

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

MODELO DE ANISOTROPIA UNIAXIAL ALEATÓRIA INFINITA *

David Renato Carreta Dominguez

Tese realizada sob a orientação do Dr. Walter Karl Theumann e defendida no Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Comissão Julgadora:

- Dr. W.K.Theumann (UFRGS).
- Dr. S. Salinas (USP).
- Dr. F.C.Sá Barreto (UFMG).
- Dr. D.Dillenburg (UFRGS).
- Dr. J.A.H. Jornada (UFRGS).

Porto Alegre
1993

*Trabalho parcialmente financiado pelas seguintes instituições: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Pró-Reitoria de Ensino e Pesquisa (PROPEP), Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS) e Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP).

Àqueles que não atrapalharam.
Obrigado, Rogério.
Para Luiz Fernando Ziebell, meu agradecimento pela atenciosa revisão ortográfica.

O que por vezes me encoleriza...é a preferência das grandes escolas de cultura...pela árida correção e limitação de amplitude e método, em lugar da novidade e beleza universais, onde possam ser encontrados.
Norbert Wiener (Cibernética e Sociedade)

RESUMO

Contribui-se para a compreensão do modelo de anisotropia uniaxial aleatória, conhecido como "random-axis model" (RAM) que representa ligas de terra-rara com metal. Deu-se atenção especial ao limite de Ising (IRAM) do sistema que ocorre para anisotropia muito grande. Estudou-se a dependência da termodinâmica do IRAM com os seguintes parâmetros relevantes:

i) a isotropia e a obliquidade (b) (em oposição à anisotropia cubica) da distribuição dos eixos aleatórios; ii) a saturação, definida como a razão entre dimensão de spin e conectividade da rede, $\alpha = p/c$.

As variáveis relevantes são a magnetização e o parâmetro de ordem de vidro-de-spin. O último emerge da "fusão" das infinitas componentes transversais ao *overlap*, cuja direção é aquela da magnetização macroscópica.

Como resultado principal encontramos que a natureza da fase ordenada altera-se substancialmente com b . Acima de um certo valor crítico $b_{c_M}(T)$ aparecem estados de Mattis como mínimos globais não-degenerados, em oposição a estados diagonais para b menor que um valor crítico inferior $b_{c_D}(T)$. Estados mixtos surgem no intervalo $b_{c_D} \leq b \leq b_{c_M}$.

Enfatizou-se o caso de α finito, para o qual construiu-se diagramas de fases através da Teoria de Campo Médio (TCM), usando o método de réplicas. A conclusão central foi a diminuição da região ferromagnética com α .

A fim de confirmar os resultados da termodinâmica obtivemos relações de recorrência para a dinâmica de relaxação, com realimentação (feedback). Para isso, além do *Overlap* e da Dispersão dos resíduos, introduziu-se um parâmetro de Autocorrelação. Foi possível construir as bacias de atração para essas três variáveis, caracterizando o regime estático.

ABSTRACT

This is a contribution to the understanding of the model of random uniaxial anisotropy, also known as the random-axis model (RAM), which describes the properties of compounds of rare-earths with metals. Special attention has been given to the Ising limit (IRAM) of the system which occurs for large anisotropy. The dependence of the thermodynamics of the IRAM with the following relevant parameters has been studied:

i) the isotropy and off-cubical ordering (b) of the distribution of random axis (in contrast to cubic anisotropy); ii) the saturation, defined as the ratio between the spin dimension and lattice connectivity, $\alpha = p/c$.

The relevant variables are the magnetization and the spin-glass order parameter. The latter appears as a "melting" of the infinite transverse components to the overlap, whose direction is those of macroscopic magnetization.

As a main result we find that the nature of the ordered phase is altered in an essential way with b . Above an upper critical value $b_{c_M}(T)$ there are Mattis states which appear as non-degenerate global minima, in contrast to diagonal states for b below a lower critical value $b_{c_D}(T)$. Mixed states appear in the range $b_{c_D} \leq b \leq b_{c_M}$.

Emphasis is made on the finite- α case, for which replica-symmetric mean-field theory is used to derive phase-diagrams. A central result is the reduction of the ferromagnetic phase with α .

Recursion relations were derived for the dynamics in order to verify the thermodynamic results in the long-time limit. For that purpose, a selfcorrelation has been introduced, in addition to the usual overlap and dispersion of residues. Basins of attraction were obtained characterizing the static behaviour.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	5
1.a	Sistema Físico	5
1.b	Modelo de Eixos Aleatórios	13
2	ANISOTROPIA INFINITA	25
2.a	O Limite Ising	25
2.b	Teoria de Campo Médio	28
2.c	Estado de Mattis ou Diagonal?	32
2.d	Estabilidade	38
3	LIMITE-α	42
3.a	Ergodicidade e Réplicas	42
3.b	Ferromagnetismo ou Vidro-de-Spin?	49
3.c	Estados Estacionários	53
3.d	Diagrama de Fases	56
4	DINÂMICA	61
4.a	Evolução do <i>Overlap</i>	61
4.b	O Parâmetro Residual	67
4.c	Autocorrelação	71
4.d	Banho-Térmico	76
5	CONCLUSÕES	79
A	Anisotropia Cristalina	82
B	Distribuição de Eixos	86
C	Limite Saturado	90
D	Técnica de Réplicas	94
E	Simulação	98

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.a Sistema Físico

Graças ao desenvolvimento tecnológico na área de materiais tem-se dado crescente importância às ligas constituídas por elementos metálicos ou semi-metálicos, e elementos de transição interna. A ênfase experimental leva em conta as propriedades macroscópicas, mecânicas, elétricas, óticas ou magnéticas, que ocorrem para diferentes especificações das variáveis microscópicas do sistema.

Por exemplo, algumas terra-raras apresentam anisotropia mais forte que outras, assim como certos metais podem resultar em comportamento magnético ordenado enquanto outros apenas demonstram domínios de orientação microscópicos de seus momentos angulares atômicos. Um composto peculiarmente interessante consiste da combinação desses elementos, na forma simbólica $Re_{1-x}Me_x$, onde Re representa um terra-rara, Me um metal e x é a sua concentração na amostra[50].

Um largo espectro de combinações pode ser efetuado com a fórmula acima, dependendo do metal e terra-rara usados. Por exemplo, alguns metais magnéticos apresentam magnetização por spin $m \gg \mu_B$, isto é, muito grande comparado ao magneton de Bohr, enquanto outros tem m pequeno. Os elementos terra-rara próximos ao centro da tabela periódica, por sua vez, tem uma configuração de spins bastante assimétrica, desde que, devido ao princípio de exclusão de Pauli, os orbitais d ou f são preenchidos primeiramente com spins alinhados. Daí possuírem um elevado campo de anisotropia magnética[28]. Além disso, a forma como são preparadas as ligas, se resfriadas lentamente ou congeladas de súbito, produz uma diferença na temperatura crítica. A magnetização espontânea do $TbFe_2$, protótipo do sistema considerado, surge a $T_{c0} = 710K$ no caso cristalino, temperatura esta que cai para $T_c = 388K$ no caso amorfo.

As variáveis termodinâmicas relacionadas respectivamente ao tipo do Re , ao Me e à concentração x são : D , o parâmetro de anisotropia, p , a dimensionalidade de spin, e c , a conectividade, ou número de coordenação da rede. Experimentalmente tem-se observado algumas regiões onde esses parâmetros oscilam:[15, 33]

$$D : (Ga, La, Eu) \ll J; (Lu, Ho, Ce) \sim J; (Dy, Tb, Er) \gg J;$$

$$\begin{aligned}
p & : (Fe, Co) \sim 2; (Al, Ni) \gg 2; \\
c & : (x \sim 1) \sim 2, 3; (x \ll 1) \gg 1
\end{aligned}$$

onde J é a interação de troca média entre spins $Me - Me$ do sistema, e no último caso temos interação de longo alcance.

Cada modelo possui parâmetros macroscópicos que descrevem naturalmente os estados ordenados. Como medida da quantidade de alinhamento dos spins define-se a magnetização por sítio ..

$$m_N = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle; \sigma = \pm 1 \quad (1.a.1)$$

onde σ_i indica o spin (Ising) no sítio $i = 1, \dots, N$, e o parêntese (bracket) a média térmica, isto é, sobre a distribuição de Gibbs

$$\begin{aligned}
dP(E) & = dE e^{-\beta E} / Z; \\
\beta & \equiv 1/T; \quad Z = \int dP(E),
\end{aligned} \quad (1.a.2)$$

sendo Z a função partição, E a energia, e a temperatura T dada em unidades de k (constante de Boltzmann).

A fim de obter uma primeira aproximação para um sistema complexo, utiliza-se a teoria de campo médio, equivalente a desprezar as flutuações em torno do valor mais provável, cuja exatidão limita-se a i) casos do tipo de alcance infinito na interação; ou ii) redes de dimensão fixa com número de coordenação infinito; ou iii) dimensionalidade infinita em redes de número de coordenação fixa. Assim por exemplo, para um ferromagneto de Ising, cujo Hamiltoniano é

$$H_I = - \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.a.3)$$

na teoria de campo médio é feita a hipótese de conectividade completa e idêntica, ou seja, $J_{ij} = J/N$ para quaisquer pares de sítios, e em termos da magnetização definida em (1.a.1),

$$H_{IM} = -N \frac{J}{2} m_N^2 \quad (1.a.4)$$

a menos da média térmica, o que indicamos através do subíndice em m . Como para todo Hamiltoniano de forma quadrática, podemos realizar uma transformação Gaussiana, a fim de linearizar nos spins, por meio da identidade

$$\begin{aligned}
e^{-M^2/2} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\Phi(X) e^{M \cdot X}; \\
d\Phi(z) &\equiv \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2}.
\end{aligned}
\tag{1.a.5}$$

Aplicando à (1.a.4), se escreve

$$e^{-\beta H_{IM}} = \int d\Phi(X) e^{\sqrt{\beta N J} m_N \cdot X}, \tag{1.a.6}$$

com a substituição da variável de integração $X = \sqrt{\beta N J} x$, e tomando a média térmica descrita em (1.a.2), a qual pode ser fatorada nos sítios, obtemos

$$Z \sim c \int dx e^{-\beta J N x^2/2} \prod_i Z_i^e. \tag{1.a.7}$$

Na equação acima, o símbolo de proporcionalidade se refere à constante $c = \sqrt{\beta N J/2\pi}$, a qual podemos negligenciar, sempre que estivermos supondo uma posterior avaliação do logaritmo dessas quantidades. Nos casos discretos, como os de spin Ising, a média térmica consiste simplesmente no traço sobre os elementos diagonalizados, ou seja

$$Z_i^e \equiv \text{Tr}_{\sigma_i} e^{\beta J x \sigma_i} = \cosh(\beta J x), \tag{1.a.8}$$

A "função partição" efetiva Z^e é apenas uma soma sobre os dois estados binários possíveis. A fatorização de Z^e , por outro lado, está implícita na suposição de independência entre os sítios.

Por fim, a integral pode ser executada pelo método de Laplace para expansão assintótica[55], tendo em mente que seu argumento decresce muito rapidamente no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, próximo ao seu valor máximo. Assim, a energia livre de Helmholtz se torna

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{T}{N} \ln Z \\
&= Jm^2/2 - T \ln(\cosh \beta J m).
\end{aligned}
\tag{1.a.9}$$

A condição de minimização na variável de integração produz uma equação descrevendo os estados estacionários do sistema

$$\begin{aligned}
\partial_m f &= 0, \\
m &= \tanh(\beta J m).
\end{aligned}
\tag{1.a.10}$$

Daí a identificação de m como o limite termodinâmico da magnetização (1.a.1),

$$m \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} m_N = \langle \sigma \rangle, \quad (1.a.11)$$

nos permite concluir que a teoria de campo médio desempenha o mesmo papel dos modelos de sítio único, isto é, é desacoplável no cálculo das médias.

Este sistema apresenta uma transição de fase de segunda ordem (contínua no parâmetro m) à temperatura crítica $T_c = 1$, em unidades de J (podemos absorver $\beta J \rightarrow \beta$); de uma fase paramagnética (P) para outra ferromagnética (F), como podemos observar ao expandir (1.a.10) no parâmetro de ordem m :

$$\begin{aligned} m &\approx \beta m - (\beta m)^3/3, \\ (\beta m)^2 &= 3\tau \text{ ou } m = 0; \\ \tau &\equiv 1 - T/T_c. \end{aligned} \quad (1.a.12)$$

A solução diferente de zero para esta equação aparece somente quando a temperatura reduzida τ se torna positiva, ou seja, à temperatura $T < T_c = 1$. Já a susceptibilidade diverge de acordo com a lei de Curie-Weiss

$$\chi \equiv \partial_h m \approx \tau^{-1}. \quad (1.a.13)$$

Uma análise de estabilidade das soluções P ou F , através do cálculo da segunda derivada da energia livre no parâmetro escolhido, ou seja

$$\partial^2 f = \beta[1 - \beta(1 - m^2)], \quad (1.a.14)$$

é sempre necessária. Para verificar a convexidade da energia livre, substituímos em (1.a.13), resultando

$$\partial^2 f \sim m^2 - \tau \sim 2\tau > 0 \quad (1.a.15)$$

na fase F .

Habitualmente utiliza-se para representar sistemas magnéticos mais realistas o Hamiltoniano de Heisenberg

$$H_H = - \sum_{(ij)} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (1.a.16)$$

onde \vec{s}_i é o spin clássico (módulo unitário com p componentes) no sítio i , e J_{ij} a interação de troca entre os spins i e j . Da mesma forma que em (1.a.3), o sinal negativo garante um estado fundamental ferromagnético. Uma ligeira generalização da linearização Gaussiana em (1.a.6) para várias dimensões produz a fatorização em sítios da versão de campo médio do Hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{HM} = -N \vec{m}_N^2 / 2, \quad (1.a.17)$$

o que conduz à função partição de um spin

$$Z_H^e \sim \text{Tr} e^{\beta \vec{m} \cdot \vec{s}}. \quad (1.a.18)$$

É bastante fácil constatar que, se cada componente do vetor de spins \vec{s} fosse independente e do tipo-Ising, cada direção da magnetização satisfaria uma equação similar à (1.a.10). Em geral é difícil tratar o Hamiltoniano de Heisenberg exatamente, então é comum a adoção de diversos tratamentos opcionais. Uma opção são os spins de Potts[21], que satisfazem certas relações para produto escalar, e cujas propriedades são agora melhor entendidas que o modelo de Heisenberg. Como outro exemplo, podemos supor um modelo de spin- S , assumindo apenas valores discretos $s_\mu = -S, \dots, 0, \dots, S$, independente de componente. Neste caso a função partição acima seria fatorável, e a condição de extremo da energia conduz a expressão para magnetização (A..4) do apêndice A, ao qual nos reportaremos a seguir.

Objetivando levar em consideração uma ordem microscópica existente em sistemas desordenados, introduz-se [47] o parâmetro chamado de vidro-de-spin,

$$q \equiv \langle \langle \sigma \rangle_T^2 \rangle \quad (1.a.19)$$

onde a média externa refere-se a distribuição configuracional, normalmente relevante em sistemas "congelados", ou seja, com larga remanência e longos períodos de relaxamento, para os quais q difere de m^2 . A maneira provavelmente mais simples de admitir desordem é supor que a interação J assume valores aleatórios, distribuídos de acordo com uma distribuição Gaussiana[47], ou com $\pm J$, por exemplo. Isto indica a presença de sítios ferromagnéticos e outros antiferromagnéticos, o que ocorre com certos materiais semicondutores.

Outra possibilidade, mais freqüente em Terra-Raras, é a presença de anisotropia magnética. Em (1.a.16), podemos admitir que J seja dependente da direção do spin, como no caso da interação tensorial, com Hamiltoniano[45]

$$H = - \sum_{(ij)} \vec{s}_i \cdot \mathcal{J}_{ij} \cdot \vec{s}_j, \quad (1.a.20)$$

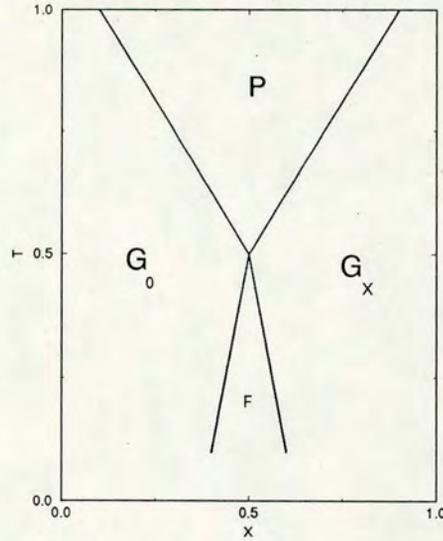


Figura 1.1: A fase superior é desordenada, enquanto que a inferior é do tipo ferromagnético; à direita e esquerda ocorrem fases "congeladas".

porém o modo mais comum de levar em conta a anisotropia devida à preferência em relação a algum eixo privilegiado em cada sítio é

$$H_d = - \sum_i D_i (s_i^z)^2 \quad (1.a.21)$$

A solução da termodinâmica para o sistema com os dois Hamiltonianos (1.a.16)-(1.a.21) acima apresenta um complicado diagrama de fases, como vemos na figura(1.1)[37]. Enquanto o regime de altas temperaturas apresenta-se como paramagnético, P , e o de baixas temperatura é ferromagnético, F , nas regiões inferiores existe uma ordenação de diferentes características, dependendo da concentração x . A essência do comportamento crítico deste tipo está na frustração, ou seja, na competição entre orientações motivadas por estímulos contrários. Conforme observa-se na figura (1.1), a qual descreve fenomenologicamente sistemas reais, dependendo do estímulo x , pode ocorrer uma orientação preferencial em uma subrede do sistema, enquanto a outra permanece desordenada. Esta ordem parcial, descritas pelas fases G_x , ou G_0 , que apresentam um valor do parâmetro q , (1.a.15), diferente de zero, ao mesmo tempo em que a magnetização se anula, se chama ordem de vidro-de-spin

(G , "spin-glass").

Nossa principal tarefa no decorrer desta tese é esclarecer alguns limites para as soluções desses Hamiltonianos. Neste ponto faremos uma pequena ilustração do que acontece com a anisotropia cristalina, isto é, quando o fator $D_i \equiv D$ para qualquer sítio em (1.a.21). A perda em realismo é compensada pelo fato que, após juntarmos os fatores resultantes do termo de sítio único (1.a.21) com (1.a.18), a função partição efetiva não é muito mais complexa, sendo

$$\begin{aligned} Z^e &= \text{Tr}_s e^{\beta H^e}; \\ H^e &\equiv \vec{m} \cdot \vec{s} + D \cdot s_z^2. \end{aligned} \quad (1.a.22)$$

Enfim, com a hipótese adicional de spins- S exposta acima, veja (A..4), particularizando $S = 1$, realizamos o traço somando os estados linearmente, após fatoradas as funções de partição por componente. No caso simples de duas dimensões de spin, chamando M a componente de \vec{m} ortogonal ao eixo anisotrópico e L a paralela, temos as duas linhas críticas referindo-se respectivamente ao surgimento da magnetização M e da L , dadas por

$$\begin{aligned} T_{cM} &= 2/3, \\ T_{cL} &= \frac{2}{2 + e^{-\beta D}}. \end{aligned} \quad (1.a.23)$$

A segunda linha surge para anisotropia D pequena junto à primeira, evoluindo a medida que aumenta D , até $T_{cL} = 1$.

É bom enfatizar que este resultado independe grandemente do tipo de spin. Para efeito de exemplo, citamos que no caso de um spin Gaussiano, ou seja, dado por uma distribuição similar àquela em (B.4), as linhas críticas são aquelas em (A..12).

Antes de partirmos para um quadro mais realista da anisotropia vamos observar o que ocorreria se, ao invés de considerar-se em (1.a.21) a amplitude D_i fixa, nós permitíssemos que esta variasse de acordo com uma distribuição aleatória[49] como aquela dada por (A..14), por exemplo. Nesta situação nos deparamos com uma desordem ("configuracional") bastante mais lenta em relação àquela descrita pelas variáveis térmicas do sistema. Daí, no cálculo da energia livre, a média sobre as configurações de D deve ser efetuada depois do logaritmo, ou seja,

$$-\beta F = \langle \ln Z \rangle_D; \quad (1.a.24)$$

e neste caso, no lugar de (1.a.9) teríamos a energia livre (por spin)

$$\begin{aligned} f &= \vec{m}^2/2 - T \langle \ln Z^e \rangle_D; \\ \vec{m} &= \langle \langle \vec{s} \rangle_T \rangle_D, \end{aligned} \quad (1.a.25)$$

onde o "bracket" externo indica a média citada. Por exemplo, no lugar das linhas críticas em (1.a.23), aparecerão dependências em c bastantes difíceis de controlar.

Parte desta tese objetiva aclarar algumas diferenças e semelhanças entre as variações utilizadas nos estudos desenvolvidos sobre este modelo. Daí, vamos expor as principais aproximações e seus limites de validade na próxima seção do primeiro capítulo, com ênfase na anisotropia aleatória, introduzindo inicialmente a técnica de réplicas, analisando o caso de muitas componentes de spin a seguir e, após, o caso de anisotropia forte. Então passamos no segundo capítulo a observar em detalhe o caso talvez mais importante e promissor da literatura: a anisotropia infinita. Desenvolvemos uma cuidadosa teoria de campo médio (TCM) para o problema, encontrando os estados estáveis e metaestáveis nas diversas regiões do diagrama de fases.

Como veremos logo, este problema encerra dúvidas sobre a existência de uma fase F ou uma fase de vidro-de-spin ("spin-glass", G). Focalizando um pouco mais próximo ao centro desta controvérsia, no terceiro capítulo introduzimos uma variável adequada ao entendimento do papel exercido pelo número de coordenação da rede c , no tipo de ordem magnética encontrada. O tratamento é na base da técnica de réplicas. As fases ferromagnéticas e de vidro de spin são vistas aqui como função do parâmetro α a ser definido como a razão entre p e c , e da obliquidade b da distribuição dos eixos aleatórios.

Enfim, no quarto capítulo utilizamos um método estocástico para analisar o comportamento dinâmico do sistema, e compará-lo assintoticamente (tempos muito grandes) aos resultados estáticos. Com base numa comparação com o modelo de rede neural, introduzimos os parâmetros: superposição (*overlap*), dispersão do resíduo e autocorrelação temporal, com o que foi possível obter relações de recorrência para estimar as bacias de atração das diferentes fases do sistema.

1.b Modelo de Eixos Aleatórios

Na seção anterior apresentamos uma anisotropia devida a uma preferência pelo eixo ao qual denominamos de z , fixando-o para toda a rede. Por outro lado, poderíamos supor que não apenas o peso da anisotropia D dependa do elemento que esteja disposto no cristal, mas que a direção varie aleatoriamente de sítio para sítio. Essa é uma hipótese bastante plausível em sistemas amorfos, os quais podem ser definidos como substâncias no estado condensado, mas sem estrutura cristalina[28]. No que se refere às propriedades mecânicas, diferem dos sólidos por apresentarem elasticidade de forma, e dos líquidos por possuírem rigidez. Como exemplos bastante comuns, temos os vidros, a glicerina, borracha, gelatina, etc.

Assim sendo, modifica-se a forma da anisotropia uniaxial do Hamiltoniano (1.a.21) para

$$H_d = -\frac{D}{2} \sum_i (\vec{n}_i \cdot \vec{s}_i)^2 \quad (1.b.1)$$

onde \vec{n}_i é um vetor unitário de eixos aleatórios p -dimensional[20]. Ele pode ter simetria discreta ou contínua. O Hamiltoniano formado pela soma de H_H , eq.(1.a.16), e H_d constitui o assim chamado modelo de eixo aleatório ("random axis model", ou RAM), ou seja,

$$H_{RAM} = -\sum_{(ij)} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \frac{D}{2} \sum_i (\vec{n}_i \cdot \vec{s}_i)^2 \quad (1.b.2)$$

A distribuição dos eixos aleatórios \vec{n} de um sistema amorfo é provavelmente isotrópica, devido à perda de orientação cristalina do material. Por isso a densidade de probabilidade mais comumente utilizada na literatura para a resolução do modelo acima é a que distribui homogeneamente sobre uma p -esfera (rígida), conforme o apêndice B,

$$\begin{aligned} dP_{is}(\vec{n}) &= d\vec{n} \delta(n - \sqrt{p}) = d\Omega_p / \Omega_p, \\ d\Omega_p &= \prod_{\mu=2}^p [d\theta_\mu \sin^{p-\mu} \theta_\mu]. \end{aligned} \quad (1.b.3)$$

Diferentemente desta distribuição com módulo do eixo fixo, tem também sido usada uma probabilidade Gaussiana[26], a qual permite uma flutuação deste módulo, dada por

$$\begin{aligned} d\Phi(\vec{n}) &= d\vec{n} \phi(\vec{n}), \\ \phi(x) &\equiv \phi_0 e^{-x^2/2}, \phi_0 = 1/\sqrt{2\pi}. \end{aligned} \quad (1.b.4)$$

Outra possibilidade é a manutenção de alguns eixos preferenciais no sistema, como as direções cúbicas da rede, de modo que a densidade de probabilidade seja dada por

$$p_c(\vec{n}) = \frac{1}{2^p} \sum_{\mu} [\delta(\vec{n} - \vec{e}_{\mu}) + \delta(\vec{n} + \vec{e}_{\mu})]. \quad (1.b.5)$$

As principais propriedades destas distribuições estão no apêndice B. Além delas, nós empregamos na maior parte da tese a distribuição de eixos oblíqua, com componentes independentes e trimodais, ou seja,

$$\begin{aligned} dP_a(x) &= b dP_H(x/a) + u dx \delta(x), \\ b.a^2 &= 1, b + u = 1, \end{aligned} \quad (1.b.6)$$

onde está definida a distribuição do modelo correlato de Hopfield[31] de rede neural

$$dP_H \equiv dx \delta(x^2 - 1). \quad (1.b.7)$$

Nos casos em que $b \sim 1$, os eixos apontam, a maior parte das vezes, para os vértices (direções duras) da rede original, enquanto que se $b \ll 1$, os eixos privilegiados na maioria dos sítios são os cúbicos (direções fáceis).

