

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

EFEITOS DA TOPOLOGIA EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

IGOR RUAN KOSARCZUK DA SILVA

Trabalho de Conclusão de Curso

PORTO ALEGRE – RS

Junho de 2017

IGOR RUAN KOSARCZUK DA SILVA

EFEITOS DA TOPOLOGIA EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

Monografia apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como requisito para obtenção do título de Bacharel em Física.
Orientador: Prof. Dr. Rubem Erichsen Junior.

PORTO ALEGRE – RS

Junho de 2017

RESUMO

Este trabalho buscou esclarecer um pouco dos efeitos da topologia em sistemas de spins. Através da utilização do método de Monte Carlo, especificamente com o Algoritmo de Metropolis, desenvolveu-se um algoritmo computacional próprio capaz de simular várias amostras de uma rede bidimensional quadrada com spins de Ising e capaz de alternar ligações entre partículas, gerando novas topologias aleatórias, e assim simular tais redes igualmente. Esclarecemos que quanto maior a aleatoriedade das ligações entre pares de partículas em uma rede de spins maior é o desvio das curvas correspondentes à energia interna, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética para redes bidimensionais quadradas pequenas e que a média dos observáveis de muitas redes aleatórias recai no modelo de rede bidimensional quadrada com spins de Ising.

ABSTRACT

This work sought makes clear some effects of topology in spin's systems. Using the Monte Carlo method, strictly the Metropolis Algorithm, we had develop a computational algorithm that's can be simulate many samples of a two-dimensional square spin network of Ising type and can change particles bonds, generating another randomly topology, and then simulate this networks. We show that when more randomly is the particle bonds in the network, more is the displacement of standard in curves of internal energy, magnetization, specific heat and magnetic susceptibility for small two-dimensional square networks and the average value of observables of many randomly networks converge to a typical two-dimensional square network model with Ising's spins.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	6
2 REVISÃO TEÓRICA.....	7
2.1 MECÂNICA ESTATÍSTICA	7
2.1.1 Valor Esperado	7
2.1.2 Equilíbrio Termodinâmico.....	8
2.1.3 Flutuações	9
2.2 SISTEMAS MAGNÉTICOS.....	9
2.3 REDES DE SPINS.....	10
2.4 MODELO DE ISING	11
2.4.1 Resultados exatos na rede quadrada	12
2.5 MODELO DE REDE ALEATÓRIA	12
2.5.1 Restrições ao Modelo de Rede Aleatória.....	13
2.6 MÉTODO DE MONTE CARLO	16
2.6.1 O Estimador $\langle Q \rangle$	17
2.6.2 Algoritmo de Metropolis.....	17
3 MODELAGEM COMPUTACIONAL	21
3.1 PROCESSOS DE CONSTRUÇÃO DA REDE	21
3.2 ARMAZENAMENTO DE DADOS	22
3.3 PROCESSO DE SIMULAÇÃO	23
3.3.1 O processo de splicing	24
3.4 REDE DE SPINS BIDIMENSIONAL QUADRADA COM INTERAÇÃO DE PRIMEIROS VISINHOS (REDE PADRÃO).....	25
3.5 REDE DE SPINS BIDIMENSIONAL ALEATÓRIA COM RESTRIÇÃO	25
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	25
5 CONCLUSÕES	30
REFERÊNCIAS.....	31

1 INTRODUÇÃO

A Mecânica Estatística é um ramo da Física que estuda sistemas físicos utilizando métodos estatísticos e Teoria das Probabilidades. Um dos maiores desafios da Mecânica Estatística é tratar de problemas de muitos corpos (visto que um mol de partículas contém $\sim 10^{23}$ unidades), onde soluções matemáticas se tornam muito complexas. Uma abordagem diferente para analisar o comportamento de sistemas sem que seja necessário obter uma solução exata é a modelagem computacional [2]. Nesta, o aumento de elementos no sistema causa um aumento no tempo de processamento, porém ainda assim é de grande vantagem, pois garante extrair informações valiosas do sistema que se estuda. Por este motivo busca-se soluções matemáticas aproximadas (ou exatas, se possível) e métodos computacionais que buscam otimizar o tempo de processamento com uma boa solução para o sistema.

Dentre os sistemas de partículas estudados pela Mecânica Estatística, são os sistemas magnéticos, que é apenas uma particularidade dos inúmeros sistemas possíveis, que são de nosso interesse. Especificamente sistemas magnéticos tratados como uma rede cristalina de spins. Muita modelagem física e matemática são realizadas sobre esse tipo de sistema a fim de obter um conhecimento mais aprofundado de seus fenômenos físicos e propriedades termodinâmicas. Neste trabalho trataremos desenvolveremos um algoritmo próprio a fim de analisar o comportamento destes sistemas magnéticos de spin, utilizando os Modelos de Ising na rede quadrada e Rede Aleatória quadrada. Buscando estabelecer diferenças e semelhanças entre as duas topologias de rede.

No primeiro capítulo introduzimos uma revisão teórica, abordando os principais conceitos que são utilizados ao longo do desenvolvimento do trabalho; o conceito de sistemas magnéticos e redes de spins e os modelos de interesse como modelo de Ising e modelo de rede aleatória.

No segundo capítulo trazemos o conceito do Método de Monte Carlo, método estatístico utilizado em nossa modelagem computacional, incluindo o Algoritmo de Metropolis, que é um algoritmo de simulação de rede baseado neste método. Também, o conceito de Estimador, Aceitação, Equilibração, Dados Mensuráveis e Estimativas de Erros Estatísticos.

No terceiro capítulo expomos a modelagem computacional utilizada para simular os diferentes tipos de rede, omitindo os algoritmos por questão de economia de páginas, mas demonstrando o funcionamento geral do algoritmo próprio e seus processos internos.

Finalmente, no quarto capítulo, expomos e discutimos os resultados das simulações. No quinto estabelecemos a conclusão sobre a efetividade e aplicabilidade do algoritmo próprio e em torno das simulações realizadas.

2 REVISÃO TEÓRICA

Nesta revisão seguiremos como referência os livros textos de Salinas [2], Newman-Barkema [1], Landau-Binder [3] e Chandler [4]. Trataremos principalmente do Método de Monte Carlo e dos modelos de rede de spins que são utilizados neste trabalho.

2.1 MECÂNICA ESTATÍSTICA

A Mecânica Estatística é uma área da Física que estuda os fenômenos físicos baseado em métodos estatísticos e Teoria das Probabilidades. Ela auxilia no estudo da dinâmica de sistemas de muitas partículas, tais como variáveis termodinâmicas relacionadas e transições de fases. Nesta se busca, também, as leis microscópicas que governam o comportamento macroscópico de um sistema, ou seja, as propriedades termodinâmicas devem corresponder a uma estrutura microscópica e é a Mecânica Estatística que desenvolve, partindo do ponto de vista microscópico para macroscópico, uma conexão com a Termodinâmica.

Uma questão importante é o sentido de “Medida”. Em um sistema termodinâmico, observado do ponto de vista microscópico, é possível realizar uma medida de alguma variável observável, porém, essa medida é realizada sobre um único arranjo de partículas dentre os Y arranjos possíveis. Cada arranjo é denominado um microestado do sistema. Do ponto de vista macroscópico o sistema estará em um estado termodinâmico bem definido (quando no equilíbrio) onde seus observáveis serão médias de seus valores em todos os microestados.

2.1.1 Valor Esperado

Um sistema com conjunto de microestados $\{\mu\}$ possuirá observáveis Q cujo valor médio será a média entre os valores Q_μ e a probabilidade $w_\mu(t)$ de medir Q_μ em um instante de tempo t para cada microestado μ . A média é denominada **valor esperado** [1] $\langle Q \rangle$ do observável Q , descrita por

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} w_{\mu}(t) \quad . \quad (2.1)$$

2.1.2 Equilíbrio Termodinâmico

Quando um sistema sofre uma variação de temperatura é necessário esperar um tempo suficientemente grande para atingir o equilíbrio térmico. Esse tempo é conhecido como **tempo de relaxação**. Ao atingir o estado de equilíbrio o sistema estabelece microestados bem definidos que, a partir daí, poderá ser realizadas medidas de observáveis onde o seu valor esperado não muda com o tempo, já que $w_\mu(t)$ acabam por se tornar bem definidos. Assim os valores de probabilidade relativas a cada microestado no momento em que se alcança o equilíbrio é chamado **de probabilidade de ocupação no equilíbrio** [1]

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} w_\mu(t) \quad (2.2)$$

Um reservatório térmico é um sistema grande o suficiente para que qualquer variação pequena de sua energia interna não cause uma alteração significativa em sua temperatura T_{rev} . Ao colocar um sistema relativamente pequeno em contato térmico com o reservatório, este sofrerá uma variação de temperatura T , equalizando-a com a temperatura T_{rev} do reservatório térmico após o tempo de relaxação. Portanto, em 1902, Gibbs¹ demonstrou que um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório de temperatura $T = T_{rev}$ possui as probabilidades de ocupações

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/k_B T} \quad , \quad (2.3)$$

com E_μ sendo a energia do microestado μ e k_B a constante de Boltzmann cujo valor é $1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$. Denota-se por convenção que $(k_B T)^{-1} = \beta$. Z é a constante de normalização com valor dado por

$$Z = \sum_{\mu} e^{-E_\mu/k_B T} = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu} \quad . \quad (2.4)$$

Z também é conhecida como **Função de Partição** e possui uma importância maior no desenvolvimento matemático da Mecânica Estatística do que uma mera constante de normalização.

