 iterações realizam-se $10^4 \times N^2$ aplicações da regra de Creutz e troca-se um par de E_c , o que quer dizer que esta modificação, na prática, não afeta o tempo de execução do programa e aumenta o número de pontos úteis resultantes de uma simulação ao reduzir a falta de ergodicidade do algoritmo.

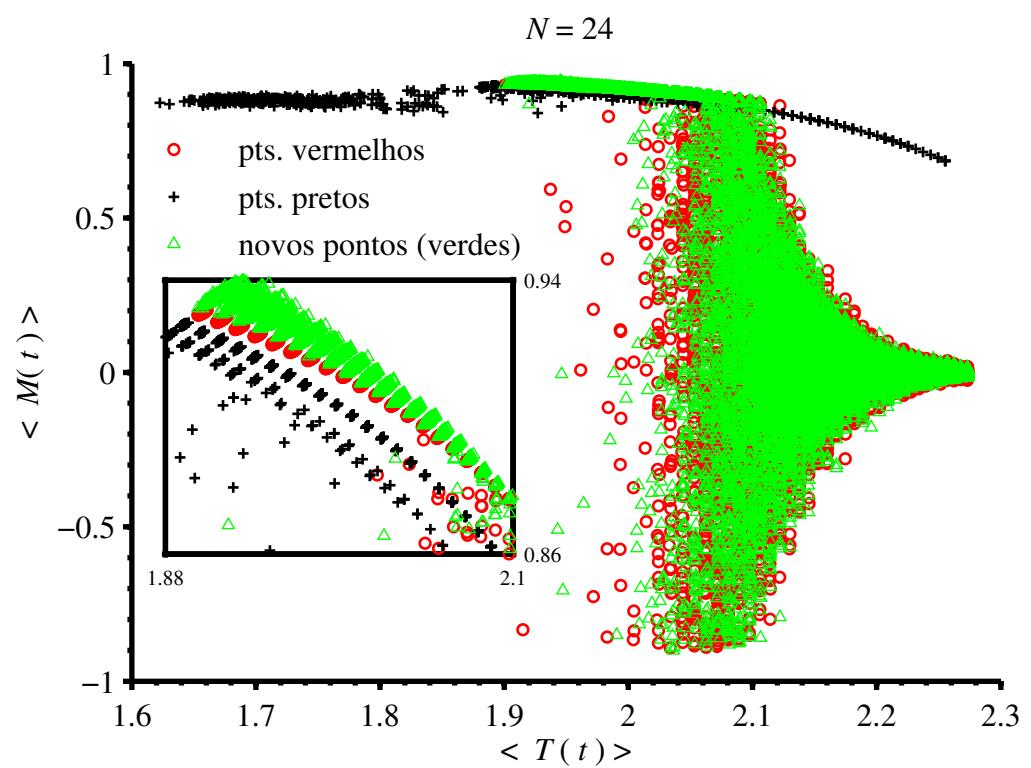


Figura 5.2: $\langle M \rangle$ da Fig. 3.2.3 junto com os novos resultados da modificação ao algoritmo.

Capítulo 6

Conclusão e trabalho futuro

O algoritmo de Creutz provou ser uma boa forma de simular o MI se se tiver em atenção a não ergodicidade encontrada. Esta mesma pode ser reduzida facilmente e sem interferir no desempenho do programa com a modificação estudada. T_c e vários dos EC puderam ser obtidos embora os métodos nem sempre foram os mais diretos. A hipótese colocada e utilizada para estimar β na Subsecção 4.2.3 merece um estudo mais aprofundado para a sua verificação ou refutação. A utilização de N maiores resultou em valores mais precisos, mas implicou um tempo de simulação quadraticamente maior. O EC da suscetibilidade magnética, γ , não foi encontrado, ao contrário de resultados anteriores na análise do AC de Creutz [6], mas, a 2 dimensões, pode ser estimado a partir das igualdades entre EC¹. O passo seguinte deste trabalho seria aplicar o AC de Creutz a 3 dimensões, mas não tendo um método de determinação de γ , não sabendo se as relações entre EC são válidas em 3D, e não tendo certeza no método de determinação de β , a tentativa de determinação dos EC 3D, que são mais importantes de determinar pela falta de conhecimento teórico, não pode ser completa. Os objetivos no futuro imediato serão reformular o programa, nomeadamente usando técnicas de manipulação de bits e fazendo uso de aceleradores HPC (GPU ou Xeon Phi), estudar em maior pormenor o método de β , incluindo o estudo de k maiores, e tentar obter um método de determinação de γ .

¹[4], pág. 717, Tabela 14, em particular, $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

Referências

- [1] L. Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944. doi: 10.1103/PhysRev.65.117. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>.
- [2] B. M. McCoy and Tai T. W. *The two-dimensional Ising model*, chapter 5, pages 86–95. Harvard University Press, 1973.
- [3] K. Binder. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 47:693–696, Aug 1981. doi: 10.1103/PhysRevLett.47.693. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.693>.
- [4] M. E. Fisher. The theory of equilibrium critical phenomena. *Reports on Progress in Physics*, 30(2):615–730, 1967. URL <http://stacks.iop.org/0034-4885/30/i=2/a=306>.
- [5] M. Creutz. Deterministic Ising dynamics. *Annals of Physics*, 167(1):62 – 72, 1986. ISSN 0003-4916. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0003-4916\(86\)80006-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0003-4916(86)80006-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491686800069>.
- [6] B. Kutlu and N. Aktekin. Computation of critical exponents for two-dimensional Ising model on a cellular automaton. *Journal of Statistical Physics*, 75(3-4):757–763, 1994. ISSN 0022-4715. doi: 10.1007/BF02186880. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02186880>.