

COMPORTAMENTO CRÍTICO DO MODELO DE ISING EM REDES

Small-world. Aline Olimpio Pereira, Makoto Yoshida, Gastão Inácio Krein. – Física – Departamento de Física – Instituto de Geociências e Ciências Exatas de Rio Claro – Campus de Rio Claro.

As propriedades geométricas e físicas de sistemas denominados Small-world networks tem sido exaustivamente investigadas nos últimos anos. Tais sistemas são representados por uma rede de nós interligados por conexões formando uma rede híbrida, com características de uma rede regular de nós mesclada com uma rede de conexões randômicas. Dentre os vários sistemas investigados, encontram-se os sistemas magnéticos usualmente descritos pelo modelo de Ising. Trata-se de sistemas constituídos por momentos magnéticos colocados em uma rede *Small-world* na qual, sobre cada nó da rede, é colocado um momento magnético e as conexões entre esses nós são estabelecidas por interações ferromagnéticas de curto e longo alcance.

O objetivo deste trabalho é investigar e identificar as manifestações das características de rede *Small-world* em propriedades termodinâmicas como a transição de fase e grandezas como os expoentes críticos que caracterizam o modelo. Para isso, introduziremos uma técnica que explora a dinâmica de tempos curtos para extrair informações sobre expoentes críticos dinâmicos, que caracterizam a transição de fase do sistema, e estudar sua correspondência com os expoentes críticos estáticos. Trata-se de explorar a evolução temporal do sistema nos instantes iniciais do regime transiente quando o sistema, partindo de um estado inicial de não-equilíbrio, relaxa para o estado de equilíbrio. Esta evolução temporal é obtida através de simulações numéricas utilizando o método Monte Carlo com o algoritmo de Metrópolis.

A energia do modelo de Ising unidimensional em redes *Small-world* é dada por

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{J}{2} \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i \sigma_k \quad (1)$$

onde σ representa os estados dos momentos magnéticos ao longo da rede, que podem assumir os valores 1 e -1 e J é um parâmetro positivo. O par $\langle i,j \rangle$ indica a soma sobre vizinhos próximos e o par $\langle i,k \rangle$ indica a soma sobre o terceiro vizinho que é escolhido aleatoriamente dentro da rede. Cada spin da rede possui no máximo três vizinhos, dois de curto e um de longo alcance. A concentração de interações de longo alcance é dada pela razão entre o número de links na rede e o tamanho da rede N .

Para o cálculo da Hamiltoniana e das demais quantidades termodinâmicas usamos o algoritmo de Metrópolis, onde as configurações de N spins são geradas através de sorteios utilizando a probabilidade

$$P = \min\{1, \exp(-\beta \Delta H)\} \quad (2)$$

de se girar um spin.

Como não consideramos um campo externo aplicado, o modelo apresenta uma transição de fase caracterizada pela temperatura crítica T_c . Determinamos essa temperatura crítica pelo cálculo do parâmetro de Binder, Fig.1(a), que é dado por

$$U_N = 1 - \frac{[\langle m^4 \rangle]}{3[\langle m^2 \rangle]^2} \quad (3)$$

onde [...] representa média sobre conformações de ligações, $\langle \dots \rangle$ média termodinâmica para uma conformação e m é dado por

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (4)$$

Para pequenos intervalos de temperatura na região de T_c , o comportamento crítico do calor específico, da magnetização e da susceptibilidade magnética são descritos pelas relações

$$C_v = \frac{1}{N} \frac{[\langle H^2 \rangle] - \langle H \rangle^2}{T^2} = N^{\alpha/\nu} f((T - T_c) N^{1/\nu}) \quad (5)$$

$$M = [\langle m \rangle] = N^{-\beta/\nu} g((T - T_c) N^{1/\nu}) \quad (6)$$

$$\chi = \frac{[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]}{T} = N^{\gamma/\nu} h((T - T_c) N^{1/\nu}) \quad (7)$$

onde f , g e h são funções universais de $(T - T_c)N^{1/\nu}$. A divergência do comprimento de correlação é caracterizada pelo expoente crítico ν que pode ser determinado pelo cálculo de ΔU_N , com $T_2 > T_1$ na região de T_c , Fig.1(b), que é dada por