Evidentemente o valor esperado no equilíbrio será

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_\mu e^{-E_\mu/k_B T} \quad . \quad (2.5)$$

Por exemplo, vamos considerar a energia interna U , que é exatamente nosso valor esperado de energia $\langle E \rangle$,

¹ Josiah Willard Gibbs (1839-1903) – cientista americano.

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-E_{\mu}/k_B T} \quad , \quad (2.6)$$

que pode ser escrita igualmente como

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \quad . \quad (2.7)$$

Utilizando as Relações de Maxwell² [2] para o calor específico C , encontramos que

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k_B \beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad . \quad (2.8)$$

2.1.3 Flutuações

Outras propriedades macroscópicas passíveis de verificação no equilíbrio termodinâmico são aquelas que estão diretamente relacionadas com as **flutuações** de outros observáveis do sistema.

Por exemplo, fazendo a média do quadrado da energia,

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-E_{\mu}/k_B T} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad , \quad (2.9)$$

e determinando a variância de E ,

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right]^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad , \quad (2.10)$$

obtemos uma nova relação para o calor específico

$$C = k_B \beta^2 [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad . \quad (2.11)$$

O mais interessante certamente é o fato de podermos calcular os níveis de flutuação de energia diretamente por uma variável macroscópica como o calor específico. As flutuações de outro observável, a magnetização, garante a determinação de outra variável macroscópica, a susceptibilidade magnética.

2.2 SISTEMAS MAGNÉTICOS

Quando aplicamos um campo magnético externo B em um sistema físico, a resposta do sistema nos revelará se este é um sistema magnético ou não. Se o sistema interagir de alguma forma com o campo então será um sistema magnético. Como uma partícula portadora de spin possui um campo magnético intrínseco, ela sofrerá interação com um campo

² Em homenagem ao físico e matemático escocês James Clerk Maxwell (1831-1879).

magnético externo. Em um sistema de partículas portadoras de spin, cada partícula interage com o campo magnético externo, de modo que o sistema possua uma magnetização líquida m . Claro que a magnetização líquida dependerá de propriedades do sistema e intensidade do campo aplicado, porém na ausência de campo externo a magnetização ocorrerá de forma espontânea onde os spins tenderão a alinhar-se na mesma direção, minimizando assim a energia do sistema. O que impede o alinhamento imediato dos spins é justamente a energia interna moldada pela temperatura do sistema.

Neste trabalho trataremos apenas de sistemas magnéticos na ausência de campo externo, ou seja, sistemas que só podem sofrer magnetização de forma espontânea.

2.3 REDES DE SPINS

Quando as partículas de um sistema estão organizadas de forma periódica como numa rede cristalina, podemos denominar este sistema como uma rede de partículas. Cada partícula está localizada em um sítio da rede. Se estas partículas possuírem spin então o sistema será, de fato, uma rede de spins. Uma rede também pode ser pensada como um **grafo**, onde os vértices e arestas são, respectivamente, as partículas e as ligações entre partículas.

O termo de energia devido à interação entre spins é escrito como

$$- \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad , \quad (2.13)$$

onde J_{ij} é a energia de interação entre duas partículas³ com spins σ_i e σ_j localizadas nos sítios i e j e N é o número total de partículas na rede. Para uma rede quadrada de comprimentos L_x e L_y , $N = L_x L_y$. O tamanho da rede também pode ser representado pelo símbolo $L_x \times L_y$.

A rede também pode ser pensada como um grafo G_{Rede} , onde os elementos da matriz de adjacência $\mathbf{A}_{G_{Rede}}$ estabelecem a ligação entre pares de partículas i e j . Assim a energia de troca J_{ij} pode ser descrita como o peso de energia ε_{ij} e a possibilidade de ligação c_{ij} entre os pares i e j , ou seja, $J_{ij} = \varepsilon_{ij} c_{ij}$. Se $c_{ij} = 0$ então as partículas i e j não estão conectadas; não possuem aresta entre elas. Portanto o Hamiltoniano de um sistema magnético em rede assume a seguinte forma generalizada:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad . \quad (2.14)$$

³A energia J_{ij} também pode ser interpretada como o termo quântico de troca, de natureza coulombiana [2].

O termo de energia devido à interação entre spins pode ser simplificado de modo que o valor esperado do Hamiltoniano possua solução matemática ou simplifique uma possível modelagem computacional.

2.4 MODELO DE ISING

Em uma rede de spins constituído de partículas de spin $+1$ ou -1 organizadas em uma rede cristalina, a contribuição das interações spin-spin é incluída no Hamiltoniano de forma simplificada. Admite-se que cada partícula interage apenas com seus vizinhos imediatos. O Hamiltoniano, então, toma a seguinte forma [2;10]:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\substack{i,j \\ i < j \\ |i-j|=1}}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad . \quad (2.15)$$

O modelo de Ising é um modelo propositalmente simplificado para que seja fácil prever o comportamento do sistema. Por este motivo, comumente se admite uma energia de troca independente dos spins e seus respectivos sítios, ou seja, $J_{ij} = J$. Em uma rede quadrada o **número de coordenação**, que é o número de ligações de uma partícula com seus vizinhos imediatos, no modelo de Ising, é 4. O número de coordenação pode variar entre diferentes redes cristalinas, moldando a rede com uma topologia diferente. A Figura 1 mostra qualitativamente a topologia para uma rede bidimensional quadrada com interação de primeiros vizinhos, seguindo o modelo de Ising.

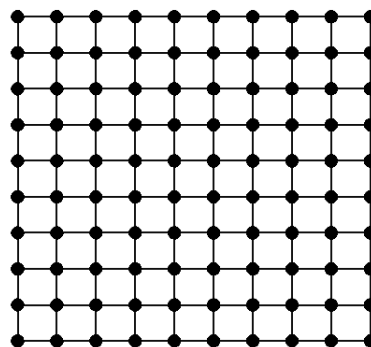


Figura 1 – Rede de partículas bidimensional quadrada 10×10 com interação de primeiros vizinhos. As partículas das extremidades estão conectadas com as partículas da outra extremidade, fechando a rede sobre si mesma.

Por motivos de facilidade de evocar o conceito da rede bidimensional quadrada com interação de primeiros vizinhos, vamos denominá-la como **rede padrão**, útil também para os propósitos de nosso trabalho.

2.4.1 Resultados exatos na rede quadrada

Uma solução exata para o modelo de Ising numa rede quadrada foi obtida por Onsager [6] e revista por Schultz-Mattis-Lieb [7]. Nela se estabelece valores teóricos para a energia interna da rede, bem como a temperatura crítica. Temperatura essa que estabelece a transição para uma fase ferromagnética no sistema. Fazendo $k_B = 1$ e $J = 1$, adimensionais, teremos que T se resolve em

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2,269 \dots \quad (2.16)$$

e a energia interna por spin $u = U/N$ sendo

$$u = -\frac{J}{\tanh \beta J} \left\{ 1 + (2 \tanh^2 2\beta J - 1) \frac{2}{\pi} K(k_1) \right\} \quad , \quad (2.17)$$

onde

$$k_1 = \frac{2 \sinh 2\beta J}{\cosh^2 2\beta J} \quad (2.18)$$

e

$$K(k_1) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} [1 - k_1^2 \sin^2 \theta]^{\frac{1}{2}} d\theta \quad . \quad (2.19)$$

2.5 MODELO DE REDE ALEATÓRIA

Em uma rede aleatória as partículas possuem ligações com outras partículas distribuídas em sítios aleatórios da rede. Essencialmente não há restrição quanto à distância entre partículas. Diferente da rede padrão, não apenas partículas imediatamente vizinhas se ligam, mas sim qualquer par de partículas na rede podem se ligar.

Como a rede pode ser descrita por um grafo G_{Rede} então o grafo de uma rede aleatória será igualmente um grafo aleatório Γ_{Rede} com matriz de adjacência $\mathbf{A}_{\Gamma_{Rede}}$. Neste caso o Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j}^N J_{ij} c_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad , \quad (2.20)$$

onde $c_{ij} \in \{0,1\}$ são os elementos da matriz de adjacência que em uma rede aleatória será também uma variável aleatória.

2.5.1 Restrições ao Modelo de Rede Aleatória

Devido à especificidade do estudo, não há interesse em gerar redes aleatórias irrestringíveis que possuam número de coordenação variável ou quantidade total de ligações diferentes de uma rede padrão. Há a necessidade de restringir a geração de uma rede aleatória para que sua modelagem possa gerar resultados comparáveis à rede padrão. Para todos os propósitos deste trabalho iremos restringir o número de partículas (vértices) para N em uma rede bidimensional quadrada, número de coordenação para 4 e o número total de ligações em $2N$.

