

Universidade de Brasília
Instituto de Física

Dissertação de Mestrado

O teorema da
flutuação-dissipação na transição
de fase: Expoente de Fisher pela
perspectiva da dinâmica fractal

Kaue Hermann Abbehausen

Dissertação de Mestrado

Brasília
Maio 2024

Kaue Hermann Abbehausen

O teorema da flutuação-dissipação
na transição de fase: Expoente de
Fisher pela perspectiva da
dinâmica fractal

Orientador: Prof. Dr. Fernando A. Oliveira

Coorientador: Prof. Dr. Jairo R. L. Almeida

Dissertação de Mestrado

Universidade de Brasília

Instituto de Física

Brasília

Maior 2024

Agradecimentos

Primeiro agradeço à CAPES por financiar meu projeto de mestrado desde o início. Agradeço aos professores, orientadores e colegas que compuseram o grupo de pesquisa, sem os debates e ajudas não teria sido uma jornada tão engrandecedora, e em especial ao Henrique Alves de Lima que estava à frente do processo de algoritmos construiu o caminho que este projeto trilhou.

Agradeço à minha família que me apoiou e investiu em meus estudos, prezando meu crescimento fazendo o que escolhi fazer. Aos meus amigos, os antigos e os novos que fiz neste caminho, pessoas incríveis que farei todo esforço para continuar próximo.

Com todo carinho e admiração, agradeço à minha companheira, amiga e namorada, Camila de Oliveira Castro. Nossas conversas valem mais que mil dissertações, nossos devaneios são a própria essência do universo. Esse projeto tem boa parte dos nossos debates no café da manhã.

Resumo

Neste trabalho desenvolvemos a hipótese de que a dinâmica de um determinado sistema pode fazer com que a atividade fique restrita a um subconjunto do espaço, caracterizado por uma dimensão fractal d_f menor que a dimensão espacial d . Desta forma buscamos discutir o teorema da flutuação-dissipação próximo a uma transição de fase. Abordamos o expoente de Fisher como a função resposta sensível à mudança na dimensionalidade, que afeta todos os expoentes críticos. Mostramos qual a consequência da variação da desordem em um Modelo de Ising desordenado no comportamento do ponto crítico e no expoente do parâmetro de ordem. Medimos a dimensão fractal na rede para diferentes intensidade de desordem, concluindo que a desordem afeta a temperatura crítica, expoentes e dimensão fractal que caracteriza o sistema.

Palavras-chave: Monte Carlo, Teorema Flutuação-Dissipação, Modelo de Ising Desordenado, Dinâmica Fractal

Abstract

In this work, we develop the hypothesis that the dynamics of a given system can confine the activity to a subset of the space, characterized by a fractal dimension d_f smaller than the spatial dimension d . In this way, we aim to discuss the fluctuation-dissipation theorem near a phase transition. We address the Fisher exponent as the response function sensitive to changes in dimensionality, which affects all critical exponents. We demonstrate the consequence of varying disorder in a disordered Ising model on the behavior of the critical point and the order parameter exponent. We measure the fractal dimension on the lattice for different disorder intensities, concluding that disorder affects the critical temperature, exponents, and fractal dimension characterizing the system.

Keywords— Monte Carlo, Fluctuation-Dissipation Theorem, Disordered Ising Model, Fractal Dynamics

Lista de Tabelas

5.1	Valores de temperatura de transição	33
5.2	Valores de expoente crítico β	34
5.3	Valores de dimensões fractal	37

Lista de Figuras

2.1	Triângulo de Sierpinski	8
2.2	Grade Ilustrativa do Modelo de Ising	17
4.1	Ilustração Algoritmo de Tabuleiro	25
5.1	Distribuição Normal do Numpy	27
5.2	Probabilidade de J_0 para diferentes desvios	28
5.3	Magnetização até equilíbrio	29
5.4	Energia em Ising Ordenado	30
5.5	Magnetização em Ising Ordenado	30
5.6	Sobreposição ordenado-desordenado da Energia	31
5.7	Sobreposição ordenado-desordenado da Magnetização	31
5.8	Magnetização por temperatura para 4 situações de desordem	32
5.9	Magnetização em função da temperatura com ajuste	33
5.10	Temperatura crítica em função da variância	34
5.11	Expoente crítico β VS desvio padrão	35
5.12	Correlação em Função da distância	36
5.13	LogLog de Número de Caixas por Tamanho	36
5.14	Dimensão Fractal em Função da Temperatura	37
5.15	Dimensão Fractal em função da desordem	38

Conteúdo

1	Organização da Dissertação	6
2	Introdução	7
2.1	Dimensão Fractal	7
2.2	Teorema da Flutuação-Dissipação	8
2.2.1	Médias e Flutuações	9
2.2.2	Equação de Langevin e Teorema de Flutuação-dissipação	11
2.2.3	Teoremas de flutuação-dissipação quânticos	12
2.2.4	Violação do Teorema de flutuação-dissipação	13
2.3	Teorema de flutuação-dissipação na transição de fase	13
2.3.1	Transição de fase	13
2.3.2	Função de correlação	14
2.3.3	Recuperando o Teorema de Flutuação-Dissipação	15
2.4	Modelo de Ising Desordenado	15
2.4.1	Descrevendo o Modelo	16
2.4.2	Variáveis e transição de fase	18
3	Objetivos	20
4	Metodologia	21
4.1	Monte Carlo e Metropolis	21
4.2	CUDA e Python	23
4.3	Simulação	24
4.4	Expoentes e Dimensão Fractal	26
5	Resultados e Discussão	27
5.1	Interações Randômicas	27
5.2	Saturação do Sistema	28
5.3	Energia e Magnetização	30
5.4	Temperaturas de Transição em Desordem e Expoente Crítico β	32
5.5	Correlação e Comprimento de Correlação	35
5.6	Dimensão Fractal	36
6	Conclusão	39

Ficha catalográfica elaborada automaticamente,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

HH552h Hermann Abbehausen, Kaue
Hermann Abbehausen / Kaue Hermann Abbehausen; orientador
Fernando A. Oliveira; co-orientador Jairo R. L. Almeida. --
Brasília, 2024.
44 p.

Dissertação(Mestrado em Física) -- Universidade de
Brasília, 2024.

1. Modelo de Ising. 2. Dimensão Fractal. 3. Simulação de
Monte Carlo. 4. Desordem. 5. Transição de fase. I. A.
Oliveira, Fernando, orient. II. R. L. Almeida, Jairo,
co-orient. III. Título.

Símbolos

Símbolo	Descrição
Z	Função Partição
E	Energia
β_t	Constante equivalente a $1/K_bT$
K_b	Constante de Boltzman
T	Temperatura
Tc_o	Temperatura crítica de um sistema ising 2d ordenado
Tc_i	Temperatura crítica de um sistema ising desordenado
β	Expoente crítico da magnetização
ψ	Densidade de probabilidade
J_{ij}	Acoplamento entre spins
J	Média dos acoplamentos entre spins
A	Uma medida qualquer
σ	Desvio padrão
σ_A	Desvio padrão da medida A
s	spin
H	Hamiltoniana do sistema
N	Quantidade de corpos no sistema
M	Valor da magnetização do sistema
U	Energia do sistema
C_v	Capacidade térmica a volume constante
χ	Susceptibilidade magnética do sistema
$G(r)$	Função de correlação
ρ	Comprimento de correlação
η	Expoente de Fisher
ϕ	Expoente de Fisher de desordem
α	Expoente crítico da capacidade térmica
γ	Expoente crítico da susceptibilidade magnética
ν	Expoente crítico do comprimento de correlação
d_f	Dimensão fractal
t_i	Tempo inicial para medição
t_f	Tempo final para medição

Capítulo 1

Organização da Dissertação

Nosso principal objetivo nessa dissertação é detalhar as alterações dos comportamentos do modelo de Ising bidimensional para o caso em que os acoplamentos entre spins são anisotrópicos. Buscamos expor as alterações em transições de fase por meio das medidas do expoente crítico de magnetização e medidas de dimensões fractais.

No capítulo 2 discutimos o teorema da flutuação dissipação, abordando fundamentos para descrever propriedades de sistemas em equilíbrio, introduzindo a relação entre cálculo de medidas, flutuações das medidas e dissipações. Também discutimos nesse capítulo a relação entre correlação e dimensão fractal.

No capítulo 3 discutimos o modelo de Ising, contextualizando seu histórico brevemente e explicando propriedades importantes do modelo. Descrevemos o modelo desordenado que é utilizado durante toda a dissertação, junto com discussões acerca das simulações que serão feitas.

No capítulo 4 detalhamos as ferramentas e métodos que são utilizados na dissertação. Descrevemos como são feitas as simulações de Monte Carlo com aplicação da API CUDA e nossas motivações para utilizar esta API. Também descreveremos os métodos de medições utilizados.

No Capítulo 5 descrevemos todos os resultados obtidos, comparando com resultados já conhecidos e descrevendo os novos resultados para sistemas desordenados. Apresentamos resultados sobre magnetização, temperatura de transição, expoente crítico beta, breve resultado sobre correlação e medidas de dimensões fractais. Concluímos a dissertação no capítulo 6.

Capítulo 2

Introdução

2.1 Dimensão Fractal

Mandelbrot surge com o conceito de dimensão fractal em uma discussão sobre o quão longa é a costa de um país[1]. Como consequência da geometria, a costa de um país tem diferentes tamanhos para diferentes instrumentos de medida usados, de forma que quanto menor for a medida mínima de um instrumento maior será o tamanho da costa. Desta forma, o conceito de escalonamento aparece mostrando que a escala do sistema observado afeta o resultado.

No entanto, Mandelbrot não discute o conceito de escalonamento, pois se atém ao conceito de dimensão fractal e propriedades importantes do mesmo. Essas propriedades, principalmente auto similaridade, são componentes importantes que caracterizam a fractalidade do sistema.

A compreensão sobre dimensões fractais começa na compreensão da separação de interfaces, por exemplo: numa propagação de queimada há a região queimada e a região a ser queimado, separadas por uma linha representando o que está sendo queimado. Diversos outros exemplos podem ser citados: fluxo de linhas num supercondutor, fluidos fluindo num meio poroso, deposição balística, crescimento de bactérias, e outros. Destes citados, há uma conexão que os tornam semelhantes: o conceito de escalonamento [2].

Dimensões fractais são utilizadas para caracterizar sistemas complexos como separação de interfaces em eventos estocásticos. Tal linha que separa um meio de outro apresenta irregularidades, e por isso segue o mesmo comportamento da costa de um país: ter um comprimento diferentes com instrumentos diferentes. Tal irregularidade impõem a necessidade de utilizar outras quantidades de caracterização além do comprimento, a chamada dimensão fractal. Destaco que geometrias euclidianas não são suficientes para caracterizar tais irregularidades[3].

A separação de fase é apenas um exemplo de geometria fractal, no entanto também é uma das aplicações que o modelo de Ising pode ter. E o conceito de escalonamento está relacionado com transição de fase, a qual é aplicação ao qual o modelo é amplamente aplicado. Desta forma, podemos aplicar o conceito de dimensão fractal à transições de fase por meio do modelo de Ising.

Objetos fractais podem possuir a propriedade de auto similaridade. Para ilustrar essa propriedade pegue a figura 2.1 e a fragmente em triângulos menores. Os triângulos menores serão semelhantes à figura original. Isto se deve à propriedade de auto similaridade, que afirma que fragmentos menores de um objeto fractal são idênticos ao objeto completo.

Portanto, enquanto o escalonamento altera valores, como o comprimento em

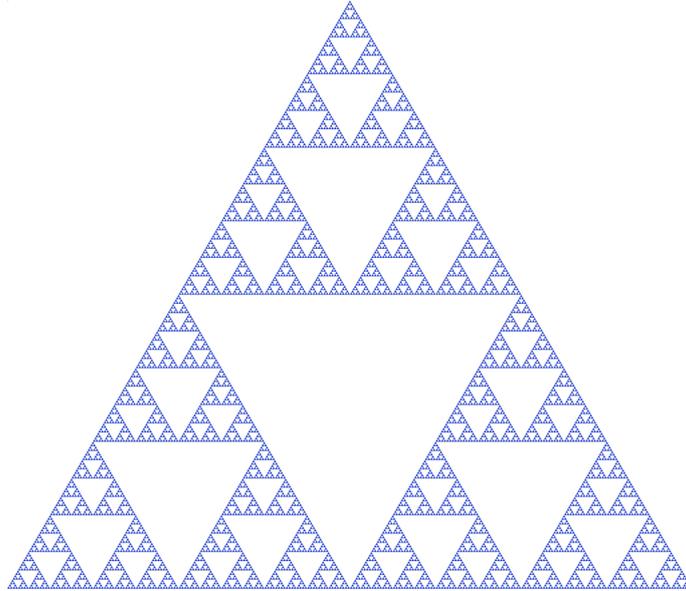


Figura 2.1: Ilustração do Triângulo de Sierpinski, um objeto fractal.

costas de países, a fractalidade é inerente a geometria. Ou seja, estudar a fractalidade de um sistema é estudar sua geometria complexa independente da escala.

Há outras propriedades que podem ser discutidas. A auto afinidade, se difere da auto similaridade pois a semelhança se mantém à depender da coordenada (x, y, z) . Um objeto fractal pode ser classificado também como invariante[2].

Independente da classificação do objeto fractal o que descreve a fractalidade deste objeto é a dimensão fractal. A dimensão fractal é obtido em [2] utilizando o seguinte pensamento: Em um objeto arbitrário podemos obter o volume se o preenchermos com bolas de tamanhos iguais e conhecidos, com tamanho linear l e volume l^{d_E} . Usando $N(l)$ como o número de bolas de tamanho definido e d_E como a dimensão inteira das bolas temos que:

$$V(l) = N(l)l^{d_E}$$

Temos que o volume não é alterado caso altere o tamanho l , por isto temos: $N(l) \sim l^{-d_E}$. Ao isolar d_E aplicando logaritmo de ambos os lados temos:

$$d_f = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln(N(l))}{\ln(1/l)} \quad (2.1)$$

Alterei de d_E para d_f pois aqui entramos no conceito de que para um objeto ser considerado fractal deve se ter $d_f < d_E$ e não inteira.

As dimensões fractais de alguns objetos são conhecidas, como o conjunto de Cantor e o Triângulo de Sierpinski. No entanto, dimensões fractais da maioria de outras geometrias não pode ser calculada usando a Eq.(2.1), e é por este motivo que utiliza-se algoritmos. O algoritmo que usaremos é descrito no capítulo de metodologia.

2.2 Teorema da Flutuação-Dissipação

O teorema da flutuação-dissipação (TFD) é de extrema importância na física [4], pois permite obter as grandezas fundamentais do sistema, veja os exemplos abaixo.

No entanto, o TFD falha em muitas circunstâncias, incluindo a transição de fase. Neste capítulo mostramos como podemos recuperar o TFD na transição de fase.