$$\Delta U_N \equiv U_N(T_1) - U_N(T_2) \sim N^{1/\nu} \quad (8)$$

A partir do valor de ν e da relação de escala $\nu = 2 - \alpha$ encontramos o valor de α . Para determinar β ajustamos as curvas da magnetização, para diferentes tamanhos de rede, para que todas as curvas se cruzem em um ponto comum, $T = T_c$, Fig.1(d). Esse procedimento é conhecido como *finite-size scaling* e segue a equação (6). Determinamos γ pelo mesmo procedimento considerando a equação (7), Fig.1(e).

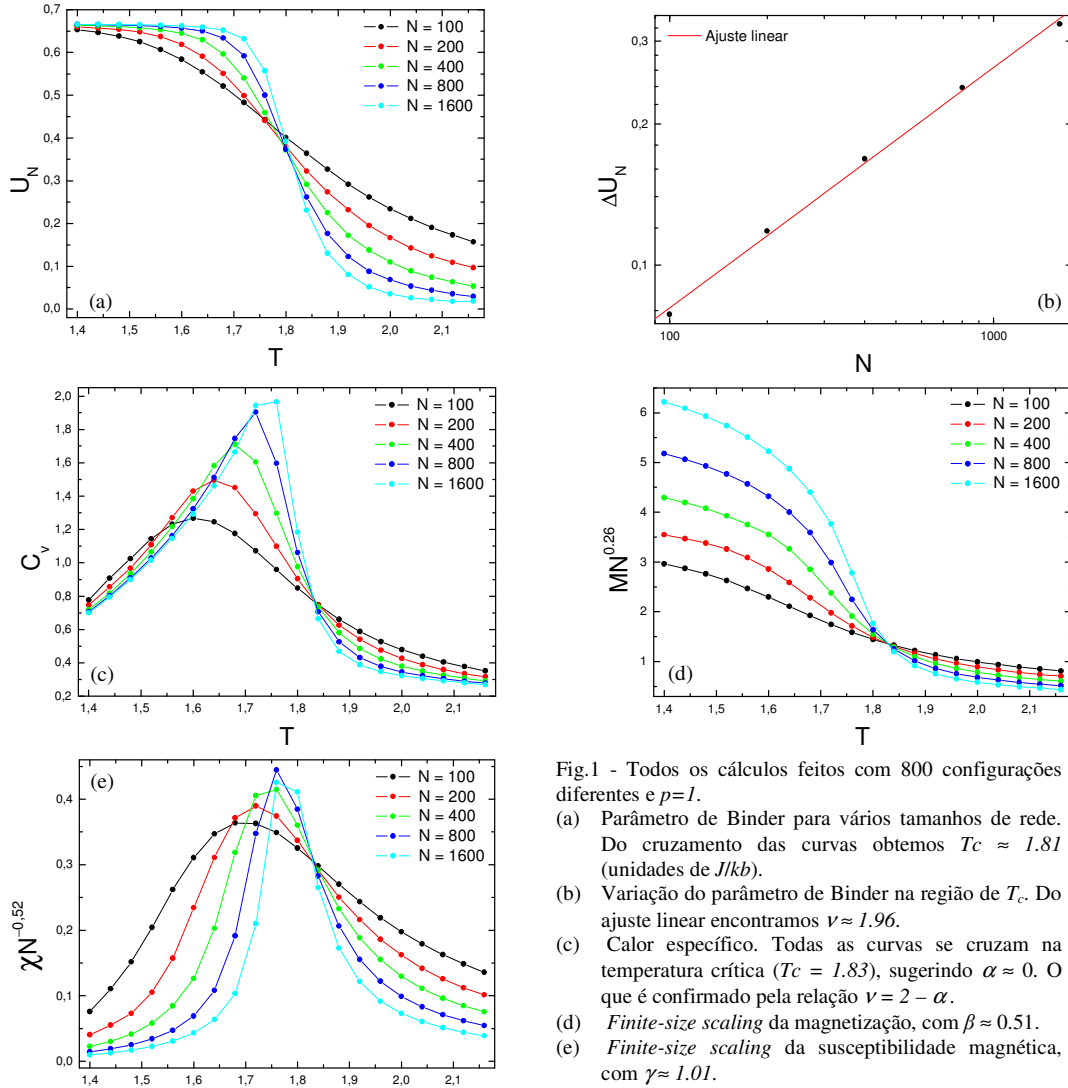


Fig.1 - Todos os cálculos feitos com 800 configurações diferentes e $p=1$.