Para gerar uma rede aleatória com as restrições mencionadas acima, pode-se realizar um processo que denominamos de **reconexão**, ou **crossing-over**, onde as ligações entre quatro partículas cruzam-se. Realizando diversas vezes o processo de reconexão, uma rede padrão passa a ser uma rede menos ordenada, mais aleatória. Ao realizar o máximo de reconexões a rede será completamente aleatória. Portanto, desta forma podemos gerar uma rede aleatória partindo de uma rede padrão.

O processo segue uma sequência de passos mostrados na figura 2 (indexados com as letras da lista abaixo) e descritos a seguir:

- a) Parte-se de uma rede padrão.
- b) Seleciona-se uma partícula P_1 aleatoriamente.
- c) Abre-se um **campo de seleção** de uma segunda partícula P_2 .
- d) Seleciona-se aleatoriamente a partícula P_2 dentro do campo de seleção, determinando a ligação B_{12} .
- e) Abre-se um **campo de restrição** à seleção de novas partículas.
- f) Seleciona-se uma partícula P_3 aleatoriamente.
- g) Abre-se um campo de seleção de uma segunda partícula P_4 .
- h) Seleciona-se aleatoriamente a partícula P_4 dentro do campo de seleção, determinando a ligação B_{34} .
- i) Encerra-se o campo de restrição.
- j) Quebram-se as ligações B_{12} e B_{34} entre P_1-P_2 e P_3-P_4 respectivamente.
- k) Reconectam-se P_1 a P_3 e P_2 a P_4 gerando as ligações B_{13} e B_{24} respectivamente.
- l) Encerra-se o processo, gerando uma rede aleatória que sofreu apenas uma reconexão. Um único crossing-over descrito por CO1x.

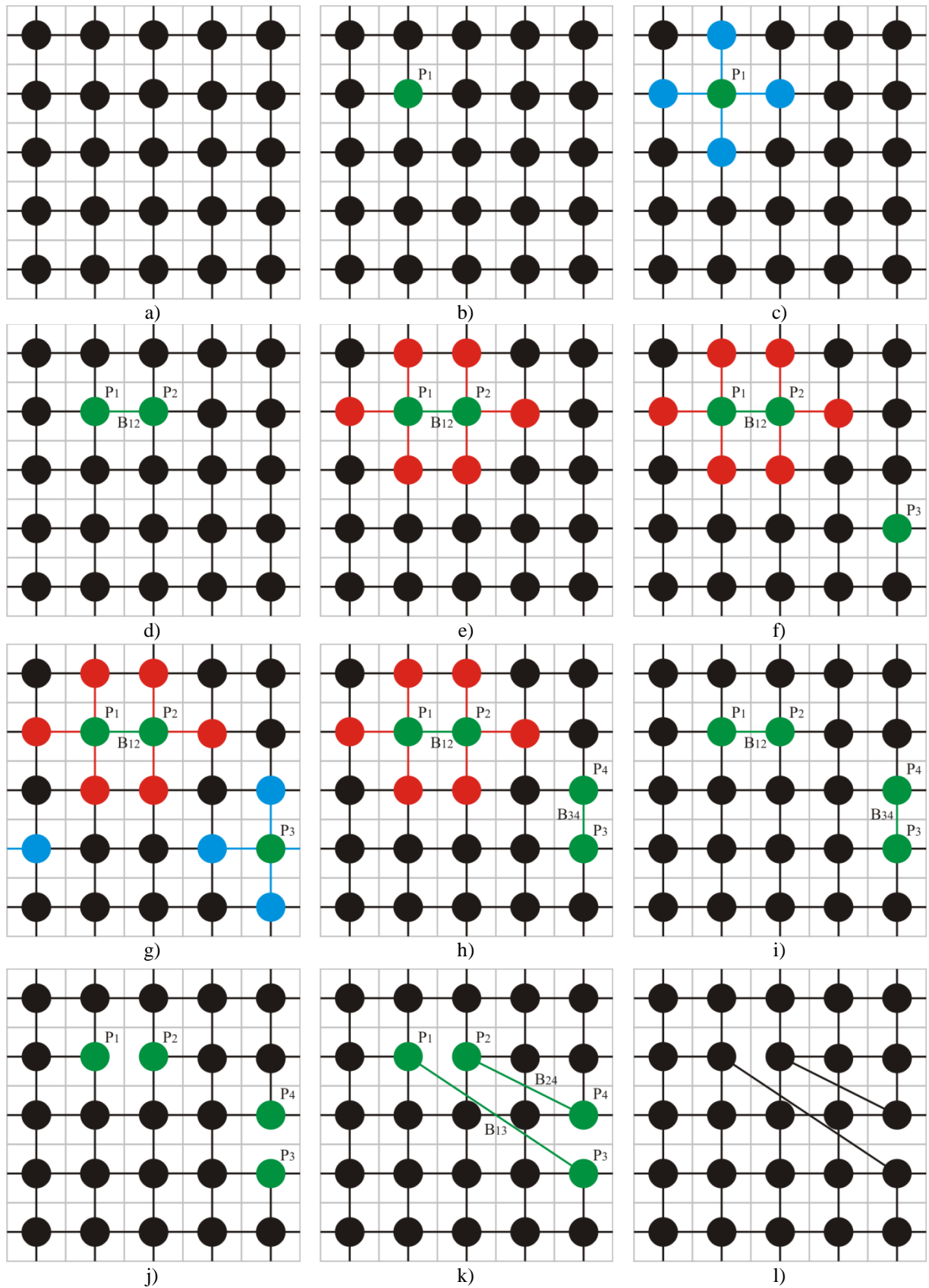


Figura 2 – Processo de reconexão (CO1x) de uma rede padrão 5×5 para uma rede aleatória com restrição. Parte-se de uma rede padrão (a), finalizando em uma rede menos ordenada (l) com apenas um par de ligações reconectadas.

A título de esclarecimento, o campo de seleção é gerado durante a seleção de uma segunda partícula porque o que se deseja é encontrar a ligação entre duas partículas. Obviamente que em uma rede padrão qualquer ligação conecta sempre duas partículas imediatamente vizinhas, porém o processo de reconexão pode muito bem ser utilizado em pares de partículas conectadas distantemente da rede, formando assim um campo de seleção diferente do de uma rede padrão, um campo de seleção apenas entre as partículas que se conectam. O processo de reconexão quebra e junta ligações independente de elas serem ligações de vizinhos imediatos ou ligação de partículas distribuídas na rede.

O campo de restrição é gerado para garantir que nenhuma partícula adjacente ao par selecionado seja selecionada. Se isso ocorresse, durante a reconexão seria possível gerar ligações duplas entre os pares de partículas. O que é indesejável nesse modelo, já que estamos tratando de uma rede aleatória com restrição.

Uma rede aleatória que recebeu n reconexões pode ser simbolizada por CO_nx . CO vem do termo crossing-over, n do número de vezes que o processo é realizado e x é o símbolo de multiplicação. Quanto mais vezes utilizado o processo em uma única rede, mais aleatória esta se torna, chegando a um momento que ela estará completamente aleatória, ou seja, uma **rede aleatória saturada**. Uma rede saturada ocorre quando o número de reconexões é bem maior que o número de conexões na rede. Como em uma rede padrão possuímos N pares de ligações, quando $n \gg N$ teremos uma rede aleatória saturada onde qualquer nova reconexão não modifica mais o nível de aleatoriedade da rede⁴. Então uma rede saturada pode ser simbolizada por um $CO^\infty x$. Um exemplo de rede aleatória utilizando o processo de reconexão está disposto na Figura 3.

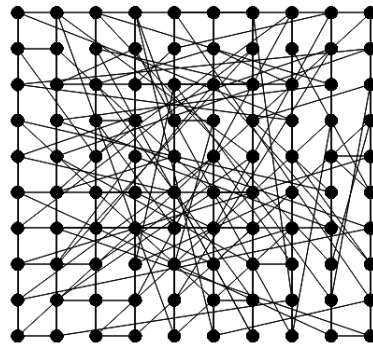


Figura 3 – Exemplo de rede 10×10 com topologia aleatória restrita. As partículas das extremidades são conectadas com as partículas da outra extremidade, exceto se houve alguma reconexão.

⁴ Apenas para fins didáticos. Pode haver uma forma correta de medir o nível de aleatoriedade em uma rede, mas não é este o caso aqui mencionado.

2.6 MÉTODO DE MONTE CARLO

O método de Monte Carlo, inicialmente, não era um método para resolver problemas de física, mas sim para estimar o valor de integrais que por outros meios seria de difícil solução [1]. Tratando-se da solução de integrais, o método é extremamente simples: sorteia-se R pontos aleatórios sobre um gráfico que contém uma curva $f(x)$, alguns pontos irão estar sob a curva, totalizando S pontos, e outros sobre a curva. Fazendo a média de pontos que caíram abaixo da curva com os pontos que caíram acima da curva podemos estimar o valor da área $I(x)$ sob a curva,

$$I(x) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{Sx}{R} \quad , \quad (2.21)$$

ou seja, a integral definida entre os intervalos que se deseja. Obviamente, quanto maior o número de pontos utilizados, maior precisão terá o resultado final.