Desde sua criação há já quase duas décadas o RAM vem recebendo diversos tratamentos sistemáticos, sem no entanto apresentar resultados conclusivos a respeito de suas propriedades termodinâmicas. Embora não haja aleatoriedade na interação de troca, a competição entre um termo ordenante de longo alcance (1.a.16) e a desordem favorecida pela anisotropia torna valiosa a exploração da potencialidade do problema.

Grande parte da literatura tem se dedicado ao comportamento do RAM em função da razão D/J . Em experiências de laboratório se evidenciou [46] a importância do tipo de terra-rara (Re) usado, como já citamos; o caso Re= Gd, por exemplo, favorece as correlações magnéticas, enquanto para Re= Tb, aparece uma estrutura magnética aleatória congelada.

Algumas alternativas teóricas se propõem a simplificar o modelo original a fim de facilitar uma melhor compreensão. Por um lado, substituindo a interação entre vizinhos próximos por interação de alcance infinito, o RAM foi resolvido em TCM [10] predizendo uma fase ferromagnética para todo valor D/J , a qualquer p (finito), bem como toda distribuição dos eixos. Este resultado está em concordância com aproximações de campo molecular local [43], bem como com algumas análises com simulação numérica [29].

A seguir vamos demonstrar os principais passos que nos conduzem a essa predição[10]. Iniciando com o procedimento descrito em (1.a.8) com a generalização de (1.a.22), realizamos a substituição natural para um parâmetro de ordem vetorial, desde que estejamos trabalhando com spins de Heisenberg, dado pelo Hamiltoniano (1.b.2), obtendo a função partição efetiva

$$Z^e = Tr_{\vec{s}} e^{\beta H^e};$$

$$\begin{aligned}
H^e &= \vec{m} \cdot \vec{s} + H_D^e, \\
H_D^e &\equiv \frac{D}{2}(\vec{n} \cdot \vec{s})^2
\end{aligned}
\tag{1.b.8}$$

com a respectiva energia livre mediada sobre a distribuição de eixos (vide apêndice B). Se nosso interesse estiver em pesquisar a temperatura na qual surge uma magnetização finita em módulo, podemos expandir a equação autoconsistente para os pontos estacionários (ou mesmo diretamente a energia livre), como em (1.a.13), nas primeiras ordens de m . Notando que os termos ímpares se anulam,

$$\begin{aligned}
\ln Z^e &\approx \beta^2 \frac{m^2}{2} \langle S^2 \rangle_D - \beta^4 \frac{m^4}{8} Q_4(S); \\
Q_4 &\equiv \langle S^2 \rangle_D^2 - \langle S^4 \rangle_D / 3,
\end{aligned}
\tag{1.b.9}$$

onde Q_4 é o quarto momento da projeção S do spin sobre \vec{m} , e a média $\langle \dots \rangle_D$ significa o traço sobre o peso do Hamiltoniano remanescente H_D^e , isto é,

$$\langle \dots \rangle_D \equiv Tr \dots e^{\beta H_D^e}
\tag{1.b.10}$$

Tomando a derivada com respeito a magnetização, após tomar a média configuracional, obtemos o extremo desejado,

$$\begin{aligned}
\beta^2 \frac{m^2}{2} \langle Q_4 \rangle &= \tau \equiv 1 - T/T_c; \\
T_c &\equiv \langle \langle S^2 \rangle_D \rangle = 1;
\end{aligned}
\tag{1.b.11}$$

onde a última identidade resulta do fato que H_D^e é rotacionalmente invariante, e daí (renormalizando o spin tomando o vínculo $\sum_\mu s_\mu^2 = p$)

$$\langle S^2 \rangle_D = \langle \frac{|\vec{s}|^2}{p} \rangle_D.
\tag{1.b.12}$$

A temperatura reduzida é τ . Os resultados prognosticados relacionando as fases pictoricamente estão na figura (1.2).

Por sua vez, trabalhos utilizando técnicas do grupo de renormalização (GR) indicaram inicialmente uma instabilidade nos pontos fixos [1], o que estaria ligado à inexistência de ordem de longo alcance. Mais tarde associou-se essa discrepância entre os resultados em TCM e no GR à redução de dimensionalidade devida à natureza aleatória do problema [44]. A dimensão abaixo da qual a TCM não é uma boa aproximação (não converge para

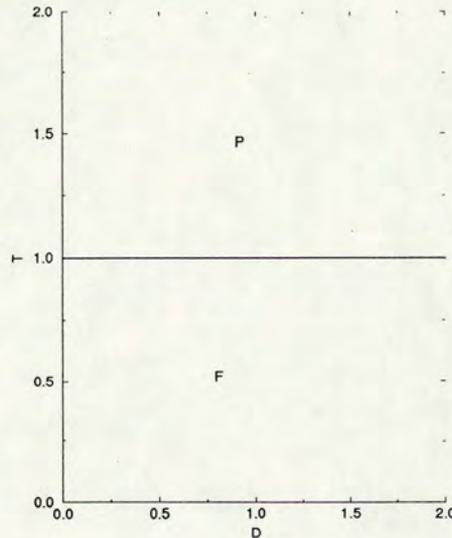


Figura 1.2: A linha $T_c = 1$ indica uma transição da fase Paramagnética superior para a F.

a verdadeira solução) foi suposta ser aumentada para $d_c = 4$ (ocorrendo uma redução na dimensionalidade efetiva em relação a sistemas puros). Esta conclusão foi obtida através de análise de leis de escala para baixas temperaturas [2].

Nos sistemas realistas, a conectividade c (o número de coordenação da rede, ou ainda o alcance da interação) é finito, portanto devemos realizar correções à teoria de campo médio comum, esboçada na seção anterior, onde tomamos $c=N$. O parâmetro relevante neste caso é então a variável $\alpha = p/N$, com a qual designaremos a "saturação" do modelo.

Há pelo menos duas situações em que encontramos o sistema saturado ($\alpha > 0$): quando c é suficientemente pequeno, ou quando p é bastante grande; em ambos casos podemos encontrar p da ordem de c , isto é, sua razão finita. No último deles, onde a TCM é exata (se $c \sim N$), podemos partir da equação (1.b.9), e calcular a função partição efetiva pelo método de Laplace, desde que ela se comporta como a integral

$$\begin{aligned}
 Z^e &= \sum_{\vec{\sigma}} \int dP(\vec{s}) e^{g(\vec{s})}; \\
 g &= M\sigma x + Ly + \frac{\beta D}{2} x^2;
 \end{aligned}
 \tag{1.b.13}$$

onde decomposemos a magnetização em uma direção paralela M e outra ortogonal ao eixo local L , conforme o apêndice C. Em g , σ é a variável Ising consequente da degenerescência por hemisfério contida na variável angular relacionada a x (e portanto M). Da mesma forma x é a componente do spin na direção do eixo \vec{n} e y a projeção sobre a magnetização de sua componente perpendicular a \vec{n} . Devido ao limite assintótico de componentes, nós temos um argumento da exponencial da ordem de p , o qual nos permite realizar a integração, utilizando o elemento diferencial em coordenadas cilíndricas, veja o apêndice C. Alguns casos particulares podem ser resolvidos mais facilmente. Por exemplo, tomando $M = L = 0$, as equações estacionárias em (C..18) se reduzem às soluções [18]

$$\begin{aligned} x_P &= 0, T > D; \\ x_G^2/p &= 1 - T/D, D > T; \end{aligned} \tag{1.b.14}$$

aqui os subíndices P e G indicam as fases paramagnética e do tipo vidro de spin de cada solução. A diferença em relação à literatura é que em[18] foram usadas coordenadas esféricas, enquanto nós utilizamos cilíndricas. Por sua vez, a segunda derivada do argumento, conforme (C..20), indica a estabilidade das fases paramagnética (P) e do tipo vidro-de-spin (G), dependendo da razão T/D . Esses estados encontram-se, no entanto, numa região onde não existe magnetismo, a qual foi avaliada achar-se acima de $T=1$, de acordo com (1.b.11).

Nos casos em que a anisotropia aleatória é superada pela interação de troca (ferromagnética), a projeção M pode ser de ordem $0(\sqrt{p})$ (macroscópica), contudo no extremo oposto, ela é tipicamente unitária; isso motiva a solução de (C..12), quando a energia livre é calculada como

$$\begin{aligned} \beta f &= \beta J(1 - J/D)m^2/2 - \beta f_x \\ f_x &= T < \ln \cosh(\beta J \vec{m} \cdot \vec{n} x) >, \end{aligned} \tag{1.b.15}$$

para o x de (1.b.14). Diretamente da equação acima, notamos que a linha $J=D$ indica uma transição de primeira ordem à esquerda da qual a magnetização se torna macroscópica, como frizamos acima (vide fig.1.3); daí outra solução deve ser procurada. Esta é aquela do comportamento normal: a anisotropia aleatória não desempenha nenhum papel importante. A expansão em (C..13) mostra, nesta fase, uma transição de segunda ordem da fase P para a F(ferromagnética) em $T=J$. À direita, o ferromagnetismo resultante é fraco (microscópico, no caso de mantermos p infinito). Esta região é típica do caso saturado, onde há competição com a fase G. Há portanto uma evidente contradição entre a fase ferromagnética F predita na TCM e a existência desta região G para anisotropia D suficientemente elevada.

Agora vamos observar o que acontece na primeira situação descrita anteriormente: o número de coordenação c é pequeno, de mesma ordem de p . Utilizamos a técnica de

réplicas da forma trabalhada no apêndice D, a qual é necessária para calcular a média do logaritmo da função partição, até a obtenção da equação (D.7)

$$g_c = \frac{\beta D}{2} |\tilde{s}|^2 + \frac{p}{2} \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 - |\tilde{s}|^4/8. \quad (1.b.16)$$

Este Hamiltoniano efetivo g_c produz um diagrama similar ao da figura (1.2)[1]. Um cálculo específico está realizado no apêndice D, particularizando para a distribuição gaussiana, com $V=W=1$, e daí, introduzindo a variável tipo vidro-de-spin

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta} \equiv \vec{s}_{\alpha} \cdot \vec{s}_{\beta}, \quad (1.b.17)$$

obtemos para a função partição efetiva

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr} e^{\beta H_n}; \\ H_n &= c \vec{m} \cdot \vec{s} + D |\tilde{s}|^2/2 + \beta D^2 \|\mathcal{C}\|^2/4. \end{aligned} \quad (1.b.18)$$

O coeficiente c aparece no termo de interação quando esta é entre vizinhos mais próximos, sendo que o Hamiltoniano efetivo aqui não resulta de uma transformação Gaussiana como realizada na primeira seção, mas de uma equação autoconsistente. A norma $\|\mathcal{C}\|^2 \equiv \sum_{\alpha\beta} \mathcal{C}_{\alpha\beta}^2$, e utilizamos o sinal til superior para indicar o vetor extendido às n réplicas. Este termo pode ser linearizado por meio de uma transformação Gaussiana, em generalização daquela em (1.a.5):

$$\begin{aligned} \exp(\beta^2 D^2 \|\mathcal{C}\|^2/4) &= \int \prod_{\alpha\beta} [d\Phi(Q_{\alpha\beta}) \exp(\beta D Q_{\alpha\beta} \mathcal{C}_{\alpha\beta}/\sqrt{2})] \\ &\equiv \int d\Phi(Q) e^{\beta D Q \times \mathcal{C}/\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (1.b.19)$$

(a última expressão é uma definição); então, substituindo em (1.b.18), com a expressão para \mathcal{C} , resta realizar o traço sobre os spins replicados e após, a "média" sobre a variável acoplada ao vidro-de-spin Q , conforme (D.8).

Embora nosso interesse neste estágio não seja um desenvolvimento rigoroso do problema acima, é instrutivo ilustrar uma hipótese plausível de resolução: considerando-se um número p muito grande de componentes de spin com um vínculo fraco (isto é, substituiremos o spin unitário por outro cujas componentes tenham média zero e variância um), o traço pode ser efetuado como uma integral Gaussiana, a qual produz a eq.(D.11). Agora, numa suposição adicional, calculamos a média sobre Q pelo método de Laplace, desprezando as contribuições fora do valor máximo do mesmo:

$$\ln Z_n = \sum_{\mu} \ln Z_{\mu}^U - \|Q\|^2/2. \quad (1.b.20)$$

As definições e detalhes das operações aqui envolvidas estão no apêndice D, vide eq.(D..13). Enfim, uma última simplificação é imposta: a solução "simétrica de réplicas", na qual colocamos todas as componentes da magnetização e da diagonal da matriz Q iguais a \bar{m} e $q/\sqrt{2}$, respectivamente. A segunda opção não é estritamente convencional na teoria de vidro de spin, costumando-se tomar a solução simétrica complementar à diagonal (isto é, os elementos $q_{\alpha\alpha} = 0$). Isso não deve servir de motivo para não prosseguirmos no cálculo, que objetiva ilustrar a origem deste parâmetro de ordem. Portanto, substituindo em (1.b.18), e somando a contribuição quadrática da interação entre vizinhos próximos, encontramos (vide apêndice D)

$$\begin{aligned} \beta f &= \beta c \frac{m^2}{2} (1 - \beta c/u) + q^2/4 + \frac{p}{2} \ln u; \\ u &\equiv 1 - \beta DB; B \equiv 1 + q. \end{aligned} \quad (1.b.21)$$

O extremo da energia livre satisfaz as equações estacionárias a seguir:

$$\begin{aligned} m(1 - \beta c/u) &= 0, \\ q &= [(\beta mc/u)^2 + p/u] \beta D \end{aligned} \quad (1.b.22)$$

as quais apresentam uma fase ferromagnética ($m > 0$), onde $u = \beta c$, e daí

$$\begin{aligned} q &= (\beta m^2 + \alpha) D \\ \alpha &\equiv p/c \end{aligned} \quad (1.b.23)$$

e outra do tipo vidro-de-spin, quando embora $m = 0$, $q > 0$. O cálculo acima está longe de ter seus passos justificados, contudo serve para demonstrar a necessidade de levarmos em conta a presença de outro parâmetro de ordem que não a média de spins m nesses sistemas, bem como a dificuldade oriunda da ausência de controle nas aproximações em que a relação α é próxima à unidade, assim como a razão D/T .

Antes de apresentarmos o próximo limite a ser desenvolvido na tese (a anisotropia forte), vamos apontar um resultado[34] envolvendo o limite $p \rightarrow \infty$, cujo principal mérito é dispensar o uso de réplicas. Consiste em comparar a energia livre do RAM à do modelo esférico em um campo externo e, apoiando-se na desigualdade de Bogoliubov, acha-se

$$\begin{aligned} f_{RAM} &= \min_{(M)} [f_S + M^2(1 - \beta_c D)]; \\ f_S &\equiv \max_{(K)} \left[\frac{T}{2} \int d\vec{p} \ln(K - J_p) - K/2 \right], \end{aligned} \quad (1.b.24)$$

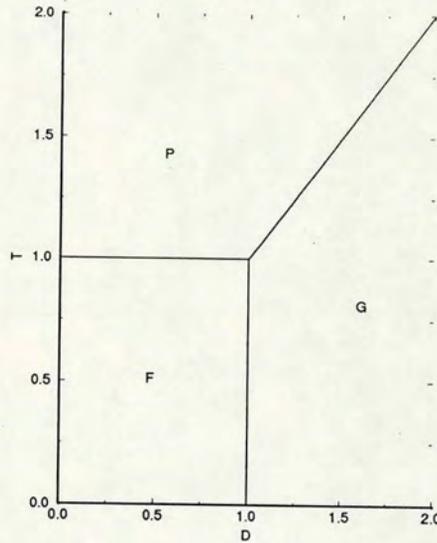


Figura 1.3: Abaixo de $T = 1$ e à esquerda de $D = 1$ há uma fase F , enquanto à direita de $D = T$ ocorre a G .

onde $J(p)$ é a transformada de Fourier da interação de troca e a temperatura de transição para uma fase ordenada ferromagnética é

$$T_c^{-1} \equiv \beta_c = \int \frac{d\vec{p}}{K - J(p)} \quad (1.b.25)$$

a qual só é finita em dimensionalidade espacial $d \geq 3$. A ligeira semelhança entre (1.b.21) e (1.b.24) não é ocasional e nos indica que nem tudo está perdido. O problema maior está em interpretarmos essas novas regiões do diagrama de fases, que pode ser esquematizado na figura(1.3). Observa-se claramente um discrepância entre este resultado e o da figura(1.2), para a qual o estado F independe de D .

Os capítulos seguintes se preocuparão com a região mais à direita neste diagrama, isto é, o limite de anisotropia forte. O aparecimento de uma fase do tipo vidro-de-spin leva à necessidade de uma análise mais elaborada dos parâmetros de ordem a ser desenvolvida em função da distribuição de eixos e da nova variável $\alpha = p/c$.

Objetivando particularizar para uma situação que é interessante tanto do ponto de vista

de realização experimental como de simplificação teórica, desde aproximadamente o ano 1980 vem se dando ênfase ao caso em que $D \gg J$. Como podemos constatar do resultado na equação (1.b.14), no limite $D \gg T$, ou seja, anisotropia muito forte, os spins se alinharão com a direção dos eixos de anisotropia aleatórios em cada sítio, de forma que

$$\begin{aligned} \cos\theta &= 1 : \vec{s}_i = \hat{n}_i \sigma_i; \\ \hat{n} &\equiv \frac{\vec{n}}{n}; \\ n &\equiv |\vec{n}|; |\sigma| = 1. \end{aligned} \tag{1.b.26}$$

Este caso permanece sendo de relativamente grande importância, representando ligas compostas de Dy, Tb ou Er com Zn, Al ou Ni, e propicia uma razoável adequação do modelo aos métodos da mecânica estatística. Lembre-se que estamos colocando, por conveniência, $J=1$, daí nossa aparente discordância do limite apontado na literatura[27]. Com efeito basta que $D \gg 1$ para recuperarmos (1.b.15), desde que estamos supondo temperaturas de ordem da unidade.

No lugar do termo (1.a.16) do Hamiltoniano, nos deparamos com um modelo de Ising, o chamado IRAM ("infinite random axial model"), descrito por

$$\begin{aligned} H_{IR} &= - \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j; \\ J_{ij} &= \hat{n}_i \cdot \hat{n}_j; \end{aligned} \tag{1.b.27}$$

enquanto o termo de anisotropia (1.b.1) se reduz à constante DN , daí podendo ser dispensado. Este Hamiltoniano substituirá então o do RAM (1.b.2).

As primeiras tentativas de resolver a termodinâmica do IRAM residem em simulações de Monte Carlo, onde, no caso de temperatura nula, utiliza-se uma atualização dos spins de acordo com a regra

$$\begin{aligned} \sigma_i(t+1) &= sg[h_i(t)]; \\ h_i &= \sum_{j \in V_i} J_{ij} \sigma_j \end{aligned} \tag{1.b.28}$$

onde no campo local h a soma se estende sobre os vizinhos que interagem com o sítio considerado em cada etapa. Esta evolução pode ser tanto paralela como seqüencial. Neste sentido, especificando para $p = 2, 3, 10$ com dimensão $d = 2$, foi encontrada [7] apenas uma fase tipo vidro-de-spin. Mesmo à temperatura finita, quando devemos empregar uma atualização estocástica de acordo à probabilidade

$$\begin{aligned}
p[\sigma(t+1)] &= e^{\beta h_t \sigma} / Z_{h_t}; \\
Z_h &\equiv 2 \cosh(\beta h)
\end{aligned}
\tag{1.b.29}$$

a ausência de uma ordem ferromagnética de longo alcance foi comprovada, ao menos nos casos $p, d = 2, 3$, primeiramente [32] estudando-se a função correlação de 2-spins e mais recentemente dando atenção ao parâmetro[8]

$$\begin{aligned}
\chi &= \langle q^2 \rangle^2 - \langle q \rangle^4; \\
q &= \langle \sigma_0 \sigma_\infty \rangle_T
\end{aligned}
\tag{1.b.30}$$

o qual permite observar uma fase ordenada de curto-alcance. Uma análise de escala para diversos tamanhos finitos ("finite-size-scaling") do sistema foi enfim realizada [16], produzindo

$$m^{-1} = [0.37 \ln(L) + 1] \tag{1.b.31}$$

o que garante o anulamento (embora lento) quando $L \rightarrow \infty$.

Por outro lado utilizando o esquema de simulação temperada ("annealing") ao invés de congelada ("quenched"), aplicável nos casos de resfriamento lento em oposição ao rápido, quando devemos substituir a expressão (1.a.24) para a energia livre por

$$\begin{aligned}
-\beta F &= \ln \langle Z \rangle; \\
Z &= Tr \prod_{(ij)} e^K; \\
K &= \beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j;
\end{aligned}
\tag{1.b.32}$$

foi obtido um algoritmo [14] para estudar o caso $d=3$. Com $p=3$ só foi encontrada ordem de curto alcance, enquanto $p=2$ permite longo-alcance com lento decaimento.

Um aspecto intrigante do IRAM foi investigado num artigo [19] que incorporou uma anisotropia cúbica à isotrópica. Na sua presença, nota-se a existência de uma linha do tipo A-T (Almeida-Thouless): para campos inferiores a

$$h_{AT} = \tau^{3/2} \tag{1.b.33}$$

aplicados numa direção longitudinal, aparece uma magnetização transversal. Isto é característico de sistemas tipo vidro-de-spin e levou-nos a estudar mais em detalhe a sua dependência na distribuição de eixos. Voltaremos a este ponto no capítulo (2-c).

Para concluir a introdução, vamos citar dois trabalhos tratando de uma situação especial: o caso em que a dimensão p se torna próxima à conectividade c da rede. O primeiro deles é um cálculo das susceptibilidades Ferromagnética (F) e de Vidro-de-spin (G) do IRAM sobre a árvore de Cayley, cujos resultados são [27]

$$\begin{aligned}\chi_F &\approx (1 - cC_1)^{-1}; C_1 \equiv \langle \cos\theta \tanh(\beta \cos\theta) \rangle \\ \chi_G &\approx (1 - cE)^{-1}; E \equiv \langle \tanh^2(\beta \cos\theta) \rangle.\end{aligned}\tag{1.b.34}$$

Expandindo-se as funções C_1 e E em β são obtidas as linhas críticas

$$\begin{aligned}T_F &= \alpha^{-1}; \\ T_G &= \alpha^{-1/2},\end{aligned}\tag{1.b.35}$$

sendo $\alpha = p/c$. A competição entre as duas fases ordenadas é vencida pela F à esquerda de $\alpha=1$ e pela G à direita.

O segundo trabalho[12] consiste de uma expansão nas variáveis "lentas", após realizar a seguinte transformação Gaussiana:

$$e^{\hat{\sigma} \cdot \mathcal{K} \cdot \hat{\sigma}/2} = \int d\Phi(\hat{x}) e^{\hat{\sigma} \cdot \mathcal{K}^{-1/2} \cdot \hat{x}}\tag{1.b.36}$$

onde $\hat{\sigma} \equiv (\sigma_i)$, $\mathcal{K} \equiv (\mathcal{K}_{ij})$, e tomar a média configuracional, resultando no Hamiltoniano efetivo

$$\tilde{H} = \tau |\vec{s}|^2/2 + c^2 |\nabla \vec{s}|^2/2 + \vec{s} \cdot \mathcal{V} \cdot \vec{s} + g |\vec{s}|^4/4,\tag{1.b.37}$$

onde \mathcal{V} é uma variável Gaussiana. As funções correlação ferromagnética e de vidro-de-spin são obtidas em termos de relações entre o alcance da interação c e o parâmetro de rede g , permitindo explicar ambos os comportamentos F e G , nos casos $c \gg g$, ou $c \sim g$ respectivamente.

Observamos, para finalizar, que no limite $D \rightarrow \infty$ a diferença entre os diagramas nas figuras (1.2) e (1.3) fica mais evidente, no sentido que na primeira há claramente uma transição F - P enquanto na segunda só aparece a fase G . Este limite também é crucial para o entendimento do diagrama fenomenológico (1.1), o qual representa bem alguns resultados experimentais[33] relacionando temperatura com concentração x , cujo papel será desempenhado em nossa abordagem pelo parâmetro α definido acima, conforme (1.b.23).

A exceção das simulações de Monte Carlo, não existe na literatura nenhum tratamento analítico da dinâmica do IRAM. Seguindo a atualização em (1.b.28), nós obtivemos algum sucesso na realização desta dinâmica. No capítulo (4) vamos demonstrar como é possível

encontrar um sistema de equações para evolução dos parâmetros *overlap* e resíduo, dados por

$$\begin{aligned}m_N(t) &= \sum_i \rho_i \sigma_i(t)/N; \\l_N^\mu(t) &= \sum_i \xi_i^\mu \sigma_i(t)/N.\end{aligned}\tag{1.b.38}$$

O primeiro indica a componente macroscópica (condensada) da magnetização, enquanto o segundo é uma típica componente microscópica. Aplicando o teorema ergódico para o *overlap* e o teorema do limite central para o resíduo, nós encontramos um mapeamento com uma equação determinística e uma outra estocástica. Uma hipótese simples de estacionariedade desta última permitiu-nos iterar as equações até a demarcação das bacias de atração.

