Modelos atômicos unidimensionais e a álgebra min-plus

Orientador : Artur Oscar Lopes

Autor : Hermes Hofmeister Ferreira

É de interesse na física teórica, obter a menor energia por átomo em uma cadeia de átomos uni-dimensional em sua menor configuração de energia. Com modelos discretos, podemos associar tais problemas à conceitos intuitivos como a "menor média cíclica"de uma matriz e solucioná-los utilizando a álgebra min-plus.

Consideramos o seguinte: O sistema é um conjunto de pontos $\{u_n\}$ que são identificados com átomos e a energia do sistema é dada pela sua forma lagrangiana

$$L(\{u_n\}) = \sum_n [W(u_{n+1} - u_n) + V(u_n)]$$

Assume-se que a ligação de dois átomos é como se fosse uma mola com uma energia potencial

$$W(u_{n+1} - u_n)$$

Investigamos o que ocorre quando um átomo se move em um potencial arbitrário de período 1

$$U(u+1) = U(u)$$

conectando este através de uma mola com um segundo átomo movendo se em outro potencial periódico V. Temos, para uma posição fixa u' do segundo átomo, que o mínimo de energia do sistema é dado por

$$T(U)(u') = V(u') + min_u[W(u' - u) + U(u)]$$

R.B. Griffiths e W. Chow sugeriram buscar soluções R periódicas para a equação

$$T(R)(u') = \lambda + R(u') = V(u') + \min_u [W(u' - u) + R(u)]$$

Isso leva ao problema de buscar uma solução R para a equação geral

$$\min_{0 \leq t \leq 1} [K(s,t) + R(t)] = \lambda + R(s)$$

Onde K é uma função contínua e duplamente periódica (há um tal K que descreve o problema dos átomos). A motivação é que com tal R, podemos entender que a cada átomo novo acoplado ao sistema, a energia do sistema aumenta de λ, que então deve ser a energia média.

É possível mostrar que tal equação possui solução contínua. A abordagem é aproximar tal solução discretizando o intervalo $[0,1]$. O problema discreto está intimamente relacionado com um problema de teoria de grafos. Explicaremos abaixo

As operações básicas min-plus para números reais são a soma min-plus $\oplus$ e o produto min-plus $\otimes$

$$a \oplus b = \min(a,b)$$

$$a \otimes b = a + b$$

Para matrizes também temos operações. Se A e B são ambas $n \times m$

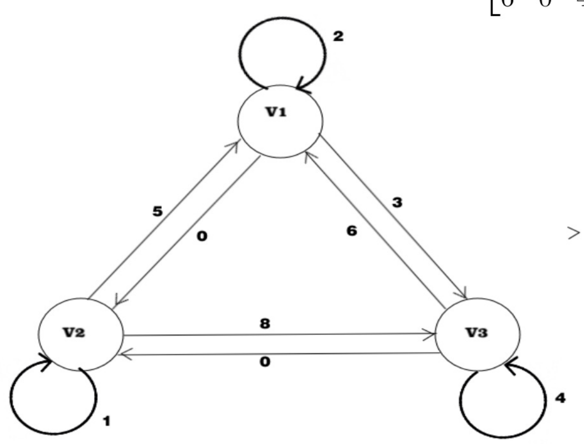
$$(A \oplus B)_{i,j} = A_{i,j} \oplus B_{i,j}$$

as entradas dessa matriz são os mínimos das entradas i,j das matrizes A e B. Se A for $n \times m$ e B for $m \times n$, então definimos a matriz $n \times n$, $C = A \otimes B$ por

$$C_{ij} = (A_{i1} \otimes B_{1j}) \oplus (A_{i2} \otimes B_{2j}) \oplus ... \oplus (A_{in} \otimes B_{nj}) = min_u[A_{iu} + B_{uj}]$$

O produto acima é simplesmente o produto matricial usual, onde substituímos as operações de soma e produto usais pelas operações respectivas min-plus. Na discretização do problema temos os pontos $p_1, ..., p_n$ aproximando $[0,1]$, identificando $K(p_i, p_j) = K_{i,j}$. Consideramos um grafo gerado pelos nodos p_i onde o custo de sair de p_i e ir para p_j é dado por $K_{i,j}$. O problema discreto é então $\min_{j=1,\ldots,n}(K_{ij} + x_j) = \lambda + x_i$ onde devemos obter λ e o vetor x. Mostra-se que esse λ é a menor média cíclica do grafo. Na álgebra min-plus esse problema é da forma $K \otimes x = \lambda \otimes x$, fornecendo uma intuição de autovalor λ e autovetor x do problema. A vantagem dessa notação é que, por exemplo $K^2 := K \otimes K$ é a matriz tal que $K^2_{i,j}$ fornece o menor custo entre cada nodo, por um caminho de duas arestas. Mais geralmente $K^n_{i,j}$ fornece o menor custo de n arestas que une i e j (com as potências min-plus). Assim define-se o traço min-plus por $Tr(A) = \bigoplus_{i=1}^n A_{i,i} = min_i A_{i,i}$, nessas condições $Tr(K^n)$ é o menor custo de um ciclo de n arestas, então a menor média cíclica de n arestas é $Tr(K^n)/n$, portanto a menor média cíclica total do grafo é $\bigoplus_{i=1}^n \frac{Tr(K^i)}{i}$ que é o próprio valor λ buscado

Exemplo: Considere a matriz $K = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 5 & 1 & 8 \\ 6 & 0 & 4 \end{bmatrix}$, K gera o dígrafo (grafo direcionado)



>

$$K^2 = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 5 \\ 6 & 2 & 8 \\ 5 & 1 & 8 \end{bmatrix}$$

$$K^3 = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 7 \\ 7 & 3 & 9 \\ 6 & 2 & 8 \end{bmatrix}$$

Agora temos

$$Tr(K) = 1 \qquad Tr(K^2) = 2 \qquad Tr_(K^3) = 3$$

assim a menor média cíclica λ de K é dada por

$$\lambda = Tr(K) \oplus \frac{Tr(K^2)}{2} \oplus \frac{Tr(K^3)}{3} = 1 \oplus 1 \oplus 1 = 1$$