Em modelos computacionais, em nosso caso especificamente modelos como o de Ising, o método é utilizado de modo que seja estabelecido um estado de equilíbrio no sistema, para que, no fim, seus observáveis possam ser medidos. Para cada microestado inicial μ haverá uma probabilidade de transição ao estado final ν que dependem das variáveis termodinâmicas do sistema, tal como temperatura. Sorteia-se um número aleatório, se este número aleatório estiver abaixo da probabilidade de transição haverá uma alteração do microestado $\mu \rightarrow \nu$, senão, mantém-se no microestado original μ . Este processo descrito acima é, na verdade, o processo utilizado no algoritmo de Metropolis. Porém, de forma generalizada, em qualquer sistema simulado, haverá uma probabilidade de transição entre estados μ e ν que deve ser satisfeita (ou não) por um número aleatório.

A grande vantagem do uso do método de Monte Carlo em nossa experimentação é a brusca diminuição do tempo computacional de processamento. Visto que em cada estado do sistema haverá inúmeros microestados correspondentes, é de se esperar que em uma simulação onde R microestados sejam selecionados aleatoriamente haverá uma boa estimativa, na média, dos observáveis que corresponde aquele estado. Igualmente, quanto maior R , diga-se “passos de Monte Carlo”, mais próximo do valor exato o observável de interesse estará.

2.6.1 O Estimador $\langle Q \rangle$

Uma das conseqüências benéficas de uma simulação de Monte Carlo é a possibilidade de calcular o valor esperado $\langle Q \rangle$ de alguma variável observável Q . Como o método de Monte Carlo trabalha selecionando subgrupos de microestado aleatoriamente com uma distribuição de probabilidade p_μ , o **estimador** Q_S será uma média dos valores dessa variável a cada microestado selecionado aleatoriamente [1]

$$Q_S = \frac{\sum_{i=1}^S Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^S p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad , \quad (2.22)$$

onde S é a quantidade de microestados selecionados aleatoriamente. É evidente também que quando $S \rightarrow \infty$, $Q_S = \langle Q \rangle$.

Quando escolhemos uma distribuição de probabilidade p_μ tal que todos os estados são igualmente prováveis, podemos cancelar os termos $p_{\mu_i}^{-1}$ em (2.22) e expressar Q_S como

$$Q_S = \frac{\sum_{i=1}^S Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^S e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad . \quad (2.23)$$

Uma outra forma de estimar o valor de Q é assumir uma probabilidade de distribuição $p_\mu = Z^{-1} e^{-\beta E_\mu}$, o que garante uma simplicidade de (2.22) [1]

$$Q_S = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S Q_{\mu_i} \quad , \quad (2.24)$$

tornando mais simples para um algoritmo computacional estabelecer o valor do observável de interesse.

O estimador é um elemento de extrema importância numa simulação de Monte Carlo, pois é através dele que serão determinadas as propriedades do sistema, tais como energia interna, magnetização, e até mesmo propriedades dependentes de uma estimativa, como calor específico e susceptibilidade magnética.

2.6.2 Algoritmo de Metropolis

Um dos primeiros algoritmos, e mais famoso, utilizando o método de Monte Carlo foi introduzido por Nicolas Metropolis em 1953 em trabalho conjunto com seus colegas. O algoritmo ficou conhecido como o Algoritmo de Metropolis [1;12].

A razão da probabilidade do sistema realizar uma transição $\mu \rightarrow \nu$ com a probabilidade de o sistema realizar uma transição $\nu \rightarrow \mu$ entre um estado μ inicial e ν final é

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (2.25)$$

Portanto é como se o estado tivesse mais probabilidade de transitar para um estado ν se $E_\nu < E_\mu$ e maior probabilidade de se manter no estado μ se $E_\nu > E_\mu$. Desta maneira, ao sortearmos um número r entre 0 e 1 várias vezes e confrontar com a razão das probabilidades dada por (2.25), teremos uma média de quão provável o sistema aceita uma transição $\mu \rightarrow \nu$. Se a energia E_ν for menor que E_μ a transição $\mu \rightarrow \nu$ deve ser satisfeita, já que o sistema possuindo menor energia ficará mais estável. Assim podemos definir a probabilidade de aceitação como sendo a razão das probabilidades de transição tal como

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{se } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{se } E_\nu \leq E_\mu \end{cases} \quad (2.26)$$

Assim, basicamente, o algoritmo de Metropolis seleciona um estado ν e se este possuir uma energia menor que o estado atual μ , $E_\nu \leq E_\mu$, ocorre uma transição. Se o estado selecionado possuir energia maior que o estado atual a transição ocorre somente se $r \leq e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$. Desta maneira, durante vários sorteios de r e transições realizadas, haverá uma competição entre aumentar a energia, através de $r \leq e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$, moldado pela temperatura T e minimizar a energia através da transição $\mu \rightarrow \nu$ quando $E_\nu < E_\mu$.

2.6.2.1 Equilibração

Quando se trabalha com um algoritmo computacional, frequentemente o sistema inicia em um estado não condizente com suas variáveis termodinâmicas. Na verdade isso também é comum em uma experimentação real, quando o sistema inicialmente está em um estado a qual não é o estado desejável, necessitando assim entrar em contato com um reservatório de energia a fim de que suas variáveis termodinâmicas assumam os valores correspondentes ao reservatório. Quando essa equiparação de estado é alcançada, podemos dizer que o sistema entrou em equilíbrio termodinâmico com o reservatório. Por exemplo: é muito improvável que um sistema magnético a $T = \infty$ tenha os spins das partículas alinhados, porém é possível que ao iniciar uma simulação o estado inicial contenha esse alinhamento. Portanto é necessário garantir um tempo grande o suficiente para que o sistema realize transições até encontrar-se no estado de equilíbrio correspondente àquela temperatura. Este tempo característico é chamado de **tempo de equilíbrio**⁵ τ_{eq} e **equilíbrio** é justamente o nome

⁵ Vale ressaltar que o tempo de equilíbrio e o tempo de relaxação não são a mesma coisa. O tempo de equilíbrio ocorre computacionalmente cuja unidade é um Passo de Monte Carlo de medida adimensional. O tempo de relaxação ocorre no sistema físico e é medido em segundos.

dado ao processo de estabilização do sistema antes que seja realizada qualquer medida. Um exemplo deste efeito pode ser verificado na figura 4.

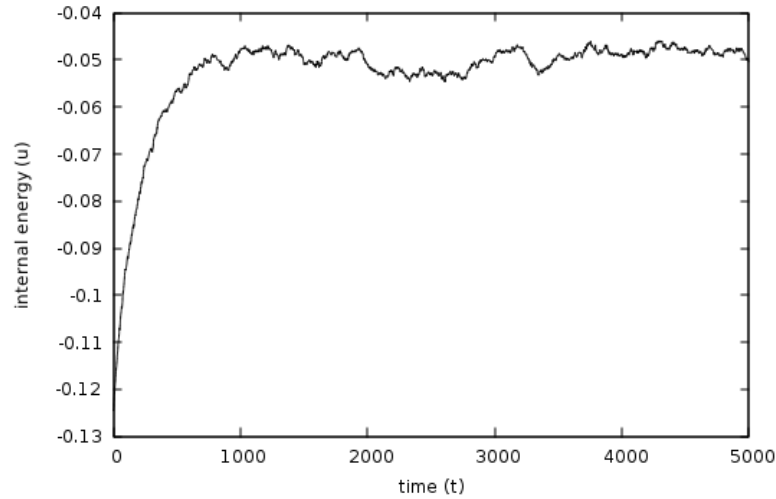


Figura 4 – Energia interna por partícula u em uma rede padrão 25×25 com $\frac{k_B T}{J} = 5.0$. Em $t = \tau_{eq} \cong 1000$ a energia interna do sistema passa a oscilar apenas em torno de um valor médio $\langle u \rangle_{t > \tau_{eq}}$

A equilibração do sistema é um processo de extrema importância na determinação do valor esperado de um observável. Visto que os passos iniciais sempre possuem valores desproporcionais, é mais seguro desconsiderá-los somente a partir tempo de equilibração τ_{eq} . Caso não seja possível conhecer o tempo de equilibração é conveniente escolher um tempo suficientemente de modo que as medições ocorram seguramente após o tempo de equilibração. É garantido, assim, que os valores indesejados pré-equilibração, valores esses que não condizem com o estado de equilíbrio do sistema, sejam descartados.