Capítulo 2

ANISOTROPIA INFINITA

2.a O Limite Ising

Podemos descrever o RAM no caso geral, conforme a equação (1.b.13), decompondo o vetor de spin unitário em uma componente paralela e outra ortogonal ao vetor de eixos local, na forma

$$\begin{aligned}\vec{s} &= \vec{s}_n \sigma + \vec{s}_\perp; \\ \sigma &= \pm 1\end{aligned}\tag{2.a.1}$$

com os vínculos

$$\begin{aligned}\vec{s}_n &= \hat{n} \sqrt{1 - s_\perp^2}, \\ \vec{s}_\perp \cdot \vec{n} &\equiv 0, \\ \hat{n} &\equiv \vec{n}/|\vec{n}|\end{aligned}\tag{2.a.2}$$

e inquirir quais as condições necessárias para que a única parcela sobrevivente seja aquela apontando para o eixo local em cada sítio, ou melhor, $s_\perp = 0$. Como sugerimos na secção (1.c), no caso em que $D \gg T$, a menor energia é encontrada justamente neste limite $\vec{s} = \vec{s}_n \sigma$, ou seja, no IRAM (secção (1.d)). Para distribuições de probabilidade dos eixos as quais permitem variação no módulo, contudo, é possível que o campo da interação em um sítio, definido como

$$\begin{aligned}h^J &= \vec{s} \cdot \vec{m}_N; \\ \vec{m}_N &\equiv \sum_j \vec{s}_j / N\end{aligned}\tag{2.a.3}$$

supere (ou seja da mesma ordem) o campo da anisotropia,

$$h^D = (\vec{s} \cdot \vec{n})^2 \equiv n^2 s_n^2 \quad (2.a.4)$$

A fim de compararmos as respectivas energias, tomaremos uma cota superior para o primeiro campo,

$$h^J \leq \sum_j s_j^2 / N \equiv 1 \quad (2.a.5)$$

e calculamos a média e a variância do segundo, respectivamente

$$\begin{aligned} \langle h^D \rangle &= p s_n^2; \\ \text{Var}(h^D) &= p s_n^4 \delta^2, \end{aligned} \quad (2.a.6)$$

onde δ é o desvio padrão do quadrado de uma simples componente do eixo,

$$\delta^2 = \text{Var}(\rho^2) \equiv \langle \rho^4 \rangle - \langle \rho^2 \rangle^2; \quad (2.a.7)$$

daí, pela lei dos grandes números, obtemos que a dispersão relativa

$$\begin{aligned} \text{Var}(h^D) / \langle h^D \rangle^2 &\sim \delta^2 / p \rightarrow 0 : \\ h^D &\rightarrow \langle h^D \rangle \end{aligned} \quad (2.a.8)$$

isto é, no limite saturado, o campo anisotrópico converge, para quase todo sítio, com probabilidade 1, para

$$h^D \rightarrow p s_n^2. \quad (2.a.9)$$

Então, considerando J de ordem de T , se $D \gg T$, relacionando (2.a.5-2.a.9), temos satisfeita a condição $D h^D \gg J h^J$, a menos daqueles sítios para os quais a projeção $s_n \ll 1/\sqrt{p}$. Estes, contudo, tem probabilidade nula, conforme notamos na seção (1.c), por exemplo, da eq.(1.b.14), onde $x/\sqrt{p} \equiv s_n$. Logo, podemos desprezar a componente transversa, e temos simplesmente

$$\begin{aligned} \vec{s} &= \hat{n} \sigma; \\ \sigma &= \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} 1, s_n = 0. \end{aligned} \quad (2.a.10)$$

Um raciocínio semelhante para o módulo de \vec{n} nos fornece

$$\begin{aligned} \text{Var}(\vec{n}^2) / \langle \vec{n}^2 \rangle^2 &\sim \delta^2/p \rightarrow 0 : \\ n^2 &\rightarrow p, \end{aligned} \tag{2.a.11}$$

em quase qualquer sítio, donde $\hat{n} \equiv \vec{n}/\sqrt{p}$, com probabilidade 1.

À primeira vista parece que algo errado está acontecendo. Para facilitar o entendimento vamos assumir a seguinte analogia: assim como uma mesa rígida elimina a dimensão vertical favorecida pela anisotropia do campo gravitacional, o limite $D \gg J$ elimina as $p-1$ componentes transversais favorecidas pela aleatoriedade dos eixos. Pequenas perturbações (rugosidades) na mesa não retiram o papel fundamental da uniformidade no plano horizontal, da mesma forma que as flutuações da anisotropia não influem decisivamente na importância da dimensão restante, a dimensionalidade de spin do modelo de Ising.

Concluindo, o Hamiltoniano se comporta como o de (1.b.27), ou ainda, no modelo de alcance infinito,

$$H_{IR} = -N \frac{J}{2} \vec{m}_N^2 \tag{2.a.12}$$

que é quadrático na magnetização, agora definida como

$$\vec{m}_N = \sum_i \vec{n}_i \sigma_i / N \tag{2.a.13}$$

Na próxima seção estudaremos este Hamiltoniano, com as distribuições de probabilidades do apêndice B.

2.b Teoria de Campo Médio

Neste ítem trataremos do caso em que o número de coordenação da rede é infinito, $c \rightarrow \infty$, em cuja situação podemos empregar a teoria de campo médio, ou seja, a equação (1.a.25) é exata. Basta então substituímos (2.a.10) em (1.b.9) e, a menos de constante, a função partição efetiva é

$$\begin{aligned} Z^e &= \text{Tr}_\sigma e^{\beta J \vec{m} \cdot \hat{n}_\sigma} \\ &\equiv 2 \cosh(\beta J \vec{m} \cdot \hat{n}), \end{aligned} \quad (2.b.1)$$

donde, incluindo em (1.a.25), a energia livre fica

$$f = J |\vec{m}|^2 / 2 - T \cdot \langle \ln[\cosh(\beta J \vec{m} \cdot \hat{n})] \rangle. \quad (2.b.2)$$

Como não há perda de generalidade na escolha de um valor apropriado de J , nós tomaremos a escala

$$\begin{aligned} \sqrt{J} \hat{n} &\rightarrow \vec{n}; \\ J \vec{m}^2 &\rightarrow \vec{m}^2, \end{aligned} \quad (2.b.3)$$

de forma que a criticalidade do problema permanece a mesma.

A condição de mínimo da energia em função dos parâmetros nos fornece os estados estacionários do sistema:

$$\vec{m} = \langle \vec{n} \tanh(\beta \vec{m} \cdot \vec{n}) \rangle, \quad (2.b.4)$$

sendo que a média daqui por diante deve ser tomada sobre as configurações \vec{n} . Antes de particularizarmos para uma distribuição, vamos observar alguns fatos gerais. Em primeiro lugar, da equação prévia, notamos que embora o máximo de cada componente da magnetização seja de ordem unitária, $m_\mu \leq \langle |n_\mu| \rangle$, há uma cota superior para o seu módulo. Desde que o limite da tangente hiperbólica é a função sinal, para o quadrado de \vec{m} nós obtemos as desigualdades

$$\begin{aligned} m^2 &\leq \langle |\vec{m} \cdot \vec{n}| \rangle: \\ m^4 &\leq \langle |\vec{m} \cdot \vec{n}|^2 \rangle = m^2: \\ m^2 &\leq 1, \end{aligned} \quad (2.b.5)$$

onde a segunda é a desigualdade de Schwartz.

Nos casos com invariância rotacional, como o das distribuições isotrópicas (B..2) ou (B..4), a solução de (2.b.4) é degenerada na direção da magnetização, satisfazendo

$$\begin{aligned} m_{is} &= \langle n_m \tanh(\beta m n_m) \rangle; \\ n_m &\equiv \vec{m} \cdot \vec{n} / m, \end{aligned} \quad (2.b.6)$$

e embora ela permaneça no campo do ferromagnetismo[19], alguns fatos não convencionais são reconhecidos. Por exemplo, a energia livre (2.b.2), com (2.b.6), depende apenas do módulo.

Já o caso da anisotropia cúbica (B..3) nos dá as componentes da magnetização

$$\sqrt{\rho} m_\mu \equiv l_\mu = \tanh(\beta l_\mu), \text{ qualquer } \mu \quad (2.b.7)$$

de modo que existam apenas as soluções do tipo

$$\begin{aligned} m_\mu &= m_s \Theta(s - \mu) \Rightarrow \\ \vec{m} &= (m_s, \dots, m_s, 0, \dots, 0), \end{aligned} \quad (2.b.8)$$

onde Θ é a função degrau, as quais designaremos por s-simétricas.

Um resultado interessante pode ser obtido expandindo (2.b.6) em torno de $m \sim 0$,

$$\begin{aligned} m &\approx \beta m \langle n_m^2 \rangle - \beta^3 m^3 \Lambda; \\ \Lambda &\equiv \langle n_m^4 \rangle / 3, \end{aligned} \quad (2.b.9)$$

de onde encontramos a temperatura crítica

$$T_c = \langle n_m^2 \rangle = 1. \quad (2.b.10)$$

De (2.b.9) conclui-se que a magnetização anula-se, em função da distribuição, continuamente como

$$\begin{aligned} m^2 &\approx \tau / \Lambda; \\ \Lambda &= W + (V - W) \cdot \Delta_s, \end{aligned} \quad (2.b.11)$$

com as definições (D..7) e a temperatura reduzida τ , e o parâmetro de "flutuação da simetria",

$$\Delta_s \equiv \sum_{\mu}^s m_{\mu}^4 / m^4 = 1/s, \quad (2.b.12)$$

sendo que a última igualdade ocorre nas soluções simétricas.

Enfim, expandindo a energia livre em (2.b.2), obtemos

$$\begin{aligned} \beta f &\approx \beta^2 m^2 (T - 1)/2 + \beta^4 m^4 \Lambda / 4 \\ &\approx -\beta^2 m^2 \tau / 4, \end{aligned} \quad (2.b.13)$$

o que indica quais os estados mais estáveis[20](isto é, de energia mais profunda). De acordo com (2.b.11), as soluções em cada caso são

$$\begin{aligned} V > W &: \Delta_{min} = 1/p, \Lambda_{min} = W + (V - W)/p; \\ V < W &: \Delta_{max} = 1, \Lambda_{min} = V, \end{aligned} \quad (2.b.14)$$

ou seja, o estado Diagonal ($s=p$) e o de Mattis ($s=1$) respectivamente.

Por outro lado, próximo à temperatura nula, a situação é a seguinte: a magnetização e energia livre são dadas por

$$\begin{aligned} m &= \langle |n_m| \rangle; \\ f &= m^2/2 - m \langle |n_m| \rangle = -m^2/2, \end{aligned} \quad (2.b.15)$$

e os estados s -simétricos nos casos cúbico e isotrópico possuem

$$\begin{aligned} m_c &= \sqrt{s/p}; \\ m_{is} &= \sqrt{2/\pi} \end{aligned} \quad (2.b.16)$$

respectivamente. No primeiro, o estado Diagonal é o de menor energia, enquanto no segundo caso há independência na simetria. Uma solução Diagonal idêntica à do caso isotrópico (com um número muito grande de componentes como estamos considerando aqui) também é encontrada se as distribuições das componentes dos eixos forem independentes, uma vez que a soma infinita de variáveis aleatórias

$$n_m = \sum_{\mu} m_{\mu} n_{\mu} / m = \sum_{\mu} n_{\mu} / \sqrt{s} \quad (2.b.17)$$

tem distribuição normal (isto é, se comporta como uma Gaussiana de média zero e variância um). Por exemplo, para a anisotropia oblíqua, os estados de Mattis e Diagonal produzem

$$\begin{aligned} m^M &= b.a = \sqrt{b}; \\ m^D &= \sqrt{2/\pi} \end{aligned} \quad (2.b.18)$$

respectivamente, e daí o estado de Mattis passa a ser o mais estável justamente quando

$$b \geq b_c \equiv 2/\pi. \quad (2.b.19)$$

de acordo à (2.c.15).

O caso da anisotropia oblíqua é interessante, uma vez que existe toda uma linha de transição entre os estados Diagonal e de Mattis $T = T_c(b)$, ligando o ponto $(b, T) = (2/\pi, 0)$ com $(1/3, 1)$. Esta é dada pelos pontos em que a energia da fase D ,

$$\begin{aligned} f^D &= m^2/2 - T \langle \ln \cosh(\beta m z) \rangle_z; \\ m^D &= \langle z \tanh(\beta m z) \rangle_z, \end{aligned} \quad (2.b.20)$$

se iguala à da fase M ,

$$\begin{aligned} f^M &= m^2/2 - bT \ln \cosh(\beta m/\sqrt{b}); \\ m^M &= \sqrt{b} \tanh(\beta m/\sqrt{b}). \end{aligned} \quad (2.b.21)$$

Para nos certificarmos que esses estados são realmente os que importam no IRAM, vamos analisar na próxima seção alguns estados simétricos pares e ímpares, e introduziremos outro parâmetro relevante.

2.c Estado de Mattis ou Diagonal?

Nesta seção vamos inquirir quais as diferenças entre os modelos regidos pela energia livre formal (2.b.2) na qual se insere a distribuição de eixos. Para iniciar, compararemos as soluções simétricas Par (P , $s=2$), cuja magnetização (módulo) e energia livre são dadas por

$$\begin{aligned} M &= \frac{b}{2} \tanh(2\beta M) + u \tanh(\beta M), \\ f &= m^2/2 - T[2bu \ln \cosh(\beta M) + \frac{b^2}{2} \ln \cosh(2\beta M)], \\ M &\equiv m^P a/\sqrt{2}, \end{aligned} \quad (2.c.1)$$

onde usamos a equação correspondente à (2.b.6) e do apêndice B, (B.17), e a solução ímpar (I , $s=3$),

$$\begin{aligned} M &= \frac{b^2}{4} [\tanh(3\beta M) + \tanh(\beta M)] + b.u \tanh(2\beta M) + u^2 \tanh(\beta M), \\ f &= m^2/2 - T[3b(u^2 + \frac{b^2}{4} \ln \cosh(\beta M) + \frac{3}{2} ub^2 \ln \cosh(2\beta M) + \frac{b^3}{4} \ln \cosh(3\beta M)], \\ M &\equiv m^I a/\sqrt{3}, \end{aligned} \quad (2.c.2)$$

com o modelo de rede neural[31], que pode ser considerado um caso particular do Oblíquo, tomando $b=1$. Recordando que neste extremo, os estados pares em geral são sempre instáveis, e que as energias f^s podem ser ordenadas, à temperatura nula, como

$$f^M < f^I < f^5 < \dots < f^D < \dots < f^4 < f^P, \quad (2.c.3)$$

podemos calcular as transições entre os estados M , I , D , e P , diretamente igualando as magnetizações obtidas, respectivamente

$$\begin{aligned} m^M &= \sqrt{b}, \\ m^I &= \sqrt{3b}(1+u^2)/2, \\ m^D &= \sqrt{2/\pi}, \\ m^P &= \sqrt{b/2}(1+u), \end{aligned} \quad (2.c.4)$$

devido à (2.c.15).

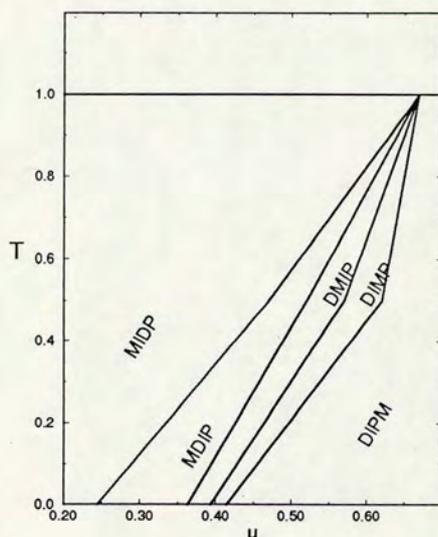


Figura 2.1: A sequência de fases metaestáveis, esquematicamente ordenada da esquerda para a direita, em função de u .

Daí, a transição $I \rightarrow D$ ocorre à $u \sim 0.244$, a $M \rightarrow D$ à $u \sim 0.363$, a $M \rightarrow I$ à $u \sim 0.393$, e a $M \rightarrow P$ à $u \sim 0.414$. Comparando numericamente as energias livres dos estados descritos acima, encontramos as pseudo-transições conforme a tabela de ordenamento dos estados da figura (2.1).

Essa troca de estabilidade entre as diversas soluções nos dá uma idéia da imensa variedade de possibilidades do IRAM. No entanto, apenas as fases D e M parecem ser mínimos globais. Os infinitos estados com $s \sim p$, contudo, devem se fundir com os assimétricos, permitindo ainda um tipo diferente de solução: apesar de existir um número finito (s) de componentes da magnetização macroscópicas, as $p - s$ microscópicas restantes, de ordem $1/\sqrt{p}$, contribuem significativamente para abaixar a energia do sistema. Algo similar ocorre num modelo de vidro-de-spin proposto há algum tempo[39], com Hamiltoniano idêntico ao (1.b.27), ou, na TCM, conforme (2.a.12), exceto pela interação

$$J_{ij}^H = J_0 + \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_j, \quad (2.c.5)$$

com ξ_μ bimodais, e cuja principal característica foi a simplicidade, de tal modo que é

passível de resolução pela teoria de campo médio, produzindo as equações estacionárias (na forma generalizada[45])

$$\begin{aligned} m &= \langle \tanh(\beta A) \rangle, \\ \vec{q} &= \langle \vec{\xi} \tanh(\beta A) \rangle, \\ A &\equiv J_0 + \vec{\xi} \cdot \vec{q}. \end{aligned} \tag{2.c.6}$$

A interpretação dada a m e q foi de parâmetros magnético e de vidro-de-spin, respectivamente.

Inspirados neste sistema, notamos que a permissão de uma distribuição trimodal pode jogar o papel da constante J_0 . Observe que, ao mesmo tempo em que, se esta anular-se então formalmente o vetor "vidro-de-spin" se torna o nosso \vec{m} , por outro lado se $J_0 = 1$ recaímos no modelo de rede neural. A vantagem do nosso caso é que, ainda com uma interação média nula, podemos descrever as fases F e G . Para simplificar, apoiados no fato de o estado de Mattis nunca perder a estabilidade em $u = 0$, tomaremos $s = 1$, escrevendo o produto escalar em (2.b.2) como

$$\begin{aligned} A &\equiv \vec{m} \cdot \vec{n} = m \cdot \rho + \omega, \\ \omega &\equiv \vec{l} \cdot \vec{\xi}, \end{aligned} \tag{2.c.7}$$

onde decomposemos cada um dos vetores

$$\begin{aligned} \vec{m} &= \begin{pmatrix} m \\ \vec{l} \end{pmatrix}, \\ \vec{n} &= \begin{pmatrix} \rho \\ \vec{\xi} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.c.8}$$

isto é, na sua componente "baixa" e nas $p-1$ componentes residuais "altas".

Da mesma forma que referimos abaixo da eq.(2.b.17) temos aqui uma distribuição Gaussiana (z) para $\omega = \sum_{\mu>1} l_\mu \xi^\mu$, também com média zero, mas agora com variância

$$\begin{aligned} Var(\omega) &= \sum_{\mu>1} l_\mu^2 \langle \xi_\mu^2 \rangle \\ &\equiv l^2 \quad : \quad \omega \sim l.z, \end{aligned} \tag{2.c.9}$$

onde utilizamos \sim para indicar a convergência no sentido de distribuição. Assim, a equação (2.b.2), por exemplo, fica como

$$f = m^2/2 + l^2/2 - T \langle \ln \cosh[\beta(m\rho + l.z)] \rangle, \quad (2.c.10)$$

de onde no lugar de (2.b.4) teremos as duas equações estacionárias seguintes:

$$\begin{aligned} m &= \langle \langle \rho \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle \rangle \equiv h_T, \\ l &= \langle \langle z \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle \rangle \equiv g_T, \end{aligned} \quad (2.c.11)$$

representando o "braket" duplo as médias sobre ρ e na Gaussiana em z .

A última igualdade pode ser transformada levando em conta a identidade

$$d\phi(z) = -z d\Phi(z), \quad (2.c.12)$$

e integrando por partes. Após eliminarmos o termo integrado (se anula nos limites ∞), sobra

$$\langle z \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle = \int d[\tanh \beta(m\rho + l.z)] \phi(z) \equiv C_\rho. \quad (2.c.13)$$

Então, efetuando a média baixa em C , a última expressão, junto com (2.c.11) fica

$$\begin{aligned} l &= lC, \\ C &\equiv \beta(1 - q), \end{aligned} \quad (2.c.14)$$

onde temos definido o parâmetro tipo vidro de spin

$$q \equiv \langle \langle \langle \sigma \rangle_T^2 \rangle \rangle = \langle \langle \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle \rangle. \quad (2.c.15)$$

Com estas colocações, concluímos que os únicos estados possíveis, além do paramagnético, são, em termos de $\vec{m} = \begin{pmatrix} m \\ l \end{pmatrix}$,

$$\begin{aligned} M &: \begin{pmatrix} m > 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ F &: \begin{pmatrix} m > 0 \\ l > 0 \end{pmatrix}, \\ G &: \begin{pmatrix} 0 \\ l > 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.c.16)$$

A primeira M e a última G nós já temos descrito anteriormente. A novidade está agora

na fase F , a qual denominaremos "Ferromagnética-mixta", devido à mescla do estado magnético com um ordenamento de tipo residual. É conveniente ressaltar sua distinção com respeito à fase M por apresentar um valor da magnetização m bastante inferior a daquela fase, para mesma temperatura, embora também difira da fase G . Diretamente de (2.c.14), obtemos que, sempre que $l > 0$,

$$C = 1 : q = \tau \equiv 1 - T, \quad (2.c.17)$$

ou seja, mesmo que $m = 0$, $q > 0$, e há uma transição a $T_g = 1$.

Uma linha de transição F - M pode ser obtida tomando o limite $l \rightarrow 0$, quando as equações (2.c.11) se tornam

$$\begin{aligned} q &\rightarrow \langle \tanh^2(\beta m \rho) \rangle = \tau \\ m &\rightarrow \langle \rho \tanh(\beta m \rho) \rangle, \end{aligned} \quad (2.c.18)$$

e as médias devem ser feitas sobre a componente baixa. No nosso caso Oblíquo,

$$\begin{aligned} \tau &= b \tanh^2(\beta m / \sqrt{b}); \\ m &= \sqrt{b} \tanh(\beta m / \sqrt{b}) = \sqrt{\tau}, \end{aligned} \quad (2.c.19)$$

de onde obtemos que o contorno $T_{FM}(b)$ desejado é dado por

$$\sqrt{\tau/b} = \tanh(\beta \sqrt{\tau/b}). \quad (2.c.20)$$

Próximo à temperatura crítica $T \approx 1$, podemos expandir a " $\tanh(\beta \sqrt{\tau/b})$ ", conduzindo à

$$\beta^2 \sim 3b \sim 1 + 2\tau. \quad (2.c.21)$$

Por outro lado, a $T \ll 1$,

$$b \sim \tau = 1 - T. \quad (2.c.22)$$

Particularmente a $T = 0$ mais alguns progressos analíticos podem ser realizados. As funções h e g das equações (2.c.11) se tornam

$$\begin{aligned} h_0 &= 2 \langle \rho \Phi(x\rho) \rangle = 2\sqrt{b}\Phi(ax); \\ g_0 &= 2 \langle \phi(x\rho) \rangle = 2[b\phi(ax) + u\phi(0)], \end{aligned} \quad (2.c.23)$$

em termos da variável

$$\frac{m}{l} \equiv x = \frac{h_0}{g_0}(x). \quad (2.c.24)$$

Em primeiro lugar, notamos que, embora a solução com $l = 0$ possa aparecer, sempre haverá outra com $l > u\phi(0) > 0$. A única exceção é exatamente o caso da rede neural, $u = 0$, quando então $2\Phi \rightarrow 1$, e chamamos a este estado de "recuperação". Desde que a $T = 0$, a energia livre torna-se

$$f = -m^2/2 - l^2/2 \quad (2.c.25)$$

as soluções F ou G serão as mínimos globais. Para ver justamente a transição F - G , nós expandimos a função à direita em (2.c.24), encontrando

$$x \sim [1 + \frac{3b-1}{6b}x^2 - O(x^4)]x, \quad (2.c.26)$$

o que dá $b_c = 1/3$, tal que se $b > b_c : m > 0$. Assim podemos pensar que não só a $T \sim 1$ como a $T \sim 0$ este seja o b crítico, mas à qualquer temperatura. Para garantir isto, realizamos inicialmente um estudo numérico, no VAX-4000/300 do IFUFRGS, comparando as energias livres dos 3 estados em (2.c.17) em todas as regiões do diagrama (T, b) , desenhando as 3 fases ordenadas M , F , e G .

Na seção seguinte estudaremos a estabilidade dos estados em cada fase, a fim de obter uma confiabilidade maior nos resultados por comparações entre os mínimos da energia livre.