2.2.1 Médias e Flutuações

A mecânica estatística se propõe a estudar a dinâmica de um grande número de partículas em equilíbrio ou fora do equilíbrio. Em equilíbrio, utiliza-se a função partição para obtenção de variáveis termodinâmicas e a equação de estado. A função partição é a combinação linear de todos os estados possíveis de energia, sendo escrita como:

$$Z = \sum_i e^{-\beta_t E_i}, \quad (2.2)$$

onde E_i é a energia do estado $|i\rangle$, $\beta_t = 1/K_b T$, K_b é a constante de Boltzman e T é a temperatura c. Para utilização de tal formalismo espera-se conhecer o hamiltoniano H que descreve o sistema e

$$H|i\rangle = E_i|i\rangle, \quad (2.3)$$

i.e. auto-estados e energias [5]. Podemos utilizar a função partição no cálculo do peso de probabilidade de um estado específico ocorrer. Tal equação é escrita como:

$$\psi = \frac{e^{-\beta_t E_i}}{Z} \quad (2.4)$$

Esta equação mostra o carácter estatístico da função partição e a relação da energia com a probabilidade do dado estado ocorrer, sendo maior a probabilidade com a diminuição da energia [5].

Dentro deste contexto estatístico, o valor de uma grandeza física é dado pela média dos possíveis valores. Utilizamos a equação abaixo, a qual segue a equação geral de uma média ponderada, neste caso, ponderada pelo peso dada pela energia. Note que a equação é uma média sobre o ensemble e não define exatamente como é calculada a média durante uma simulação

$$\langle y \rangle = \frac{\sum_i e^{-\beta_t E_i} y_i}{\sum_i e^{-\beta_t E_i}} \quad (2.5)$$

A flutuação em torno de um valor médio é um conceito importante na física estatística que se mostra presente em vários cenários. Pode-se iniciar a interpretação de flutuação com a compreensão da distribuição Gaussiana:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (2.6)$$

a qual é interpretada como a probabilidade de uma medida de x ocorrer, dados os valores da média ($\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_i x_i$) e da variância ($\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$), em que N representa a quantidade de medidas. Destacando que a variância (ou desvio padrão, considerando σ) é a dispersão dos valores ao redor da média, ou seja, uma flutuação.

É importante destacar uma relação chamada desvio relativo, o qual configura uma relação importante entre o desvio padrão com a quantidade de medidas feitas [5]. Tal relação é fundamental para qualquer problema estatístico e é dado por:

$$\frac{\sigma_A}{\langle A \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.7)$$

Esta equação, conhecida como a lei dos grandes números, onde N representa o número de medidas realizada, sendo de extrema importância quando for discutido os métodos de obtenção das medidas neste projetos.

A eq.(2.6) tem fundamental importância, uma vez que ao obter medidas de um sistema qualquer, a média e o desvio padrão serão utilizados respectivamente como inferência do valor e da precisão deste dado valor, como é discutido em [6]. Além disso, para a mecânica estatística, em escalas nanométrica variâncias são responsáveis por outras características físicas do sistema. Essa relação é dada abaixo para alguns casos:

O calor específico C_v

$$\sigma_U^2 = k_B T^2 C_v, \quad (2.8)$$

onde σ_U^2 é a variância da energia do sistema em equilíbrio com energia U , mostrando que o calor específico é dado pela variância da energia. Outros desvios se relacionam com outras propriedades, como o desvio do volume de um sistema se relaciona com compressibilidade isotérmica κ_T ($\sigma_V^2 = k_B T \langle V \rangle \kappa_T$).

Há também a suscetibilidade magnética a campo zero, a qual é a variância da magnetização [7]:

$$\chi_0 = \beta_t (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (2.9)$$

Uma relação semelhante foi obtida recentemente para o parâmetro de ordem r de uma sincronização de fase induzida por ruído em um modelo de Kuramoto [8, 9, 10, 11]

$$\sigma_r^2 = k_B T_c \chi, \quad (2.10)$$

Em um sistema em crescimento, o desvio da altura na separação das superfícies se relaciona com a rugosidade, ou largura de linha, w via [2]

$$w(L, t) = \sigma_h, \quad (2.11)$$

em que L representa o tamanho horizontal e t o tempo de deposição. Aqui a média é calculada sobre o espaço. A rugosidade é uma grandeza física muito importante, uma vez que muitos fenômenos importantes têm sido associados a ela [2, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. Para muitos processos de crescimento, a rugosidade, $w(L, t)$, aumenta com o tempo até atingir um valor saturado w_s , ou seja, $w(t \rightarrow \infty) = w_s$. A evolução temporal da rugosidade é bem descrita pelo escalonamento de Family-Vicsek [2, 29]

$$w(L, t) = \begin{cases} ct^{\chi/z}, & \text{if } t \ll t_\times, \\ w_s \propto L^\chi, & \text{if } t \gg t_\times, \end{cases} \quad (2.12)$$

onde $t_\times \propto L^z$, e χ é o expoente de rugosidade. O expoente de rugosidade χ pode ser associado à dimensão fractal da interface d_f através da relação [30, 31, 32, 33, 34]

$$\chi = \begin{cases} 2 - d_f, & \text{if } d = 1 \\ d - d_f, & \text{if } d \geq 2. \end{cases} \quad (2.13)$$

Essa última relação é muito importante para nosso trabalho.

2.2.2 Equação de Langevin e Teorema de Flutuação-dissipação

No início do século XX, a teoria atômica ainda era muito controversa. Para alguns pesquisadores, as respostas desconhecidas para muitas perguntas representavam um problema enorme, enquanto para outros constituíam um grande estímulo. As obras de Einstein e Smoluchowski sobre o movimento browniano causaram um grande impacto. Sob abordagens diferentes, P. Langevin, A.D. Fokker, M. Planck e A. Kolmogorov estudaram o movimento browniano como uma classe especial de processo estocástico de Markov [4, 35, 36, 37, 38, 39].

Langevin iniciou a era dos processos estocásticos explícitos na física considerando a equação de movimento para uma partícula se movendo em um fluido como [38]:

$$M \frac{dv(t)}{dt} = -M\gamma v(t) + f(t), \quad (2.14)$$

Onde M e γ são a massa da partícula e o atrito, respectivamente. A proposta engenhosa e elegante foi modular as interações complexas entre as partículas, considerando todas as interações como duas forças principais. Tomando Δt como o intervalo de tempo entre colisões aleatórios entre a partícula e as moléculas do fluido, a primeira contribuição representa uma força de atrito, $-M\gamma v$, onde a escala de tempo característica é $\tau = \gamma^{-1}$ enquanto a segunda contribuição vem de uma força estocástica, $f(t)$, com escala de tempo $\Delta t \ll \tau$.

É importante mencionar que para uma variável estocástica $g(t)$, a média em um intervalo de tempo τ_0 pode ser estimada como

$$\overline{g(t)} = \frac{1}{\tau_0} \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} g(t+s) ds \quad (2.15)$$

e a hipótese ergódica de Boltzmann (HEB) estabelece que para um sistema em equilíbrio,

$$\overline{g(t)} = \langle g(t) \rangle, \quad (2.16)$$

o que significa que a média temporal é igual à média do ensemble. Desta forma, podemos utilizar tanto média no tempo quanto média no ensemble, exceto nas situações em que a HEB falha. Note que para o movimento browniano $\tau \approx 1s$, $\Delta t \approx 10^{-12} - 10^{-14}s$, deste modo existe bastante espaço para escolher τ_0 de modo que $\Delta t \ll \tau_0 \ll \tau$, nesta condição a HEB é válida mesmo fora do equilíbrio. A força aleatória $f(t)$, na Eq. (2.14), obedece às seguintes condições:

(i) a força média devido às colisões aleatórias na partícula é zero

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (2.17)$$

(ii) não há correlação entre a velocidade inicial da partícula e a força aleatória

$$\langle f(t)v(0) \rangle = 0 \quad (2.18)$$

e (iii) a força aleatória em diferentes tempos t e t' não são correlacionadas

$$\langle f(t)f(t') \rangle = B\delta(t-t'), \quad (2.19)$$

sendo B uma constante a ser determinada. A equação acima é conhecida como um processo Gaussiano ou também chamado de ruído branco. Para entender as propriedades dinâmicas de uma partícula que obedece à equação de movimento (2.14) e às condições (2.17) a (2.19), começamos com a seguinte solução:

$$v(t) = v(0) + \int_0^t \exp[-\gamma(t-t')] f(t') dt'. \quad (2.20)$$

Depois de um longo tempo, o sistema atinge o equilíbrio, o que significa que

$$\langle v^2(t \rightarrow \infty) \rangle = \langle v^2 \rangle_{eq} = k_B T / M. \quad (2.21)$$

(i.e., o teorema da equipartição). Usamos então as condições acima para obter $B = 2M\gamma k_B T$ e reescrever a Eq. (2.19) como

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2M\gamma k_B T \delta(t - t'). \quad (2.22)$$

Foi uma ideia engenhosa de Langevin separar a interação muito complicada das moléculas na escala de tempo limite, ou seja, a mudança de tempo lenta (a força dissipativa) e a mudança de tempo rápida (a força estocástica). É digno de nota que essa separação artificial entre elas na Eq.(2.14) agora desaparece como consequência da Eq.(2.22), onde essa importante relação foi destacada. Esta foi a primeira forma explícita do teorema de flutuação-dissipação.

A bela e simples abordagem de Langevin nos ajuda a lidar com muitas situações na física. Permite-nos fazer alguns cálculos analíticos para alguns modelos simplificados e até obter alguns limites para sistemas mais complexos. Também é fácil realizar experimentos computacionais dentro de sua estrutura. Portanto a equação de Langevin e sua formulação quântica com o conceito de campos flutuantes abriu um amplo ramo de investigações em diversos sistemas como o espalhamento de luz [40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47], espalhamento de nêutrons em metais líquidos [48, 49], dinâmica de cadeias poliméricas [50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63], motores moleculares [64, 65, 66], condutividade [67, 68], teoria das taxas de reação [69, 70, 71, 72] e sincronização de ruído [73, 74, 75, 76, 77, 78]. O uso de conceitos de difusão encontra inúmeras aplicações na ciência, por exemplo, na difusão controlada de medicamentos no organismo [79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86], onde o bom entendimento dos mecanismos de liberação, bem como dos tempos de liberação característicos, é fundamental. Não seria exagero afirmar que todos esses campos são direta ou indiretamente associados com a difusão anômala [87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109].

2.2.3 Teoremas de flutuação-dissipação quânticos

Ao longo do último século, a teoria da resposta linear de sistemas quânticos a perturbações externas aplicadas tem avançado sendo inspiradas nos trabalhos de Nyquist, Johnson, Kubo e Callen [110, 111, 112, 113, 114, 115, 116]. Em particular, foi estabelecido que os coeficientes de resposta linear em sistemas hamiltonianos são proporcionais às funções de correlação de dois pontos [113, 114], de maneira semelhante a situações que surgem em sistemas estocásticos.

Aprofundamentos adicionais e relações com a termodinâmica foram desenvolvidas por Onsager [117], que estudou a dinâmica de relaxação do sistema macroscópico observável em termos da primeira derivada (temporal) da entropia, que é diferente de zero fora do equilíbrio. De acordo com a definição de Onsager, a derivada da entropia em relação a uma variável macroscópica é denominada força termodinâmica, que neste cenário está acoplada linearmente a um fluxo termodinâmico por meio de um coeficiente cinético. Em seu trabalho seminal, Onsager também apresentou uma prova das relações de simetria nos coeficientes cinéticos e estabeleceu uma ligação entre a dispersão de flutuações e as taxas de relaxamento. Levou várias décadas para uma nova série de desenvolvimentos, refletindo, entre outros, o contexto da termodinâmica estocástica de sistemas mesoscópicos, resposta linear de processos

não-Markovianos e resposta de processos estocásticos impulsionados por flutuações não gaussianas [72, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131].

Outra generalização das relações de flutuação-dissipação decorre do trabalho pioneiro de Bochkov e Kuzovlev [132, 133], que obtiveram igualdades rigorosas para flutuações (teoremas de flutuação) em um sistema arbitrário levado a um estado fortemente não equilibrado. Seu trabalho foi posteriormente seguido por Jarzynski [134, 135] e Crooks [136]. Notavelmente, em contraste com a relação de flutuação-dissipação estudada no regime linear, os teoremas de flutuação fornecem informações sobre a resposta não linear e foram testados experimentalmente [137].

2.2.4 Violação do Teorema de flutuação-dissipação

Como exposto acima, a relação entre flutuações e dissipação desempenha um papel crucial na teoria de resposta fundamentada na mecânica estatística. O formalismo do FDT derivado para sistemas próximos ao equilíbrio, onde o equilíbrio detalhado é mantido, nos permite obter importantes quantidades medidas, como suscetibilidade, seção transversal de espalhamento de luz, intensidade de espalhamento de nêutrons, difusão, rugosidade superficial no crescimento, e outros, estudando correlações espontâneas de variáveis dinâmicas flutuantes. Por outro lado, a quebra do FDT de equilíbrio é um fato muito comum e está bem documentada na literatura. Por exemplo, na dinâmica KPZ, o FDT funciona para $1 + 1$ dimensões, no entanto, falha para $d + 1$ dimensões quando $d > 1$ [13, 138]. A violação do FDT também foi observada em experimentos de vidro estrutural, por meio de extensas simulações computacionais [139, 140, 141, 142, 143, 144], em proteínas [145], na transferência de calor radiativo mesoscópico [146, 147], na dinâmica de Heisenberg desordenado [148, 149], bem como na difusão balística [97, 118, 150, 151].

Um avanço na compreensão de possíveis cenários de quebra do FDT é analisar uma hierarquia nos teoremas fundamentais da física estatística: A condição de mistura é mais forte do que a HEB, Eq. (2.16), e a ergodicidade é uma condição necessária para o FDT, como discutido anteriormente. A conexão hierárquica entre mistura, ergodicidade e FDT foi investigada em uma sequência de trabalhos [97, 118, 150, 152], estabelecendo assim a maneira como a relação FDT pode ser contrariada.

2.3 Teorema de flutuação-dissipação na transição de fase

2.3.1 Transição de fase

Uma transição de fase é bem descrita pelo comportamento do parâmetro de ordem, calor específico e susceptibilidades próximos a temperatura crítica T_c . Considere por exemplo sistemas magnéticos descritos pela dinâmica de um sistema de spins, o qual s_i representa o valor do spin em um sítio i . O parâmetro de ordem, neste caso a magnetização m é dada pela média aritmética:

$$m = \frac{1}{N} \sum s_i. \quad (2.23)$$

Próximo a transição de fase, i.e. para $T \rightarrow T_c$ temos:

$$m \propto |T - T_c|^\beta, \quad (2.24)$$

o calor específico com campo magnética nulo ($h = 0$):

$$C_{h=0} \propto |T - T_c|^{-\alpha}, \quad (2.25)$$

e a suscetibilidade magnética, $h \rightarrow 0$

$$\chi_0 \propto |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (2.26)$$

os expoentes α , β e γ são chamados expoentes críticos [5, 153]. Observe que a rugosidade, eq. (2.12), também é descrita por leis de potência.