2.6.2.2 Dados Mensuráveis

Com a simplicidade do modelo de Ising, utilizando apenas os spins, que são propriedades de natureza magnética, no hamiltoniano (excluindo o campo magnético externo) haverá, no sistema, duas variáveis candidatas a medições durante uma simulação de Monte Carlo, sendo elas a energia E_μ e a magnetização M_μ do microestado μ . Como o modelo tratado é uma rede de spins cujos valores são $+1$ ou -1 a magnetização M_μ será diretamente proporcional à soma dos spins para cima ($+1$) com a dos spins para baixo (-1)

$$M_\mu = \sum_i^N s_i^\mu \quad . \quad (2.27)$$

Dado também que a magnetização por partícula é $m = M/N$, fazendo uma série de medidas em um conjunto de microestados selecionados aleatoriamente $\{\mu\}_{\text{rand}}$, teremos que o valor esperado da magnetização por partícula, seguindo (2.24), será

$$\langle m \rangle = \frac{\langle M \rangle}{N} = \frac{1}{N} \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{\mu \in \{\mu\}_{\text{rand}}}^S M_\mu \quad . \quad (2.28)$$

A energia do microestado ν após uma transição $\mu \rightarrow \nu$ será a energia do microestado μ mais a diferença de energia $\Delta E_{\mu\nu} = \Delta E_{\nu\mu}$ entre μ e ν ,

$$E_\nu = E_\mu + \Delta E_{\mu\nu} \quad . \quad (2.29)$$

Importante notar que essa equação descreve que a energia do microestado final vai depender de um microestado inicial. Para resolver esta questão é usual estabelecer a energia do primeiro microestado diretamente a partir do hamiltoniano (2.15 ou 2.20) antes de iniciar uma simulação que, apesar de possuir um custo computacional maior que (2.29) será utilizada apenas no início da simulação. Será necessário, portanto, conhecer apenas $\Delta E_{\mu\nu}$ durante a simulação. Para os modelos tratados neste trabalho, com $J = J_{ij}$, tendo

$$\Delta E_{\mu\nu} = 2J\sigma_k^\mu \sum_{i \text{ conectados a } k} \sigma_i^\mu \quad , \quad (2.30)$$

onde as partículas nos sítios i estão conectadas com a partícula do sítio k .

Para estimar o valor da energia interna U seguimos a mesma receita de (2.28). Partindo de (2.20) teremos

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = - \sum_{i,j}^N J_{ij} c_{ij} [\langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle)] \quad , \quad (2.31)$$

que em uma aproximação de campo médio desprezamos os termos de correlação $(\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle)$ obtendo

$$U = - \sum_{i,j}^N J_{ij} c_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad , \quad (2.32)$$

e que para efeitos computacionais, utilizando (2.24), teremos

$$\langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{\mu \in \{\mu\}_{\text{rand}}}^S \langle \sigma_i \rangle^\mu \langle \sigma_j \rangle^\mu \quad . \quad (2.33)$$

Outras variáveis de interesse são as variáveis derivantes das variâncias da energia interna e da magnetização por partícula, tais como o calor específico c e a susceptibilidade magnética χ respectivamente. Seus valores são dados por

$$c = \frac{\beta^2}{N} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad \text{e} \quad (2.34)$$

$$\chi = \beta N [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2] \quad . \quad (2.35)$$

2.6.2.3 Estimativa de Erros Estatísticos

Devido à aleatoriedade de microestados gerados em uma simulação de Monte Carlo, os observáveis acabam sendo de natureza estatística, de modo que a simulação se torna uma fonte de **erros estatísticos**. Para o modelo de Ising o único tipo de erro estatístico é devido a flutuações térmicas, qualquer outro tipo de erro que não provenha dessas flutuações é um erro sistemático [1;17]. Nesta seção abordaremos a questão da estimativa de erro estatístico para um observável.

A melhor maneira de se estimar o erro é realizando n amostragens de um observável Q durante a simulação. Porém é necessário que cada amostra seja estatisticamente independente. Para isso estima-se o valor esperado de Q , utilizando (2.24), com um espaçamento de tempo suficientemente grande entre uma amostragem e outra, possuindo assim um conjunto de valores esperados $\{\langle Q \rangle_k\}$, de maneira que o desvio padrão será dado por

$$\sigma_Q = \sqrt{\frac{1}{n-1} (\overline{Q^2} - \bar{Q}^2)} \quad , \quad (2.36)$$

onde $\overline{Q^2}$ é a média do quadrado de $\{\langle Q \rangle_k\}$, \bar{Q}^2 é o quadrado da média de $\{\langle Q \rangle_k\}$ e n é o número de amostras.

3 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Nesta seção abordaremos a modelagem computacional utilizada para o desenvolvimento do algoritmo próprio utilizado nas simulações dos modelos de redes de spin. O algoritmo foi desenvolvido em linguagem C [5] e baseado em estruturas de dados [8].

3.1 PROCESSOS DE CONSTRUÇÃO DA REDE

Foi desenvolvido um algoritmo computacional utilizando estruturas de dados a fim de obter uma vantagem em nível de modelagem e processamento de dados. Uma série de estruturas que em conjunto são capazes de modelar o nosso problema de redes de spins, possibilitando uma rápida alteração entre topologias de rede.

O primeiro elemento estruturado a ser desenvolvido foi o **cabeçalho da rede**. Neste inserimos as informações importantes tal como temperatura, número de colunas, número de linhas, valor da constante de Boltzmann e valores globais referentes à rede em si como energia interna e magnetização do estado atual da rede. A segunda estrutura desenvolvida foi

o **sítio**, que contém a informação de posição (i, j) na rede. Neste caso o sítio se traduz apenas como uma posição fixa do espaço, o “plano de fundo” por onde as partículas serão distribuídas. A título de exemplo, se adotássemos uma rede hexagonal, haverá sítios vazios, desprovidos de partículas, o que em outra modelagem poderia ser igualmente útil. A terceira estrutura desenvolvida foi a **ligação**, possuindo nesta a informação entre ligações sítio-sítio ou partícula-partícula juntamente com a energia de ligação J_{ij} . Neste momento já fomos capazes de unir sítios com ligações e criar a rede de fundo – quadrada, cada sítio possuindo quatro ligações – a qual as partículas seriam inseridas. A quarta estrutura desenvolvida foi a **partícula**, que contém a informação de spin. Cada sítio ou partícula pode assumir qualquer quantidade de ligações, mas nas redes de interesse o número de ligações se mantém em quatro, como comentado anteriormente (§2.5.1). O passo seguinte foi acoplar as partículas criadas aos respectivos sítios da rede e conectando partículas com partículas em concordância com uma rede padrão.

Como o processo de construção da rede referido acima é preferencialmente generalizado, o mesmo poderia ser utilizado para uma rede d -dimensional qualquer, com tipo de rede cristalina, topologia e energias de ligações determinada pelo usuário. A vantagem deste tipo de estruturação é a facilidade de modelar outros tipos de rede, porém utilizamos o processo apenas na construção dos modelos de rede padrão e rede aleatória restrita.

3.2 ARMAZENAMENTO DE DADOS

Para um armazenamento rápido de dados utilizamos **Árvores Binárias de Pesquisa** (ABP) [8]. A árvore ABP pode ser tanto de energia quanto de magnetização. Ela é composta por um **cabeçalho da árvore** que armazena informações globais tal como médias do observável, suas quantidades totais de ocorrência durante a simulação e valor do calor específico ou susceptibilidade magnética se a árvore for, respectivamente, de energia ou magnetização. Cada valor do observável que ocorre é inserido em uma **folha**. As folhas são os vértices da árvore que contém como índice um valor do observável e a quantidade de ocorrência deste valor. Durante a simulação, alguns microestados ν são selecionados e a energia ou magnetização são determinadas. Devido à grande quantidade de ocorrências do mesmo valor de energia ou magnetização, tornou-se conveniente inserir nas folhas uma variável correspondente ao valor de energia ou magnetização – índice – e outra correspondente à quantidade de ocorrências – contagem. Assim duas árvores para cada

amostra da simulação foram utilizadas, uma para armazenar a energia e outra para armazenar a magnetização. Se o valor de energia ou magnetização não existisse em sua respectiva árvore, então uma nova folha era criada, senão pesquisava-se a folha que continha aquele valor e adicionava-se +1 na contagem.

Ao término da simulação todos esses dados nas árvores são tratados. De modo que obtemos os correspondentes valores de energia média, energia média quadrática, energia quadrática média, magnetização média, magnetização média quadrática, magnetização quadrática média e média do módulo da magnetização. Todas estas médias são atualizadas no cabeçalho da árvore e utilizando (2.34) e (2.35) determinamos, respectivamente, o calor específico ou susceptibilidade magnética.

É importante mencionar que para cada amostra existe uma árvore de energia e uma árvore de magnetização. Portanto n árvores garantem a estimativa de erro estatístico (2.36) para n amostras. Podendo assim já determinar o erro para todos os observáveis como energia interna, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética.

3.3 PROCESSO DE SIMULAÇÃO

Após a rede construída, com suas partículas posicionadas em seus respectivos sítios e estando conectadas umas as outras, é que inserimos de temperatura e constante de Boltzmann para dar início à simulação.

A simulação segue o Algoritmo de Metropolis (§2.6.2). Seleciona-se uma partícula P_1 aleatoriamente na rede, verificam-se suas ligações B_k e suas respectivas energias de ligação J_{B_k} e obtém-se o conjunto de partículas $\{P_l\}$, $l > 1$, conectadas a P_1 . Verifica-se a diferença de energia $\Delta E_{\mu\nu}$ (2.29) se inverter o spin de P_1 determinando a probabilidade de ocorrer a transição entre estados $\mu \rightarrow \nu$ (2.26). O algoritmo escolhe um número aleatório r entre 0 e 1 e confronta com a probabilidade de aceitação, realizando assim a troca do estado ou não, conforme (2.26). Esse processo é repetido muitas e muitas vezes até o término da simulação. Apesar de J_{B_k} poder ser definido separadamente para cada ligação, em nossas simulações mantemos $J_{B_k} = 1 \forall k$.