2.d Estabilidade

A partir da energia livre obtida na secção anterior, vamos estudar a estabilidade das varias fases definidas em função dos parâmetros magnetização e resíduo. A matriz estabilidade, constituída das segundas derivadas da energia livre, tem a forma quadrática seguinte:

$$\mathcal{D}^2 f = \begin{pmatrix} D_m & \beta Q \\ \beta Q & D_l \end{pmatrix}, \quad (2.d.1)$$

cujos elementos são dados por

$$\begin{aligned} D_m &\equiv \partial^2 f / \partial m^2 = 1 - C_m, \\ D_l &\equiv \partial^2 f / \partial l^2 = 1 - C_l, \end{aligned} \quad (2.d.2)$$

na diagonal e

$$\begin{aligned} \beta Q &\equiv \partial^2 f / \partial m \partial l \\ &= \beta \langle\langle \rho z \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle \end{aligned} \quad (2.d.3)$$

fora dela, e onde definimos as funções

$$\begin{aligned} Q_m &\equiv 1 - TC_m = \langle\langle \rho^2 \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle, \\ Q_l &\equiv 1 - TC_l = \langle\langle z^2 \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (2.d.4)$$

Para obter seus autovalores, montamos a equação para o determinante,

$$|\mathcal{D}^2 f - \lambda I| = \lambda^2 - 2E_+ \lambda - \beta^2 Q^2 = 0, \quad (2.d.5)$$

com a variável

$$E_{\pm} \equiv \frac{D_m \pm D_l}{2}. \quad (2.d.6)$$

Resolvendo[54], encontramos

$$\lambda_{\pm} = E_{\pm} \pm \sqrt{E_{\pm}^2 + \beta^2 Q^2}; \quad (2.d.7)$$

que são os autovalores que controlam as flutuações transversais e longitudinais coletivamente, isto é, as estabilidades nas direções m e l são acopladas.

Tanto nos estados G como no M , quando m ou l se anulam, respectivamente, nós notamos de (2.d.3) que $Q = 0$, donde

$$\lambda_- = E_+ - |E_-| = \min(D_m, D_l) \quad (2.d.8)$$

é o menor autovalor, no qual estamos interessados. Por outro lado, como vimos na seção anterior, através da integração por partes, nas fases M e G , quando $l > 0$,

$$q \equiv \langle \langle \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle \rangle = \tau; \quad (2.d.9)$$

juntando os dois últimos resultados, podemos encontrar a transição F - M , colocando λ_- , no limite $l \rightarrow 0$, ou seja

$$\begin{aligned} \lambda_- &= D_l = 0 : \\ Q_l &= \langle \tanh^2(\beta m\rho) \rangle = q = \tau. \end{aligned} \quad (2.d.10)$$

Se considerarmos ainda a equação estacionária para m , obteremos então novamente (2.c.18) como a linha $T_{FM}(u)$, com $u = 1 - b$, abaixo e à direita da qual o estado de Mattis perde a estabilidade. Em nosso caso oblíquo, ela é descrita por (2.c.20) e está representada na figura(2.2). Ali, ademais das transições M - F , e F - D , traçamos uma linha separando as regiões onde o segundo estado mais estável é o de Mattis ou Diagonal, dentro da fase mixta F .

É bastante interessante a observação do que acontece se somarmos um campo uniforme externo, produzindo um termo Hamiltoniano do tipo

$$H_h = -\vec{h} \cdot \sum_i \vec{s}_i, \quad (2.d.11)$$

de forma que todas as equações serão alteradas pelo termo adicional

$$m \rightarrow M \equiv m + h, \quad (2.d.12)$$

onde admitimos que a magnetização será preferencialmente na direção do campo. Substituindo então em (2.c.18),

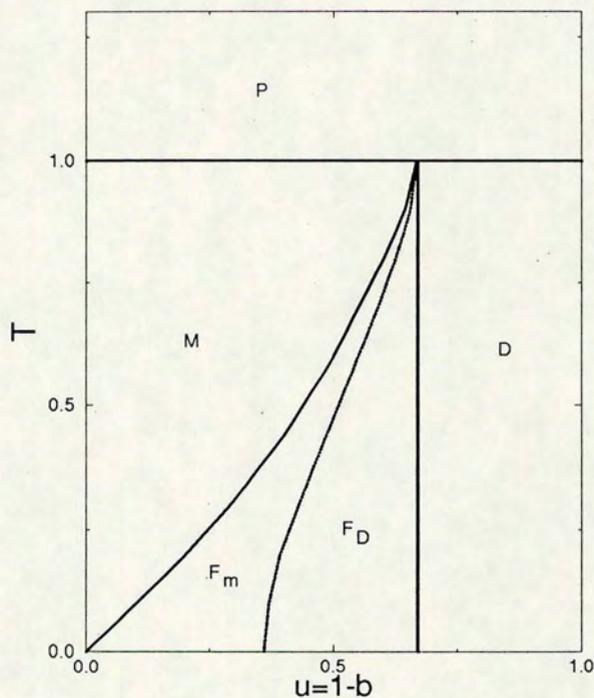


Figura 2.2: As fases abaixo de $T = 1$ são a de Mattis, Ferro-Mixta e Residual.

$$\begin{aligned}
 \langle \tanh^2(\beta M \rho) \rangle &= \tau, \\
 \langle \rho \tanh(\beta M \rho) \rangle &= m
 \end{aligned}
 \tag{2.d.13}$$

teremos a linha de Gabay-Toulouse (G-T) [22], a qual mostra que valor de h é necessário para alinhar a magnetização exclusivamente na sua direção, eliminando o ordenamento residual ortogonal nos spins, característico de sistemas tipo vidro-de-spin. Daí, em nosso caso oblíquo, similarmente a (2.c.20), onde

$$b \tanh^2(\beta M a) = \tau;$$

$$ba \tanh(\beta M a) = M - h, \quad (2.d.14)$$

nós achamos

$$\sqrt{b} \tanh[\beta(\sqrt{\tau} + h)] = \sqrt{\tau}, \quad (2.d.15)$$

que é a linha (G-T) explícita. Também podemos obtê-la expandindo diretamente (2.d.13) para $\tau \ll 1$,

$$\begin{aligned} \beta^2 M^2 &\sim \tau: \\ \beta M - (\beta M)^3 V &\sim M - h, \end{aligned} \quad (2.d.16)$$

de onde obtemos, (agora para uma distribuição "em geral")

$$\tau^{3/2} \sim \frac{h}{V-1}, \quad (2.d.17)$$

com V definido em (D.7). Esta é a linha de Almeida e Thouless (A-T); para campos inferiores a $h_c(\tau)$ aparece uma orientação randômica no sistema.

Dois reparos são oportunos neste momento. Em primeiro lugar, vemos que o comportamento descrito em (2.d.17) é típico de spins de Ising, concordando com o limite que nós estamos lidando. No entanto, a linha G-T em (2.d.13) se refere justamente a spins vetoriais: há portanto um "crossover" aqui, na vizinhança de $\tau \sim 0$. Em segundo lugar, é necessário tomarmos $V > 1$ para que a linha A-T em (2.d.17) faça sentido (não pode haver raiz negativa). Isto implica $u > 2/3$, ou seja, estamos na fase de vidro-de-spin.

Capítulo 3

LIMITE- α

3.a Ergodicidade e Réplicas

O princípio básico na TCM é a eliminação das flutuações no limite termodinâmico. Na representação em termos da integral funcional pela expansão assintótica, quando a função partição é

$$Z = \int d\vec{m} e^{-NK(\vec{m})} \sim e^{-NK_0} |K_2|^{-1/2}, \quad (3.a.1)$$

onde o argumento da exponencial é rapidamente decrescente fora do seu máximo $-NK_0$, nós podemos desprezar já a partir da segunda derivada (Hessiano),

$$(\partial_{\mu\nu}^2 K) \equiv K_2, \quad (3.a.2)$$

Para notar isto, calculamos a energia livre, tomando o logaritmo

$$\begin{aligned} \beta f_N &= \frac{\ln Z}{-N} \\ &= K_0 + \frac{1}{2N} \ln |K_2| \\ &\equiv K_0 + \frac{1}{2N} \text{Tr} \ln K_2. \end{aligned} \quad (3.a.3)$$

Desde que o traço contenha um número finito de parcelas, no limite $N \rightarrow \infty$, o segundo termo se anula.

No caso do IRAM, o argumento é

$$\begin{aligned} K &= \beta \vec{m}^2 / 2 - [\ln \cosh(\beta A)], \\ A &\equiv \vec{m} \cdot \vec{n}, \end{aligned} \quad (3.a.4)$$

onde definimos a "média" parcial

$$[B] \equiv \sum_i B_i/N \quad (3.a.5)$$

A primeira derivada nos informa a condição de estacionariedade,

$$\partial_\mu K = \beta\{m_\mu - [n_\mu \tanh(\beta A)]\} = 0, \quad (3.a.6)$$

enquanto o Hessiano será

$$\begin{aligned} K_2 &= \beta(\delta_{\mu\nu} - C_{\mu\nu}), \\ C_{\mu\nu} &\equiv \beta[n_\mu n_\nu (1 - \tanh^2 \beta A)], \end{aligned} \quad (3.a.7)$$

de onde obtemos a energia

$$\begin{aligned} \beta f_N &\sim K_0 + \frac{\alpha}{2p} \sum_\mu \ln \lambda_\mu(K_2); \\ \alpha &\equiv \frac{p}{N}, \end{aligned} \quad (3.a.8)$$

substituindo o traço pela soma dos autovalores. Aqui propomos uma solução onde os elementos cruzados são desprezados, restando apenas

$$\begin{aligned} C_{11} &= \beta[\rho^2\{1 - \tanh(\beta A)\}], \\ C_{pp} &= \beta[n_p^2\{1 - \tanh(\beta A)\}]. \end{aligned} \quad (3.a.9)$$

Então só são relevantes os $p-1$ autovalores degenerados correspondentes às flutuações transversais, que coincidem com o produto dos elementos diagonais da matriz Hessiana (reduzida da primeira linha e coluna) em (3.a.7),

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} \text{Tr} \ln K_2 &\rightarrow \ln \Upsilon; \\ \Upsilon &= \beta(1 - C_{pp}); \end{aligned} \quad (3.a.10)$$

Alternativamente, podemos partir em (3.a.1) com as hipótese do capítulo anterior, escrevendo a integral como

$$\begin{aligned} Z &= \int dm l^{p-2} dl d\Omega_{p-1} e^{-NG} \\ &\sim e^{-NG_0}, \end{aligned} \quad (3.a.11)$$

agora com $A = \beta(m\rho + l.z)$ em (3.a.4), onde temos incluído o fator assintótico na exponencial,

$$G \equiv K - \alpha \ln l \quad (3.a.12)$$

A energia livre, então, considerando até os termos em primeira ordem de α fica

$$f_N \sim \frac{m^2 + l^2}{2} - T[\ln \cosh \beta(m\rho + l.z)] + \alpha T \ln l, \quad (3.a.13)$$

e a condição de extremo na integração impõe as equações autoconsistentes

$$\begin{aligned} m &= [\rho \tanh \beta(m\rho + l.z)], \\ l &= [z \tanh \beta(m\rho + l.z)] + \alpha \frac{T}{l} \end{aligned} \quad (3.a.14)$$

Embora tenhamos nos restringido apenas à primeira ordem de aproximação, já é possível perceber o enorme problema a ser enfrentado: na definição de Υ em (3.a.10), assim como nas expressões acima, falta realizar a média "parcial" (3.a.5). Essa dificuldade inicial é eliminada nos casos com $p \ll N$, desde que temos certeza que as variáveis aleatórias são ergódicas, isto é, podemos usar a lei dos grandes números (LGN), com

$$[B] \rightarrow \langle B_i \rangle \quad (3.a.15)$$

para quase toda configuração de sítios. A flutuação é

$$\text{Var}[B] = \text{Var}(B)/N, \quad (3.a.16)$$

a qual geralmente é desprezível, e daí a "média da média" é automaticamente realizada,

o que normalmente é chamada a automediança. Infelizmente nada podemos afirmar no $\lim -\alpha$, assim chamado o caso limite em que ambos p e N tendem a infinito de tal forma que sua razão seja finita, quer dizer,

$$\alpha > 0 \Rightarrow \lim -\alpha. \quad (3.a.17)$$

Também indicaremos esta definição como o limite- α .

Nesta situação, poderíamos pensar em aproximar o cálculo da dispersão $\text{Var}(B)$ pela variança de $-\vec{n}$ através de uma expansão do tipo

$$\text{Var}(B) \sim (\partial_n B)^2 \cdot \text{Var}(|\vec{n}|). \quad (3.a.18)$$

Esse raciocínio, no entanto, não é rigoroso, pois não sabemos ao certo qual a relação entre elas. Porém, mesmo que superássemos este problema, ainda esbarraríamos em outro, no mínimo tão grande quanto ele: a aproximação em (3.a.1) vai apenas até o segundo termo na expansão assintótica da integral [55]; resta calcular todos aqueles em que estamos interessados, até a ordem apropriada em α , o que é bastante árduo.

Foi pensando nisto que nas últimas duas décadas o método de cálculo de médias configuracionais mais utilizado em sistemas desordenados utiliza a técnica de réplicas. Esta se origina da constatação de que, com a seguinte identidade:

$$\ln X \equiv \frac{\ln X^\epsilon}{\epsilon} \equiv \partial_\epsilon X^\epsilon |_{\epsilon \rightarrow 0}, \quad (3.a.19)$$

podemos resolver a energia livre mediada sem integrar o logarítmo,

$$\begin{aligned} f &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle \ln Z \rangle}{-\beta N} = \partial_\epsilon f_\epsilon |_{\epsilon \rightarrow 0}; \\ f_\epsilon &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{Z_\epsilon}{-\beta N}. \end{aligned} \quad (3.a.20)$$

Qualquer das identidades em (3.a.19) podem ser usadas; nós adotaremos a última, com a definição

$$Z_\epsilon \equiv \langle Z^\epsilon \rangle; Z^\epsilon = \text{Tr} e^{-\beta H^\epsilon}, \quad (3.a.21)$$

onde o Hamiltoniano replicado para o IRAM é a soma de um número inteiro ϵ de cópias equivalentes e independentes,

$$H^\epsilon = \sum_\alpha^\epsilon H_\alpha = -N \frac{J}{2} \tilde{m}_N^2. \quad (3.a.22)$$

Faz-se então a continuação analítica para ϵ reais e toma-se o $\lim \epsilon \rightarrow 0$. Este procedimento chama-se o método das réplicas. Aqui temos usado a mesma notação compacta do primeiro capítulo, conforme (1.b.18), por exemplo:

$$\tilde{m}^2 \equiv \sum_{\alpha}^{\epsilon} (\tilde{m}^{\alpha})^2. \quad (3.a.23)$$

Embora nesta tese nós venhamos a evitar uma discussão aprofundada desses fatos, é bom esclarecer que nem tudo é simples. Enquanto que da troca de limites $N \Leftrightarrow \epsilon$ efetuada a partir de (3.a.20) não aparece nenhuma falha, há uma intrigante perda de analiticidade na continuação da variável inteira ϵ para real. Além disso, já na passagem de ϵ por 1, ocorre uma preocupante singularidade na matriz "vidro-de-spin" escolhida como parâmetro do sistema. Contudo, os intervalos em que isso ocorre (baixas temperaturas), levando a comportamentos como entropia negativa (descobertos pela primeira vez no modelo SK [47]), têm sido razoavelmente controlados.

A variável da última equação, na qual o Hamiltoniano é quadrático,

$$\tilde{m}_N \equiv \sum_i \tilde{n}_i \tilde{\sigma}_i / N, \quad (3.a.24)$$

da mesma forma que na seção (2.c), pode ser decomposta em componentes "baixas" e "altas". Escolheremos novamente $s=1$ e as $p-1$ componentes residuais, na forma

$$\tilde{m} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{m} \\ \tilde{l} \end{pmatrix} \quad (3.a.25)$$

e fatorizaremos o argumento da função partição efetiva, como [5]

$$Z_{\epsilon} = \langle \text{Tr} \delta Z_M \delta Z_L \rangle. \quad (3.a.26)$$

O primeiro fator é ergódico, e através da transformação Gaussiana generalizada, fica

$$\begin{aligned} \delta Z_M &\equiv \int d\Phi(\sqrt{\beta N} \tilde{x}) A_x, \\ A_x &= \exp(\beta \sum_i \tilde{\sigma}_i \cdot \tilde{x} \rho_i). \end{aligned} \quad (3.a.27)$$

O segundo deve ser mediado, sendo

$$\delta Z_L \equiv \int d\Phi(\sqrt{\beta N} \tilde{y}) A_y;$$

$$A_y = \prod_i B_i, \quad (3.a.28)$$

onde temos definido

$$\begin{aligned} B &= e^{\vec{a} \cdot \vec{\xi}}, \\ \vec{a} &\equiv \beta \tilde{\sigma} \cdot \vec{y}. \end{aligned} \quad (3.a.29)$$

Para levar a efeito a média sobre as variáveis "congeladas" $\vec{\xi}$, algumas condições são necessárias. Se, por exemplo, as componentes não forem independentes, como no caso da isotropia rígida da equação (B..2), a média marginal sobre elas, em (3.a.26) redundará em fatores dependentes de componentes baixas ρ . Isto tornará o problema impraticável. Outro exemplo é o da anisotropia cúbica, quando, separando os termos, baseando em (B..11), nós temos

$$\langle B \rangle = \sum_{\mu > 1} \cosh(\sqrt{p} a^\mu) / p + \cosh(\sqrt{p} a^1) / p. \quad (3.a.30)$$

Como o próximo passo deve ser a integração sobre as variáveis Gaussianas em \vec{a} , devemos expandir

$$\langle B \rangle \sim \sum_{\mu} (1 + p a_\mu^2 / 2 + p^2 a_\mu^4 / 24) / p \sim 1 + \vec{a}^2 / 2 + O(\vec{a}^2) \sim e^{\vec{a}^2 / 2}. \quad (3.a.31)$$

Esta exponenciação considera, no entanto, implicitamente, que o módulo $|\vec{a}|$ é muito pequeno, o que só podemos afirmar, na melhor das hipóteses, de cada componente a_μ .

Para observar melhor isto, vamos expandir a exponencial em (3.a.29) e após mediar,

$$\langle B \rangle \sim \langle 1 + \omega + \omega^2 / 2 + \omega^3 / 6 + \omega^4 / 24 \rangle, \quad \omega \equiv \vec{a} \cdot \vec{\xi}; \quad (3.a.32)$$

zerando as médias "ímpares", sobram as pares que estão no apêndice B, (B..8), donde

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &\sim 1 + a^2 / 2 + \langle \omega^4 \rangle / 24; \\ \langle \omega^4 \rangle / 3 &= W a^4 + (V - W) \sum_{\mu} a_\mu^4. \end{aligned} \quad (3.a.33)$$

Desde que ocorra $W \equiv 1$ (logo, não vale para a distribuição cúbica), podemos concluir que a condição para que

$$\langle B \rangle = e^{a^2 / 2}; \quad a^2 \equiv \sum_{\mu > 1} a_\mu^2 \quad (3.a.34)$$

seja exato até $O(1/p)$ é simplesmente

$$\sum_{\mu} a_{\mu}^4 \ll a^4. \quad (3.a.35)$$

Este ponto não está suficientemente claro na literatura [5], onde tem sido sugerida apenas a pequenez de a_{μ} (microscopia dos overlaps residuais), o que é uma condição bem mais forte.

Satisfeita essa condição (fraca), que coincide em desprezar flutuações maiores que as Gaussianas, a média pode ser realizada pelo Teorema do Limite Central (TLC), pois o argumento da exponencial é normalmente distribuído,

$$\begin{aligned} \omega &\sim a.z \Rightarrow \\ \langle B \rangle &= \int d\Phi(z) e^{a.z} = e^{a^2/2} \end{aligned} \quad (3.a.36)$$

novamente. Na próxima seção vamos introduzir os parâmetros de ordem relevantes para o cálculo da energia pelo método de Laplace.

3.b Ferromagnetismo ou Vidro-de-Spin?

Seguindo a linha de cálculo da seção anterior, vamos agora desenvolver o fator residual em (3.a.28), primeiramente tomando o produto em sítios,

$$\begin{aligned} \prod_i B_i &= e^{\sum_i a_i^2/2} \\ &= \prod_{\mu>1} \exp(\beta N \tilde{y}_\mu \cdot \mathcal{C}_N \cdot \tilde{y}_\mu/2), \end{aligned} \quad (3.b.1)$$

onde definimos a matriz de correlação entre réplicas de spins,

$$\mathcal{C}_N \equiv \beta \sum_i \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_i / N. \quad (3.b.2)$$

A seguir integramos nas variáveis "altas", obtendo

$$\begin{aligned} \delta Z_L &= \prod_\mu \int d\tilde{y}_\mu \exp[\beta N \tilde{y}_\mu \cdot (\mathcal{I} - \mathcal{C}_N) \cdot \tilde{y}_\mu] \\ &= e^{-\frac{N}{2} \text{Tr} \ln |\mathcal{I} - \mathcal{C}_N|}. \end{aligned} \quad (3.b.3)$$

A última expressão é resultado da integral Gaussiana generalizada.

Na etapa seguinte, introduzimos um vínculo δ de Dirac para a variável acoplada à correlação de spins,

$$e^{-\frac{N}{2} \text{Tr} \ln |\mathcal{I} - \mathcal{C}_N|} = \int D\mathcal{C} \delta(\mathcal{C} - \mathcal{C}_N) e^{-\frac{N}{2} \text{Tr} \ln |\mathcal{I} - \mathcal{C}|}, \quad (3.b.4)$$

onde usaremos daqui em diante a notação compacta

$$D\mathcal{A} \equiv \prod_{\alpha\beta} d\mathcal{A}_{\alpha\beta}. \quad (3.b.5)$$

Então, para podermos realizar a média térmica, usamos a representação integral de Fourier para a delta,

$$\begin{aligned} \delta(\mathcal{C} - \mathcal{C}_N) &= \int D\lambda e^{i\lambda \times (\mathcal{C} - \mathcal{C}_N)}, \\ \mathcal{A} \times \mathcal{B} &\equiv \sum_{\alpha\beta} \mathcal{A}_{\alpha\beta} \mathcal{B}_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.b.6)$$

Supondo uma integração sobre contornos imaginários, vamos fazer a substituição de variáveis com a qual resulta

$$e^{-\frac{\beta}{2}Tr \ln |C - C_N|} = \int DCD\mathcal{R} e^{-NG_0} \prod_i e^{\beta H_0^i} \quad (3.b.7)$$

onde definimos

$$\begin{aligned} G_0 &\equiv \frac{\beta}{2} \mathcal{R} \times C + \frac{\alpha}{2} Tr \ln (\mathcal{I} - C), \\ H_0 &\equiv \beta \tilde{\sigma} \cdot \mathcal{R} \cdot \tilde{\sigma} / 2 \end{aligned} \quad (3.b.8)$$

Note que estas expressões independem da distribuição em particular dos eixos de anisotropia, bastando que satisfaçam a condição em (3.a.35).

Agora vamos adicionar a contribuição do termo magnético, conforme (3.a.27), com o qual a função partição replicada se torna

$$\begin{aligned} Z_\epsilon &= \int d\tilde{m} DCD\mathcal{R} e^{-NG} \langle \prod_i \hat{Z}_i \rangle; \\ G &\equiv G_0 + \beta \tilde{m}^2 / 2; \end{aligned} \quad (3.b.9)$$

onde definimos o Hamiltoniano efetivo por

$$\begin{aligned} \hat{Z} &= Tr e^{\beta \hat{H}}, \\ \hat{H} &\equiv H_0 + \tilde{\sigma} \cdot \tilde{m} \rho. \end{aligned} \quad (3.b.10)$$

A média restante é realizada automaticamente, pela LGN (veja 3.a.15), e de acordo com o método de Laplace, temos

$$\beta f_\epsilon = G - \langle \ln \hat{Z} \rangle_\rho + O(\epsilon^2). \quad (3.b.11)$$

Esta expressão formal para a energia livre replicada deve ser minimizada nos parâmetros de magnetização ordinária

$$\tilde{m} \equiv \langle \rho[\tilde{\sigma}] \rangle, \quad (3.b.12)$$

de vidro-de-spin, no limite termodinâmico do vínculo (3.b.2),

$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta} &\equiv \beta \langle [\sigma_\alpha][\sigma_\beta] \rangle \\ &\equiv \beta(\delta_{\alpha\beta} + q_{\alpha\beta}), \end{aligned} \quad (3.b.13)$$

e da dispersão "residual" R , de acordo com a interpretação do capítulo anterior (nesta abordagem de réplicas R atua como multiplicador de Lagrange para C). Segundo se depreende de (3.b.1)-(3.b.8), com a substituição $y \rightarrow l$,

$$\begin{aligned} R_{\alpha\beta} &\equiv \langle \vec{l}_\alpha \cdot \vec{l}_\beta \rangle, \\ \vec{l} &\equiv \langle \vec{\xi}[\vec{\sigma}] \rangle_\xi, \end{aligned}$$

onde a média interna é a térmica, a externa é sobre ρ , e as duas igualdades matriciais acima entendem-se para as ϵ^2 componentes. Como é convencional em problemas de vidro-de-spin [47], nós utilizaremos a partir de aqui o *Ansatz* de simetria de réplicas, o qual implica que, no ponto estacionário, todos os ϵ subsistemas são, além de equivalentes, idênticos. Assumiremos então

$$\begin{aligned} m_\alpha &\equiv m, \\ q_{\alpha\beta} &\equiv q(1 - \delta_{\alpha\beta}), \\ R_{\alpha\beta} &\equiv R(1 - \delta_{\alpha\beta}), \end{aligned} \tag{3.b.14}$$

de modo que os termos em (3.b.8) se tornam

$$\begin{aligned} \mathcal{R} \times \mathcal{C} &= \beta q R \epsilon^2 - \beta q R \epsilon, \\ Tr \ln \mathcal{I} - \mathcal{C} &= \ln \lambda_1^{\epsilon-1} \lambda_P, \\ \vec{\sigma} \cdot \mathcal{R} \cdot \vec{\sigma} &= R \left[\left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right)^2 - \tilde{\sigma}^2 \right]. \end{aligned} \tag{3.b.15}$$

Os autovalores para uma matriz do tipo $\mathcal{A} \equiv a\mathcal{P} + b\mathcal{I}$, isto é, a soma de um projetor com uma identidade, podem ser obtidos por meio de recorrência sobre os determinantes menores, resultando, no nosso caso, em

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\equiv b = 1 - C, \\ \lambda_P &\equiv b + \epsilon a, \quad a = -\beta q, \end{aligned} \tag{3.b.16}$$

onde definimos o parâmetro $C \equiv \beta(1 - q)$. Falta ainda linearizar o argumento da função partição efetiva,

$$\hat{Z} = e^{-\beta^2 R/2} Tr e^{\beta \rho \sum_\alpha \sigma_\alpha} \int d\Phi(z) e^{\beta l z \sum_\alpha \sigma_\alpha}, \tag{3.b.17}$$

com $l \equiv \sqrt{R}$. Então obtemos, no lugar de (3.b.11),

$$\begin{aligned} \beta f_\epsilon &= \beta(m^2 + l^2 C) \frac{\epsilon}{2} - \langle \ln \int d\Phi(z) \cosh^\epsilon \beta(m\rho + l.z) \rangle \\ &+ \frac{\alpha}{2} [(\epsilon - 1) \ln(1 - C) - \ln(1 - C - \epsilon\beta q)] \end{aligned} \quad (3.b.18)$$

e finalmente podemos efetuar o limite em (3.a.20), quando ..

$$\begin{aligned} f &= f_0 + \frac{\alpha}{2} f_C, \\ f_0 &= (m^2 + l^2 C)/2 - T \langle \ln[\cosh \beta(m\rho + l.z)] \rangle, \\ f_C &= T \ln(1 - C) - \frac{q}{1 - C}; \quad q \equiv 1 - TC. \end{aligned} \quad (3.b.19)$$

O primeiro termo é muito semelhante ao da energia livre obtida no capítulo anterior, para o caso α nulo, à excessão do fator C multiplicando o parâmetro residual. As médias são sobre a componente baixa do eixo aleatório e sobre o ruído Gaussiano. O último termo só existe para $\alpha > 0$, e guarda alguma familiaridade com o de (3.a.13).