2.3.2 Função de correlação

Como dito anteriormente, as equações de variância de uma grandeza representam quantidades características do sistema. Deste modo as flutuações observadas são fontes importantes de informações. É importante destacar que as equações 2.8 e 2.9 representam uma relação muito importante na área de física estatística: relação de flutuação-dissipação. Deste modo defini-se a flutuação como:

$$\psi(i) = s_i - m \quad (2.27)$$

e a função de correlação

$$G(r) = \langle \psi(i+r)\psi(i) \rangle = \langle s_{(i+r)}s_i \rangle - \langle s_i \rangle^2 \quad (2.28)$$

onde r representa a distância entre dois sítio. Para pequenas flutuações no limite contínuo, $G(r)$ satisfaz [153]:

$$(-\nabla^2 + \kappa^2)G(r) = \delta^d(r), \quad (2.29)$$

com transformada de Fourier $\tilde{G}(k) = (k^2 + \kappa^2)^{-1}$. A transformada de Fourier inversa de $G(r)$, também no limite de pequenos k , produz [154]

$$G(r) \propto \begin{cases} r^{2-d} \exp(-r/\rho), & \text{if } r > \rho, \\ r^{2-d-\eta}, & \text{if } r \ll \rho, \end{cases} \quad (2.30)$$

onde $\rho = \kappa^{-1}$ é o comprimento de correlação, d é a dimensão do sistema, por exemplo em sistemas bidimensionais $d = 2$. O comportamento para r pequeno é assumido, introduzindo empiricamente o expoente de Fisher η . Para T próximo à temperatura crítica T_c , o comprimento de correlação diverge com:

$$\rho \propto |T - T_c|^{-\nu}, \quad (2.31)$$

O expoente crítico do comprimento de correlação ν está relacionado ao expoente crítico do calor específico α através da relação de hiper escalonamento [154]

$$\alpha = 2 - d\nu, \quad (2.32)$$

associando assim uma variável termodinâmica com a divergência do comprimento de correlação. Também temos a relação de escala de Fisher [154]:

$$\gamma = (2 - \eta)\nu. \quad (2.33)$$

2.3.3 Recuperando o Teorema de Flutuação-Dissipação

A introdução do expoente η na eq. 2.30 mostra que a teoria de campo médio, na qual $\eta = 0$, não fornece os expoentes corretos para a transição de fase.

Motivado por resultados anteriores no estudo de crescimento [29, 31, 32, 155, 156, 157] Lima e colaboradores [34] recuperaram o FDT para transição de fase propondo que para $T \rightarrow T_c$:

1. A hipótese de que a dinâmica de um determinado sistema pode fazer com que a atividade fique restrita a um subconjunto do espaço, caracterizado por uma dimensão fractal d_f menor que a dimensão espacial d .
2. Que a equivalente Eq. (2.29) no espaço fractal justifica e determina o expoente η , como

$$\eta = d - d_f. \quad (2.34)$$

Assim, o expoente de Fisher na função de correlação $G(r)$ representa o desvio da dimensão inteira. d_f está dentro dos limites $d - 1 \leq d_f \leq d$. Esse resultado é geral e aplica-se a toda transição de fase de segunda ordem. Observe a semelhança com a eq. 2.13 mostrando uma relação entre transição de fase no equilíbrio e crescimento fora do equilíbrio.

Para o modelo isotrópico de Ising em duas dimensões temos os resultados exatos $\eta = 1/4$, o que dá $d_f = 7/4$. Esse resultado foi verificado recentemente [34] com grande precisão.

Para o modelo desordenado de Ising obtemos apenas valores numéricos. Estamos tentando obter uma relação semelhante à eq. 2.34.

2.4 Modelo de Ising Desordenado

O modelo de Ising é um modelo de interações de spins, conjecturado por Lenz e Ising [158], que ganhou muita popularidade com a facilidade de explicação de fenômenos cooperativos. Estes fenômenos tem como essência os detalhes das forças intermoleculares e da propagação da ordem de longo alcance. O modelo se faz simples, pois há uma simplificação na representação de tais forças. De forma básica, é descrito um rede com geometria determinada e com sítios que podem ser ocupados. Porém, alterando o que ocupa os sítios há diferenças na aplicação.

Os sítios podem estar ocupados com uma mistura de moléculas, assim apresentando separação de fase com agrupamentos de mesma molécula. Também há possibilidade de haver espaços preenchidos e vazios, representando condensação de moléculas numa região. No caso deste projeto, consideramos os sítios ocupados por spins com valores *up* ou *down*. Neste cenário, observaremos a magnetização espontânea, dada pelo comportamento conjunto dos spins [159, 160].

Lenz sugeriu que o dipolo atômico ocupando o sítio na rede pode rotacionar, por este motivo os sítios são ocupados por spins, e a rotação é representada pela alteração entre valores *up* e *down*. Existem propriedades desta rotação que levam à popularidade do modelo. A configuração dos spins, dada pela diminuição de energia, ocorre devido ao comportamento cooperativo do sistema, ou seja, os spins tendem a igualar seus valores (*up* ou *down*) com os vizinhos com quais se relacionam. Gerando um contexto de ordenação do sistema.

A configuração dos spins não depende apenas da interação, mas também da temperatura a qual o sistema se encontra e a geometria do mesmo. Ising demonstrou que um sistema unidimensional de spins possui apenas a fase ferromagnética,

onde os spins tendem a se alinhar paralelamente. Posteriormente, Onsager [161] demonstrou que um modelo de Ising com geometria quadrada possui transição entre fase ferromagnética e paramagnética. Essa transição é chamada de transição de ordem-desordem, e por se tratar de um sistema de spins a transição representa uma transição magnética. O estado ferromagnético alinha os spins paralelamente, enquanto o paramagnético não alinha dos spins e possui magnetização nula.

A interação entre spins é fator determinante no comportamento do sistema sendo representada no modelo pela chamada constante de acoplamento J . Em modelos simples, o acoplamento é dado como um valor constante e igual para todos os spins, contudo este pode tomar valores distintos tanto numérico quanto para diferentes interações. Explicito aqui que a explicação de comportamentos magnéticos é dada por fatores não magnéticos. E é possível ainda adicionar campo no modelo de Ising, fator utilizados em outros trabalhos.

Resultados já conhecidos do modelo e comparações com resultados experimentais mostram que existem materiais que são “Ising-likes”, isto é, materiais que apresentam comportamentos macroscópicos próximos aos resultados obtidos pelo modelo [162]. E fora no escopo da física e de materiais este modelo já serviu em pesquisas quanto à difusão de infecções da COVID-19 [163] e em pesquisas sociais [164, 165].

2.4.1 Descrevendo o Modelo

Objetivo fundamental da mecânica estatística de equilíbrio, pode ser definido como a determinação da função de partição Eq. (2.2). Entretanto, para tal, precisamos resolver Eq. (2.3) inicialmente. Pelo que conhecemos da mecânica quântica, Eq. (2.3) pode ser resolvida exatamente apenas em poucos casos. Mesmo assim, a resolução da Eq. (2.3) não implica a imediata obtenção da função de partição. No nosso estudo vamos concentrar a atenção no modelo de Ising, o qual hamiltoniano será definido adiante.

O modelo de Ising, que foi idealizado por Lenz e estudado por Ising no início do século XX, é um modelo que considera interações entre partículas [159]. O modelo é descrito como uma rede com sítios ocupados por partículas que possuem “momentos magnéticos” com valores $s_i = \pm 1$. Com o advento da mecânica quântica na década de 20 do século passado esses momentos magnéticos foram associados com os “spins”.

O modelo de Ising descreve a interação entre um sítio i e um sítio j na forma [166].

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{i,j} s_i s_j - \mu h \sum_i s_i, \quad (2.35)$$

onde $J_{i,j}$ é o potencial de energia entre dois spins, $s_i = \pm 1$ e μ é o momento magnético do spin sobre efeito do campo magnético externo h . As interações descritas pelo modelo são bastante complexas deste modo utiliza-se as seguintes aproximações:

1. Considerar que a função de onda decai exponencialmente, assim a intensidade das interações com os segundos e terceiros vizinhos são pequenas. Desta forma limita-se as interações entre primeiros vizinhos. Essa aproximação é utilizada durante toda essa dissertação.
2. Considerar todos os acoplamentos do sistema $J_{i,j} = J$

A aproximação 2 foi estudada por [34]. Nesse trabalho estudaremos sistemas desordenados na aproximação dos primeiros vizinhos.

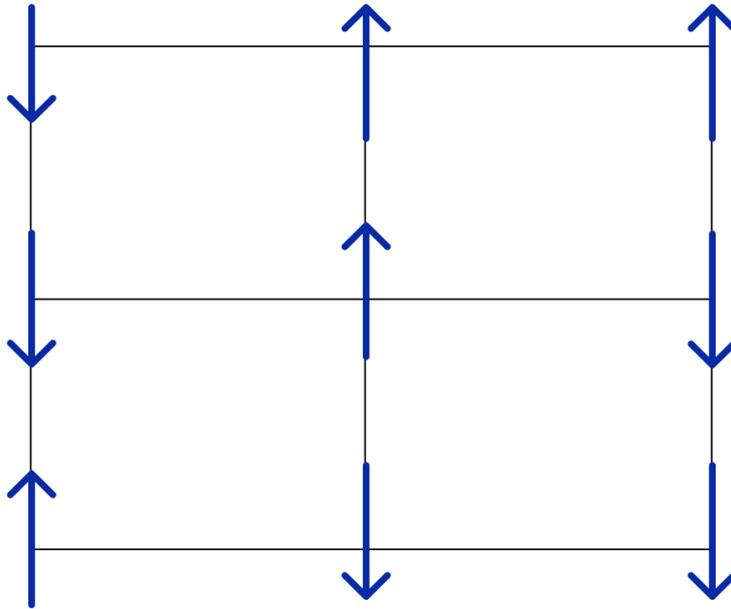


Figura 2.2: Ilustração representativa de uma grade do modelo de Ising bidimensional de tamanho 3x3.

A rede pode ter diferentes geometrias. Para uma dimensão é apenas uma linha com sítios. Para o caso bidimensional e o tridimensional é uma rede quadrada e um cubo, respectivamente, as geometrias mais simples. Existem geometrias com formato triangular, hexagonal. Dependendo da geometria do sistema e do comprimento da função de onda, as quantidades de possíveis interações são alteradas. No caso de primeiros vizinhos numa rede quadrada, um spin tem apenas 4 interações como é observado em 2.2.

O sistema desordenado será o foco deste trabalho, sem atuação de campo magnético. A Hamiltoniana do sistema utilizado neste projeto é:

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{i,j} s_i s_j, \quad (2.36)$$

que representa um sistema de spins disposto numa grade retangular, e que tem as constantes de acoplamento de cada par de spin dadas por uma distribuição Gaussiana da seguinte forma:

$$P(J_{i,j}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_J^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{J_{i,j} - \langle J_{i,j} \rangle}{\sigma_J} \right)^2 \right], \quad (2.37)$$

em que $\langle J_{i,j} \rangle$ é o valor médio, e σ_J é o valor do desvio padrão que terá diferentes valores durante o projeto. Note que $J_{i,j}$ depende do par de spins s_i e s_j . E dependendo dos valores de $\langle J_{i,j} \rangle$ e σ_J temos um vidro de spin. Outras pesquisas fora feitas com distribuição discreta, com $J_{ij} = \pm 1$, e gaussiana com média igual a zero [167].

O modelo de Ising não corresponde a uma realidade física, já que momentos magnéticos reais são representados por vetores matriciais dadas pelas são as matrizes de Pauli. Entretanto, como o modelo de Ising é entre modelos de muitos corpos o mais simples, ele serve de base para muitos estudos em física, química, biologia, e mesmo nas ciências sociais.

A resolução do modelo de Ising ordenado foi feita para o caso unidimensional por

Ising e bidimensional com campo nulo, $h = 0$, por Onsager[161]. Ele determinou que a temperatura crítica para uma rede retangular com condição de contorno periódica é dada:

$$\sinh(2J/K_B T c_o) = 1 \quad (2.38)$$

No entanto, a solução do modelo bidimensional é extensiva e complicada. Atualmente muitas pesquisas são feitas utilizando simulações computacionais, que terão os métodos abordados mais adiante.

Destaco que na Hamiltoniana apresentada os spins podem ter valor ± 1 , e o comportamento padrão dos spins é alinhar-se com seus vizinhos para $J > 0$. Isto ocorre pois a configuração de spins com maior probabilidade ocorre com o menor valor de energia, e que neste caso é dado com o alinhamento dos spins. Quanto há interação campo-spin ocorre o alinhamento do spin com o campo magnético também.

Existe utilidade do modelo em diferentes sistemas. Os mais básicos a serem descritos são: sistemas magnéticos com orientações de spin “up” ou “down”; mistura com dois tipos de moléculas; misturas com moléculas e espaços vazios. Nestes cenários o valor do spin s_i representa ou a orientação do spin, ou o tipo da molécula ou se é um espaço vazio ou ocupado[168].

Como as interações tendem a alinhar paralelamente os spins abaixo da temperatura crítica é comum a criação de grupos (clusters) com spins de mesmo valor. Esta é a característica fundamental para sistemas de misturas.

2.4.2 Variáveis e transição de fase

As variáveis que podem ser calculadas com este modelo são magnetização, energia, susceptibilidade magnética, calor específico[168]. Essas são medidas básicas a serem obtidas, assim como a função de correlação e o comprimento de correlação. As obtenção dessas grandezas podem exigir uma grande potência computacional, portanto precisamos usar programas eficientes para os recursos que dispomos. Também é importante compreender como realizar as medições para facilitar as simulações. Neste momento focaremos na discussão sobre as variáveis calculadas e como medi-las em simulação, e no próximo capítulo discutirei os métodos.

Saber calcular essas variáveis é importante para conseguir realizar a simulação. A energia é uma variável muito importante para dar sequência no método de Monte Carlo que será discutido no próximo capítulo. Ela é dada pelo hamiltoniano do sistema, de forma que cada spin contribui com uma unidade E_i de energia, e temos:

$$E_i = - \sum_{\langle j \rangle} J_{ij} s_i s_j. \quad (2.39)$$

A soma das energias de cada spin resulta na energia do sistema. Em contexto de simulação não é possível conhecer a densidade de probabilidade do sistema, então utilizamos a média aritmética para calcular as variáveis, ao invés da média sob o ensemble. No caso da energia por spin temos:

$$E = - \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j \quad (2.40)$$

A energia desempenhará um papel crucial na tomada de decisão de organização dos spins, por isso é a primeira variável calculada.

Dada uma organização de spins, podemos medir a magnetização do sistema, que representará a distribuição de spins *up* ou *down* e será utilizada para verificação de transição de fase magnética. A magnetização é dada pela equação (2.23) podendo ter o valor apenas entre 1 e -1. Valores diferentes de zero refletem um sistema na fase ferromagnética, enquanto valores iguais a zero são atribuído à fase paramagnética.

A partir destas duas variáveis é possível calcular capacidade térmica e susceptibilidade utilizando a equação de variância das medidas pelas equações (2.8 e 2.9).

O comportamento do comprimento de correlação perto da transição de fase é diferente longe da transição. O comprimento de correlação passa a seguir uma lei de potência dada pela equação (2.31), apresentando divergência em $T = T_c$ (T_c é a temperatura crítica), e esta divergência é dita como uma das mais importantes para a compreensão de fenômenos críticos.

Atinge-se a transição de fase quando $T \rightarrow T_c$, atingindo um comportamento crítico. Nesta dissertação, como se trata de um sistema desordenado utilizaremos a notação T_{c_o} para representar a temperatura crítica de um sistema ordenado, dado pela equação (2.38). Temperaturas críticas referentes ao sistemas desordenado é representada aqui como T_{c_i} .