Antes de iniciar a coleta de dados esperamos um tempo suficientemente longo de tentativas de inverter os spins a fim de garantir a equilibração do sistema. Só após atingir a equilibração é que iniciamos a coleta de dados de energia e magnetização que são inseridos em suas respectivas ABPs.

3.3.1 O processo de splicing

Um processo importante referente à coleta de dados em tempo de simulação é o que chamamos de **splicing**⁶.

Para um melhor resultado, diminuindo o erro estatístico, utilizamos muitas amostras. Porém essas amostras são simuladas em série. Ao término da simulação de cada amostra, o sistema estará em um estado específico que, na amostra seguinte, será o primeiro estado, de modo que as amostras estariam próximas o suficiente para admitir-se uma dependência estatística entre elas. Para minimizar a dependência realizamos um descarte dos dados até atingir-se um tempo de equilíbrio – pré-equilíbrio; descarte – e períodos de tempo que a coleta de dados é realizada – pós-equilíbrio; coleta – formando **blocos** de dados descartados e coletados. Podemos definir uma eficiência entre coleta e descarte que é a razão entre o tempo de equilíbrio e o tempo máximo de simulação por amostra $\epsilon_{cd} = \frac{\tau_{eq}}{\tau_{max}}$, que é também a perda de eficiência computacional em prol da independência amostral.

Como esses blocos de dados coletados ficam distantes um dos outros (Figura 5) por um tempo igual ao tempo de equilíbrio, assumimos uma independência estatística entre os blocos e o erro estatístico se torna simples de calcular (2.36), sem precisar depender de outros métodos alternativos mencionados na referência [1].

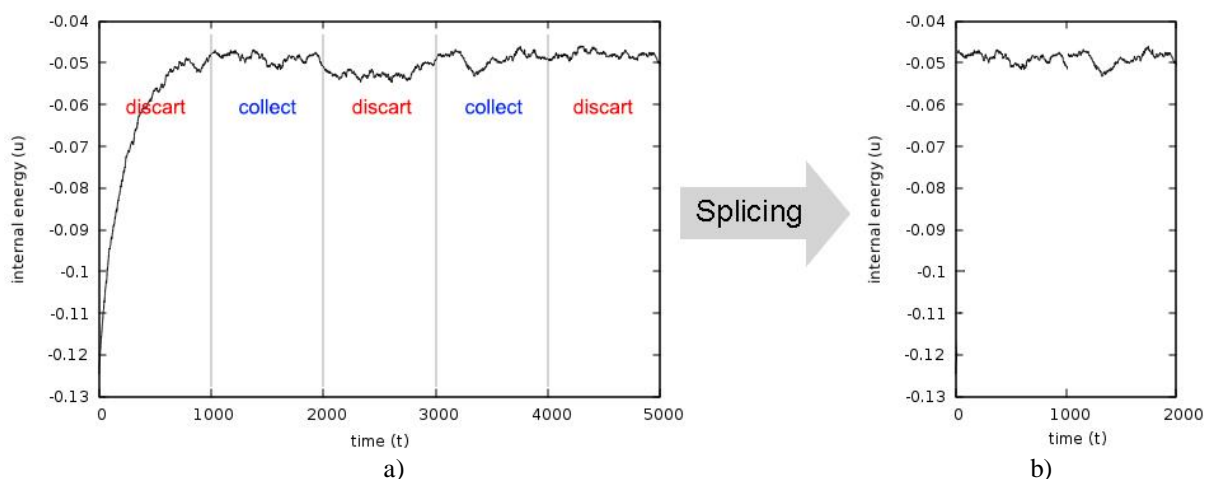


Figura 5 – Processo de splicing na energia interna u com $\tau_{eq} = 1000$ e $\tau_{max} = 2000$ para uma rede padrão 25×25 . (a) Durante o processo de simulação do sistema espera-se um tempo de equilíbrio para que os dados sejam coletados por amostra. Ao término da amostragem inicia-se uma nova simulação em série, partindo do ultimo estado em que o sistema se encontra iniciando novamente a coleta de dados somente após um tempo de equilíbrio. (b) Os dados coletados equivalem a uma simulação onde as amostras são independentes. A perda de tempo computacional reflete a eficiência entre coleta e descarte.

⁶ Splicing é o nome de um processo biomolecular que remove os *íntrons* – descarta – e junta os *éxons* – coleta – após a transcrição do RNA [9]. Utilizamos a mesma denominação devido à semelhança entre o processo computacional e o processo biomolecular.

3.4 REDE DE SPINS BIDIMENSIONAL QUADRADA COM INTERAÇÃO DE PRIMEIROS VISINHOS (REDE PADRÃO)

Realizamos simulações sobre três tamanhos de rede padrão: 5×5 , 10×10 e 25×25 . Para todas elas, iniciamos com estados de spins completamente aleatórios nas partículas a uma temperatura $T_i = 5.0$ e constante de Boltzmann definida em $k_B = 1$. As energias de ligações entre os pares de partículas foram todas estabelecidas em $J_{ij} = 1$. O tempo de equilíbrio foi definido em $\tau_{eq} = 5000N$ e o tempo máximo da simulação por amostra em $\tau_{max} = 10000N$. Foram estabelecidas 100 amostras por temperatura, varridas a partir da temperatura inicial até uma temperatura final $T_f = 0.0$ com intervalos de $\Delta T = -0.2$. Ao termino de toda a simulação, fomos capazes de obter gráficos para energia interna, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética. Todos com seus respectivos erros estabelecidos.

3.5 REDE DE SPINS BIDIMENSIONAL ALEATÓRIA COM RESTRIÇÃO

Para redes aleatórias 5×5 foram realizadas simulações em 10 redes aleatórias CO1x, 10 redes aleatórias CO10x e 10 redes aleatórias CO100x (saturada) e 1 rede aleatória CO25x. Para redes aleatórias 10×10 foram realizadas simulações em 1 rede aleatória CO1x, 1 redes aleatória CO10x e 1 rede aleatória CO100x e 1 rede aleatória CO400x (saturada). Para redes aleatórias 25×25 foram realizadas simulações em 1 rede aleatória CO1x, 1 redes aleatória CO50x e 1 rede aleatória CO625x e 1 rede aleatória CO1250x (saturada).

Os parâmetros de temperatura inicial, variação de temperatura, temperatura final, constante de Boltzmann, energias de ligação, tempo de equilíbrio, tempo máximo e número de amostras iguais às simulações das redes padrão.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A primeira discussão que pode ser feita é sobre o correto funcionamento do algoritmo próprio [15]. Para verificar a convergência das variáveis durante a simulação, definimos a função

$$\text{conv}(x) = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t x_i \quad , \quad (4.1)$$

onde x é a variável de interesse e t o tempo em passos de Monte Carlo, gerando o gráfico da figura 6 para 10 redes padrão a uma temperatura $T = 5.0$.

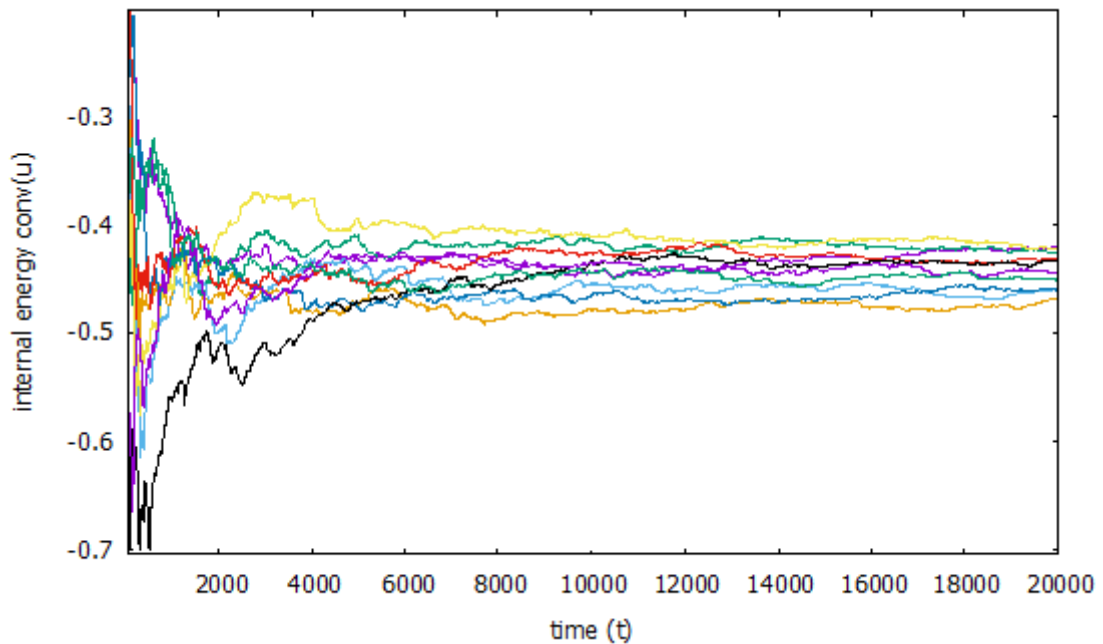


Figura 6 – Convergência da energia interna contra tempo em 10 redes padrão 5×5 a temperatura $T = 5.0$. A energia interna converge para um valor em torno de -0.45 .