Antes de iniciarmos a busca das soluções estacionárias que minimizam a energia (3.b.20), retornemos ao caso $\alpha = 0$; de acordo com (2.c.14), para que a última energia e aquela em (2.c.10) coincidam, devemos ter $C \equiv 1$ neste limite. A condição de extremo aplicada à variável C produz

$$\begin{aligned} \partial_C f &= \frac{l^2}{2} - \frac{\alpha}{2} \frac{q}{(1 - C)^2} = 0 \Rightarrow \\ l &= \frac{\sqrt{\alpha q}}{1 - C}; \end{aligned} \quad (3.b.20)$$

esta última igualdade significa que, se $\alpha \rightarrow 0$, então $C \rightarrow 1$, de modo a manter-se l finito, como desejamos. Isto assegura a coerência entre as duas abordagens: a TCM trivial e a de réplicas.

3.c Estados Estacionários

Da energia livre simétrica de réplica obtida na seção anterior, em função dos parâmetros

$$\begin{aligned} m &= \langle\langle \rho[\sigma] \rangle\rangle, \\ q &= \langle\langle [\sigma]^2 \rangle\rangle, \\ l^2 &= \langle\langle z[\sigma]^2 \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3.c.1)$$

onde as médias externas são sobre o ruído Gaussiano z e sobre a componente baixa do eixo, respectivamente, e a interna (sobre as variáveis "rápidas" do sistema) é

$$[\sigma] \equiv \tanh \beta(m\rho + l.z), \quad (3.c.2)$$

obtemos os estados estacionários que são as soluções das equações acima. Estes resultados podem ser igualmente (e mais facilmente) encontrados derivando a energia livre a fim de obter um extremo:

$$\begin{aligned} \partial_m f &= m - \langle\langle \rho \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle, \\ \partial_l f &= lC - \langle\langle z \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle, \\ \partial_C f &= \frac{l^2}{2} - \frac{\alpha}{2} \frac{q}{(1-C)^2}. \end{aligned} \quad (3.c.3)$$

Igualando estas expressões a zero obtemos, além da última equação da seção anterior, as duas seguintes:

$$\begin{aligned} m &= \langle\langle \rho \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle, \\ C &= \beta(1-q) \Rightarrow q = \langle\langle \tanh^2 \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3.c.4)$$

onde a segunda igualdade resulta de uma integração por partes do estilo da efetuada em (2.c.13), e da definição de q . Considerando que os parâmetros l e C vem acoplados, um deles pode ser considerado como "auxiliar", então vamos juntar as duas últimas equações de (3.c.4),

$$l(1-C) = \sqrt{\alpha q} \Rightarrow l = \langle\langle z \tanh \beta(m\rho + l.z) \rangle\rangle + \sqrt{\alpha q}. \quad (3.c.5)$$

Possuimos então uma equação implícita para a magnetização m e outra para o resíduo l .

Particularizaremos agora para algumas das distribuições independentes do apêndice B. No caso isotrópico Gaussiano, essas duas equações, integrando por partes, ficam

$$\begin{aligned} m &= mC, \\ l &= lC + \sqrt{\alpha q}; \end{aligned} \quad (3.c.6)$$

a solução para $m > 0$ exige que $C \equiv 1$. Portanto, ou α é estritamente nula, ou $q = 0$. Como a soma

$$\begin{aligned} \beta(m\rho + l.z) &= \beta\delta.Z, \\ \delta &\equiv \sqrt{m^2 + l^2}, \end{aligned} \quad (3.c.7)$$

é uma nova Gaussiana Z , temos

$$q = \langle \tanh^2(\beta\delta.Z) \rangle, \quad (3.c.8)$$

que é positivo, e daí temos uma contradição. Concluimos então que só existe a solução de vidro de spin em sistemas IRAM isotrópicos, com α finito, levantando a degenerescência do caso $\alpha = 0$.

O caso em que nos deteremos a partir de agora é o oblíquo. Podemos escrever as equações como

$$\begin{aligned} m &= h_T = \sqrt{b} \langle \tanh \beta(m.a + l.z) \rangle, \\ l &= g_T + \sqrt{\alpha q}, \end{aligned} \quad (3.c.9)$$

com as mesmas funções definidas em (2.c.11), e onde

$$\begin{aligned} g_T &= b \langle \tanh \beta(m.a + l.z) \rangle + u \langle \tanh \beta(l.z) \rangle; \\ q &= b \langle \tanh^2 \beta(m.a + l.z) \rangle + u \langle \tanh^2 \beta(l.z) \rangle. \end{aligned} \quad (3.c.10)$$

Assumindo $b = 1 = a$, $u = 0$, nós recuperamos as equações para o modelo de rede neural [5]. Os diagramas serão discutidos na seção seguinte.

No caso de temperatura nula, podemos usar uma única variável para descrever o sistema, já que $q \rightarrow 1$, como na seção (2.c),

$$\frac{m}{l} \equiv x = K(x) = \frac{h_0}{\sqrt{\alpha + g_0}}, \quad (3.c.11)$$

com as definições de (2.c.2). É interessante observar como a variável α desempenha o papel de u : tanto um como outro impedem o resíduo l de se anular. Por sua vez, a energia livre,

$$f = (m^2 + l^2 C)/2 - T \langle\langle |\beta(m\rho + l.z)| \rangle\rangle - \frac{\alpha/2}{1 - C}, \quad (3.c.12)$$

pode ainda ser escrita, realizando a média e usando as equações para m , l e C , como

$$f = -(m^2 + l^2)/2, \quad \dots \quad (3.c.13)$$

ou seja, proporcional ao quadrado do módulo da magnetização, como seria de se esperar. É relativamente simples então avaliar a profundidade da energia nas diferentes fases M e G , o que foi feito utilizando-se um programa em Pascal, rodado num IBM-3090.

3.d Diagrama de Fases

Vamos nesta seção apresentar os diagramas de fases explícitos obtidos com o método de réplicas. Inicialmente estudamos o caso da temperatura nula, quando, de acordo com (3.c.11), a equação autoconsistente é

$$y = K(y) \equiv \frac{\Phi(y)}{\phi(y) + \Upsilon}, \quad (3.d.1)$$

onde temos definido as variáveis

$$\Upsilon \equiv \sqrt{\alpha}/2 + u[\phi(y) + \sqrt{1/2\pi}]; \quad y = xa. \quad (3.d.2)$$

Notamos que valores de u grandes levam a menores valores de α críticos, isto é, existe uma linha (u, α) de transição onde inicia-se o aparecimento de estados magnéticos (de "recuperação", na linguagem de rede neural), e outra onde estes se tornam estáveis. Além desta fase temos estudado a I (fase ímpar), descrita na seção (2.c), a qual podemos encontrar através das equações acopladas

$$\begin{aligned} m &= \sqrt{3b}[b^2(h_3 + h_1)/2 + 2ub.h_2 + 2u^2.h_1], \\ l &= \sqrt{\alpha} + [b^3(g_3 + 3g_1)/2 + 3b^2u(g_2 + g_0) + 6bu^2.g_1 + 2u^3.g_0], \end{aligned} \quad (3.d.3)$$

e a P (fase par), cujas equações são

$$\begin{aligned} m &= \sqrt{2b}[b/2.h_2 + u.h_1], \\ l &= \sqrt{\alpha} + [b^2/2g_2 + 2bu.g_1 + (b^2/2 + u^2)g_0], \end{aligned} \quad (3.d.4)$$

usando as distribuições no apêndice B, e onde temos generalizado as funções definidas em (2.c.23), com

$$\begin{aligned} h_k &\equiv 2\Phi(ky), \\ g_k &\equiv 2\phi(ky); \quad y = ma/l. \end{aligned} \quad (3.d.5)$$

Os diagramas estão representados nas figuras (3.1-2).

Além da fase paramagnética, observamos na figura (2.2) o aparecimento de regiões ordenadas de baixa temperatura do tipo estado de Mattis, Ferromagnético (mixto) e Diagonal.

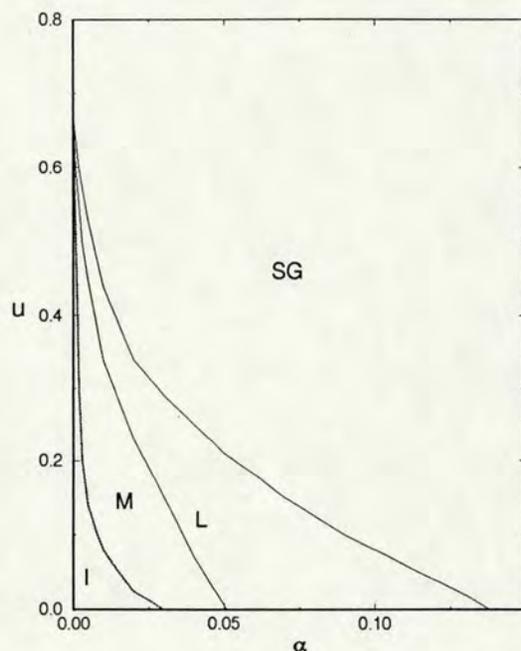


Figura 3.1: $T=0$. A linha superior indica o surgimento do estado M; na seguinte eles se tornam mínimos globais. Abaixo da linha tracejada aparece o estado I.

No plano (u, α) , à temperatura nula, obtemos que o estado Impar é, no melhor dos casos, metaestável; seu surgimento começa em $\alpha_I = .0295$, para $u = 0$, como vemos na fig.(3.1). Nesta região os mínimos globais são os estados de Mattis, que surgem em $\alpha_M = .051$. Para $\alpha \geq \alpha_M(u)$, esses estados são mínimos locais, até desaparecerem completamente em $\alpha_c = .138$ (com $u=0$). Acima da linha $\alpha_M(u)$ a menor energia livre pertence à solução de vidro de spin.

Já a fase Par surge como estável para α muito pequenos ($\alpha \leq .00002$) e $u \sim .6$, como se vê na fig.(3.2). A partir daí a fase M é o mínimo global, até a linha $\alpha_M(u)$.

Agora vamos dar um pouco de atenção à fase vidro-de-spin. Sendo, $m = 0$, então temos uma única equação,

$$l = \sqrt{\alpha q_l} + g_l, \tag{3.d.6}$$

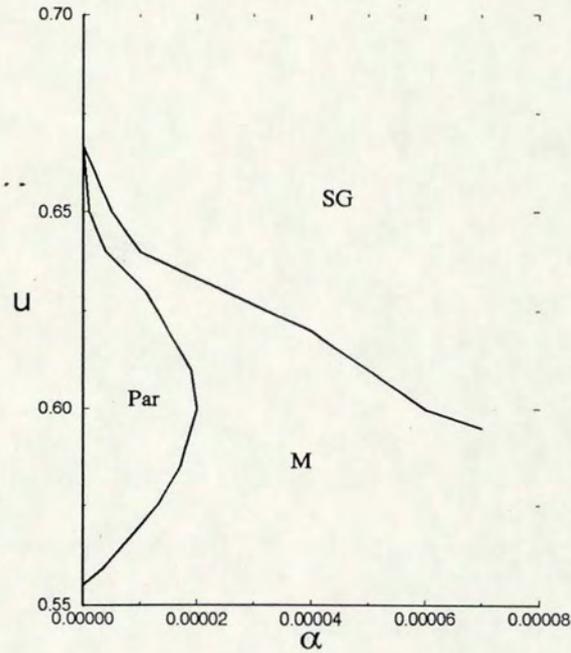


Figura 3.2: A curva superior indica a transição M-SG, enquanto na da esquerda o estado Par se torna mínimo global.

onde as funções q e g são simplesmente

$$\begin{aligned} q_l &\equiv \langle \tanh^2 \beta(l.z) \rangle, \\ g_l &\equiv \langle z \tanh \beta(l.z) \rangle. \end{aligned} \quad (3.d.7)$$

Uma expansão da "tanh" próximo à $l = 0$ nos dá

$$\begin{aligned} q_l &\simeq \langle (\beta l.z)^2 - 2(\beta l.z)^4/3 \rangle \sim (\beta l)^2 [1 - 2(\beta l)^2], \\ g_l &\simeq \langle \beta l.z^2 - (\beta l)^3 z^4/3 \rangle \sim \beta l [1 - (\beta l)^2], \end{aligned} \quad (3.d.8)$$

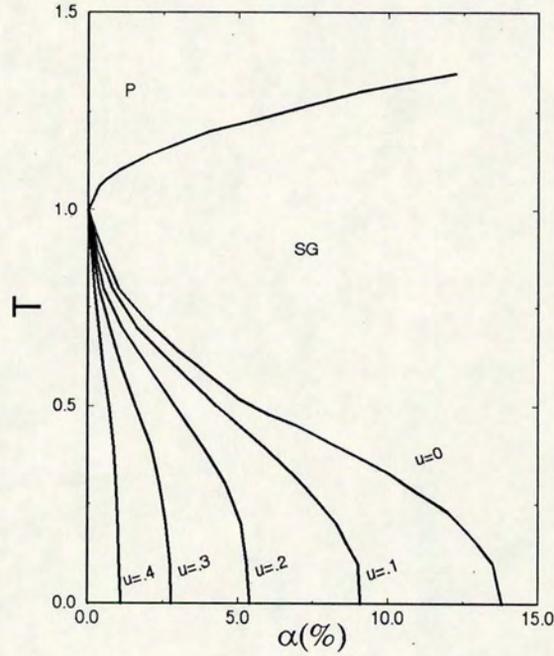


Figura 3.3: A linha superior separa a fase P da G ; as diversas curvas inferiores indicam o surgimento do estado F , para diferentes valores de u .

de modo que a solução de (3.d.6) para $0 < l \ll 1$ é

$$T \sim (\sqrt{\alpha} + 1)[1 - (\beta l)^2] \Rightarrow l^2 \sim \tau_g, \quad (3.d.9)$$

onde a temperatura reduzida para a transição da fase paramagnética à de vidro de spin independe de b ,

$$\tau_g \equiv 1 - T/T_g; T_g \equiv 1 + \sqrt{\alpha}. \quad (3.d.10)$$

Juntando este resultado ao do caso geral, onde a magnetização e o resíduo são as soluções das equações

$$\begin{aligned}
 m &= b.a < \tanh \beta(m.a + l.z) > \\
 l &= \sqrt{\alpha q} + g_T, \\
 g_T &= b < zt_a > + u < zt_0 >, \\
 q &= b < t_a^2 > + < t_0^2 >,
 \end{aligned}
 \tag{3.d.11}$$

onde temos definido

$$\begin{aligned}
 t_a &\equiv \tanh \beta(m.a + l.z), \\
 t_0 &\equiv \tanh \beta(l.z),
 \end{aligned}
 \tag{3.d.12}$$

obtemos os diversos diagramas superpostos na figura (3.3). Cada linha $T = T_c^u(\alpha)$ indica o surgimento do estado de Mattis, inicialmente como mínimo local.

A diferença entre o tratamento desenvolvido neste capítulo e no anterior está na generalização para α finito, quando necessitamos empregar o método de réplicas. Como vimos no início, sua utilização não é contudo, totalmente livre de falhas. A solução do ponto estacionário assumida, com simetria de réplicas, pode ser discutível[5]. Ao invés de realizarmos a quebra desta simetria, resolvemos conferir sua validade através da comparação por outros métodos. No próximo capítulo tratamos do problema do IRAM por argumentos puramente probabilísticos. Já no apêndice E vamos realizar uma simulação (não muito pretenciosa) para observar o efeito de α finito, com uma distribuição não trimodal.

Capítulo 4

DINÂMICA

4.a Evolução do *Overlap*

Até aqui temos estudado a estática do IRAM, isto é, os estados de equilíbrio termodinâmico. Isto implica em desprezar uma quantidade vizivelmente apreciável de estados metaestáveis, ou mesmo fora do equilíbrio, quer dizer, aqueles que não são soluções estacionárias do sistema. É possível, porém, descrever os estados transitórios a partir de parâmetros macroscópicos, de forma similar aos da estática. Para esses, no entanto, não apresentamos equações autoconsistentes, mas um sistema dinâmico.

O ponto de partida são as N equações de atualização dos spins da equação (1.b.28), que dão uma regra pela qual eles se alinham com o campo produzido pelos outros, de forma a diminuir a energia. Com esta dinâmica relaxacional microscópica, determinística no caso $T = 0$ (sem ruído térmico), devida a Glauber[24],

$$\begin{aligned}\sigma_i(t+1) &= \text{sgn}[h_i(t)]; \\ h_i(t) &\equiv \sum_{j \neq i} J_{ij} \sigma_j(t), \\ J_{ij} &\equiv \vec{n}_i \cdot \vec{n}_j,\end{aligned}\tag{4.a.1}$$

podemos calcular a evolução dos p parâmetros de ordem, ou seja, as componentes da magnetização, no decorrer do tempo,

$$\vec{m}_N(t) = \sum_i \vec{n}_i \sigma_i(t) / N.\tag{4.a.2}$$

No caso ergódico, isto é, $\alpha = 0$, a soma acima converge para a média no limite termodinâmico, então podemos relacionar o vetor magnetização em um tempo posterior na forma

$$\begin{aligned}\vec{m}(t+1) &= \langle \vec{n} \text{sgn}[h(t)] \rangle; \\ h(t) &= \vec{n} \cdot \vec{m}(t),\end{aligned}\tag{4.a.3}$$

onde a equação para o campo local h se deve à definição em (4.a.2), e podemos adicionar o termo excluído naquela soma sem alterar o limite. Ocorre que, no $\lim - \alpha$, além de o número p tornar-se infinito, a alta conectividade da rede e a presença da retroalimentação ("feedback") na dinâmica torna impossível a solução exata do problema. Em outras palavras, não encontra-se um mapeamento do tipo

$$\vec{m}(t+1) = f[\vec{m}(t)], \quad (4.a.4)$$

para a magnetização vetorial. Recordemos a decomposição sugerida em (2.c.8), em componente macroscópica e residuais, respectivamente

$$\begin{aligned} m_N(t) &= \sum_i \rho_i \sigma_i(t) / N; \\ l_N^\mu(t) &= \sum_i \xi_i^\mu \sigma_i(t) / N. \end{aligned} \quad (4.a.5)$$

Particularmente para o *overlap* principal, ou simplesmente *overlap*, ao qual denominaremos a média configuracional da componente macroscópica da magnetização, em analogia com a rede neural, *não* é possível escrever um mapa do tipo descrito em (4.a.4), ou mesmo a solução

$$m(t) = f_t^1[m(t-1), m(t-2), \dots, m(0)] \quad (4.a.6)$$

ou seja, o *overlap* em termos das t etapas anteriores. Além disso, uma tal equação poderia ser problemática, na medida em que a função evolução fosse tornando-se mais complexa com o aumento do número de "variáveis" representando o sistema.

Para eliminar essas dificuldades, típicas do problema de "memória associativa", algumas variações tem sido propostas. Por exemplo, diluindo as ligações "sinápticas" através de cortes nas ligações, na forma[9]

$$J_{ij}^c = C_{ij} J_{ij}, \quad (4.a.7)$$

com a distribuição

$$dP(C_{ij}) = dC_{ij} [(1 - c/N)\delta(C_{ij}) + c/N\delta(C_{ij} - 1)], \quad (4.a.8)$$

com $c \ll N$ (dilução extrema), os ancestrais de cada spin ficam diferentes, tornando-os descorrelacionados. Neste caso, o campo local em cada sítio fica dado por

$$h_i(t) = \sum J_{ij}^c \sigma_j(t) / c \equiv \vec{n}_i \cdot \vec{m}_c(t), \quad (4.a.9)$$

onde na definição de \vec{m}_c só contribuem para a soma os sítios com interação. De acordo com a lei dos grandes números, no limite $c \rightarrow \infty$,

$$\vec{m}_c \equiv \sum_j C_{ij} \vec{n}_j \sigma_j / c \rightarrow \vec{m}. \quad (4.a.10)$$

Então a decomposição de (4.a.5) fornece simplesmente

$$\begin{aligned} h_i(t) &= m(t) \rho_i + \omega(t) \\ \omega(t) &\equiv \sum_{\mu > 1} \xi_i^\mu l^\mu, \end{aligned} \quad (4.a.11)$$

onde ω é um ruído estacionário devido aos $p-1$ resíduos[36]. Sendo todos os termos da soma reciprocamente independentes, segundo o teorema do limite central (TLC),

$$\omega(t) \sim \sqrt{\alpha} \cdot z(t); \quad \alpha \equiv p/c; \quad (4.a.12)$$

onde o símbolo \sim significa "no sentido da distribuição". Em outras palavras, essa notação implica a igualdade das distribuições de probabilidades

$$dP(\omega) = d\Phi(z) \equiv dz \phi(z) \quad (4.a.13)$$

com a definição de (1.a.5). Assim, o ruído é uma variável Gaussiana z normalizada cujos momentos (média zero e variância unitária) são independentes do tempo. Embora a diluição carregue consigo um fato que pode ser realista do ponto de vista de uma rede neural biológica, qual seja, torne a interação assimétrica, este fato é indesejável no caso do IRAM. O modelo deixa de ser conservativo, logo não há Hamiltoniano neste caso. Apesar de que existam tratamentos aproximados para a diluição simétrica, a introdução de vínculo de igualdades $C_{ij} = C_{ji}$ origina correlações insuperáveis.

Outra proposta visando soluções exatas é o caso de ligações unidirecionais ("feedforward") [11], onde a matriz interação é

$$J_{ij}^P(t) = \vec{n}(t) \cdot \vec{n}(t-1). \quad (4.a.14)$$

Agora as variáveis antes congeladas \vec{n}_i também são modificadas no tempo, o que corresponde à aproximação temperada ("annealing"). Nesta situação a simplificação está na ausência da retroalimentação ("feedback"), daí permitindo realizar-se exatamente o desacoplamento

temporal das equações para

$$\begin{aligned} m(t+1) &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \vec{m}_N = H(x(t)), \\ l^2(t+1) &\equiv \langle \lim_{N \rightarrow \infty} \vec{l}^2 \rangle = G(x(t)). \end{aligned} \quad (4.a.15)$$

Aqui, como no capítulo anterior, definimos a variável magnética normalizada pela dispersão "l": $x = m/l$. Estes resultados foram primeiramente obtidos através do método de Laplace sobre o funcional gerador (equivalente da função partição), e mais tarde por argumentos probabilistas [40]. Como no caso diluído, contudo, a dificuldade relativa à inexistência do Hamiltoniano retorna.