- (a) Parâmetro de Binder para vários tamanhos de rede. Do cruzamento das curvas obtemos $T_c \approx 1.81$ (unidades de J/kb).
- (b) Variação do parâmetro de Binder na região de T_c . Do ajuste linear encontramos $\nu \approx 1.96$.
- (c) Calor específico. Todas as curvas se cruzam na temperatura crítica ($T_c = 1.83$), sugerindo $\alpha \approx 0$. O que é confirmado pela relação $\nu = 2 - \alpha$.
- (d) *Finite-size scaling* da magnetização, com $\beta \approx 0.51$.
- (e) *Finite-size scaling* da susceptibilidade magnética, com $\gamma \approx 1.01$.

Desses cálculos concluímos que ao se introduzir interações de longo alcance ao modelo de Ising unidimensional a transição de fase se dá a uma temperatura finita e não mais em $T = 0$. Essa temperatura depende da concentração p de ligações de longo alcance. Os resultados numéricos obtidos para os expoentes críticos estáticos caracterizam a transição de fase do modelo quanto à universalidade. Esses resultados indicam valores que são obtidos com a teoria de campo médio.

Para o estudo do comportamento critico dinâmico desse modelo, consideramos, inicialmente um sistema fora do estado de equilíbrio, onde a magnetização é muito pequena, $T \gg T_c$. Submete-se esse sistema a T_c e em seguida relaxa-se o mesmo para o estado de equilíbrio. Nessa dinâmica a magnetização sofre um aumento inicial, que pode ser descrito por uma lei de potência que é caracterizada pelo expoente critico dinâmico θ . Essa evolução temporal é dada por

$$M(t) = \frac{1}{N} \left[\left\langle \sum_i \sigma_i(t) \right\rangle \right] \quad (9)$$

Para pequenos intervalos de tempo o k -ésimo momento da magnetização é dado por

$$M^{(k)}(t, \tau, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{x_0}m_0) \quad (10)$$

onde b é um fator de escala espacial arbitrário, t é o tempo de evolução e τ é a temperatura reduzida. Os expoentes β e ν , previamente determinados, são os expoentes estáticos e z um dos expoentes dinâmicos. O expoente x_0 é a dimensão de escala da magnetização inicial, capaz de descrever a dependência do comportamento de escala com as condições iniciais do sistema.

Para uma rede muito grande e com pequena magnetização inicial, se tomarmos $b = t^{1/z}$ e $\tau = 0$, obtemos

$$M(t, m_0) \sim m_0 t^\theta \quad (11)$$

onde $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z$. Essa lei de potencia só é valida quando $t^{x_0/z}m_0$ é suficientemente pequeno, portanto esse comportamento é esperado no estágio inicial da evolução temporal.

A evolução temporal do segundo momento da magnetização é dada por

$$M^{(2)}(t) = \frac{1}{N^2} \left[\left\langle \left(\sum_i \sigma_i(t) \right)^2 \right\rangle \right] \quad (12)$$

Como no inicio da evolução temporal o comprimento de relação espacial é pequeno, para um sistema de dimensão d , tamanho N e segundo momento $M^{(2)}(t, N) \sim N - d$ temos

$$M^{(2)}(t) \sim t^{(d-2\beta/\nu)/z} \quad (13)$$

A evolução temporal da auto-correlação é dada por

$$A(t) = \frac{1}{N} \left[\left\langle \sum_i \sigma_i(t) \sigma_i(0) \right\rangle \right] \quad (14)$$