Com exceção da energia, as variáveis apresentadas divergem e são descritas por uma lei de potência. São esses os parâmetros de ordem, funções responsivas e as funções de correlações, e são caracterizadas por expoentes críticos.

Note que o modelo se baseia em interações de primeiros vizinhos, curta distância caracterizada por um comprimento de correlação próximo a 1. Entretanto o comportamento coletivo, próximo a uma transição de fase, mostra a existência de correlações de longa distância.

Capítulo 3

Objetivos

Nesta dissertação temos como hipótese:

1. O expoente de Fisher está relacionado com a dimensão fractal do sistema.

Desta forma, objetivamos de modo geral demonstrar como a desordem afeta a transição de fase, caracterizada pelos expoentes críticos, e a dimensão fractal utilizando de simulações computacionais do Modelo de Ising.

De forma específica, objetivamos:

1. Utilizar um sistema desordenado dado por uma função de distribuição Gaussiana com média fixa unitária e valores de variância variáveis;
2. Criar algoritmo de simulação paralela em placa de vídeo;
3. Verificar como a temperatura de transição é alterada com alterações da desordem;
4. Obter expoente crítico do parâmetro de ordem para diferentes valores de desordem;
5. Obter expoente de Fisher para diferentes valores de desordem;
6. Obter dimensão fractal para diferentes valores de desordem;
7. Descrever a relação entre dimensão fractal e expoente de Fisher para contexto de sistema desordenado.

Capítulo 4

Metodologia

4.1 Monte Carlo e Metropolis

O método de Monte Carlo (MC) é uma abordagem para simular sistemas estocásticos, i.e, que evoluem temporalmente de forma aleatória [168]. Seguindo uma cadeia de Markov é possível alcançar diversos estados do sistemas para obter medidas estatísticas, que no nosso caso representam grandezas físicas.

O método de Monte Carlo possui diversas aplicações, por exemplo o cálculo de áreas, decaimento radioativo, cálculo do valor π , movimento browniano, modelos de crescimento de superfície [169]. É bastante utilizado quando o sistema de estudo tem bastantes graus de liberdade, possibilidades de estados. Em um modelo de Ising, a quantidade de possíveis estados que o sistema pode ter aumenta com o tamanho da rede, lembrando que cada spins pode ter dois valores diferentes.

O Algoritmo de Metropolis é uma forma de realizar o método de Monte Carlo. Ele funciona escolhendo aleatoriamente um corpo do sistema e alterando seu valor. Com a alteração do valor aplica-se uma condição pré-estabelecida, que dirá se a alteração deverá continuar no sistema ou não. Após tomada de decisão voltamos a escolher outro corpo aleatoriamente, e seguir o ciclo por um número determinado de vezes. Um ciclo descrito acima é chamada de Monte Carlo Sweep (MCS).

O método de MC tem como entrada a matriz de spins, sendo necessário definir qual é a condição usada para alterar o sistema durante a cadeia de markov. No algoritmo de Metropolis se faz uso da energia do sistema. Partindo da equação 2.4 temos a densidade de probabilidade de um estado i qualquer. Considere um segundo estado y qualquer, onde temos a densidade alterada apenas para a energia deste estado.

$$\rho_y = \frac{e^{-\beta_t E_y}}{Z}. \quad (4.1)$$

Verificando a razão das densidades nestes dois estados temos:

$$\frac{\rho_i}{\rho_y} = \frac{e^{-\beta_t E_i}}{e^{-\beta_t E_y}}, \quad (4.2)$$

e portanto,

$$\frac{\rho_i}{\rho_y} = e^{-\beta_t [E_i - E_y]} = e^{-\beta_t \Delta E}. \quad (4.3)$$

A Eq.(4.3) mostra que a razão das densidades de probabilidades entre dois estados consecutivos depende da variação da energia. Consideramos então que a mudança do estado i para o estado y tem probabilidade de ocorrência dada pela variação de energia entre os estados. Desta forma a equação governa a cadeia de markov na grade. Portanto, o Algoritmo de Metropolis consiste em observar a variação de energia e aplicar as seguintes condições:

$$\begin{cases} \Delta E < 0 - \text{Mudança ocorre} \\ \Delta E > 0 - \text{Mudança ocorre se } p < e^{-\beta_t \Delta E} \end{cases}$$

onde p é um número sorteado aleatoriamente com distribuição uniforme.

Observe que na primeira condição o sistema se direciona para o estado de menor energia, uma vez que diferença negativa resultará na alta probabilidade de ocorrência e mudança do caso de maior energia para o de menor. Enquanto a segunda condição possibilita a mudança de um estado de menor energia para outro de maior energia, permitindo que ocorra oscilação do sistema. A junção destas condições permitem a evolução da cadeia de markov e a existência de flutuações.

O caso de Ising desordenado possui diferentes valores de acoplamentos, então a mudança de energia para virar o spin $s_{i,j}$ é

$$\Delta E = \begin{cases} J[s_{i,j+1} + s_{i,j-1} + s_{i-1,j} + s_{i+1,j}]s_{i,j}, & \text{Ordenado} \\ [J_{i,j+1}s_{i,j+1} + J_{i,j-1}s_{i,j-1} + J_{i-1,j}s_{i-1,j} + J_{i+1,j}s_{i+1,j}]s_{i,j}, & \text{Desordenado.} \end{cases} \quad (4.4)$$

É importante destacar que o Algoritmo de Metrópolis é uma técnica inteligente de amostragem, pois as condições que aceitação da mudança na cadeia de markov seleciona estados mais representativos do sistema. Sendo assim, a obtenção das medidas ocorre no momento que o sistemas atingir um ponto de saturação.

A temperatura também atua nas probabilidades da transição entre microestados. E como ponto principal, este condicional está de acordo com a equação 2.3, que mostra que a maior probabilidade de ocorrência é com a diminuição da energia.

A simulação é um artifício que possui algumas complicações que devem ser discutidas. Destaco duas dificuldades importantes: tempo de simulação e precisão dos resultados. Ambas necessitam que quem faça a simulação esteja ciente e que tenha ferramentas para contornar-las, e que estas relacionadas.

A precisão das simulações deve ser olhada com atenção, já que por se tratar de probabilidades é possível alcançar um falso equilíbrio, como um mínimo de energia local e interpretar como um mínimo global. Geralmente, estas situações são evitadas realizando mais ciclos de MCS. Contudo, esta solução encontra a segunda complicação, tempo.

Muitas simulações tomam muito tempo e requerem assim um poder computacional maior. Com o progresso dos computadores as simulações também estão evoluindo, envolvendo mais corpos, mais fatores e afins. No modelo de Ising, como exemplo, é possível aumentar o número de integrantes. Mas como já mostrado anteriormente, o número de microestados aumenta com 2^L apenas com o aumento da grade, e adicionando as possibilidades dos valores de J_{ij} tem-se um aumento considerável das aplicações de MS. Por consequência, o tempo levado para realizar

a simulação aumenta consideravelmente. Esse é o motivo do uso da ferramenta CUDA.

4.2 CUDA e Python

Compute Unified Device Architecture (CUDA) é uma API destinada à programação paralela desenvolvida pela empresa NVIDIA. Esta ferramenta faz uso da placa de vídeo (GPU) para processar a simulação, e não o processador do computador (CPU) [170]. De forma geral, a placa de vídeo é utilizada para processos que envolvem a imagem, mas com a arquitetura CUDA é possível executar o algoritmo que não envolve imagem na GPU. Esta arquitetura utiliza linguagem C e C++.

GPUs atuais utilizam hardware com multiprocessadores escalonáveis em estilo ordenado. Esta ordem é separada em blocos (blocks) e sub-blocos (threads). O CUDA funciona sendo ativada por extensões no código, que compilaram o algoritmo e envia os processos para os blocos e sub-blocos.

A principal diferença de executar em GPU e não CPU é que a GPU realiza a mesma função desejada em cada sub-bloco ao mesmo tempo, enquanto a CPU executa a função de forma linear. Exemplificando no modelo de Ising, a CPU realizará o método MC para um “spin” por vez, enquanto a GPU consegue realizar para mais de um spin.

Por causa da forma que programação em CUDA funciona, o tempo dedicado a uma simulação diminui consideravelmente, como mostrado em [171]. Para grades de Ising com poucos corpos (cerca de 2^5) a CPU possui vantagem, no entanto, os resultados não possuem a precisão desejada. Para 2^8 sítios o tempo de simulação chega a ser cem vezes menor em execução de GPU.

A ferramenta CUDA existe para diversas linguagens de programação, incluindo a linguagem Python. Esta linguagem vem crescendo dentro e fora de ambientes acadêmicos, sendo utilizada em computação científica [172] [173], ciência de dados [174] e outros. Por Python ser uma linguagem open-source, há inúmeras bibliotecas que adicionam funcionalidades ao código, e algumas serão discutidas abaixo pois serão utilizadas no projeto.

A biblioteca principal é a Numpy [175], que adiciona funcionalidade poderosa de programação com arrays. Tendo aplicações em computação quântica, estatística, química e outras áreas, numpy implementa linguagens como C e FORTRAN no ambiente python. Há utilização primordial de arrays multidimensionais (tensores) ([176]). Entretanto, as ações da numpy são operadas na CPU.

Outra biblioteca, que faz uso da numpy, é a Scipy [177]. Como discutido em [173], scipy é criado sob Numpy, assim fazendo uso dos arrays para modelar e resolver problemas científicos. Os algoritmos incluem integração, interpolação, equações diferenciais, problemas de autovalor, estatística e outros módulos.

A última biblioteca de extrema importância é a Numba [178], que atua como compilador de códigos Python e funções matemáticas com objetivo de aumentar rapidez. Numba compila trechos de códigos python para núcleo (kernel) CUDA.

A maioria dos módulos desta biblioteca mapeia diretamente o código Python para funcionalidades CUDA.

4.3 Simulação

Nesta sessão irei detalhar os passos da simulação e detalhes importantes de como funciona o Monte Carlo em paralelo com CUDA.

Lembre que os passos do MCS para o modelo de Ising são:

1. Escolher randomicamente um spin da grade e gira-lo;
2. calcular a energia;
3. Decidir se este spin mantém-se girado com base na energia.

A repetição de MS faz com o sistema mude de microestado, selecionando apenas estados representativos do ensemble. Este método descrito acima é chamado de serial, pois é realizado em série estes passos.

Quando aplicamos o Monte Carlo com CUDA temos uma alteração importantíssima nos passos por se tratar de um método paralelo. O método paralelo significa que os spins passaram pela MS ao mesmo tempo, o que causa necessidade de alterações na lógica de programação, as quais detalharei a seguir.

A primeira alteração diz respeito ao mapeamento da grade de spins com o mapeamento do hardware do dispositivo (GPU). Quando um dispositivo é ativado, os multiprocessadores são distribuídos em uma grade núcleo, que pode ser dividido em blocos, e cada bloco é dividido em vários sub-blocos (threads). Cada sub-bloco será atarefado com o processo de monte carlo, e assim faz-se o mapeamento de cada sítio na grade de spins com cada sub-bloco na grade núcleo. Desta forma, cada spin passa pelo MS ao mesmo tempo.

A segunda alteração surge como consequência da forma como a GPU processa o método, virando todos os spins ao mesmo instante. Como consequência desta programação paralelo o sistema entra num ciclo em que muda-se de um estado A para B, e em sequência do estado B para o A. Por este motivo, utiliza-se um algoritmo chamado de algoritmo checkerboard, que funciona separando a etapa de virar os spins em duas, de forma a virar apenas spins não interagentes. O resultado do algoritmo é evitar que o sistema se prenda num ciclo.

Neste algoritmo os passos de Monte Carlo em Paralelo, neste projeto, se transformam em:

1. Definir os spins pares e girá-los;
2. calcular a energia para cada spin girado;
3. Decidir se estes spins mantém-se girado com base na energia;
4. Definir os spins ímpares e girá-los;

5. calcular a energia para cada spin girado;
6. Decidir se estes spins mantêm-se girado com base na energia.

Para definir se o spin é par ou ímpar utiliza-se a soma das posições de linha e coluna do spin, e com isto apenas spins não interagentes vão passar pelo processo. Destaco que este algoritmo é uma forma ativar algumas threads, permitindo o avanço na cadeia de markov, enquanto as desativas se mantêm inalteradas. A figura abaixo ilustra o algoritmo tabuleiro de damas.

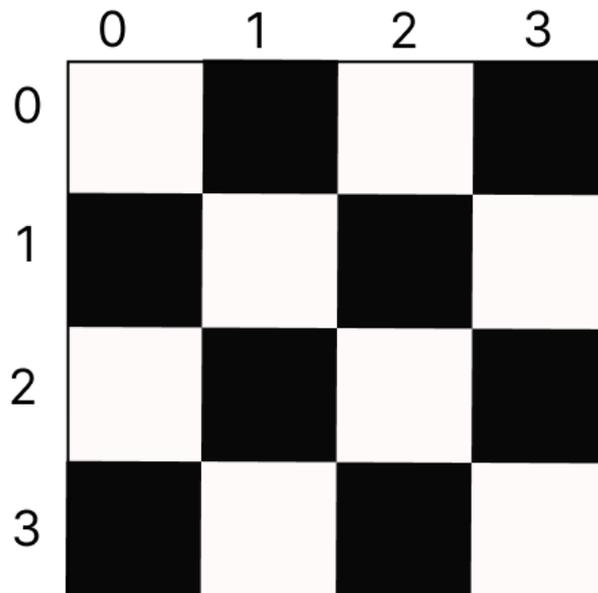


Figura 4.1: Ilustração do algoritmo checkerboard com numeração do índice das linhas e das colunas. Os quadrados pretos indicam os sítios dos spins que passaram pelo MCS.

A figura se trata de uma grade 4x4, em que os quadrados pretos são os ímpares e representam as posições dos spins que serão virados para realizar o MS. Note que os quadrados pretos não são interagentes entre si. Com esse algoritmo e o método monte carlo temos o processo de equilibrar o sistema.

Independente da medida a se obter é necessário estar em situação em que o sistema atingiu o ponto de saturação. Neste contexto, faz-se muitas medidas realizando o seguinte passo a passo de medição:

1. Calcula a grandeza desejada;
2. Realize um MCS para alterar o microestado naquela temperatura;
3. repita passo 1 a 2 por um número determinados de vezes e guarde todas as medidas calculadas;
4. A medida final é dada pela médias de todas medidas.

Para a realização da simulação, uma vez que a medição toma tempo e poder computacional, deve-se definir com antecedência qual/quais medidas serão calculadas durante a simulação. O passo a passo de uma simulação completa, que tem

como resultado valores médias da grandeza em função da temperatura é:

1. Cria uma rede de spins inicial;
2. Definir uma temperatura ;
3. Repetir o MCS com CUDA até atingir a saturação;
4. Realizar o processo de medição para obter o valor da grandeza na temperatura definida no item 2;
5. Alterar o valor da temperatura, usando o estado final desta cadeia de markov como o estado inicial da próxima;
6. Repetir os passos 3 a 5 até obter todas os valores de medidas nas temperaturas desejadas;
7. Salvar os dados.

4.4 Expoentes e Dimensão Fractal

Nesta sessão detalharei brevemente como é feita a obtenção dos expoentes críticos e a medição da dimensão fractal.

Com os dados das medidas em função da temperatura, então utilizo as equações [2.24](#), [2.28](#) e [2.1](#). A correlação dada por [2.28](#) tem como variável dependente a distância.