Antes de procedermos a uma análise mais sistemática, entenderemos as primeiras tentativas de solução do modelo de rede neural conexo e interpretação dos parâmetros. A mais simples proposta para o ruído interno ω , como vimos, é a Gaussiana, com média e variância

$$\begin{aligned} \langle \omega_N \rangle &= \sum_{\mu} \langle \xi_{i\mu} l_{N\mu} \rangle, \\ \text{Var}(\omega_N) &= \sum_{\mu} \text{Var}(\xi_{i\mu} l_{N\mu}) + \sum_{\mu \neq \nu} C_{\mu\nu}^i / p; \end{aligned} \quad (4.a.16)$$

onde a covariância das componentes é

$$C_{\mu\nu} \equiv \langle \xi_{\nu} l_{\mu} \xi_{\nu} l_{\nu} \rangle - \langle \xi_{\mu} l_{\mu} \rangle \langle \xi_{\nu} l_{\nu} \rangle. \quad (4.a.17)$$

Desde que estejamos em um processo de recuperação, isto é, as condições iniciais para os spins são

$$\begin{aligned} P(\sigma_i^0 = \rho_i) &\sim O(1) \Rightarrow m_0 \sim O(1); \\ P(\sigma_i^0 = \xi^{\mu}) &\sim O(1/\sqrt{p}) \Rightarrow l_0^{\mu}/\sqrt{p} \equiv L_0^{\mu} \sim O(1), \end{aligned} \quad (4.a.18)$$

a covariância $C_{\mu\nu}$, bem como $\langle \omega_N \rangle$ se anulam. Então no limite termodinâmico, no qual estamos interessados, vale a relação

$$\text{Var}(\xi_i^{\mu} l_{\mu}) \approx \frac{p}{N^2} \left[\sum_j \text{Var}(\xi_j \sigma_j) + \sum_{i \neq j} C_{ij} \right], \quad (4.a.19)$$

onde a covariância dos sítios

$$C_{ij} \equiv \langle \xi_i \sigma_i^0 \xi_j \sigma_j^0 \rangle - \langle \xi_i \sigma_i^0 \rangle \langle \xi_j \sigma_j^0 \rangle \quad (4.a.20)$$

novamente é desprezada. Então obtemos a expressão (4.a.12) para soma em ω , pelo TLC, pois

$$Var(\omega) = p \sum_j \langle \xi_{j\mu}^2 \rangle / N^2 \equiv \alpha. \quad (4.a.21)$$

A média da função sinal (4.a.2) sobre o ruído Gaussiano no campo em (4.a.8) pode ser realizada por integração por partes, como

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^1 \rangle_z &= \int d\Phi(z) \operatorname{sgn}(x\rho + z) \\ &= \Phi(z) \operatorname{sgn}(x\rho + z) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int d[\operatorname{sgn}(x\rho + z)] \Phi(z) \\ &= 0 + 2 \int \delta(x\rho + z) \Phi(z) = 2\Phi(x\rho) \end{aligned} \quad (4.a.22)$$

onde $x \equiv m^0 / \sqrt{\alpha}$. Daí, para as variáveis binárias da rede neural ($b=1$), obtemos a fórmula de primeira etapa [36], após usar a ergodicidade do *overlap*,

$$m^1 = \langle \rho \langle \sigma^1 \rangle_z \rangle_\rho = 2\Phi(m^0 / \sqrt{\alpha}). \quad (4.a.23)$$

Duas observações são oportunas:

i) esta última fórmula é um caso particular do Perceptron, (4.a.15), se tomarmos lá

$$H(x) \equiv 2\Phi(x), \quad G(x) \equiv 2\phi(x), \quad (4.a.24)$$

e assumirmos $\alpha \ll 1$, donde $\phi(x) \rightarrow 0$, logo $l \rightarrow \sqrt{\alpha}$, como aqui.

ii) a última equação pode ser iterada t vezes, se supusermos uma condição adicional: a variância do ruído em (4.a.12) é **estacionária**, ou seja, invariante no tempo. Assim, podemos obter o α crítico, acima do qual a recuperação não é possível: quer dizer, para $\alpha \leq \alpha_c$, existe uma região de $m^1 > m^0$ (não necessariamente m cresce indefinidamente); ela é tal que

$$D_x[2\Phi(x/\sqrt{\alpha})]_0 = 1 \Rightarrow \alpha = 2/\pi \sim 0.64. \quad (4.a.25)$$

Antes de procurarmos resolver estas dificuldades, vamos apresentar, para efeito de entendimento, um resultado [52] que se deduz considerando o ruído adicional devido ao "erro na recuperação" Γ ,

$$l^2 = \alpha + \Gamma; \quad \Gamma = 2(1 - m^0); \quad (4.a.26)$$

neste caso, embora o *overlap* não diminua consideravelmente, o α crítico cai para próximo à $\alpha_c = 0.14$, como concluímos numericamente. Este cálculo bastante simplista é portanto, bastante realista (condiz com a estática e resultados numéricos). A seguir estudaremos algumas generalizações e pesquisaremos a estrutura provável da dinâmica de longo tempo. As duas extensões principais são o caso de temperatura finita, quando por exemplo, no lugar da eq.(4.a.14), temos

$$m^1 = \langle \tanh \beta(m + \sqrt{\alpha}z) \rangle; \quad (4.a.27)$$

e o caso de distribuições mais gerais (a oblíqua em particular), quando no lugar de (4.a.15) temos

$$m^1 = 2 \langle \rho \Phi(x\rho) \rangle = 2ba\Phi(xa). \quad (4.a.28)$$

4.b O Parâmetro Residual

Podemos deduzir das eq.(4.a.16) que a conectividade completa do sistema introduz correlações na dinâmica que devem crescer com o tempo. Isto significa que, embora as variáveis térmicas sigam uma evolução Markoviana, no sentido que a etapa futura independe da passada, sendo válida a equação Master

$$P[\sigma(t+1)|\sigma(t-1)] = \sum_{\sigma(t)} P[\sigma(t+1)|\sigma(t)]P[\sigma(t)|\sigma(t-1)] \quad (4.b.1)$$

o ruído, que deve ser entendido no sentido de distribuição (aqui implícito: de probabilidade), obedece um processo com efeito de memória, dependendo de cada etapa anterior. Assim, por exemplo, continuando o cálculo do *overlap*, obteve-se [23] uma fórmula de segunda etapa que pode ser escrita como

$$m^2 = \sum_{\sigma} (1 + m\sigma) \Phi\left(\frac{m^1 + \sigma\sqrt{\alpha}g_0}{l_1}\right), \quad (4.b.2)$$

onde o parâmetro l_1 pode ser interpretado como a primeira etapa na evolução do ruído sendo dado por

$$\begin{aligned} l_1^2 &= \alpha + 2\sqrt{\alpha}m^0m^1g_0 + g_0^2, \\ g_0 &\equiv 2\phi(x^0), \quad x^0 \equiv m/\sqrt{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.b.3)$$

Este resultado, primeiramente encontrado por expansão no ponto estacionário, foi reproduzido e superado utilizando [41] argumentos probabilísticos. Poderia parecer óbvio que a iteração desta equação para o *overlap* em termos das duas etapas anteriores reduziria a bacia de atração, como se pode constatar do aumento do ruído da recuperação, que pode ser a interpretação de l_i . Ocorre, no entanto, que o valor crítico de α , para permitir um crescimento $m^2 > m^0$ é aumentado ainda para $\alpha=67$ [23], em comparação com (4.a.25). Isso se deve, provavelmente, a que a escolha de um ruído inicial trivial ($l_0 = \sqrt{\alpha}$) eleve o *overlap* m^1 o suficiente para penetrar na bacia de atração. Contudo, isto não nos fornece uma informação sobre a evolução posterior.

A terceira etapa é

$$\begin{aligned} m^3 &= 2 \sum_{\sigma^0\sigma^1} p_{01} \Phi\left(\frac{m^2 + \sqrt{\alpha}g_{01}}{l_2}\right) \\ p_{01} &\equiv \frac{1 + \sigma^0m^0}{2} \frac{1 + \sigma^1m^1}{2}; \\ g_{01} &= g_1(\sigma^1 + \sigma^0g^0), \end{aligned} \quad (4.b.4)$$

enquanto que o ruído pode ser escrito como[41]

$$\begin{aligned} l_2^2 &= \alpha + 2\sqrt{\alpha}g_1c_1 + g_1^2; \\ c_1 &= m^1m^2 + g_0(m^0m^2 + h_1) \end{aligned} \quad (4.b.5)$$

onde g_1, h_1 , são certas funções retendo as etapas 0 e 1. Embora estas equações não nos dêem nenhuma indicação do comportamento do *overlap* em um tempo qualquer, o simples fato de serem exatas tem o seu mérito. Por fim, com o auxílio de uma dinâmica truncada [42] foi possível realizar uma indução nas primeiras etapas, propondo uma estrutura para as equações relativas aos dois parâmetros importantes, do *overlap*

$$m(t+1) = 2 \left\langle \Phi\left(\frac{m(t) + \sqrt{\alpha}\tilde{g}}{l(t)}\right) \right\rangle_{p(\sigma^0 \dots \sigma^{t-1})}, \quad (4.b.6)$$

onde \tilde{g} retém novamente as (t-1) etapas anteriores, e do ruído,

$$l^2(t+1) = \alpha + 2\sqrt{\alpha}\tilde{g}c(t) + \tilde{g}^2. \quad (4.b.7)$$

Como nosso objetivo aqui não é aprofundar o entendimento dessas fórmulas de t etapas, vamos relacionar o ruído aos (p-1) *overlaps* residuais:

$$\begin{aligned} L_N^\mu(t+1) &= \frac{\sqrt{p}}{N} \sum_i \xi_i^\mu \sigma_i(t+1), \\ \sigma_i(t+1) &= \text{sgn}[h_{i\mu}(t) + \xi_i^\mu L_N^\mu(t)/\sqrt{p}], \end{aligned} \quad (4.b.8)$$

onde no campo retiramos a mesma componente do resíduo considerado,

$$\begin{aligned} h_{i\mu}(t) &= m_N(t)\rho_i + \omega_\mu(t), \\ \omega_\mu(t) &\equiv \sum_{\nu \neq \mu} \xi_i^\nu l^\nu(t). \end{aligned} \quad (4.b.9)$$

Agora temos o seguinte programa a desenvolver: ademais do ruído ω , o próprio resíduo satisfaz as condições do TLC, pois se trata de uma soma infinita de parcelas (quase) independentes; na primeira etapa, sua média é

$$\langle L_N^\mu(1) \rangle_{\rho\xi} = \sqrt{p} \langle \xi_i^\mu \sigma_i(1) \rangle, \quad (4.b.10)$$

ou, expandindo o sinal do campo até $O(1/\sqrt{p})$,

$$\sigma_i(1) \sim \text{sgn}[h_{i\mu}(0)] + 2 \frac{\xi_i^\mu}{\sqrt{p}} L_N^\mu(0) \delta[h_{i\mu}(0)]. \quad (4.b.11)$$

Para calcular a média configuracional (4.b.10) devemos conhecer o comportamento do ruído. Ao invés de tomarmos a variância de uma realização totalmente aleatória, como a gerada em (4.a.18), com a hipótese simples de independência entre o resíduo, para uma configuração inicial fixa e a componente ξ_i^μ (lembre que a soma não inclui o sítio desta), temos

$$\text{Var}[\omega(0)] = \sum_{\nu \neq \mu} L_{N\nu}^2(0)/p, \quad (4.b.12)$$

que no limite de $p \rightarrow \infty$ dá para a variância do ruído

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \text{Var}[\omega(0)] = \langle L_\nu^2(0) \rangle \equiv l^2(0) \quad (4.b.13)$$

na etapa de partida. O limite acima implica em que o resíduo pertença ao espaço de Hilbert. Embora seja apenas uma aproximação para etapas posteriores, aqui o resultado é exato, seguindo a LGN, e se restringindo a uma definição bastante natural da variância do ruído como a dispersão do resíduo, que o trataremos de designar a partir daqui.

Com isto podemos calcular a média do resíduo, primeiro tomando a integral Gaussiana

$$\langle \sigma(1) \rangle_z = 2\Phi(x(0)\rho) + 2\xi_i^\mu \frac{L_N^\mu(0)}{\sqrt{p}l(0)} \phi(x(0)\rho) \quad (4.b.14)$$

com o x após (4.a.15). Por fim, mediando na componente restante,

$$\langle L_N^\mu(1) \rangle_{\rho\xi} = \frac{L_N^\mu(0)}{l(0)} g(x(0)); g(x) \equiv 2\phi(x) \quad (4.b.15)$$

vemos que o resíduo depende apenas do tempo anterior.

A variância é de fácil manipulação, sendo

$$\text{Var}(L_N^\mu) = \frac{p}{N} \sum_i \text{Var}(\xi_i^\mu \sigma_i) \equiv \alpha, \quad (4.b.16)$$

para qualquer tempo. Justamente no lim- α , controlando a uniformidade da convergência pelo teorema de Liapunov[56], o TLC produz

$$L_N^\mu - \langle L_N^\mu \rangle_{\rho\xi} \Rightarrow \sqrt{\text{Var}(L_N^\mu)} z \quad (4.b.17)$$

o que, no sentido da distribuição, para a variável Gaussiana z normalizada, nos dá uma

equação estocástica para o resíduo neste limite, indicando que segue um processo com uma contribuição Markoviana e outra Gaussiana, com

$$L^\mu(1) \sim \sqrt{\alpha}z(1) + \frac{L^\mu(0)}{l(0)}g(x(0)). \quad (4.b.18)$$

Completando as operações, observamos que o resíduo evolui linearmente como a soma de dois termos cujas médias (sobre o conjunto de componentes) se anulam, daí

$$\langle L^\mu(1) \rangle_\mu = 0. \quad (4.b.19)$$

A dispersão é

$$\langle L_\mu^2(1) \rangle_\mu = \alpha + 2\sqrt{\alpha}g(x(0))c(0) + g^2(x(0)) \equiv l^2(1), \quad (4.b.20)$$

onde temos definido a autocorrelação para a componente Gaussiana do resíduo, na etapa inicial, como

$$c(0) \equiv \langle L_\mu(0)z(1) \rangle_\mu / l(0). \quad (4.b.21)$$

Na próxima seção generalizaremos todas as definições dadas, e empregaremos o método de indução para obter o termo geral na etapa t qualquer.

4.c Autocorrelação

Da mesma forma como procedemos na construção do Overlap em (4.a.15), com a sugestão de (4.b.12) para o ruído temos

$$\begin{aligned} m^1 &= h(x^0) = 2\Phi(x^0); \\ x^0 &\equiv m^0/l^0. \end{aligned} \tag{4.c.1}$$

Este é o caso da distribuição binária, embora seja facilmente generalizada para a oblíqua. Juntamos com as equações para a dispersão (4.b.20)

$$l_1 = [\alpha + 2\sqrt{\alpha}c_0g(x^0) + g^2(x^0)]^{1/2}; \tag{4.c.2}$$

e para a autocorrelação (4.b.21), sendo necessária agora outra hipótese sobre o resíduo estocástico. Em (4.b.18) observamos que a Gaussiana evolui no tempo; admitiremos que sua evolução seja estacionária, $z(t) = z$, com o propósito único de obter um resíduo Markoviano,

$$L_1^\mu \sim \sqrt{\alpha}z + \frac{L_0^\mu}{l_0}g_0. \tag{4.c.3}$$

Daí, a partir da definição generalizada da autocorrelação,

$$c_t \equiv \langle L_t^\mu z \rangle_\mu / l_t, \tag{4.c.4}$$

temos

$$c_1 l_1 = [\sqrt{\alpha} + c_0 g(x_0)]. \tag{4.c.5}$$

Logo, nós temos um algoritmo para a fórmula de primeira etapa em apenas 3 parâmetros. Observe-se que apesar de que na última equação usamos o valor avançado da dispersão, isso é facilmente contornável por uma substituição de variável, se desejarmos um mapa do tipo (4.a.4). Computacionalmente falando, a fórmula (4.c.5) é inclusive mais rápida.

Já possuindo uma demonstração dessa fórmula para uma etapa, para completar o método indutivo, devemos provar que, da sua aplicabilidade para algum tempo se deduz o tempo posterior. Antes de analisarmos linha por linha os passos supostos na obtenção da fórmula, observemos o que nos diz a literatura a respeito da autocorrelação c . Ainda que explicitamente ela só tenha sido citada em um trabalho[3], onde foi proposta como

$$c_0 = m^0 m^1 \sqrt{\alpha} / l_0, \tag{4.c.6}$$

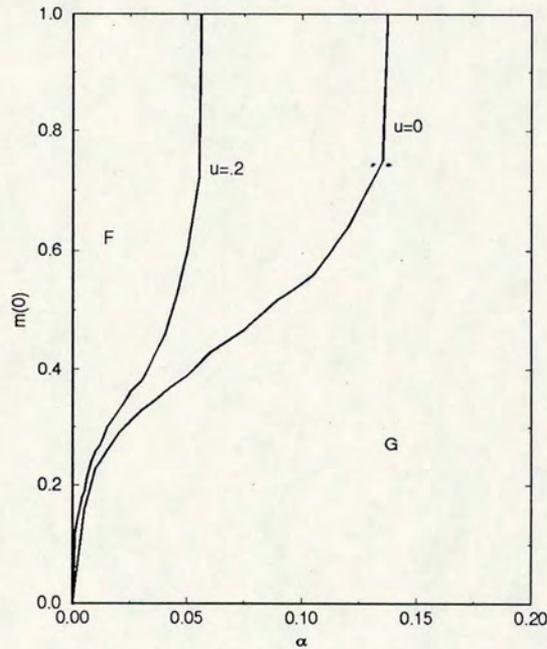


Figura 4.1: A bacia de atração para o ponto fixo Magnético está acima das curvas superior e inferior (para $b=1$ e $b=.8$ respectivamente); abaixo a bacia é de vidro de spin. $c(0)=0, l(0)=.5$.

nas equações (4.b.3-4.b.6) temos efetivamente uma dependência nela, dada na equação (4.b.7) em função da etapa anterior. Sua forma foi sugerida [30] como resultado de um ruído com efeito de memória residual (não Markoviano), com o Ansatz

$$\omega(t) = lz + K(m^{t-1}, m^{t-2}, \dots, m^0). \quad (4.c.7)$$

Diferentemente de todas essas propostas, inclusive um recente artigo[48], nós partimos de condições iniciais mais próximas da estacionariedade (se esta realmente existir), pois em l^0 não há qualquer suposição de "completa aleatoriedade". A seguir propomos a hipótese

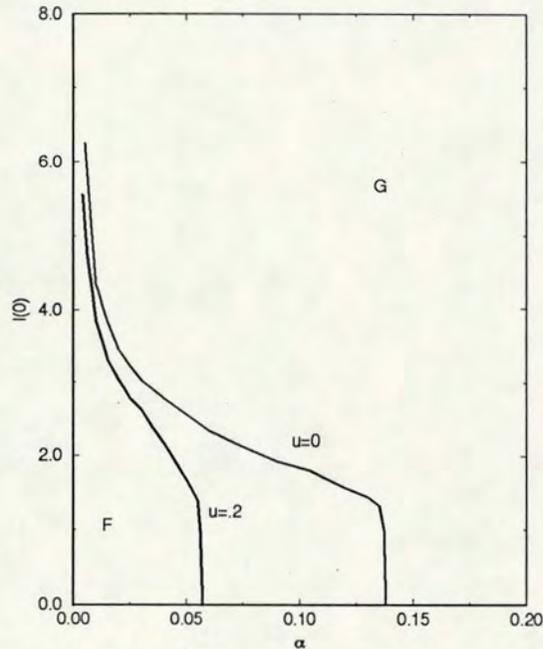


Figura 4.2: O contorno entre as bacias de atração para o ponto fixo magnético e do vidro de spin esta descrito pelas curvas. Os valores iniciais são $m=1$, $c=0$.

de convergência quadrática média do resíduo:

$$\alpha - \lim \sum_{\nu} L_{\nu N}^2(t)/p = \langle L_{\nu}^2(t) \rangle \equiv l^2(t). \quad (4.c.8)$$

A esta característica chamamos de propriedade Hilbertiana. Lembre-se que o próprio L_N^{μ} não converge para nada. A aproximação mais importante consiste na hipótese de estacionariedade do termo Gaussiano do resíduo. Isto nos permite deduzir a Markovianidade do α -lim do mesmo, do seguinte modo:

$$L_N^{\mu}(t+1) \Rightarrow \sqrt{\alpha} \cdot z + \frac{L_{\mu}(t)}{l(t)} g(x(t)). \quad (4.c.9)$$

Esta forma funcional do resíduo nos permite obter a estacionariedade forte (as equações

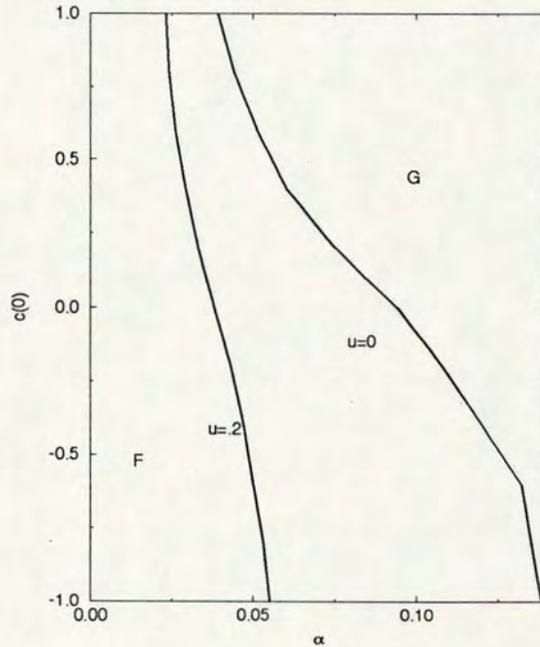


Figura 4.3: A bacia de atração para o ponto fixo magnético está separada da bacia do vidro de spin pelas curvas. Os valores iniciais são $m=1=l$.

para os momentos permanecem invariantes no tempo) já na fórmula de primeira etapa. Como vimos ao final da seção (4.a), desde que temos desacoplado as médias residuais da média sobre a componente "baixa", as 3 equações ainda valem para qualquer distribuição de componentes independentes dos eixos, como no IRAM estudado nos capítulos anteriores. Assim, com as mesmas funções já definidas g e h , temos

$$\begin{aligned}
 m_{t+1} &= h(x_t) \\
 l_{t+1}^2 &= \alpha + 2\sqrt{\alpha}g(x_t)c_t + g^2(x_t), \\
 c_{t+1}l_{t+1} &= \sqrt{\alpha} + g(x_t)c_t; \quad x_t \equiv m_t/l_t.
 \end{aligned}
 \tag{4.c.10}$$

Iterações numéricas foram realizadas sobre este sistema de equações para algumas condições iniciais e vários valores de α . Esclarecendo, estudamos aquelas regiões do espaço de

fase m, l, c, α para as quais o *overlap*, no ponto fixo m_∞ , converge, ou seja para $m = 0$, ao qual chamamos atrator G , (note que $l_\infty > 0$) ou seja para $m > 0$, denominado atrator F , em analogia com as fases de Vidro-de-spin e Ferromagnética da estática. As figuras desta seção indicam a bacia de atração dos estados F e G , para cada α e m_0, l_0, c_0 críticos, isto é, aqueles sobre a linha divisória das bacias. Temos escolhido o caso de Hopfield e outro, para o IRAM, $b = 1, b = .8$ respectivamente. As condições iniciais são $l_0 = 1, c_0 = 0$. Para exemplificar, observe a figura (4.2): escolhendo-se a linha $\alpha = .1$, necessitamos partir com um resíduo inicial suficientemente pequeno ($l_0 \leq 2$) afim de recuperarmos o estado ferromagnético, se $u = 0$.

Não estudamos a dependência da bacia de atração para o m_t sobre a variação desses parâmetros, nem do tempo de relaxação.

4.d Banho-Térmico

Vimos na seção (1.d) como uma temperatura finita afeta a atualização dos spins, tornando a dinâmica estocástica, baseada na probabilidade condicional de transição:

$$\begin{aligned} P(\sigma_i^1 | h_i^0) &= e^{\beta h_i \sigma_i^1} / Z_h; \\ Z_h &= 2 \cosh \beta h_i, \end{aligned} \quad (4.d.1)$$

ou seja, permitimos que alguns spins no tempo posterior assumam valor oposto ao campo local. Esta evolução é equivalente à dinâmica de Glauber[24] dada por

$$\sigma_i^1 = \text{sgn}[h_i^0 + \gamma_i], \quad (4.d.2)$$

onde γ é o ruído de banho-térmico, cuja distribuição probabilística

$$P(\gamma) = e^{\beta \gamma} / Z_\gamma, \quad (4.d.3)$$

em qualquer sítio, produz as flutuações na atualização. Para entender essa equivalência, calculemos a média térmica sobre um spin "avanzado",

$$\begin{aligned} [\sigma^1]_T &\equiv [\text{sgn}(h + \gamma)]_\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} dP(\gamma) \text{sgn}(h + \gamma) \\ &= \int_{-h}^{\infty} dP(\gamma) - \int_{-\infty}^{-h} dP(\gamma), \end{aligned} \quad (4.d.4)$$

e então, com (4.d.3),

$$[\sigma^1] = 1 - 2e^{-\beta h} / Z_h \equiv \tanh \beta h^0. \quad (4.d.5)$$

Podemos então generalizar facilmente as equações para o parâmetro ergódico (o *overlap*), no limite termodinâmico,

$$m^1 = \langle\langle \rho[\sigma^1] \rangle\rangle, \quad (4.d.6)$$

e para o resíduo estocástico Markoviano, onde, pelo TLC,

$$L_\mu^1 \Rightarrow \sqrt{\alpha} z^1 + \langle L_{N_\mu}^1 \rangle_{\rho, \xi}, \quad (4.d.7)$$

isto é, converge no sentido da probabilidade; em ambas necessitamos realizar a média em (4.d.5). Assim, com o mesmo argumento indutivo da seção anterior, a evolução do Overlap para temperatura finita é

$$\begin{aligned} m(t+1) &= \langle\langle \rho \tanh \beta h(t) \rangle\rangle, \\ h(t) &= m(t)\rho + l(t)z(t). \end{aligned} \quad (4.d.8)$$

Por sua vez, a segunda parcela em (4.d.7) se obtém expandindo, de forma semelhante à (4.b.15),

$$\begin{aligned} \langle L_{N\mu}^1 \rangle &= \sqrt{p} \langle\langle \xi_\mu [\sigma^1] \rangle\rangle \\ &\sim \sqrt{p} \langle\langle \xi_\mu \tanh \beta h^0 \rangle\rangle + \frac{L_{N\mu}^0}{l^0} g_T, \\ g_T &\equiv \beta l^0 \langle\langle 1 - \tanh^2 \beta h^0 \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (4.d.9)$$

Enfim, temos uma equação para a evolução da dispersão, em qualquer tempo,

$$l^2(t+1) = \alpha + 2\sqrt{\alpha}g_T(t)c(t) + g_T^2(t), \quad (4.d.10)$$

em função da autocorrelação, definida como a covariância entre a Gaussiana e o resíduo no tempo posterior; por conveniência vamos supor novamente a estacionariedade da variável Gaussiana: desde que ela é normalizada, com média nula e variância unitária, isto implica em $\langle z(t+1)z(t) \rangle = 1$, donde podemos excluir o índice de tempo. Isso é necessário para obtermos uma expressão para a autocorrelação

$$c(t+1)l(t+1) \equiv \langle z.L_\mu(t+1) \rangle = \sqrt{\alpha} + c(t)g_T(t), \quad (4.d.11)$$

onde a função g pode ser definida em qualquer etapa, integrando por partes (4.d.10),

$$g_T(t) = \langle\langle z \tanh \beta h(t) \rangle\rangle, \quad (4.d.12)$$

onde agora $z(t) \equiv z$.