Analises cuidadosas de escala mostram que a auto-correlação também decai por uma lei de potencia

$$A(t) \sim t^{(-d/z+\theta)} \quad (15)$$

Sabemos que a magnetização, seu segundo momento e a auto-correlação só obedecem essas leis de potencia, equações (11), (13) e (15), se t estiver no intervalo de tempo $[t_{mic}, t_m]$, onde t_{mic} é o tempo de escala microscópico e t_m é o instante limite a partir do qual a curva de $\ln M(t)$ versus $\ln t$ deixa de ser uma reta. Analisando-se o expoente θ como função de t , Fig.2(b), determinamos t_{mic} , pois o tempo microscópico é o tempo que o expoente θ leva para se tornar estável. Os valores de $\theta(t)$ foram obtidos fazendo ajustes lineares, no intervalo de tempo $[t, t+15]$, para cada t da curva de $M(t)$, Fig.2(c).

Para determinar o valor de θ fazemos um ajuste linear de $M(t)$ no intervalo $[t_{mic}, t_m]$, Fig.2(c).

A auto-correlação e o segundo momento da magnetização foram calculados a partir de configurações iniciais com magnetização nula. Fazendo um ajuste linear da auto-correlação, Fig.2(d), e do segundo momento da magnetização, Fig.2(e), no intervalo $[t_{mic}, t_m]$, e considerando as equações (15) e (13) juntamente com o valor de θ encontramos o expoente z e a relação β/ν dos expoentes estáticos.

Na Fig.2(a) comparamos a curva de $M(t)$ para dois tamanhos de rede, $N = 800$ e $N = 1600$, observando essas curvas notamos que o tamanho do intervalo de tempo $[t_{mic}, t_m]$ é proporcional ao tamanho da rede. Escolhemos $N = 1600$ para nosso estudo, pois o tamanho do intervalo $[t_{mic}, t_m]$ e o tempo computacional gasto são razoáveis.

O valor da relação entre os coeficientes críticos estáticos β e ν corresponde, com uma margem de erro devido ao tamanho finito da rede, ao valor encontrado no estudo estático. Isso indica que os

valores encontrados para os coeficientes críticos dinâmicos θ e z caracterizam corretamente a dinâmica do modelo.