Para encontrar os valores do expoentes críticos realizo um ajuste de curva com base nas equações, também em python com aplicação da biblioteca Scipy. Faço uso do módulo “curve_fit”, que aplica o método dos mínimos-quadrados não lineares para ajustar os dados a uma dada função. Explicito que o ajuste de curva é sempre feito próximo a transição de fase.

Para o cálculo da dimensão fractal utilizei o método box-counting [[179](#)], com adaptações. O método calcula dimensões fractais em imagens, e adaptamos para que a entrada em que será calculado a dimensão seja a grade de spins. Este método funciona cobrindo a grade com caixas e contando quantas caixas estão cobrindo o objeto geométrico. Para obtenção da dimensão de Hausdorff cria-se um looping em que a cada estágio há mais caixas de tamanhos menores. A dimensão de Hausdorff é dada portanto pelo coeficiente angular do ajuste de curva linear, seguindo a equação [\(2.1\)](#).

Capítulo 5

Resultados e Discussão

5.1 Interações Randômicas

A hamiltoniana para um modelo de spin no contexto desordenado é dada pela equação (2.36), onde a intensidade da interação J_{ij} depende das posições i e j . A variação da energia é dada pela equação abaixo:

$$\Delta E = [J_{i,j+1}s_{i,j+1} + J_{i,j-1}s_{i,j-1} + J_{i-1,j}s_{i-1,j} + J_{i+1,j}s_{i+1,j}]s_{i,j} \quad (5.1)$$

Utilizamos a distribuição gaussiana para gerar os valores dos acoplamentos para cada spin, onde temos que definir os valores da média e do desvio padrão. Definimos estes valores como: $\langle J_{ij} \rangle = 1$, enquanto o desvio padrão não tem um valor fixo, sendo escolhido de forma a abranger valores próximo de zero e valores maiores. Note que o valor do desvio padrão representa a desordem do sistema.

Para a criação dos valores de acoplamento utilizamos a classe *random.normal* da biblioteca Numpy. Os valores são organizados em matriz, com mesmo tamanho da matriz de spins, para que possa haver mapeamento direto entre a posição do spin e seu respectivo valor de acoplamento. Abaixo apresentamos a distribuição normal retornada.

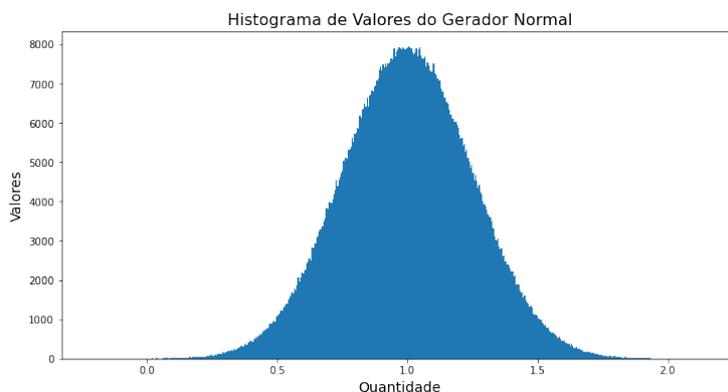


Figura 5.1: Distribuição normal com $\langle J_{ij} \rangle = 1$ e $\sigma_J = 0.25$ com 1024^2 valores.

A figura 5.1 representa uma distribuição gaussiana feita pela classe da biblioteca numpy. O aumento do desvio padrão amplifica a probabilidade de ocorrer valores distantes das média. Portanto, precisamos compreender a probabilidade da ocorrência de valores negativos, pois estes causarão frustrações no sistemas. Em termos gerais,

valores negativos no acoplamento leva o spin a se posicionar antiparalelamente ao vizinho que compartilha essa interação. Note que acoplamentos positivos alinham os vizinhos paralelamente, e caso um spin tenha vizinhos com acoplamento positivo e negativo haverá uma competição para decidir qual alinhamento seguir.

Apresento abaixo o gráfico da probabilidade de se obter valores menores que zero para diferentes desvios padrões. Esses valores foram calculados a partir da função de distribuição acumulada:

$$P(J_{i,j} < 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_J^2}} \int_{-\infty}^0 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{J_{i,j} - \langle J_{i,j} \rangle}{\sigma_J} \right)^2 \right] dJ_{i,j}. \quad (5.2)$$

alterando os valores dos desvios σ_J .

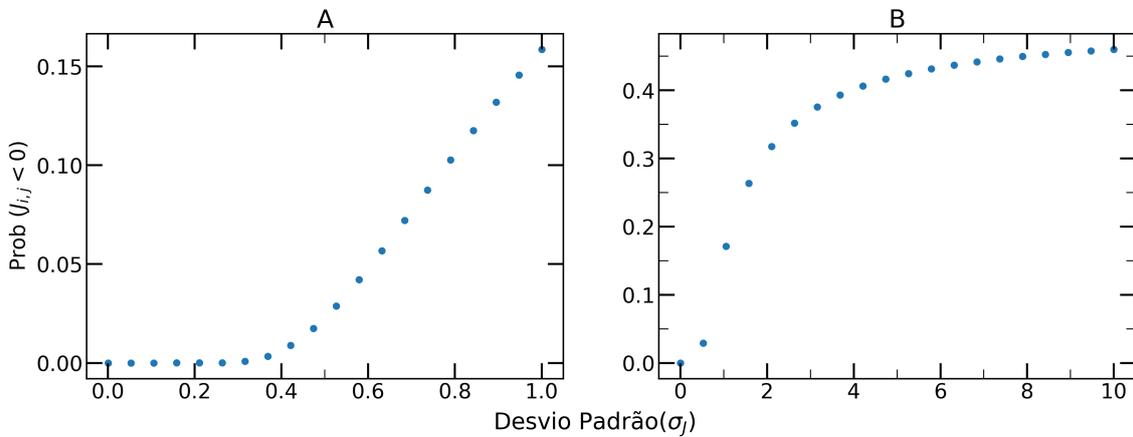


Figura 5.2: Probabilidade de ocorrer valores de $J_{ij} < 0$ para diferentes valores de σ_J com $\langle J_{ij} \rangle = 1$. A curva do gráfico A apresenta valores abaixo de $\sigma_J = 1$, enquanto no B apresento valores maiores de desvio padrão.

Perceba que o gráfico A apresenta um comportamento em que espera-se atingir um valor máximo de $P(J < 0)$.

O gráfico A mostra que até o ponto $\sigma_J = 0.4$ o valor de $P(J < 0)$ é praticamente nulo, e a partir deste ponto há uma crescente na probabilidade de valores negativos. Note que até o desvio padrão atingir o valor $\sigma_J = 0.8$, a probabilidade de valores negativos é de 10%. O gráfico B apresenta o comportamento de saturação quando o desvio padrão tende ao infinito. É importante ressaltar que há relação direta entre probabilidade e frequência, de forma que a probabilidade da ocorrência valores negativos apresenta diretamente a frequência de valores negativos na matriz de acoplamento.

5.2 Saturação do Sistema

Primeiro temos que definir qual momento o sistema atinge a saturação, uma parte fundamental para realizar todas as medições. Para tal, realizamos a simulação de Monte Carlo medindo a magnetização em função da quantidade de ciclos MCS, representado no gráfico como t .

Todos dados de temperatura estão em unidade da temperatura crítica de sistema ordenado (T_{c_o}) com $J = 1$, que tem o valor dado pela equação 2.38, e portanto segue que:

$$\frac{k_B T_{c_o}}{J} \simeq 2.269 \quad (5.3)$$

Tomamos essa decisão pois quando o sistema desordenado se aproximar do contexto ordenado ($\sigma_J = 0$) temos que ter os mesmos comportamentos já conhecidos de um sistema ordenado e facilita a comparação.

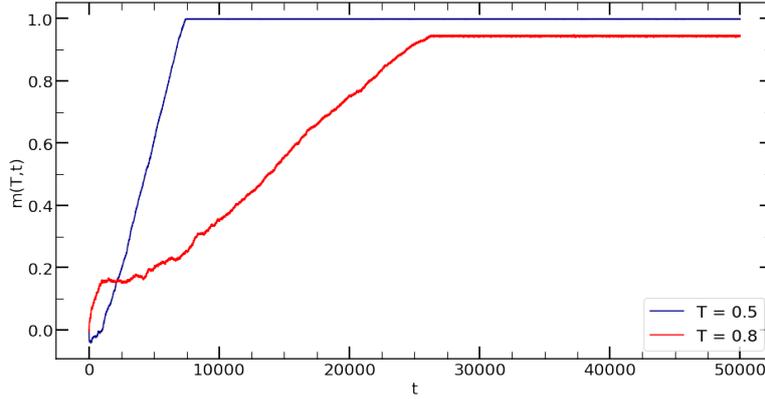


Figura 5.3: A magnetização $m(T, t)$ em função do tempo t para uma rede quadrada de Ising a temperaturas fixas $T = 0.5T_{c_o}$ e $T = 0.8T_{c_o}$, em azul e vermelho, respectivamente.

O gráfico 5.3 apresenta a magnetização em função da quantidade de ciclos MCS para duas temperaturas em estado de sistema ordenado com $\langle J_{ij} \rangle = 1$, o que equivale à $\sigma_J = 0$. Após determinada quantidade a curva se aproxima de uma linha horizontal, significando que sistema atingiu a saturação. Note também que para duas situações de diferentes temperaturas necessita-se de mais ciclos para atingir a saturação para temperaturas mais altas.

Definimos então regras para realização da simulação: I) A simulação irá iniciar em situação de $m(T, t) = 1$. II) A temperatura inicial da simulação será $T = 0,2T_{c_o}$, pois estando próxima de zero atingi-se a saturação com menos ciclos MCS. III) para cada alteração da temperatura será utilizado a mesma rede.

Também definimos qual é o intervalo de tempo que realizaremos as medições. Denominando t_i como o ponto inicial de medição e t_f como o ponto final.

Em geral, iniciamos a simulação na temperatura $T = 0,2T_{c_o}$, em uma grade com todos os spins igual a 1. Atingimos o equilíbrio para a primeira temperatura utilizando $t_i = 20000$ e $t_f = 30000$, i.e, após 20000 MCS começamos a obter a grandeza desejada e paramos após atingir 30000 ciclos MCS. A partir da segunda temperatura utilizaremos $t_i = 5000$ e $t_f = 15000$. Note que a diminuição da quantidade de ciclos a partir da segunda temperatura se deve ao fato de: I) A primeira temperatura atingiu o equilíbrio II) a diferença entre as temperaturas subsequentes é de $0.007T_{c_o}$, pois para temperaturas longe da transição de fase (entre $T = 0.2T_{c_o}$ e $T = 0.9T_{c_o}$) foram utilizados 100 pontos de temperatura.

5.3 Energia e Magnetização

Primeiro apresentamos a diferença no comportamento da energia e da magnetização em função da temperatura para três situações isotrópicas. Estes três gráficos representam o seguinte cenário: $\sigma_J = 0$ e $\langle J \rangle = [0.9, 1, 1.1]$. Desta forma queremos observar possíveis diferenças entre os três comportamentos.

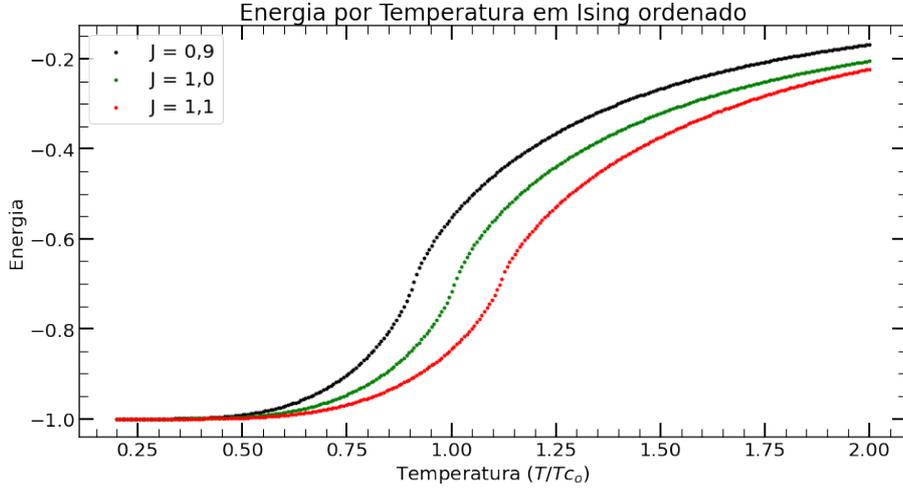


Figura 5.4: Energia em função da temperatura para três valores de J com $\sigma_J = 0$, representando caso ordenado. Curva preta, verde e vermelha representam respectivamente $J = 0.9$, $J = 1.0$, $J = 1.1$

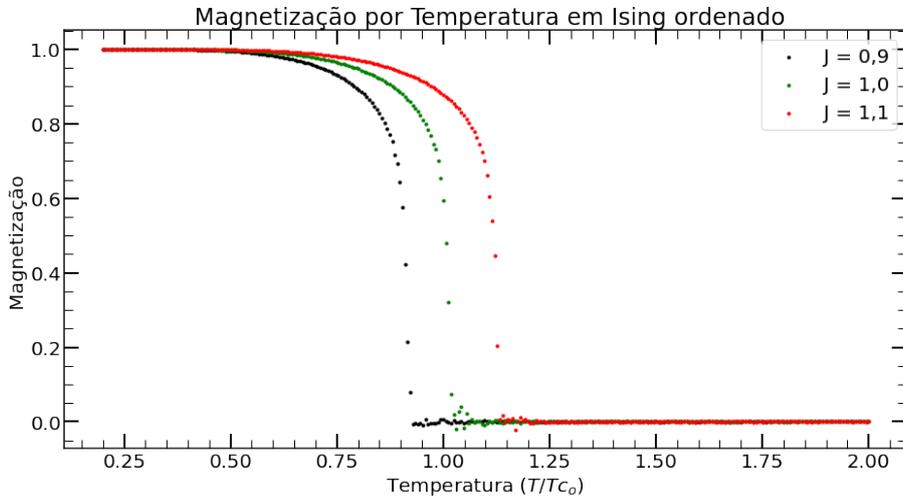


Figura 5.5: Magnetização em função da temperatura para três valores de J com $\sigma_J = 0$, representando caso ordenado. Curva preta, verde e vermelha representam respectivamente $J = 0.9$, $J = 1.0$, $J = 1.1$

As figuras 5.4 e 5.5 apresentam três curvas para três valores de acoplamento médio num sistema isotrópico. As três curvas apresentadas são semelhantes, com a única diferença sendo um deslocamento no eixo X (temperatura). Este resultado mostra que o acoplamento causa um deslocamento dos valores no eixo da temperatura, de forma que para atingir um mesmo valor de energia ou magnetização em dois sistemas com acoplamentos diferentes, é necessário estar a uma temperatura diferente. No caso da magnetização, nota-se que há também um deslocamento no

valor da temperatura crítica, a temperatura em que ocorre a transição de fase. Este resultado está de acordo com a equação (5.3).