De posse do sistema dinâmico definido pelas equações (4.d.8-4.d.10-4.d.11), podemos implementar um algoritmo para resolve-lo numericamente, isto é, encontrar os tempos de relaxação τ para os pontos fixos (se existirem) e suas bacias de atração. No caso da temperatura nula da seção prévia, nós temos uma relação entre α e τ dada na figura (4.d.1) e a bacia da figura (4.d.2).

Para terminar vamos fazer algumas considerações sobre os problemas observados neste capítulo:

i) A dinâmica admitida foi a de Glauber; provavelmente outra atualização paralela não afete os resultados (o que necessita ser conferido), contudo a sequencial, onde devemos utilizar a equação diferencial para o campo

$$\partial_t h = -h + [m\rho + l.z + \xi_\mu l^\mu] \quad (4.d.13)$$

ou a equação Master à temperatura finita, pode produzir soluções radicalmente diferentes.

ii) A forte conectividade, bem como a retroalimentação origina ruídos de difícil controle, como se viu. As hipóteses escolhidas, de resíduo Hilbertiano, e estacionariedade na Gaussiana, se refletem num processo Markoviano para o resíduo. Se afrouxarmos este *ansatz*, tomando

$$L_\mu(t+1) = \sqrt{\alpha}z + L_\mu(t)g/l(t) + K[l(t-1), m(t-1)], \quad (4.d.14)$$

é provável que apareçam soluções periódicas com diversos ciclos, ou ainda estados caóticos, onde ocorra uma sensível dependência sobre as condições iniciais, podendo ser verificado da evolução divergente[38]

$$\delta x^t \sim \delta x^0 e^{\lambda t}, \quad (4.d.15)$$

com o expoente de Liapunov $\lambda > 0$, para os parâmetros descritos. No caso Markoviano, para as regiões triadas, nós só encontramos $\tau \equiv -1/\lambda > 0$, isto é, tempos de relaxação positivos.

iii) A vantagem maior de nosso método é que, partindo de um ruído inicial não "totalmente aleatório", com umas poucas suposições, proporcionamos um algoritmo para qualquer etapa avançada, mostrando o significado físico dos parâmetros propostos: o Overlap principal, a Dispersão do resíduo, e a Autocorrelação. A partir dele, podemos comparar os resultados da dinâmica com a estática, e aprimorar a técnica relacionando um número (finito) maior de parâmetros. Além disso, foi possível generalizar esse tratamento, original na abordagem do problema mais simples da rede neural, para uma distribuição qualquer de componentes independentes, em particular para a oblíqua estudada no problema do IRAM.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

Uma vasta gama de materiais amorfos de Metais com Terras-raras podem ser descritos pelo modelo de anisotropia aleatória (RAM), apresentando ordem magnética. Embora não tenhamos dado uma solução definitiva ao problema do RAM, esperamos ter alcançado o objetivo almejado de isolar algumas variáveis relevantes, como o parâmetro de anisotropia da distribuição de eixos e a razão α entre a dimensionalidade de spin e a conectividade da rede. Em suma, estudamos a dependência das fases de baixa temperatura com a saturação α e a obliquidade dos eixos.

Os resultados principais podem ser listados como:

i) O limite $D \rightarrow \infty$ (o IRAM), ou seja, anisotropia forte, foi o interesse do nosso trabalho, dadas as suas particularidades como protótipo de sistema frustrado sem troca aleatória. A divergência na literatura quanto a suas propriedades termodinâmicas motivou o estudo desse caso. Formulamos os parâmetros de ordem no primeiro capítulo, a magnetização e de vidro de spin, bem como descrevemos o modelo Hamiltoniano de Heisenberg adequado ao problema, com as versões já utilizadas. No segundo capítulo tratamos do diagrama de fases no plano (T, b) , onde b é a medida de obliquidade dos eixos em relação às direções fáceis (as possíveis orientações cristalinas remanescentes no material amorfo), criada por uma distribuição trimodal das componentes. Do ponto de vista físico, especificamos então os Terras-raras com alta anisotropia (T_b, D_y) e elevada concentração de Metais (grande número de coordenação), supondo dimensionalidade de spin pequena (Fe, Co), e analisamos a variação de seu comportamento com a forma (amorfa ou cristalina) como são preparados.

Encontramos, além da fase paramagnética de altas temperaturas, 3 fases distintas abaixo de $T_c = 1$: uma ordenada do tipo Mattis, onde apenas uma componente da magnetização influi na energia do sistema; outra Ferromagnética mista, onde além da componente macroscopicamente condensada, desempenham um papel as infinitas componentes residuais; e enfim, a fase marginalmente estável de vidro-de-spin, onde há apenas ordem microscópica, continuamente degenerada, a qual é a única existente para $b < 1/3$. Um campo externo, por sua vez, induz a um alinhamento magnético com expoente típico de vidro-de-spin, produzindo uma linha A-T que indica um "crossover" para Ising.

ii) No terceiro capítulo, estudamos o $\text{lim-}\alpha$, onde a energia livre foi obtida na abordagem da técnica de réplicas. A diminuição da região ferromagnética com o endurecimento dos eixos (diminuição da obliquidade) é o resultado mais relevante. A fase de vidro-de-spin independe da característica particular da distribuição. Os estados simétricos com número grande de componentes são sempre no máximo metaestáveis, porém são eles que originarão aquela fase. Uma condição para a utilização do método é tornada clara, restringindo-se ao segundo momento da distribuição. O caso α finito presta-se a uma descrição mais precisa de ligas reais, além de descrever sistemas com maior dimensão de spin. Os estados pares encontrados para valores muito pequenos de α mostram, embora a pequenez da região onde são os mínimos globais, a riqueza de estados ao menos metaestáveis gerados pela distribuição oblíqua.

iii) Em último, mas não menos importante lugar, analisamos a dinâmica do IRAM, no quarto capítulo. Poucas hipóteses foram necessárias para a obtenção de um mapa de evolução dos parâmetros relevantes, definidos como o *Overlap*, a Dispersão e a Autocorrelação, com os quais conseguimos tratar o problema de longos tempos. O *ansatz* consiste em considerar a variável aleatória residual como Markoviana, com uma componente Gaussiana estacionária. Usando a propriedade de Hilbert para o ruído, descrevemos o sistema dinâmico, cujos pontos fixos correspondem à estática do terceiro capítulo. Além de mapear as bacias de atração para os estados Ferromagnético e de Vidro-de-spin, construímos uma ferramenta com a qual é possível estudar os tempos de relaxação dos parâmetros.

Algumas dificuldades e possíveis desenvolvimentos serão discutidos a seguir.

i) Em primeiro lugar, carecemos de um tratamento rigoroso do efeito do vínculo rígido sobre os estados, os quais, no caso de não utilizarmos a lei dos grandes números, serão descritos por

$$\vec{m} = \left\langle \frac{\vec{n}}{n} \tanh \beta(m\rho + l.z) \right\rangle, \quad (5.1)$$

o que não permite sabermos a distribuição da variável módulo, pois nela se encontram acopladas todas as componentes. Ademais, nada podemos afirmar sobre a convergência $\vec{n}^2 \rightarrow p$ se b for muito pequeno ($b \rightarrow O(1/\sqrt{p})$), quando os desvios passam a exercer um papel não só na distribuição, como na provável contribuição do termo de anisotropia.

ii) A influência de termos da ordem de J/D , conforme a seção (1.c) ainda não foi suficientemente pesquisada. Apesar de ser de difícil controle, é justamente aí que se encontram as maiores controvérsias; os métodos desta tese devem ser razoavelmente ampliados para tratar este caso.

iii) Os estados dinâmicos de tipo periódico (para varios ciclos), quasi-periódicos, ou mesmo caóticos não têm sido comprovados nem descartados, mesmo com as aproximações

utilizadas. Então cabe um estudo mais aprofundado sobre as propriedades deste sistema e possíveis conseqüências de um relaxamento da estacionariedade.

iv) Além das aplicações citada na seção (1.a), encontramos uma extensão relativamente simples para o problema de polímeros[6]. Nossos métodos não devem demandar muita modificação para abarcar estes sistemas.

Apêndice A

Anisotropia Cristalina

Neste apêndice descreveremos alguns resultados suscintos sobre o Hamiltoniano de Heisenberg e o do campo cristalino da seção (1.a).

O Hamiltoniano (1.a.16), que reduz ao da eq.(1.a.17) no modelo de alcance infinito, com magnetização

$$\vec{m}_N \equiv \sum_i \vec{s}_i / N, \quad (\text{A..1})$$

é exatamente solúvel na teoria de campo médio. No caso de spins-S, com componentes independentes, a função partição efetiva é dada por

$$\begin{aligned} Z_H^e &\sim \prod_{\mu} Z_{\mu}, \\ Z_{\mu} &= \text{Tr} e^{\beta m_{\mu} s_{\mu}}, \end{aligned} \quad (\text{A..2})$$

sendo a energia livre então

$$f = \vec{m}^2 / 2 - T \ln Z^e. \quad (\text{A..3})$$

Logo o seu mínimo é encontrado satisfazendo a equação estacionária abaixo,

$$\begin{aligned} m_{\mu} &\equiv \langle s_{\mu} \rangle = \frac{2}{Z_{\mu}} \sum_{s=1}^S s \sinh(\beta m_{\mu} s), \\ Z_{\mu} &\equiv 1 + 2 \sum_{s=1}^S \cosh(\beta m_{\mu} s). \end{aligned} \quad (\text{A..4})$$

Daí , após realizarmos a expansão para $m_\mu \ll 1$, obtemos a temperatura crítica abaixo da qual surge a fase F ,

$$T_{cS} = S \frac{1+S}{6}. \quad (\text{A..5})$$

Levaremos em conta agora a anisotropia devida à preferência em relação a algum eixo privilegiado em cada sítio dada por

$$H_d = - \sum_i D_i (s_i^z)^2 \dots \quad (\text{A..6})$$

Essa é a anisotropia do campo cristalino. A função partição efetiva se torna

$$\begin{aligned} Z^e &= \text{Tr}_s e^{\beta H^e}; \\ H^e &\equiv \vec{m} \cdot \vec{s} + D \cdot s_z^2. \end{aligned} \quad (\text{A..7})$$

Com a hipótese adicional de spins-S, veja (A..4), particularizando $S = 1$, realizamos o traço somando os estados linearmente, após fatoradas as funções de partição por componente. No caso simples de duas dimensões de spin, chamando M a componente de \vec{m} ortogonal ao eixo anisotrópico e L a paralela, temos

$$\begin{aligned} Z_D^e &= Z_M \cdot Z_L, \\ Z_M &\equiv 1 + 2 \cosh \beta M, \\ Z_L &\equiv 1 + 2e^{\beta D} \cosh \beta L. \end{aligned} \quad (\text{A..8})$$

Enfim, encontramos duas linhas críticas referindo-se respectivamente ao surgimento da magnetização M e à L , dadas por

$$\begin{aligned} T_{cM} &= 2/3, \\ T_{cL} &= \frac{2}{2 + e^{-\beta D}}. \end{aligned} \quad (\text{A..9})$$

A segunda linha surge para anisotropia D pequena junto à primeira, evoluindo a medida que aumenta D , até $T_{cL} = 1$, conforme as leis respectivas

$$\begin{aligned} T_{cL} &\rightarrow 1, D \rightarrow \infty, \\ T_{cL} &\rightarrow \frac{2}{3}(1 + D/2), D \ll 1. \end{aligned} \quad (\text{A..10})$$

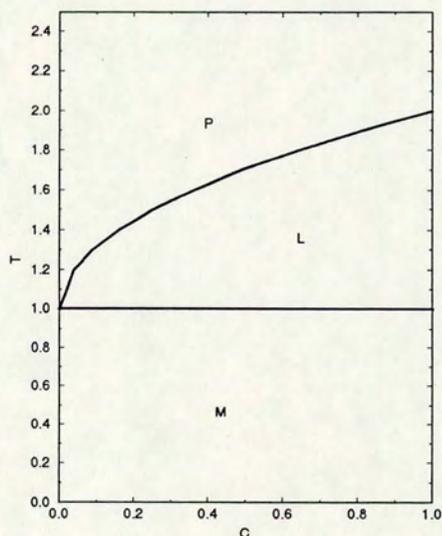


Figura A.1: A linha crítica superior indica a transição P-L, enquanto a inferior mostra o surgimento da fase M.

É bom enfatizar que este resultado independe grandemente do tipo de spin. Para efeito de exemplo, citamos que no caso de um spin Gaussiano, ou seja, dado por uma distribuição similar àquela em (B.4), onde os fatores em (A.9) são

$$\begin{aligned} Z_M &= e^{\beta M^2/2}, \\ Z_L &= e^{\frac{\beta L^2/2}{1-\beta D}}, \end{aligned} \quad (\text{A..11})$$

as linhas críticas são

$$\begin{aligned} T_{cM} &= 1, \\ T_{cL} &= 1 + D, \end{aligned} \quad (\text{A..12})$$

como se deduz da estabilidade da energia livre, dada por

$$f \sim (1 - \beta)M^2/2 + (1 - \frac{\beta}{1 - \beta D})L^2/2 \quad (\text{A..13})$$

Vamos então considerar uma distribuição aleatória[50] da amplitude D_i da anisotropia,

$$dP(D) = dD[C\delta(D - 1) + (1 - C)\delta(D)], \quad (\text{A..14})$$

por exemplo, independente do sítio i . No cálculo da energia livre, a média sobre as configurações de D deve ser efetuada depois do logaritmo, ou seja, teríamos a energia livre (por spin)

$$- \beta F = \langle \ln Z \rangle_D. \quad (\text{A..15})$$

Aplicando ao exemplo na equação (A..13), obtemos

$$f = \beta(T - 1)M^2/2 + [1 - \frac{c}{T - D} - \frac{1 - c}{T}]L^2/2; \quad (\text{A..16})$$

A convexidade da energia implica as linhas de transição

$$\begin{aligned} T_{cM} &= 1, \\ T_{cL} &= 1 + \sqrt{C}. \end{aligned} \quad (\text{A..17})$$

As fases com ordenamento longitudinal e transversal à anisotropia aparecem na figura (A.1).

Apêndice B

Distribuição de Eixos

Vamos enumerar as várias formas de distribuição de probabilidades para os eixos utilizadas nesta tese, bem como algumas médias importantes efetuadas com essas distribuições. Estas podem ser expressas através de sua densidade $p(\vec{n})$

$$\begin{aligned} dP(\vec{n}) &= d\vec{n} p(\vec{n}), \\ d\vec{n} &\equiv \prod_{\mu} dn_{\mu}. \end{aligned} \quad (\text{B..1})$$

A primeira é talvez a mais importante, desde que introduzida no modelo original: a isotrópica,

$$\begin{aligned} dP_{is}(\vec{n}) &= d\vec{n} \delta(n - \sqrt{p}) = d\Omega_p / \Omega_p, \\ d\Omega_p &= \prod_{\mu=2}^p [d\theta_{\mu} \text{sen}^{p-\mu} \theta_{\mu}], \end{aligned} \quad (\text{B..2})$$

a qual fixa o módulo do eixo, mas é invariante rotacional, e pode ser descrita em coordenadas esféricas como acima. Uma forma hábil de assumir a quebra dessa invariança é a anisotropia cúbica, a qual apresenta uma das densidades abaixo

$$\begin{aligned} p_c(\vec{n}) &= \frac{1}{2p} \sum_{\mu} [\delta(\vec{n} - \vec{e}_{\mu}) + \delta(\vec{n} + \vec{e}_{\mu})], \\ p_f &= A. \sum_{\mu} (\vec{n} \cdot \vec{e}_{\mu})^4; |\vec{e}_{\mu}|^2 = p \end{aligned} \quad (\text{B..3})$$

a segunda delas tomando em conta as imperfeições da rede cristalina no material amorfo.

Outra maneira de permitir a flutuação nos eixos, mantendo, porém, a isotropia, é a distribuição Gaussiana

$$\begin{aligned}
d\Phi(\vec{n}) &= d\vec{n} \phi(\vec{n}), \\
\phi(x) &\equiv \phi_0 e^{-x^2/2}, \phi_0 = 1/\sqrt{2\pi}.
\end{aligned}
\tag{B..4}$$

A variação agora está apenas no módulo. A Gaussiana apresenta uma peculiaridade útil para conveniências técnicas. Como se observa, suas componentes são independentes o que implica na fatoração de médias de produtos. Com esta mesma propriedade, expressa por

$$dP(\vec{n}) = \prod_{\mu} [dP_{\mu}(n_{\mu})] \tag{B..5}$$

vamos introduzir uma distribuição anisotrópica, a que designaremos por "oblíqua", cuja distribuição marginal (isto é, para uma só componente) é a trinomial definida por

$$\begin{aligned}
dP_a(x) &= b dP_H(x/a) + u dx \delta(x), \\
b \cdot a^2 &= 1, b + u = 1.
\end{aligned}
\tag{B..6}$$

A distribuição dP_H é a de Hopfield[31] para as componentes dos padrões de uma rede de neurônios, mas também é a distribuição binomial, como se vê:

$$dP_H(X) \equiv dX \delta(X^2 - 1) = dX [\delta(X - 1) + \delta(X + 1)]/2. \tag{B..7}$$

Para as diversas distribuições acima, vamos agora colocar os valores de algumas médias a serem utilizadas nesta tese. Em primeiro lugar as potências definidas em (D..7):

$$\begin{aligned}
W_{is} &= \frac{p}{p+2}; W_c = 0; W_{\phi} = 1; W_a = 1. \\
V_{is} &= \frac{p}{p+2}; V_c = p/3; V_{\phi} = 1; V_a = a^2/3,
\end{aligned}
\tag{B..8}$$

as quais são fáceis de verificar diretamente. A média $\langle n_{\mu} n_{\nu} \rangle = \delta_{\mu\nu}$, por normalização, para toda distribuição. Também serão úteis as médias para o módulo de uma componente:

$$\begin{aligned}
M &\equiv \langle |\rho| \rangle; \\
M_{is} &= \frac{2\Gamma(p/2)}{\Gamma(p/2 + 1/2)} \sqrt{p/\pi} \rightarrow \sqrt{2/\pi}, \\
M_c &= 1/\sqrt{p}, \\
M_{\phi} &= 2\phi_0 \\
M_a &= \sqrt{b},
\end{aligned}
\tag{B..9}$$

e da exponencial definida abaixo

$$\begin{aligned}
G &\equiv \langle e^{\vec{g} \cdot \vec{n} / \sqrt{p}} \rangle . \\
G_{is} &= \int d\theta \operatorname{sen}^{p-2} \theta e^{g \cos \theta} \Omega_{p-1} / \Omega_p, \\
G_c &= \sum_{\mu} \cosh(g_{\mu}) / p; \\
G_{\phi} &= e^{g^2 / 2p}, \\
G_a &= \prod_{\mu} [b \cdot \cosh(g_{\mu} / \sqrt{bp}) + u].
\end{aligned} \tag{B..10}$$

A superfície de uma p-esfera de raio unitário Ω_p foi definida em (B..2). É interessante expandir a distribuição anisotrópica na soma de diversas outras, com pesos

$$\begin{aligned}
dP_a(\vec{n}) &= \sum_{k=0}^p \binom{p}{k} b^p u^{p-k} dP_{a_k}(\vec{n}); \\
dP_{a_k} &\equiv d\vec{n} \sum_{(\vec{a}_k)} \delta(\vec{n} - \vec{a}_k)
\end{aligned} \tag{B..11}$$

onde os vetores \vec{a}_k apontam na direção da k-semidiagonal, isto é, tem k componentes unitárias; como exemplo, tomemos

$$\begin{aligned}
dP_{a_0} &= d\vec{n} \delta(\vec{n}); \\
dP_{a_1} &= dP_c(\vec{n}/a); \dots; \\
dP_{a_p} &= dP_H(\vec{n}/a).
\end{aligned} \tag{B..12}$$

Então concluímos que no limite de a grande (b pequeno) os eixos apontam preferencialmente para as direções duras (diagonais), enquanto que se a for pequeno, os eixos fáceis (cúbicos) são privilegiados.

Além disso podemos construir as probabilidades marginais para as somas parciais de s componentes; uma variável aleatória com densidade de probabilidade trimodal com estados x_i ,

$$p(x^{\mu}) = \sum_i a_i \delta(x^{\mu} - x_i), \tag{B..13}$$

tem a seguinte distribuição para a freqüência de cada estado (X_i):

$$P(X_1, X_2, X_3) = X! \frac{a_1^{X_1} a_2^{X_2} a_3^{X_3}}{X_1! X_2! X_3!},$$

$$X \equiv \sum X_i, \quad (\text{B..14})$$

onde a_i são os pesos respectivos, $a_1 \equiv b/2 = a_3$; $a_2 = u$, com estados $-x_1 = 1 = x_3, x_2 = 0$; então usando as substituições

$$y_X = \sum^X = X_3 - X_1,$$

$$t = X_3 + X_1, \quad (\text{B..15})$$

nós obtemos a distribuição

$$P(X, y_X, t) = \frac{(b/2)^t (u)^{X-t} X!}{\frac{t-y_X}{2}! \frac{t+y_X}{2}! (X-t)!}, \quad (\text{B..16})$$

Agora, somando sobre a variável "marginal" t , temos a probabilidade da soma de s componentes (independentes) trimodais, $y \equiv \sum^s n_\mu / a$,

$$p_s(y) \equiv \sum_{(t)} P(s, y, t). \quad (\text{B..17})$$

Assim, particularizando para os casos $s = 2$,

$$p(y_2) = b^2 \delta(y^2 - 4) + 2b \cdot u \cdot \delta(y^2 - 1) + (b^2/2 + u^2) \delta(y); \quad (\text{B..18})$$

e com $s = 3$ componentes,

$$p(y_3) = \frac{3}{4} b^3 \delta(y^2 - 9) + 3b^2 \cdot u \delta(y^2 - 4) + 3b(b^2/4 + u^2) \delta(y^2 - 1) + (3b^2/2 + u^2) u \delta(y). \quad (\text{B..19})$$

Apêndice C

Limite Saturado

Em primeiro lugar vamos detalhar a demonstração da equação (1.b.15) a partir da (1.b.13), utilizando o método de Laplace. Para tanto devemos escrever o integrando em termos de uma exponencial com argumento que cresce muito rapidamente. Como vimos, o Hamiltoniano na eq. (1.b.9) pode ser representado em termos das variáveis

$$\beta J \vec{m} = \begin{pmatrix} M \\ L \end{pmatrix}, \quad \vec{s} = \begin{pmatrix} x^\sigma \\ \vec{y} \end{pmatrix};$$
$$\vec{y} \equiv \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} \quad (\text{C..1})$$

ou seja, nas componentes paralela e ortogonal ao eixo local \vec{n} . Por outro lado, para uma distribuição isotrópica dos spins, cuja diferencial de probabilidade em coordenadas cilíndricas é

$$dP_{is}(\vec{s}) = d\vec{s} \delta(s^2 - p) = ds^3 d\Omega_{p-2} / \Omega_{p-2}; \quad (\text{C..2})$$

onde $d\Omega_{p-2}$ é o elemento diferencial angular para uma esfera em $p-2$ dimensões podemos escolher as duas coordenadas cartesianas x , y e as restantes "polares", com módulo z de modo que o elemento de área seja

$$ds^3 \equiv dx dy dz \delta(x^2 + y^2 + z^2 - p) z^{p-3}. \quad (\text{C..3})$$

Agora, a última expressão contém uma potência assintótica em p , então (C..2) fica

$$dP(\vec{s}) \sim dx dy e^h,$$
$$h = \frac{p}{2} \ln(p - x^2 - y^2), \quad (\text{C..4})$$

onde temos realizado a integração sobre z , posto que esta variável não figura em g de (1.b.13).