Podemos perceber que os observáveis – no caso da figura acima apenas a energia interna – convergem para um valor médio, garantindo que o algoritmo próprio funciona corretamente.

Referente ao processo de reconexão, o bom funcionamento pode ser verificado diretamente pela figura 3. A figura 3, assim como todos os gráficos deste trabalho, foi gerada pelo gnuplot [13] através de um arquivo texto gerado na saída da simulação. Este arquivo texto continha os pares de partículas conectadas, possibilitando assim representá-lo graficamente. Não foi mantida no algoritmo próprio esta funcionalidade, que foi utilizada apenas durante a construção do algoritmo para garantir o correto funcionamento do processo de reconexão.

A segunda discussão é sobre os resultados obtidos pelas simulações. Inserimos em gráficos separados, disponíveis na figura 7, as curvas correspondentes à energia interna, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética de uma rede padrão 5×5 e as médias de 10 redes aleatórias CO1x, 10 redes aleatórias CO10x e 10 redes aleatórias CO100x (saturada). As barras de erro nos gráficos da figura 7 são devidas à simulação da rede padrão.

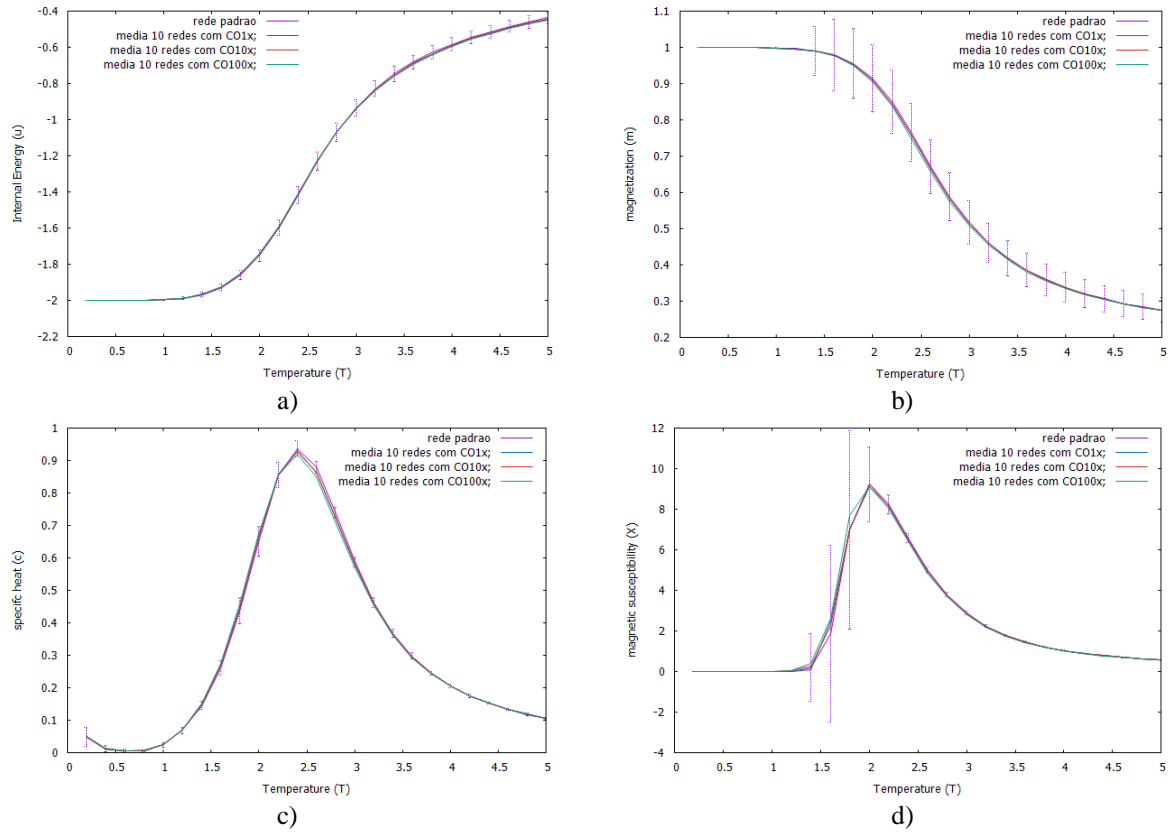


Figura 7 – Energia interna u (a), módulo da magnetização $|m|$ (b), calor específico c (c) e susceptibilidade magnética χ (d) contra temperatura T para uma rede padrão e suas médias para 10 redes aleatórias CO1x, 10 redes aleatórias CO10x e 10 redes aleatórias CO100x(saturada) . Todas as redes possuem tamanho 5×5 .

Segundo a figura 7, podemos notar que a média dos observáveis dos 3 grupos de redes aleatórias (CO1x, CO10x e CO100x) possuem o mesmo comportamento do que em uma rede padrão. As curvas das médias se aproximam muito das curvas dos observáveis da rede padrão, estando também dentro do erro estatístico.

Desses grupos de redes aleatórias, buscamos observar a seguir não a média, mas sim o valor real de um observável de uma única rede aleatória. Geramos assim os gráficos da figura 8 para a magnetização a fim de realizar tal observação.

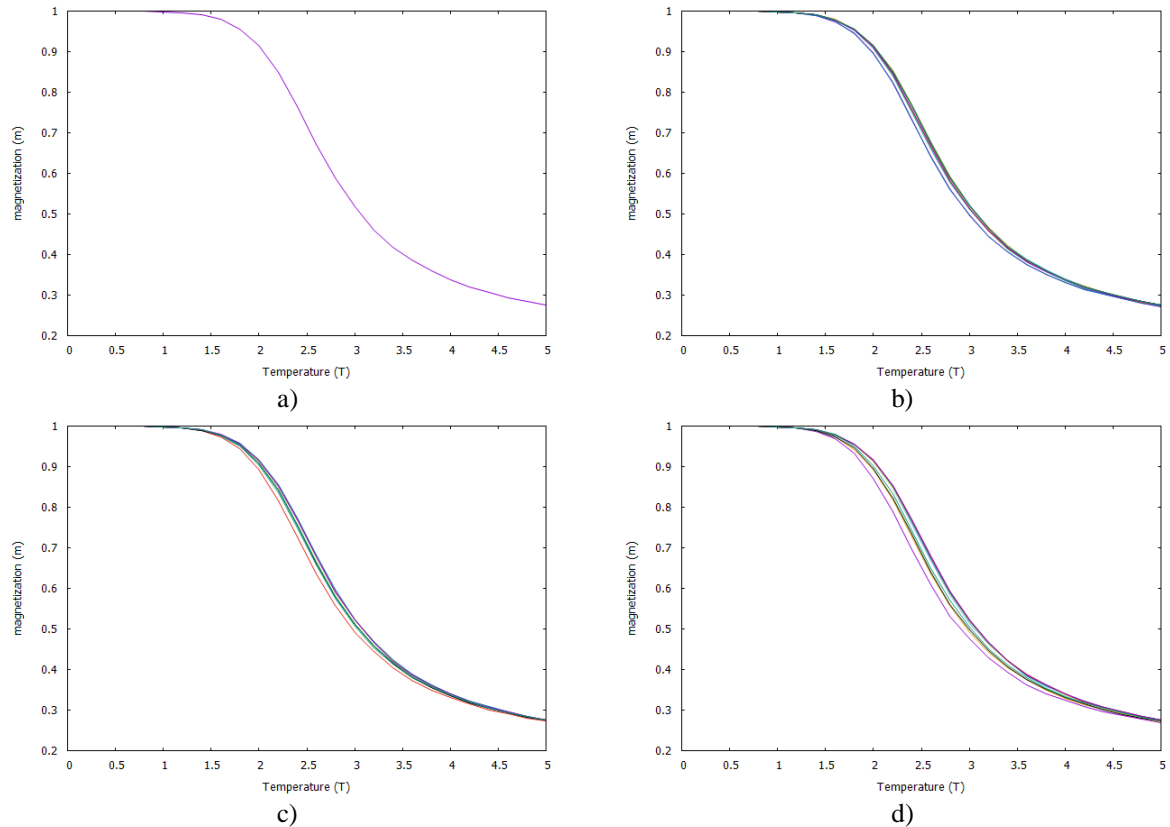


Figura 8 – Módulo da magnetização $|m|$ contra temperatura T para uma rede padrão (a), 10 redes aleatórias CO1x (b), 10 redes aleatórias CO10x (c) e 10 redes aleatórias CO100x(saturada) (d). Todas as redes possuem tamanho 5×5 . Percebe-se que ocorre um fenômeno de dispersão da curva conforme aumenta-se o número de reconexões realizadas na rede.