Com este resultado sabe-se que o valor da constante de acoplamento altera o valor da temperatura crítica proporcionalmente. No entanto, para o sistema desordenado estas equações não são aplicáveis, lembrando que em nosso sistema $J_{i,j}$ segue uma distribuição normal com média unitária. Isto significa que há valores maiores que um, valores menores que um e valores iguais a 1. Para descobrir o comportamento das curvas destas medidas em relação a temperatura crítica apresento os gráficos abaixo:

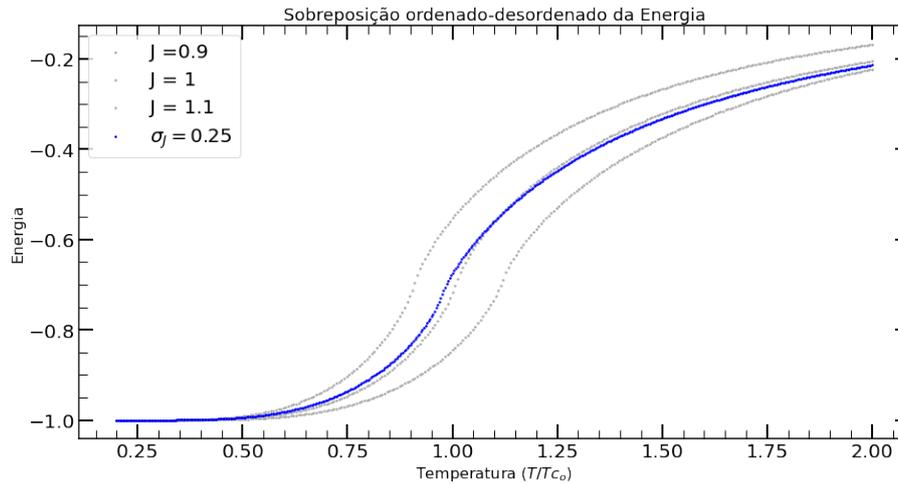


Figura 5.6: Energia em função da temperatura para 3 valores J Isotrópico e 1 J Anisotrópico com $\sigma_J = 0.25$ Azul. O gráfico é uma sobreposição da curva de energia por temperatura para um caso desordenado em cima da figura 5.4, assim as curvas cinzas são idênticas às curvas do caso ordenado.

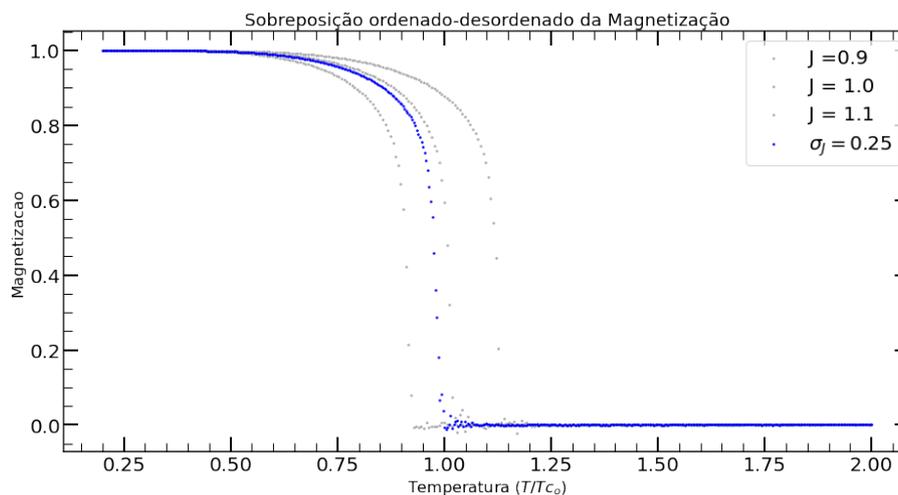


Figura 5.7: Magnetização em função da temperatura para 3 valores J Isotrópico e 1 J Anisotrópico com $\sigma_J = 0.25$ Azul. O gráfico é uma sobreposição da curva de magnetização por temperatura para um caso desordenado em cima da figura ??, assim as curvas cinzas são idênticas às curvas do caso ordenado.

As figuras 5.6 e 5.7 são sobreposições das curvas para o sistema desordenado em cima das figuras 5.4 e 5.5. Elas mostra que o comportamento das curvas de energia

e magnetização são semelhantes às curvas ordenadas, apresentando também deslocamento no eixo da temperatura. Este deslocamento pode ser melhor observado no gráfico da magnetização, o qual apresenta diminuição do valor da temperatura de transição. O gráfico da energia mostra comportamento semelhante entre sistema ordenado e desordenado, mas não é tão claro quanto ao deslocamento da temperatura crítica.

Para melhor visualizar o deslocamento da temperatura crítica apresentamos o gráfico 5.8. Neste gráfico há quatro curvas de magnetização por temperatura no sistema desordenado, cada uma com valor diferente de desvio padrão.

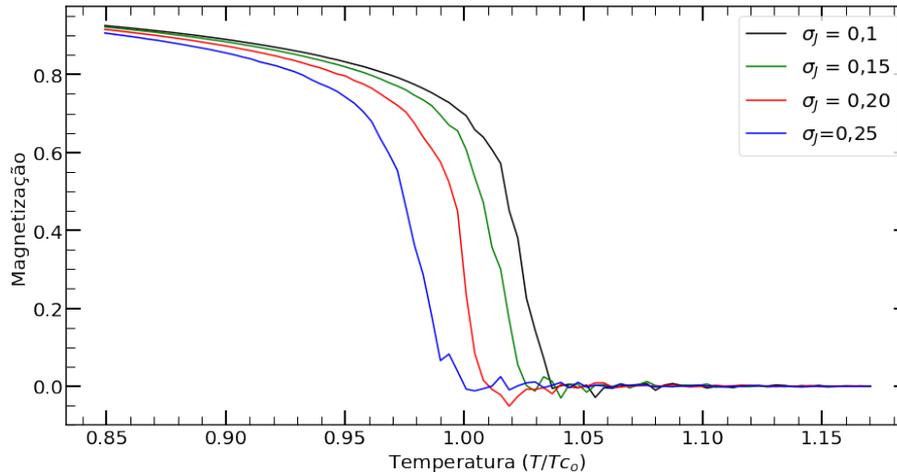


Figura 5.8: Magnetização em função da temperatura para quatro valores de J anisotrópico. Em sequência temos: $\sigma_J = 0.1$ em preto, $\sigma_J = 0.15$ em verde, $\sigma_J = 0.20$ em vermelho e $\sigma_J = 0.25$ em azul

O gráfico acima mostra que o comportamento para quatro diferentes valores de desordem são semelhantes, e apresentam deslocamento da temperatura crítica ao aumentar os valores do desvio padrão. Isto significa que o aumento da desordem no sistema age como um fator de enfraquecimento na intensidade do acoplamento médio, uma vez que a temperatura crítica diminui tal qual acontece na diminuição de J para sistema ordenado.

Desta forma, conhecer as temperaturas de transição para cada diferente valor de desvio padrão é crucial para definir o ponto de transição ao qual queremos realizar análises.

5.4 Temperaturas de Transição em Desordem e Expoente Crítico β

Com objetivo de compreender a relação da temperatura de transição em função do desvio padrão foram realizadas simulações para obtenção da magnetização por temperatura. Como mostrado anteriormente, a curva da magnetização apresenta transição de fase, e analisando os dados próximo da transição é possível obter dois valores importantes neste projeto: Temperatura crítica (Tc_i) e expoente crítico (β). Note que a temperatura crítica aqui é denominada por Tc_i para descrever temperatura

crítica de um sistema anisotrópico.

A equação utilizada está escrita abaixo, em que os parâmetros ajustáveis são a , Tc_i e β .

$$M(T) = a(Tc_i - T)^\beta \quad (5.4)$$

Esta equação serve para $T \leq Tc_i$, assim para cada valor de desvio padrão faz-se seleção dos dados próximos da transição, e realiza-se o ajuste. A figura 5.9 mostra um dos casos para qual foi realizado o ajuste de curva.

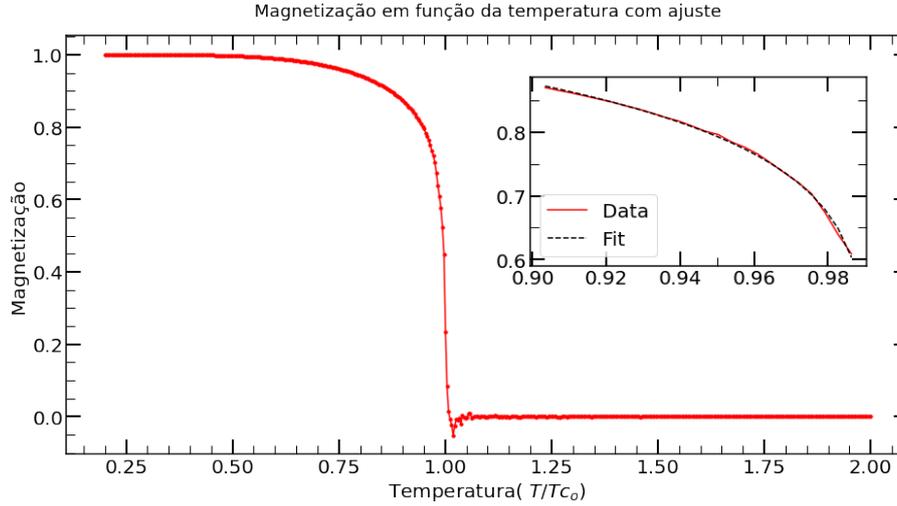


Figura 5.9: Magnetização em função da temperatura e ajuste de curva próximo da transição para sistema anisotrópico para $\sigma_J = 0, 20$

Nas tabelas abaixo apresento também valores de temperaturas críticas, expoentes e coeficientes de determinação para cada valor de desvio padrão.

Desvio Padrão (σ)	Tc_i/Tc_o	R^2
0.0	1.005	0.999
0.10	1.0005	0.999
0.20	0.987	0.998
0.30	0.967	0.997
0.40	0.951	0.997
0.50	0.930	0.997
0.60	0.890	0.998

Tabela 5.1: Tabela contendo valores de temperatura de transição e coeficiente de determinação para cada valor do desvio. A tabela apresenta alguns dos valores obtidos para visualização.

Com os valores apresentados na tabela e adições de outros valores entre os apresentados foi feito o gráfico na figura 5.10.

A figura 5.10 mostra que a temperatura crítica diminui com o aumento da variância (o quadrado do desvio padrão). Propomos a seguinte equação para a curva que obtivemos:

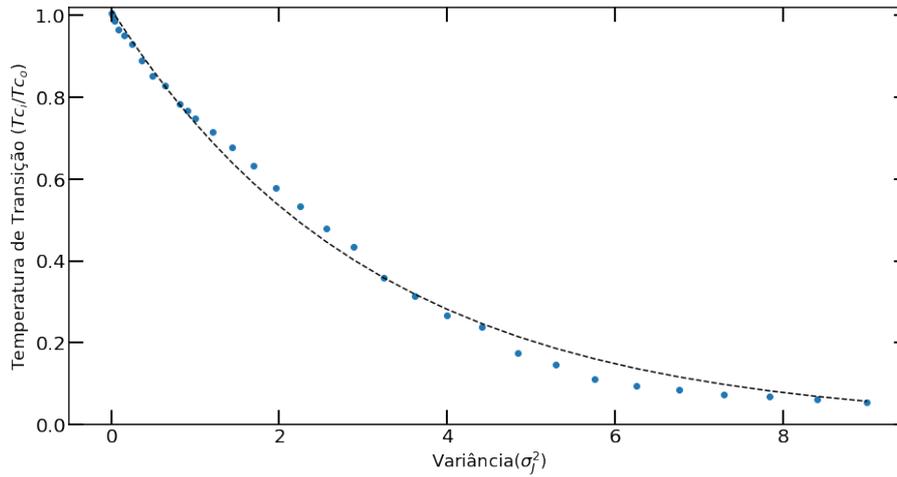


Figura 5.10: Temperatura crítica em função do desvio padrão σ_J no modelo de Ising com interações randômicas por uma distribuição gaussiana com regressão não-linear pela linha trecejada. $R^2 = 0.995$

$$\frac{Tc_i(\sigma_J)}{Tc_o} = \exp[-a\sigma_J^2] \quad (5.5)$$

onde $a = 0.321 \pm 0.007$.

Note que quando $\sigma_J = 0$ temos o caso isotrópico em que $Tc_i(0) = Tc_o$. Este gráfico mostra que o aumento da desordem do sistema afeta a temperatura crítica diminuindo seu valor, de forma que aparenta estar enfraquecendo a intensidade do acoplamento médio. A tendência é levar a temperatura de transição à zero onde há apenas fase paramagnética.

Apresentamos abaixo a tabela e o gráfico com os valores de β , que mostram mudanças significativas em seus valores.

Desvio Padrão (σ)	β	R^2
0.0	0.126	0.999
0.10	0.105	0.999
0.20	0.084	0.998
0.30	0.071	0.997
0.40	0.057	0.998
0.50	0.045	0.997
0.60	0.042	0.995
0.70	0.040	0.998
0.80	0.037	0.996

Tabela 5.2: Tabela contendo expoente crítico β e coeficiente de determinação. A tabela apresenta alguns dos valores obtidos para visualização.

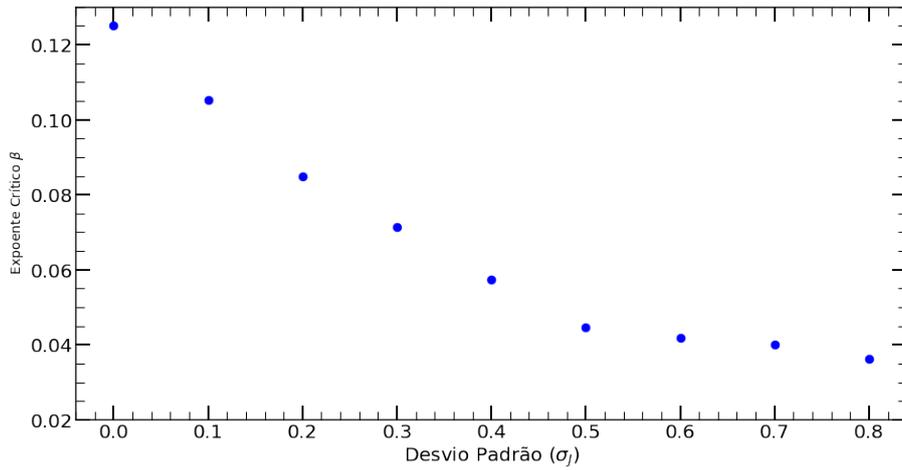


Figura 5.11: Valores de β para cada valor de σ_J .

A figura e tabela mostram que ao variarmos o desvio padrão, representando o aumento da desordem, o valor do expoente crítico β diminui, enquanto com $\sigma_J = 0$ temos o valor já conhecido de $\beta = 1/8$. Este resultado indica que também há alteração na curva da magnetização próximo à transição de fase, em comparação com modelo ordenado.

5.5 Correlação e Comprimento de Correlação

Para obter a correlação utiliza-se a equação (2.28). O cálculo da correlação dentro da simulação é feita para diferentes valores de r , que representa a distância entre um spin e os spins aos quais se calcula a correlação. Na simulação, calculamos para cada temperatura a correlação em diferentes distâncias.