Daí adicionamos ao argumento da exponencial, na integral da função partição, resultando em

$$\begin{aligned}
 Z^e &= \sum_{\sigma} \int dx dy e^J; J \equiv h + g; \\
 h &= \frac{p}{2} \ln(p - x^2 - y^2); \\
 g &= M\sigma x + Ly + \frac{\beta D}{2} x^2.
 \end{aligned} \tag{C..5}$$

A soma em σ decorre da degenerescencia dos hemisférios. A solução desta integral exige então uma maximização do argumento J com respeito a x e y , o que produz as equações estacionárias

$$\begin{aligned}
 M\sigma + \beta D x &= \frac{px}{p - x^2 - y^2} \\
 L &= \frac{py}{p - x^2 - y^2}.
 \end{aligned} \tag{C..6}$$

Desde que a variável M , sendo apenas uma simples componente (em oposição à L , onde se encontram as $p-1$ componentes restantes), deve ser de ordem unitária para quase qualquer configuração do eixo \vec{n} , vamos tomar $M = 0$ na soma em (C..6), e as equações (C..6) se reduzem à única abaixo:

$$\beta D = \frac{p}{p - x^2 - y^2} = L/y, \tag{C..7}$$

donde obtemos as soluções

$$\begin{aligned}
 y &= \frac{L}{\beta D}, \\
 x^2 &= p - \frac{p}{\beta D} - y^2;
 \end{aligned} \tag{C..8}$$

substituindo estas soluções na expressão (C..6), nós obtemos

$$\begin{aligned}
 Z^e &= e^{J_0} \cosh Mx; \\
 J_0 &= \frac{p}{2} \ln \frac{p}{\beta D} + \frac{L^2}{\beta D} + \beta D x^2 / 2 \\
 &= \frac{L^2}{2\beta D} + cte.
 \end{aligned} \tag{C..9}$$

onde temos efetuado já a soma em σ . Para calcularmos a energia livre como indicamos na seção anterior, necessitamos tomar o logarítmo primeiro e depois promediar a função partição em relação às variáveis configuracionais. Isto implica em calcular a média das $p-1$ projeções ortogonais à \vec{n} da magnetização. Usando Pitágoras, para distribuição isotrópica, temos, por (C..1)

$$\begin{aligned} \langle L^2 \rangle &= \langle (\beta J m)^2 - M^2 \rangle_n \\ &= (\beta J m)^2 - O(1/p) \rightarrow (\beta J m)^2, \end{aligned} \quad (C..10)$$

logo a energia fica

$$\begin{aligned} \beta f &= \beta J m^2 / 2 - \langle \ln Z^e \rangle \\ \langle \ln Z^e \rangle &= \frac{(\beta J m)^2}{2\beta D} + \beta f_x; \\ f_x &= T \langle \ln \cosh(\beta J \vec{m} \cdot \vec{n} x) \rangle, \end{aligned} \quad (C..11)$$

sendo x dado em (C..8). Reagrupando os termos quadráticos na magnetização, encontramos uma dependência na razão J/D , na forma

$$\beta f = \beta J (1 - J/D) m^2 / 2 - \beta f_x. \quad (C..12)$$

Realizando agora uma expansão na magnetização, obtemos

$$\begin{aligned} \beta f_x &\sim \langle (\beta J m n_m x)^2 / 2 \rangle + o(m^4) \\ \beta f &\sim \beta J m^2 (1 - \beta J) / 2. \end{aligned} \quad (C..13)$$

Um resultado útil pode ser a expansão da última equação na razão T/D , quando, até primeira ordem, o último termo da energia fica

$$\begin{aligned} f_x &= f_\infty - \frac{T J m}{2D} m_\infty; \\ f_\infty &= T \langle \ln \cosh(\beta J m n_m) \rangle; \\ m_\infty &= \langle n_m \tanh(\beta J m n_m) \rangle. \end{aligned} \quad (C..14)$$

Finalmente podemos colocar esta expansão na equação anterior, para obter a expressão

$$\begin{aligned} f &= f_\infty - \frac{J}{2D}(m^2 - Tm \cdot m_\infty); \\ f_\infty &\equiv m^2/2 - T \langle \ln \cosh(\beta J m n_m) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C..15})$$

e então, a equação para a maximização da energia com respeito a magnetização,

$$\begin{aligned} m(1 - J/D) &= m_\infty(1 - \frac{JT}{2D}) - \frac{(Jm)^2}{2D}(1 - Q), \\ Q &= \langle n_m^2 \tanh(\beta J m n_m) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C..16})$$

Observemos agora a estabilidade das fases P e G; neste caso no lugar de (C..6) temos simplesmente

$$J = \beta D x^2/2 + p/2 \ln(p - x^2). \quad (\text{C..17})$$

A condição de extremo é

$$\begin{aligned} \partial_x J &= \beta D x - \frac{px}{p - x^2} = 0; \\ x_P &= 0; x_G^2 = p(1 - T/D). \end{aligned} \quad (\text{C..18})$$

A segunda derivada em relação à x é

$$\begin{aligned} J_2 &\equiv \partial_x^2 J = \beta D - \frac{p}{p - x^2} - \frac{2x^2 p}{(p - x^2)^2}; \\ J_2^P &= \beta D - 1, D > T; \\ J_2^G &= 2\beta D(1 - \beta D), D < T. \end{aligned} \quad (\text{C..19})$$

Apêndice D

Técnica de Réplicas

No que segue, vamos explicitar o cálculo da função partição obtida pelo método de réplicas na seção (1.b). Para começar indicamos os passos necessários no desenvolvimento de (1.b.18). O método de cálculo empregado na obtenção de tais resultados é conhecido na literatura referente a sistemas desordenados como método de réplicas. Com o objetivo de manipular a difícil média do logaritmo em (1.a.24), consiste em reproduzir o Hamiltoniano n vezes (ou seja, n réplicas independentes), e usar a identidade

$$\begin{aligned} \langle \ln Z \rangle &= \partial_n Z_n \equiv \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln Z_n}{n}; \\ Z_n &= \langle Z^n \rangle, \quad Z^n \equiv \text{Tr} e^{-\beta H^n}. \end{aligned} \quad (\text{D..1})$$

Note-se que, ao substituir-se o cálculo da média do logaritmo pela da função partição replicada, pode-se trocar a ordem da realização da média configuracional pela térmica. Isto é permitido sempre que houver analiticidade nos integrandos[45]. (Veja-se o terceiro capítulo, onde a algebra dessa técnica será apresentada em mais detalhes). Por exemplo, aplicando à função partição efetiva em (1.b.9), achamos

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr}_{\vec{s}} \exp(g + \beta \vec{m} \cdot \vec{s}); \\ e^g &= \langle \exp(\vec{n} \cdot \mathcal{A} \cdot \vec{n}) \rangle; \\ \mathcal{A}_{\mu\nu} &\equiv \frac{\beta D}{2} \tilde{s}_\mu \cdot \tilde{s}_\nu, \end{aligned} \quad (\text{D..2})$$

onde o produto escalar nas grandezas com til indica $\tilde{x} \cdot \tilde{y} \equiv \sum_{\alpha} x_{\alpha} y_{\alpha}$, isto é, uma soma no índice de réplicas. Daí se torna possível a obtenção de uma função partição sem a desordem, após calcularmos a média acima.

A média configuracional pode ser feita se expandirmos o argumento da exponencial, ou seja

$$e^g \sim 1 + \sum_{\mu\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu} \langle n_\mu n_\nu \rangle + \frac{1}{2} \langle [\sum_{\mu\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu} n_\mu n_\nu]^2 \rangle. \quad (D..3)$$

Realizando as médias sobre as configurações de \vec{n} , isto produz

$$\begin{aligned} e^g &\sim 1 + \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 + \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu} \langle n_\mu^4 \rangle / 2 \\ &+ \langle n_\mu^2 n_\nu^2 \rangle [2 \sum_{\mu\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}^2 + \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 - 3 \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2] / 2, \quad (D..4) \\ \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 &= \frac{\beta D}{2} |\tilde{s}|^2. \end{aligned}$$

Assim, tomando o logaritmo obtemos

$$g = \frac{\beta D}{2} |\tilde{s}|^2 + W \sum_{\mu\nu} \mathcal{A}_{\mu\nu}^2 + \frac{3}{2} (V - W) \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 + (\beta D)^2 \frac{W - 1}{8} |\tilde{s}|^4, \quad (D..5)$$

onde definimos as constantes

$$\begin{aligned} V &\equiv \langle \rho^4 \rangle / 3; \\ W &\equiv \langle \rho^2 \xi^2 \rangle; \\ \rho &\equiv n_1, \quad \xi \equiv n_2 \end{aligned} \quad (D..6)$$

as quais dependem da distribuição de eixos conforme o apêndice C. Passamos agora a resolução deste Hamiltoniano efetivo g .

Para exemplificar tomamos o caso hipercúbico, quando $W = 0$, $V = p/3$, segundo (B..8):

$$g_c = \frac{\beta D}{2} |\tilde{s}|^2 + \frac{p}{2} \sum_{\mu} \mathcal{A}_{\mu\mu}^2 - |\tilde{s}|^4 / 8 \quad (D..7)$$

Este Hamiltoniano efetivo produz um diagrama similar ao da figura (1.2)[1].

Substituindo (1.b.19) em (1.b.18), com a expressão para \mathcal{C} , resta realizar o traço sobre os spins replicados e após, a "média" sobre a variável acoplada ao vidro-de-spin Q :

$$\begin{aligned} Z_n &= \langle Z_f \rangle_Q; \quad Z_f \equiv \int dP(\tilde{s}) \prod_{\mu} e^{\beta H^{\mu}}; \\ H^{\mu} &= c\tilde{m}_{\mu} \cdot \tilde{s}_{\mu} + \frac{D}{2} \tilde{s}_{\mu} \cdot \mathcal{B} \cdot \tilde{s}_{\mu}; \quad \mathcal{B} \equiv \mathcal{I} + \sqrt{2}Q \end{aligned} \quad (D..8)$$

onde $\mathcal{I}_{\alpha\beta} \equiv \delta_{\alpha\beta}$. A partir da equação (D..8), vamos realizar a média térmica utilizando um spin Gaussiano,

$$\begin{aligned} Z_f &= \prod_{\mu} Z_{\mu}^U \\ Z^U &= \int d\Phi(\tilde{\sigma}) e^{\beta H_U}, \\ H_U &= c\tilde{m} \cdot \tilde{\sigma} + \frac{D}{2} \tilde{\sigma} \cdot \mathcal{B} \cdot \tilde{\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{D..9})$$

O termo quadrático do Hamiltoniano eficaz pode ser colocado junto do termo Gaussiano, resultando em

$$\begin{aligned} Z^U &= \int d\tilde{\sigma} \exp[\tilde{\sigma} \cdot \mathcal{U} \cdot \tilde{\sigma} + \beta c\tilde{m} \cdot \tilde{\sigma}] \\ \mathcal{U} &\equiv \mathcal{I} - \beta D\mathcal{B}. \end{aligned} \quad (\text{D..10})$$

Agora podemos executar a integração Gaussiana, com a substituição $\tilde{\sigma} \cdot \mathcal{U}^{1/2} = \tilde{t}$, bastando "completar o quadrado" na exponencial, isto é

$$\begin{aligned} Z^U &= \int d\Phi(\tilde{t}) e^{\beta c\tilde{m} \cdot \mathcal{U}^{-1/2} \cdot \tilde{t}} |\mathcal{U}|^{-1/2} \\ &= \exp[(\beta c)^2 \tilde{m} \cdot \mathcal{U}^{-1} \cdot \tilde{m} - \text{Tr} \ln \mathcal{U}/2] \end{aligned} \quad (\text{D..11})$$

que, colocado na equação (D..10), produz

$$\begin{aligned} Z_f &= \prod_{\mu} Z_{\mu}^U, \\ Z_{\mu}^U &\equiv \exp[(\beta^2 c^2 \tilde{m}_{\mu} \cdot \mathcal{U}^{-1} \cdot \tilde{m}_{\mu} - \text{Tr} \ln \mathcal{U})/2]. \end{aligned} \quad (\text{D..12})$$

Então podemos calcular (D..8), tendo em mente que a média sobre Q definida anteriormente, é uma Gaussiana nos dois índices da matriz. A menos de algumas constantes de proporcionalidade, podemos escrever

$$\begin{aligned} Z_n &= \int d\mathcal{Q} \exp[-\|\mathcal{Q}\|^2/2 + \ln Z_f] \\ &\rightarrow \exp[-\|\mathcal{Q}\|^2/2 + \sum_{\mu} \ln Z_{\mu}^U]. \end{aligned} \quad (\text{D..13})$$

O próximo passo é considerar a simetria de réplicas, tomando

$$\begin{aligned} \vec{m}_\alpha &= \vec{m}, \text{ qualquer } \alpha; \\ Q_{\alpha\beta} &= q/\sqrt{2} \Rightarrow \\ B_{\alpha\beta} &= 1 + q, \text{ qualquer } \alpha, \beta, \end{aligned} \tag{D..14}$$

onde obtemos, substituindo em (D..13),

$$\begin{aligned} \langle \ln Z_n \rangle &= n \frac{(\beta c \vec{m})^2}{2u} - \frac{np}{2} \ln u - \frac{nq}{4}, \\ u &\equiv 1 - \beta DB; B = 1 + q \end{aligned} \tag{D..15}$$

e então a energia livre, com o termo magnético, fica

$$\beta f = \beta c \frac{m^2}{2} (1 - \beta c/u) + q^2/4 + \frac{p}{2} \ln u. \tag{D..16}$$

Enfim, a maximização com respeito aos parâmetros m , q , fornece

$$\begin{aligned} \partial_m f &= cm(1 - \beta c/u) = 0 \\ \partial_q f &= q/2 - (\beta mc/u)^2 \beta D/2 - p/u \beta D/2. \end{aligned} \tag{D..17}$$

Apêndice E

Simulação

Efetuamos uma simulação de Monte Carlo bastante simples. Baseados no programa em Pascal ao final deste apêndice onde a distribuição de probabilidade para as componentes independentes dos eixos foi escolhida, por simplicidade, como

$$\begin{aligned}dP(\theta) &= d\theta/\pi \\ \rho &= \text{sen}\theta,\end{aligned}\tag{E..1}$$

pudemos simular alguns fatos observados na distribuição trimodal. Em termos da componente, temos

$$dP(\rho) = \frac{d\rho}{\pi}(1 - \rho^2)^{-1/2}.\tag{E..2}$$

As médias para as potências pares são

$$\begin{aligned}\langle \rho^2 \rangle &= 1/2 \\ \langle \rho^4 \rangle &= 3/8,\end{aligned}\tag{E..3}$$

enquanto as ímpares se anulam. Já a média do módulo é

$$\langle |\rho| \rangle = 2/\pi.\tag{E..4}$$

Como temos realizado a dinâmica determinística de Glauber (temperatura nula), as equações de campo médio correspondentes as soluções estacionárias de Mattis e Diagonal definidos após (2.b.14) são

$$\begin{aligned}m_M &= \langle |\rho| \rangle \sim 0.637 \\ m_D &= \langle |z|/\sqrt{2} \rangle_\phi \sim 0.564.\end{aligned}\tag{E..5}$$

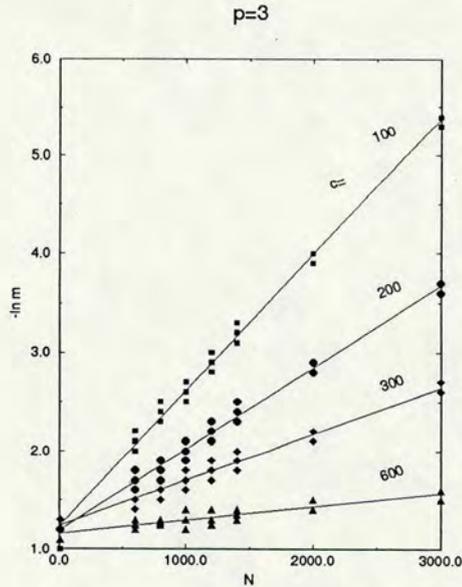


Figura E.1: Escala logarítmica da magnetização contra tamanho da rede, para diversos α .

Dessa razão entre as magnetizações, conclui-se que esta distribuição se assemelha ao caso $b \sim .7$, de acordo com (2.b.18). Observe que, embora a energia livre para o estado de Mattis seja menor, é possível que estados mixtos tenham energia ainda mais funda. Ainda dos resultados da seção (2.B) notamos que à temperatura crítica, o estado de Mattis é o mínimo Global, posto que $V = 1/8 < W = 1/4$. Isto mostra que uma magnetização finita, mesmo que reduzida, é bastante natural, ainda à $T = 0$.

Apesar de que a simulação seja em apenas uma dimensão, como temos tomado interações de longo alcance, número de coordenação c variável, mas grande, e dimensionalidade de spin suficientemente pequena, é possível o aparecimento de estados magnetizados, para inicialização dos spins suficientemente próxima da orientação completa.

Os efeitos de dimensão finita, posto que não foi permitido o uso de redes com número de sítios maior que $N = 3000$, devem ser levados em conta. Com a finalidade de estudar o comportamento da magnetização em função de N próximo à transição, realizamos diversos relaxamentos para cada c , conforme a figura (E.1). A interpretação do resultado é que está de acordo com a descontinuidade da transição, quando a lei de escala é

$$m \sim A e^{B[\alpha_c - \alpha]N} \quad (\text{E..6})$$

e ajustando uma reta para os valores do gráfico, obtemos as constantes

$$\begin{aligned} A &\sim 0.3, \\ B &\sim 0.06, \\ \alpha &\sim 0.004. \end{aligned} \quad (\text{E..7})$$

Se observarmos a figura (3.1), notamos que esse valor crítico de α corresponde aproximadamente a $u \sim .5$, donde $a \sim 2$ e $V \sim 1.3$. O valor de b crítico predito no cálculo para α finito é, portanto, ligeiramente menor que no caso não saturado. Estes resultados, obtidos da dinâmica, corroboram o fato observado na estática que o valor da obliquidade b depende de α .

```

PROGRAM tera30(input,output);
const n=1500;p=3;
type
sp(nn:integer) = array [1..nn] of real;
cs(nn:integer;pp:integer) = array[1..nn,1..pp] of real;
ji(nn:integer) = array [1..nn,1..nn] of real;
var
sigma:sp(n);campo:sp(n);
eixal:cs(n,p); intro:ji(n);
var a,b,c,d,e,f,t,u,v,w,x,y,z:real;
g,h,i,j,k,l,m,o,q,r,s:integer;
const en='en';ou='ou';

function rnd(x:real):real;
begin
d:=exp(30*abs(z)); rnd:=sin(d);
end;

BEGIN
writeln('zal,ma0,qco,sfi');readln(z,k,q,s);

for i:=1 to k do {sitios magneticos}
begin
z:=rnd(z); eixal[i,1]:=z;sigma[i]:=abs(z)/z;

```

```

for l:=2 to p do
begin
z:=rnd(z);eixal[i,l]:=z;
end;
end;

    for i:=k+1 to n do {sitios nao magneticos}
begin
z:=rnd(z);if z<0 then sigma[i]:=-1
else sigma[i]:=1;
for l:=1 to p do
begin
z:=rnd(z);eixal[i,l]:=z;
end;
end;

    for i:=1 to n do {interacao de troca}
begin
g:=i+q; if g>n then g:=n;
{condicao de contorno fechada}
for j:=i+1 to g do
intro[i,j]:=0; for l:=1 to p do
intro[i,j]:=intro[i,j]+eixal[i,l]*eixal[j,l];
end;

    for h:=1 to s do {relaxacao do campo e spin}
begin
x:=0; for i:=1 to n do
begin
campo[i]:=0;g:=i+q;if g>n then g:=n;
for j:=i+1 to g do
campo[i]:=campo[i]+intro[i,j]*sigma[j];
if campo[i]<0 then sigma[i]:=-1
else sigma[i]:=1;
x:=x+eixal[i,1]*sigma[i];
end;
w:=x/n;a:=q/n;b:=k/n;
writeln('hte,wag');writeln(h,w);
end;
writeln('ma0,mag,con,n,p');writeln(b,w,a,n,p);
END.

```

Referências

- [1] AHARONY,A; *Phys Rev B*, 12/3 (75) 1038.
- [2] AHARONY,A., PYTTE,E.; *Phys Rev B*, 27 (83) 5872.
- [3] AMARI,S.; *Proc IEEE*, 78/9 (90) 1443.
- [4] AMIT,D.,GUTFREUND,H., SOMPOLINSKY,H.; *Phys Rev A*, 32/2 (85) 1007.
- [5] AMIT,D.,GUTFREUND,H., SOMPOLINSKY,H.; *Ann Phys*, 173 (87) 30.
- [6] BENSIMON,D., MUKAMEL,D., PELITI,L. *Eur Let*, 18/3 (92) 269.
- [7] BRAY,A.J., MOORE,M.A.; *J Phys C*, 18 (85) L139.
- [8] CHAKRABARTI,A.*J Appl Phys*, 63/8 (88) 3735.
- [9] DERRIDA,B., GARDNER,E., ZIPPELIUS,A.; *Eur Let*, 4 (87) 167.
- [10] DERRIDA,B., VANNIMENUS,J.; *J Phys C*, 13 (80) 3261.
- [11] DOMANY,E., KINZEL,W., MEIR,R.; *J Phys A:M.G*, 22 (89) 2081.
- [12] FEIGEL'MAN,M.V., TSODYKS,M.V.; *Sov Phys JETP*, 64/3 (86) 562.
- [13] FIBICH,M.; *J Phys*, 2 (90) 2987.
- [14] FISCH,R.; *Phys Rev B*, 39/1 (89) 873.
- [15] FISCH,R.; *Phys Rev B*, 41/16 (90) 11705.
- [16] FISCH,R.; *Phys Rev Let*, 66/15 (91) 2041.
- [17] FISCH,R., HARRIS,A.B.; *Phys Rev B*, 41/16 (90) 11305.
- [18] FISHER,D.; *Physica A*, 177 (91) 84.
- [19] FISCHER,K., ZIPPELIUS,A.; *J Phys C*, 18 (85) L1139 [corrig:19(86)L265].
- [20] FISCHER,K., ZIPPELIUS,A.; *Prog Th Phys Sup*, 87 (86) 165.

- [21] FONTANARI,J.F., THEUMANN,W.K.,DOMINGUEZ,D.R.C.; *Phys Rev B*, 39/10 (89) 7132.
- [22] GABAY,M., TOULOUSE, G.; *Phys Rev Let*, 47/3 (81) 201.
- [23] GARDNER,E., DERRIDA,B., MOTTISHAW,P.; *J Phys*, 48 (87) 741.
- [24] GLAUBER, R.J.; *J Math Phys*, 4/2 (63) 294.
- [25] GOLDSCHMIDT,Y.Y.; *Phys Rev B*, 30/3 (84) 1632.
- [26] GOLDSCHMIDT,Y.Y., AHARONY,A.; *Phys Rev B*, 32/1 (85) 264.
- [27] HARRIS,A.B., CAFLISH,R.G., BANAVAR,J.R.; *Phys Rev B*, 35/10 (87) 4929.
- [28] HARRIS,R., PLISCHKE,M., ZUCKERMANN,M.J.; *Phys Rev Let*, 31/3 (73) 160.
- [29] HARRIS,R., SUNG,S.H.; *J Phys F*, 8/12 (78) L299.
- [30] HENKEL,R.D., OPPER,M.; *Eur Let*, 11/5 (90) 403.
- [31] HOPFIELD,J.J.; *Proc Nat Acad Sc USA*, 79 (82) 2554.
- [32] JAYAPRAKASH,C., KIRKPATRICK,S.; *Phys Rev B*, 21/9 (80) 4072.
- [33] JOVEN,E., DEL MORAL,A., ARNAUDAS,J.I.; *J Appl Phys*, 69/8 (91) 5069.
- [34] KHORUZHENKO,B.A.; *J Stat Phys*, 61/1-2 (91) 21.
- [35] KHURANA,A.,JAGANNATHAN,A.,KOSTERLITZ,J.M.;*Nucl Phys B*, 240 (84)1.
- [36] KINZEL,W.; *Z Phys B*, 60 (85) 205.
- [37] MANO,H.; *Progr Th Phys Sup*, 101 (90) 597.
- [38] MOLGEDEY,L., SCHUCHARDT,J., SCHUSTER,H.G.; *Phys Rev Let*, 69/26 (92) 3717.
- [39] MORGENSTEIN,I., VAN HEMMEN,J.L.; *Phys Rev B*, 32/9 (85) 6058.
- [40] PATRICK,A.E., ZAGREBNOV, V.A.; *J Phys Fr*, 51 (90) 1129.
- [41] PATRICK,A.E., ZAGREBNOV,V.A.; *J Phys A:M.G*, 24 (91) 59.
- [42] PATRICK,A.E., ZAGREBNOV,V.A.; *J Stat Phys*, 63/1-2 (91) 3413.
- [43] PATTERSON,J.D., GRUZALSKI,G.R., SELMEYER,D.J.; *Phys Rev B*, 18/3 (78) 1377.
- [44] PELCOVITS,R.A.; *Phys Rev B*, 19/1 (79) 465.

- [45] PROVOST, J.P., VALLEE, G.; *Phys Rev Let*, **50/8** (83) 598.
- [46] SELLMAYER, D.J., NAFIS, S.; *J Appl Phys*, **57/1** (85) 3584.
- [47] SHERRINGTON, D., KIRKPATRICK, S.; *Phys Rev Let*, **35** (75) 1792.
- [48] SHUKLA, P.; *J Stat Phys*, **71/3-4** (93) 705.
- [49] TAMASHIRO, M.N., SALINAS, S.R.A.; *Braz J Phys*, **23/1** (93) 69.
- [50] TEJADA, J., MARTINEZ, B., LABARTA, A., GROSSINGER, R., SASSIK, H., VAZQUEZ, M., HERNANDO, A.; *Phys Rev B*, **42/1** (90) 898.
- [51] VAN HEMMEN, J.L., ZAGREBNOV, V.A.; *J Phys A*, **20** (87) 3989.
- [52] ZAGREBNOV, V.A., CHYVIROV, A.S.; *Sov Phys JETP*, **68** (89) 153.
- [53] DOMINGUEZ, D.R.C., THEUMANN, W.K.; *Phys Rev B*, em impressão.
- [54] DIOPHANTE; *Les Arithmetiques, Les Belles Lettres*, (1984) Paris.
- [55] DINGLE, R.B.; *Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation*, Academic Press (1973) London.
- [56] KOROLIUK; *Manual de Probabilidades e Estadística*, Mir (1981) Moscou.