Na figura 7b é possível visualizar que as médias dos 3 grupos de redes aleatórias sobre a magnetização compreendem bem à curva de uma rede padrão como na figura 8a. Porém em cada simulação de uma nova rede aleatória o padrão de curva gerado é levemente deslocado para esquerda ou para a direita no eixo da temperatura (como mostram as figuras 8b, 8c e 8d), gerando um fenômeno de dispersão da curva de magnetização. O mesmo fenômeno ocorre para os outros observáveis.

A fim de entender melhor o fenômeno de dispersão das curvas dos observáveis gerados por uma rede aleatória, se este permanece ocorrendo conforme se aumenta o tamanho da rede, geramos os gráficos de magnetização para redes de tamanho 5×5 , redes de tamanho 10×10 e redes de tamanho 25×25 , onde cada gráfico possui uma rede padrão e quatro redes aleatórias de diferentes quantidades de reconexões. Os gráficos foram inseridos na figura 9.

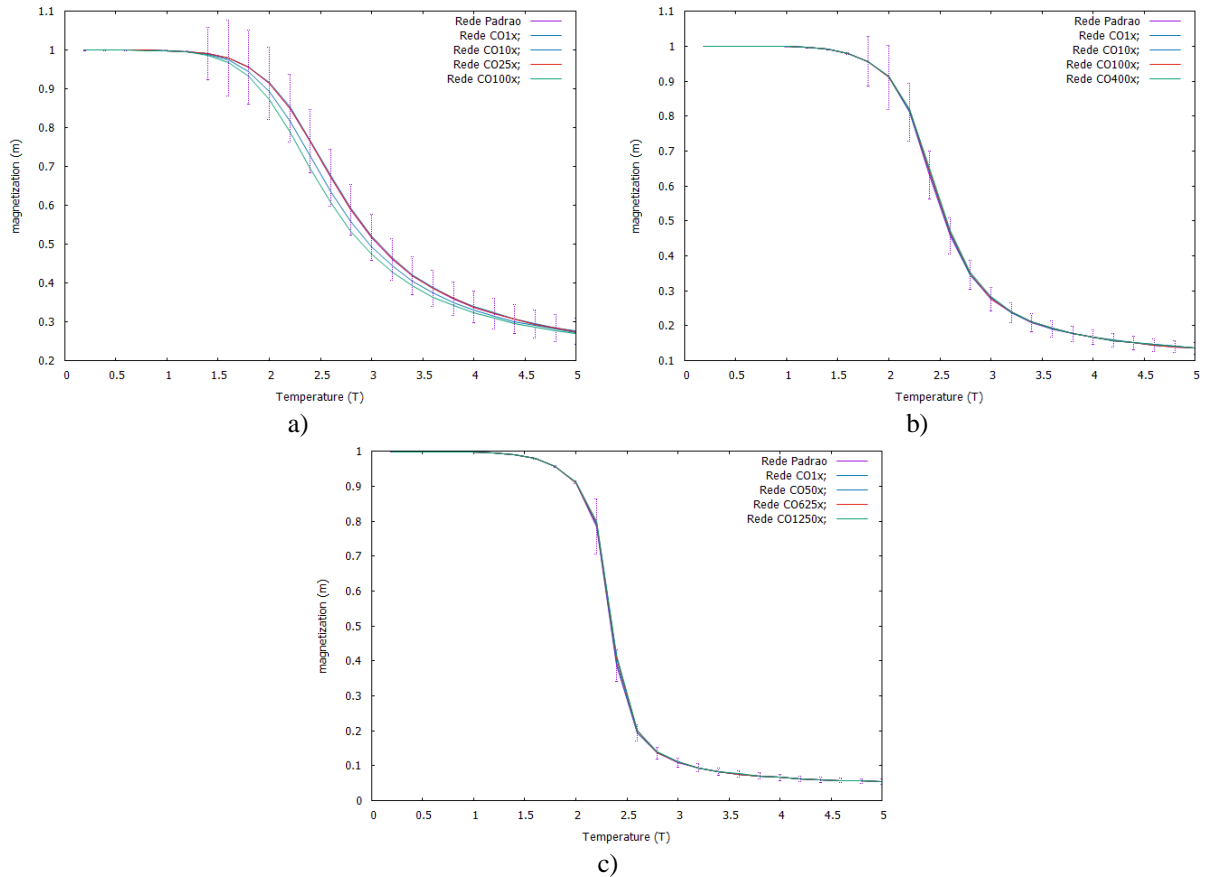


Figura 9 – Módulo da magnetização $|m|$ contra temperatura T para uma rede padrão e outras quatro redes aleatórias de diferentes números de reconexões. Os tamanhos das redes são de 5×5 (a), 10×10 (b) e 25×25 (c). As barras de erro são referentes à rede padrão. O fenômeno de dispersão nas curvas de magnetização das redes aleatórias tende a diminuir conforme se aumenta o tamanho da rede.

A figura 9 nos possibilita observar que o fenômeno de dispersão das curvas de observáveis em redes aleatórias tende a desaparecer conforme o tamanho da rede aumenta. Na figura 9a a dispersão é mais visível e nas figuras 9b e 9c ela já não é percebida. Outra informação importante que pode ser extraída da figura 9 é que o erro estatístico diminui conforme se aumenta o tamanho da rede.

5 CONCLUSÕES

Após o desenvolvimento e teste de um algoritmo computacional próprio fomos capazes de simular diferentes tipos de rede, analisando o comportamento de seus observáveis em uma rede padrão em comparação com redes aleatórias restritas. Os primeiros resultados, verificados na figura 7, nos mostraram que as médias dos observáveis de diversas redes aleatórias comportam-se como os observáveis de uma rede padrão de mesmo tamanho e número de coordenação. Os resultados também nos revelaram que os observáveis das redes aleatórias de tamanho 5×5 apresentam um fenômeno de dispersão em suas curvas conforme aumenta-se o grau de aleatoriedade das redes, verificado na figura 8.

O fenômeno de dispersão das curvas dos observáveis parece estar relacionado apenas com redes aleatórias de pequenos tamanhos. Devido ao processo de recombinação não restringir a distância entre pares de partículas, é possível que este fenômeno de dispersão esteja associado com a aleatoriedade local de uma rede. Uma rede pequena o suficiente como uma rede 5×5 apresentará reconexões de ligações mais localmente do que em uma rede 100×100 por exemplo. O tamanho de uma rede 100×100 já parece ser grande o suficiente para que não haja aleatoriedade localizada. A aleatoriedade passa a ser sobre toda a rede e, na média, seus observáveis acabam comportando-se como os de uma rede padrão.

Uma maneira de verificar se de fato é uma aleatoriedade local que causa o fenômeno de dispersão o ideal seria simular uma rede de tamanho grande mantendo uma restrição no processo de reconexão. Tal restrição sendo sobre a distância máxima entre os pares de partículas selecionados, criando assim aleatoriedades locais. Não realizamos tais simulações, porém mantemos esta tarefa como perspectiva para um futuro trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford Press, 1999.
- [2] SALINAS, Sílvio R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2a edição. São Paulo: Edusp, 2005.
- [3] LANDAU, D.; BINDER, K. *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. 3rd Edition. New York: Cambridge University Press, 2009.
- [4] CHANDLER, D. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. New York: Oxford University Press, 1987.
- [5] MENOTI, David. *Programação em C: Um Curso Básico e Abrangente*. Belo Horizonte-MG, 2005. Disponível em <http://www2.dcc.ufmg.br/disciplinas/pc/source/introducao_c_menoti_dccufmg.pdf>. Acesso em 11 de out. 2016.
- [6] ONSAGER, L. *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [7] SCHULTZ, T. D.; MATTIS, D. C.; LIEB, E. H. *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856 (1964).
- [8] GALANTE, R.; EDELWEISS, N. *Estruturas de Dados*. Editora UFRGS, 2009.
- [9] ZAHA, A.; FERREIRA, H.; PASSAGLIA, L. *Biologia Molecular Básica*. 3ª edição. Porto Alegre: Mercado Aberto, 2003.
- [10] ISING, E. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Z. Phys. **31**, 253–258 (1925).
- [11] BRUSH, S. G. *History of the Lenz-Ising Model*. Rev. Mod. Phys. **39**, 883-893 (1967).
- [12] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [13] WILLIAMS, T.; KELLEY, C. *gnuplot 5.1*. <<http://sourceforge.net/projects/gnuplot>>. SourceForge, January 2015. Software. Disponível em <<http://www.gnuplot.info>>. Acesso em 11 de out. 2016.
- [14] SILVA, ROBERTO DA; FELÍCIO, J. R. D. *Revista Brasileira de Ensino de Física*. **24**, 103 (2002).

[15] O algoritmo próprio referido no texto pode ser obtido com o autor.

[16] YANG C. N. *The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model*. Phys. Rev. **85**, 808 (1952).

[17] BEVINGTON, P. R.; ROBINSON, D. K. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. 3rd Edition. New York: McGraw-Hill, 2003.