A imagem 5.12 apresenta o comportamento da correlação em função da distância para o caso anisotrópico de $\sigma_J = 0.2$ em que a temperatura de transição é $T_{c_i} = 0.987$. Para valores de temperatura se aproximando da transição de fase ocorre aumento da intensidade da correlação. Os comportamentos observados são comportamentos semelhantes ao que é esperado para o caso ordenado. Os pontos são os dados obtidos e as linhas são conexões entre os pontos para fins de visualização.

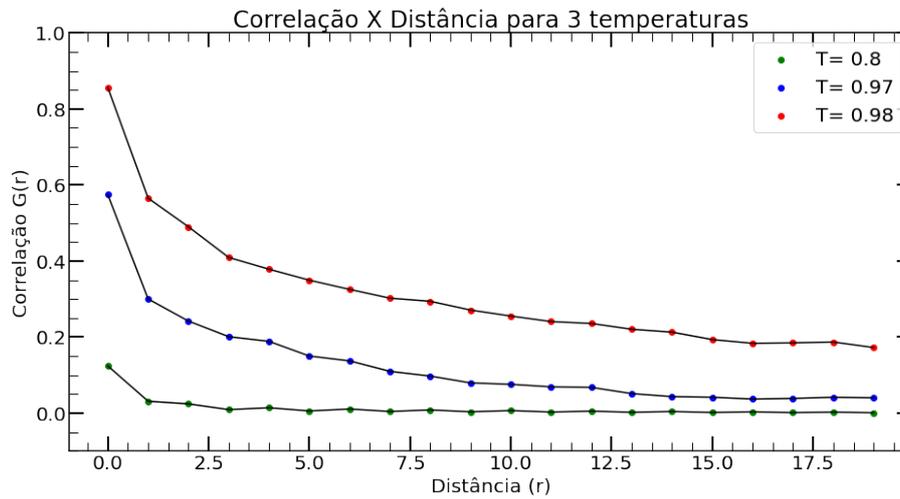


Figura 5.12: A correlação entre spin i e spins à uma distância r para três diferentes temperaturas, mostrando o aumento da correlação quando há aumento da temperatura.

5.6 Dimensão Fractal

Usando o método do Boxcounting medimos a dimensão fractal do sistema em diversos pontos de temperatura, para determinados valores de desordem. Estes dados permitem utilizar a equação 5.6 para obter o valor da dimensão fractal na transição de fase.

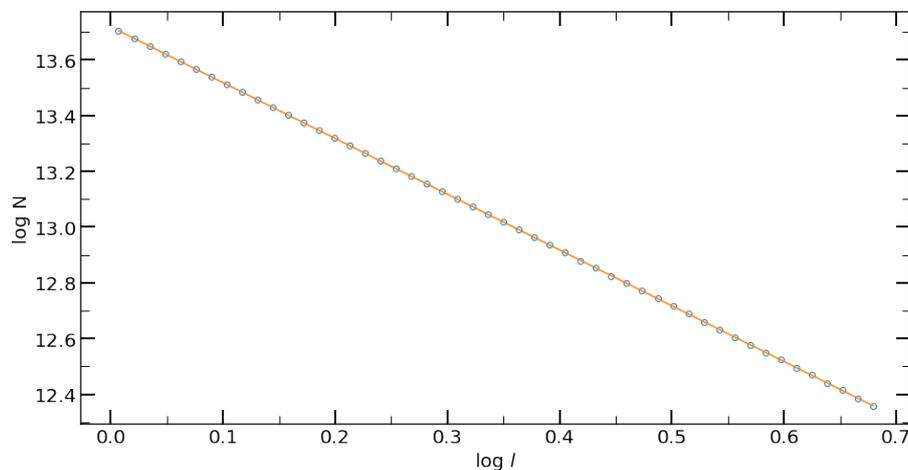


Figura 5.13: Gráfico do resultado do Boxcounting para uma grade de spins, com $\log(N)$ com N sendo o número de caixas, e $\log(l)$ com l sendo o tamanho das caixas. Os pontos são dados obtidos, e a linha a regressão linear.

A figura 5.13 mostra o resultado do método BoxCounting para uma rede à uma dada temperatura ($T = 0.8T_{c_0}$). Note que nesta configuração e notando que o valor l se direciona à zero, estamos utilizando a equação 2.1 para obter o valor da dimensão fractal, a qual é obtida pelo valor do coeficiente angular da reta ajustada. Novamente, o ajuste foi feito utilizando a biblioteca scipy.

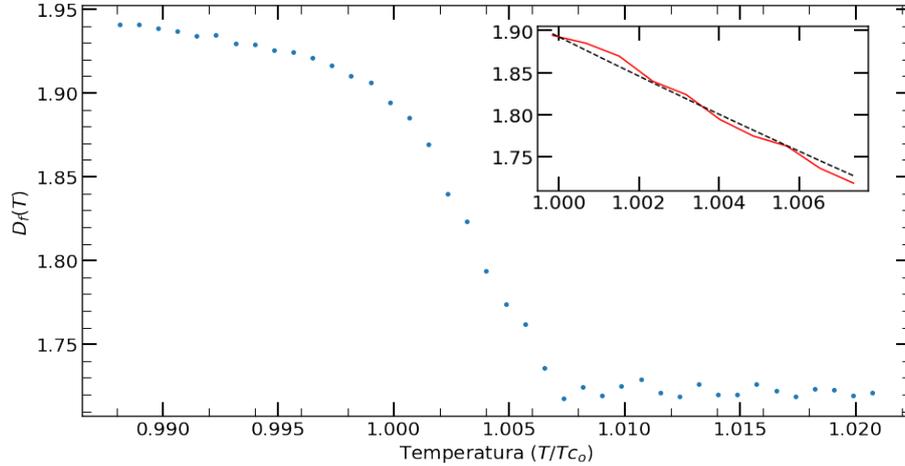


Figura 5.14: Gráfico da dimensão fractal em função da temperatura, para caso $\sigma_J = 0.0$ com ajuste da curva dada por 5.6, com os valores: $d_f = 1.752 \pm 0.009$.

A figura 5.14 mostra o comportamento da curva da função proposta em função da temperatura para o caso em que $\sigma_J = 0,0$. Seu valor diminui com o aumento da temperatura até atingir valor constante após transição. Portanto, propomos a seguinte equação para o ajuste de curva próximo da transição:

$$D_f(T) = d_f + a(T - T_{c_i}) + b(T - T_{c_i})^2 + \mathcal{O}(3) \quad (5.6)$$

Com o ajuste dado pela equação 5.6 conseguimos obter o valor da dimensão fractal quando a temperatura atinge a temperatura crítica, obtida pela magnetização. Esta sequência de passos foi realizada para outros valores de desordem, e os valores obtidos são apresentados na tabela e no gráfico abaixo. Reforço que medir dimensões fractais somente faz sentido no ponto crítico.

Desvio Padrão (σ_J)	D_f	R^2
0.00	1.752	0.99
0.10	1.739	0.99
0.20	1.737	0.99
0.30	1.727	0.99
0.40	1.743	0.99
0.50	1.721	0.99
0.60	1.732	0.99

Tabela 5.3: Tabela de valores de dimensões fractal para respectivos valores de desordem

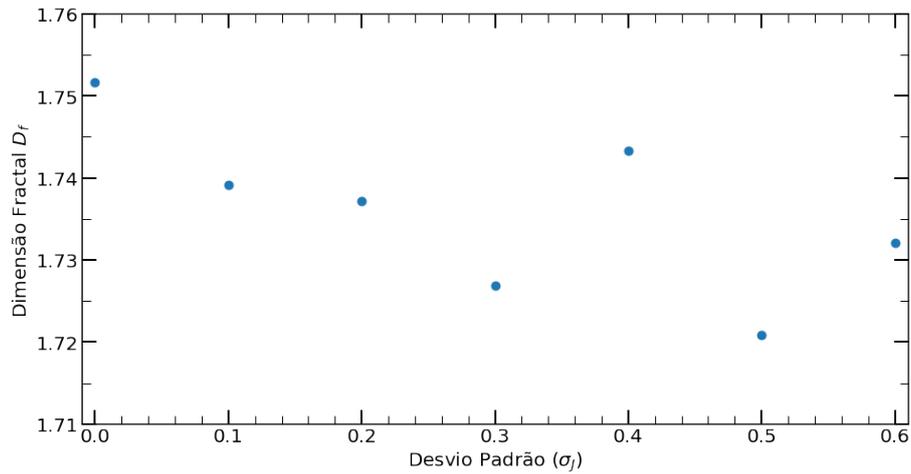


Figura 5.15: Valores de dimensão fractal em função da desordem para seis valores de σ_J .

O gráfico 5.15 mostra que a dimensão fractal, medida via boxcounting, apresenta tendência à diminuir valor, com exceção para $\sigma_J = 0.4$ que teve seu valor fora da tendência geral. O valor da dimensão fractal para o caso ordenado ($\sigma_J = 0$) foi o mesmo encontrado em [34]. Também mostra que com o aumento da desordem a dimensão fractal aparenta não seguir uma curva precisa.

Mostra-se desta forma que a fractalidade que caracteriza a dimensão fractal no ponto crítico é afetada pela intensidade da desordem. Isto significa que os valores médios e desvios dos acoplamentos da rede altera a formação dos spin.

Capítulo 6

Conclusão

Simulações do modelo de Ising com acoplamento seguindo probabilidade gaussiana foram realizadas, representando um sistema desordenado e investigando as alterações com o aumento da desordem. As simulações foram desenvolvidas utilizando API CUDA, proporcionando aumento no tamanho do sistema e diminuição no tempo de simulação.

Objetivamos medir magnetização para obtenção de expoentes críticos e valores de temperatura de transição, verificar o comportamento da correlação, e dimensão fractal do sistema em diferentes intensidades de desordem em situação de transição de fase. Primeiro descobrimos que a temperatura crítica é alterada com o aumento da desordem, de forma que medimos as temperaturas críticas para cada desvio e propomos a equação 5.5 que descreve a diminuição exponencial.

Ajustando a magnetização em função da temperatura, obtivemos também valores de β , e mostramos na figura 5.11 e tabela 5.4 que o aumento do desvio padrão altera o valor deste expoente crítico.

A correlação foi estudada apenas quanto a seu comportamento, onde mostramos que o decaimento exponencial com a distância prevalece com o aumento da desordem, e que ao se aproximar da transição ocorrem correlações mais intensas, tanto correlação com spins próximos quanto distantes. Quanto a correlação, são necessários mais estudos para realizar ajustes que descrevam corretamente o comportamento, assim como detalhes sobre expoentes críticos e dimensões fractais, tal qual em outros trabalhos do grupo.

Utilizando método de Boxcounting, medimos a dimensão fractal em função da temperatura para diferentes valores de desvio padrão. A equação 5.6 serviu como função de ajuste para encontrar o valor da dimensão fractal em situação de transição. Desta forma, a tabela 5.6 e o gráfico 5.15 mostram que a geometria do sistema se altera na transição com a alteração do desvio padrão.

Portanto, o trabalho apresenta resultados a respeito do modelo de Ising desordenado, comparando resultados para sistemas isotrópicos. Os resultados mostram alteração de expoente crítico e geometria do sistema em relação aumento da desordem.

Considerações são feitas a respeito da correlação já que não mostramos a con-

sequência do aumento da desordem nesta medida. Isso se deu ao fato de não estabelecermos uma forma teórica de como a desordem afetaria a dimensão fractal, e assim não pudemos relacionar dimensão fractal com expoente de Fisher para o caso desordenado.

Nosso objetivo é continuar nossos estudos e poder determinar o expoente de Fisher para sistemas desordenados da mesma forma que fizemos para sistemas isotrópicos. Uma das questões a ser resolvida é se a relaxação para os estados de equilíbrio é normal ou anômala [180, 181]

Bibliografia

- [1] Benoit Mandelbrot. How long is the coast of Britain? statistical self-similarity and fractional dimension. *Science*, 156:636–638, 1967.
- [2] A. L. Barabási and H. E. Stanley. *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [3] Soumya Ranjan Nayak, Jibitesh Mishra, and Gopinath Palai. Analysing roughness of surface through fractal dimension: A review. *Image and Vision Computing*, 89:21–34, 2019.
- [4] Fernando A. Oliveira, Rogelma M. S. Ferreira, Luciano C. Lapas, and Mendeli H. Vainstein. Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, 7:18, 2019.
- [5] Sílvia R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. 2 edition, 2005.
- [6] Márcio S. Gomes-Filho, Luciano Lapas, Ewa Gudowska-Nowak, and Fernando A. Oliveira. Fluctuation-dissipation relations from a modern perspective, 2023.
- [7] H Falk and Ludwig W Bruch. Susceptibility and fluctuation. *Physical Review*, 180(2):442, 1969.
- [8] Pedro D. Pinto, Fernando A. Oliveira, and André L. A. Penna. Thermodynamics aspects of noise-induced phase synchronization. *Phys. Rev. E*, 93:052220, May 2016.
- [9] Pedro Dias Pinto. *Termodinâmica e criticalidade dos estados de sincronização de osciladores de fase acoplados*. PhD thesis, Biblioteca Central da UNB.
- [10] Pedro D Pinto, Andre LA Penna, and Fernando A Oliveira. Critical behavior of noise-induced phase synchronization. *EPL (Europhysics Letters)*, 117(5):50009, 2017.
- [11] Jayara SD Oliveira and Pedro D Pinto. Efeitos de ruído na sincronização de osciladores globalmente acoplados. *Pesquisare-A Revista Eletrônica da UFOB*, 1(1):46–46, 2017.
- [12] Samuel Frederick Edwards and D. R. Wilkinson. The surface statistics of a granular aggregate. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 381(1780):17–31, 1982.
- [13] Mehran Kardar, Giorgio Parisi, and Yi-Cheng Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 56:889–892, Mar 1986.

- [14] Bernardo A. Mello, Alaor S. Chaves, and Fernando A. Oliveira. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. *Phys. Rev. E*, 63:041113, Mar 2001.
- [15] J. A. Cordeiro, M. V. B. T. Lima, R. M. Dias, and F. A. Oliveira. Morphology of growth by random walk deposition. *Physica A*, 295:209, 2001.
- [16] Sidiney G Alves, Tiago J Oliveira, and Silvio C Ferreira. Non-universal parameters, corrections and universality in Kardar–Parisi–Zhang growth. *J. Stat. Mech. Theory Exp.*, 2013(05):P05007, 2013.
- [17] Washington S Alves, Evandro A Rodrigues, Henrique A Fernandes, Bernardo A Mello, Fernando A Oliveira, and Ismael V. L. Costa. Analysis of etching at a solid-solid interface. *Phys. Rev. E*, 94(4):042119, 2016.
- [18] Waldenor P. Gomes, André L. A. Penna, and Fernando A. Oliveira. From cellular automata to growth dynamics: The Kardar-Parisi-Zhang universality class. *Phys. Rev. E*, 100:020101, Aug 2019.
- [19] Evandro A Rodrigues, Bernardo A Mello, and Fernando A Oliveira. Growth exponents of the etching model in high dimensions. *J. Phys. A*, 48(3):35001–35012, 2015.
- [20] E.A. Rodrigues, F.A. Oliveira, and B.A. Mello. On the existence of an upper critical dimension for systems within the kpz universality class. *Acta Physica Polonica B*, 46(6):1231, 2015.
- [21] B. A. Mello. A random rule model of surface growth. *Physica A*, 419:762–767, February 2015.
- [22] I. S. S. Carrasco and T. J. Oliveira. Kardar-Parisi-Zhang growth on one-dimensional decreasing substrates. *Phys. Rev. E*, 98:010102, Jul 2018.
- [23] Joachim Krug, Paul Meakin, and Timothy Halpin-Healy. Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media. *Physical Review A*, 45(2):638, 1992.
- [24] Joachim Krug. Origins of scale invariance in growth processes. *Adv. Phys.*, 46(2):139–282, 1997.
- [25] Bernard Derrida and Joel L Lebowitz. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Physical Review Letters*, 80(2):209, 1998.
- [26] Paul Meakin, P Ramanlal, Leonard Michael Sander, and RC Ball. Ballistic deposition on surfaces. *Physical Review A*, 34(6):5091, 1986.
- [27] E Daryaei. Universality and crossover behavior of single-step growth models in $1+1$ and $2+1$ dimensions. *Physical Review E*, 101(6):062108, 2020.
- [28] Alex Hansen, Jean Schmittbuhl, G George Batrouni, and Fernando A de Oliveira. Normal stress distribution of rough surfaces in contact. *Geophys. Res. Lett.*, 27(22):3639–3642, 2000.
- [29] Evandro A Rodrigues, Edwin E Mozo Luis, Thiago A de Assis, and Fernando A Oliveira. Universal scaling relations for growth phenomena. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2024(1):013209, jan 2024.