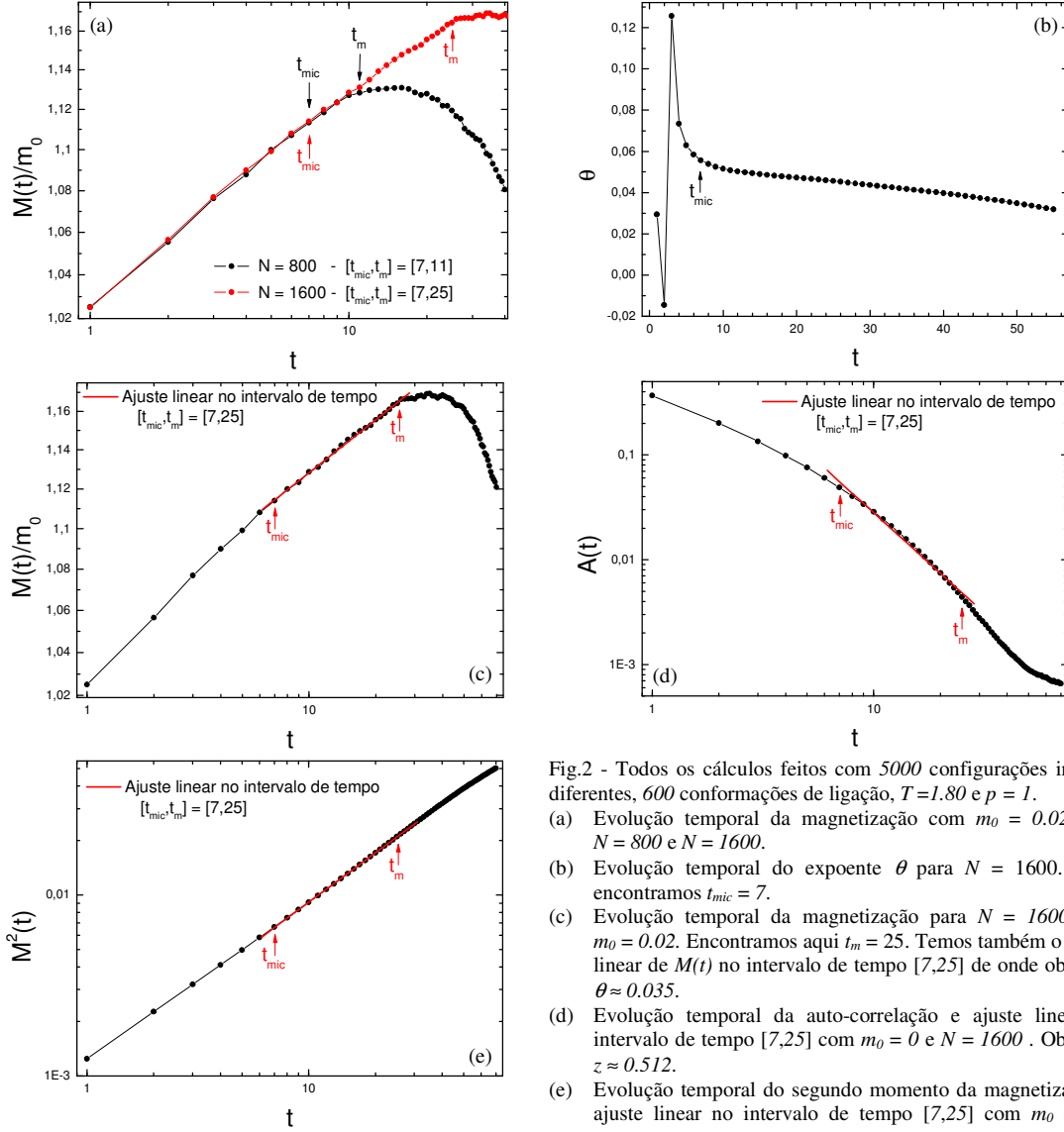


Fig.2 - Todos os cálculos feitos com 5000 configurações iniciais diferentes, 600 conformações de ligação, $T=1.80$ e $p = 1$.

- (a) Evolução temporal da magnetização com $m_0 = 0.02$ para $N = 800$ e $N = 1600$.
- (b) Evolução temporal do expoente θ para $N = 1600$. Aqui encontramos $t_{mic} = 7$.
- (c) Evolução temporal da magnetização para $N = 1600$ com $m_0 = 0.02$. Encontramos aqui $t_m = 25$. Temos também o ajuste linear de $M(t)$ no intervalo de tempo $[7, 25]$ de onde obtemos $\theta \approx 0.035$.
- (d) Evolução temporal da auto-correlação e ajuste linear no intervalo de tempo $[7, 25]$ com $m_0 = 0$ e $N = 1600$. Obtemos $z \approx 0.512$.
- (e) Evolução temporal do segundo momento da magnetização e ajuste linear no intervalo de tempo $[7, 25]$ com $m_0 = 0$ e $N = 1600$. Obtemos $\beta/\nu \approx 0.268$.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Albert, A. L. Barabasi, Rev. Mod. Phys. **74**, 47 (2002); M. E. J. Newman, J. Stat. Phys. **101**, 819 (2000)
- [2] A. Barrat and M. Weigt, Eur. Phys. J. B. **13**, 547 (2000)
- [3] M. Guitterman, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 8373 (2000)
- [4] K. Binder and D. P. Landau, *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, 2nd ed.
- [5] A. Pekalski, Phys. Rev. E **64**, 057104 (2001)
- [6] H. Hong, B. J. Kim, and M. Y. Choi, Phys. Rev. E **66**, 018101 (2002)
- [7] B. Zheng, Phys. Rev. Lett. **77**, 679 (1996); K. Okano, L. Schülke, K. Yamagishi, and B. Zheng, Nuclear Physics B **485**, 727 (1997)
- [8] H. A. Fernandes, E. Arashiro, J. R. Drugowich de Felício, A. A. Caparica, Physica A **366** 255 (2006)

Bolsa: FAPESP