- [30] Márcio S. Gomes-Filho, André L.A. Penna, and Fernando A. Oliveira. The Kardar-Parisi-Zhang exponents for the 2+1 dimensions. *Results in Physics*, 26:104435, 2021.
- [31] Edwin E Mozo Luis, Thiago A de Assis, and Fernando A Oliveira. Unveiling the connection between the global roughness exponent and interface fractal dimension in ew and kpz lattice models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2022(8):083202, aug 2022.
- [32] Edwin E. Mozo Luis, Fernando A. Oliveira, and Thiago A. de Assis. Accessibility of the surface fractal dimension during film growth. *Phys. Rev. E*, 107:034802, Mar 2023.
- [33] Pablo M. Amorim, Edwin E. Mozo Luis, Fernando F. Dall’Agnol, and Thiago A. de Assis. Role of finite probe size in measuring growth exponent in film deposition. *Journal of Applied Physics*, 133(23):235304, 06 2023.
- [34] Henrique A. Lima, Edwin E. Mozo Luis, Ismael S. S. Carrasco, Alex Hansen, and Fernando A. Oliveira. A geometrical interpretation of critical exponents, 2024.
- [35] A. Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Ann. Phys.*, 17:549, 1905.
- [36] A. Einstein. *Investigations on the theory of the Brownian Movement*. Dover, New York, 1956.
- [37] Ewa Gudowska-Nowak, Katja Lindenberg, and Ralf Metzler. Preface: Marian Smoluchowski’s 1916 paper—a century of inspiration. *J. Phys. A*, 50(38):380301, 2017.
- [38] P. Langevin. Sur la theorie du mouvement Brownien. *Comptes Rendus*, 146:530, 1908.
- [39] M. H. Vainstein, I. V. L. Costa, and F. A. Oliveira. Mixing, ergodicity and the fluctuation-dissipation theorem in complex systems. In M. C. Miguel and M. Rubí, editors, *Jamming, Yielding, and Irreversible Deformation in Condensed Matter*, volume 688 of *Lecture Notes in Phys.*, pages 159–188. Springer Berlin / Heidelberg, 2006.
- [40] Rogerio CC Leite, Robert S Moore, and Sergio PS Porto. Use of a gas laser in studies of the depolarization of the Rayleigh scattering from simple liquids. *The Journal of Chemical Physics*, 40(12):3741–3742, 1964.
- [41] AF Penna, A Chaves, P da R Andrade, and Sergio PS Porto. Light scattering by lithium tantalate at room temperature. *Physical Review B*, 13(11):4907, 1976.
- [42] Rudolph A Marcus. Exchange reactions and electron transfer reactions including isotopic exchange. theory of oxidation-reduction reactions involving electron transfer. part 4.—a statistical-mechanical basis for treating contributions from solvent, ligands, and inert salt. *Discussions of the Faraday Society*, 29:21–31, 1960.

- [43] F. A. Oliveira. Time-reversal symmetry in light scattering by excitations in a film. *Solid State Commun.*, 40:859–861, 1981.
- [44] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light*. Oxford University Press, New York, 2000.
- [45] M. B. L. Santos, E. A. Oliveira, and A. M. F. Neto. Rayleigh scattering of a new lyotropic nematic liquid crystal system: crossover of propagative and diffusive behavior. *Liq. Cryst.*, 27:1485, 2000.
- [46] F. Benmouna, B. Peng, J. Gapinski, A. Patkowski, J. Ruhe, and D. Johannsmann. Dynamic light scattering from liquid crystal polymer brushes swollen in a nematic solvent. *Liq. Cryst.*, 28:1353, 2001.
- [47] FA Oliveira, MG Cottam, and DR Tilley. Green functions, power spectra, and raman scattering of thin film polaritons. *Physica Status Solidi (b)*, 107(2):737–747, 1981.
- [48] A. Rahman, K. S. Singwi, and A. Sjölander. Stochastic model of a liquid and cold neutron scattering. II. *Phys. Rev.*, 126:997–1004, May 1962.
- [49] Renat M. Yulmetyev, Anatolii V. Mokshin, and Peter Hänggi. Diffusion time-scale invariance, randomization processes, and memory effects in Lennard-Jones liquids. *Phys. Rev. E*, 68:051201, Nov 2003.
- [50] J. Florencio and M. H. Lee. Exact time evolution of a classical harmonic-oscillator chain. *Phys. Rev. A*, 31:3231, 1985.
- [51] J. A. Odell and M. A. Taylor. Dynamics and thermomechanical stability of DNA in solution. *Biopolymers*, 34:1483, 1994.
- [52] R. Toussaint, G. Helgesen, and E. G. Flekkøy. Dynamic roughening and fluctuations of dipolar chains. *Phys. Rev. Lett.*, 93:108304, 2004.
- [53] T. P. Doerr and P. L. Taylor. Breaking in polymer chains. i. the harmonic chain. *The Journal of Chemical Physics*, 101(11):10107–10117, 1994.
- [54] F. A. Oliveira and P. L. Taylor. Breaking in polymer chains. II. The Lennard-Jones chain. *J. Chem. Phys.*, 101(11):10118–10125, 1994.
- [55] F. A. OLIVEIRA. Dynamical scaling of anharmonic lattices at the onset of fracture. *Modern Physics Letters B*, 09(01):31–38, 1995.
- [56] F. A. Oliveira and J. A. Gonzalez. Bond-stability criterion in chain dynamics. *Phys. Rev. B*, 54:3954–3958, Aug 1996.
- [57] F. A. Oliveira. Transition-state analysis for fracture nucleation in polymers: The Lennard-Jones chain. *Phys. Rev. B*, 57:10576–10582, May 1998.
- [58] J. A. Gonzalez and F. A. Oliveira. Nucleation theory, the escaping processes, and nonlinear stability. *Phys. Rev. B*, 59:6100, 1999.
- [59] F. A. Oliveira. Dynamical renormalization of anharmonic lattices at the onset of fracture: Analytical results for scaling, noise, and memory. *Phys. Rev. B*, 52:1009, 1995.

- [60] Armando M. Maroja, Fernando A. Oliveira, Michał Cieřła, and Lech Longa. Polymer fragmentation in extensional flow. *Phys. Rev. E*, 63:061801, May 2001.
- [61] Cristiano L. Dias, Martin Dubé, Fernando A. Oliveira, and Martin Grant. Scaling in force spectroscopy of macromolecules. *Phys. Rev. E*, 72:011918, Jul 2005.
- [62] Anirban Sain, Cristiano L. Dias, and Martin Grant. Rupture of an extended object: A many-body Kramers calculation. *Phys. Rev. E*, 74:046111, Oct 2006.
- [63] DL Azevedo, Kleber AT da Silva, PW Mauriz, GM Viswanathan, and FA Oliveira. Fractal behavior of poly (GC) and poly (TA) DNA segments arranged in quasiperiodic fibonacci sequence. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 445:27–34, 2016.
- [64] Jing-Dong Bao. Transport in a flashing ratchet in the presence of anomalous diffusion. *Phys. Lett. A*, 314(3):203 – 208, 2003.
- [65] J. D. Bao, Y. Z. Zhuo, F. A. Oliveira, and P. Hänggi. Intermediate dynamics between Newton and Langevin. *Phys. Rev. E*, 74:061111, 2006.
- [66] Q Qiu, X-Y Shi, and J-D Bao. Mixed nonergodicity of a forced system and its non-stationary strength. *EPL (Europhysics Letters)*, 128(2):20005, 2019.
- [67] Jeppe C. Dyre and Thomas B. Schröder. Universality of AC conduction in disordered solids. *Rev. Mod. Phys.*, 72:873–892, Jul 2000.
- [68] F. A. Oliveira, R. Morgado, A. Hansen, and J. M. Rubí. Superdiffusive conduction: AC conductivity with correlated noise. *Physica A*, 357:115–121, 2005.
- [69] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7:284, 1940.
- [70] F. A. Oliveira. Reaction rate theory for non-Markovian systems. *Physica A*, 257:128, 1998.
- [71] P. Hänggi and H. Thomas. Time evolution, correlations, and linear response of non-Markov processes. *Z. Physik B*, 26:85, 1977.
- [72] Peter Hänggi, Peter Talkner, and Michal Borkovec. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers. *Rev. Mod. Phys.*, 62:251–341, Apr 1990.
- [73] S. Boccaletti, J. Kurths, G. Osipov, D. L. Valladares, and C. S. Zhou. The synchronization of chaotic systems. *Phys. Rep.*, 366:1–101, 2002.
- [74] L. Longa, E. M. F. Curado, and F. A. Oliveira. Roundoff-induced coalescence of chaotic trajectories. *Phys. Rev. E*, 54:R2201, 1996.
- [75] Amos Maritan and Jayanth R Banavar. Chaos, noise, and synchronization. *Physical Review Letters*, 72(10):1451, 1994.
- [76] M. Cieřła, S. P. Dias, L. Longa, and F. A. Oliveira. Synchronization induced by Langevin dynamics. *Phys. Rev. E*, 63:065202, May 2001.

- [77] Grigory V Osipov, Jürgen Kurths, and Changsong Zhou. *Synchronization in oscillatory networks*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [78] R. Morgado, M. Cieřła, L. Longa, and F. A. Oliveira. Synchronization in the presence of memory. *Europhys. Lett.*, 79:10002, 2007.
- [79] Juergen Siepmann and Florence Siepmann. Modeling of diffusion controlled drug delivery. *Journal of Controlled Release*, 161(2):351 – 362, 2012. Drug Delivery Research in Europe.
- [80] Márcio Sampaio Gomes Filho, Fernando Albuquerque Oliveira, and Marco Aurélio Alves Barbosa. A statistical mechanical model for drug release: Investigations on size and porosity dependence. *Physica A*, 460(C):29–37, 2016.
- [81] Maxime Ignacio, Mykyta V Chubynsky, and Gary W Slater. Interpreting the Weibull fitting parameters for diffusion-controlled release data. *Physica A*, 486:486–496, 2017.
- [82] Kulveer Singh, Soumitra Satapathi, and Prateek K Jha. “Ant-wall” model to study drug release from excipient matrix. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 519:98 – 108, 2019.
- [83] Constantin Mircioiu, Victor Voicu, Valentina Anuta, Andra Tudose, Christian Celia, Donatella Paolino, Massimo Fresta, Roxana Sandulovici, and Ion Mircioiu. Mathematical modeling of release kinetics from supramolecular drug delivery systems. *Pharmaceutics*, 11(3):140, 2019.
- [84] Márcio Sampaio Gomes-Filho, Marco Aurélio Alves Barbosa, and Fernando Albuquerque Oliveira. A statistical mechanical model for drug release: Relations between release parameters and porosity. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 540:123165, 2020.
- [85] Yikun Yang, Xiaoyin Qiao, Ruiying Huang, Haoxiang Chen, Xuelei Shi, Jian Wang, Weihong Tan, and Zhikai Tan. E-jet 3d printed drug delivery implants to inhibit growth and metastasis of orthotopic breast cancer. *Biomaterials*, 230:119618, 2020.
- [86] Márcio Sampaio Gomes-Filho, Fernando Albuquerque Oliveira, and Marco Aurélio Alves Barbosa. Modeling the diffusion-erosion crossover dynamics in drug release. *Phys. Rev. E*, 105:044110, Apr 2022.
- [87] R Dean Astumian and Martin Bier. Fluctuation driven ratchets: molecular motors. *Physical Review Letters*, 72(11):1766, 1994.
- [88] Fábio D A Aarão Reis. Diffusion on regular random fractals. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 29(24):7803, dec 1996.
- [89] Ralf Metzler, Eli Barkai, and Joseph Klafter. Anomalous diffusion and relaxation close to thermal equilibrium: A fractional Fokker-Planck equation approach. *Phys. Rev. Lett.*, 82(18):3563, 1999.
- [90] R. Metzler and J. Klafter. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37:161, 2004.

- [91] Jing-Dong Bao and Yi-Zhong Zhuo. Ballistic diffusion induced by a thermal broadband noise. *Phys. Rev. Lett.*, 91:138104, Sep 2003.
- [92] F. A. Oliveira, R. Morgado, C. Dias, G. G. Batrouni, and A. Hansen. Comment on “Nonstationarity Induced by Long-Time Noise Correlations in the Langevin Equation”. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5839, 2001.
- [93] F. A. Oliveira, R. Morgado, M. V. B. T. Lima, B. A. Mello, A. Hansen, and G. G. Batrouni. Comment on “Dynamical foundations of nonextensive statistical mechanics”. *Phys. Rev. Lett.*, 90:218901, 2003.
- [94] R. Morgado, F. A. Oliveira, G. G. Batrouni, and A. Hansen. Relation between anomalous and normal diffusion in systems with memory. *Phys. Rev. Lett.*, 89:100601, 2002.
- [95] J. M. Sancho, A. M. Lacasta, K. Lindenberg, I. M. Sokolov, and A. H. Romero. Diffusion on a solid surface: Anomalous is normal. *Phys. Rev. Lett.*, 92:250601, Jun 2004.
- [96] Marcel VS Santos, Cássia C Donato, Ismael VL Costa, and Fernando A Oliveira. A numerical study for non-stationary anomalous diffusion considering non-inversive velocity correlation functions. *Journal of Computational Interdisciplinary Sciences*, 1(2):113–117, 2009.
- [97] Luciano C. Lapas, Rafael Morgado, Mendeli H. Vainstein, J. Miguel Rubí, and Fernando A. Oliveira. Khinchin theorem and anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, 101:230602, Dec 2008.
- [98] Aleksander Weron and Marcin Magdziarz. Generalization of the Khinchin theorem to Lévy flights. *Phys. Rev. Lett.*, 105:260603, Dec 2010.
- [99] Felix Thiel, Franziska Flegel, and Igor M. Sokolov. Disentangling sources of anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, 111:010601, Jul 2013.
- [100] C. C. Y. Dorea and A. V. Medino. Anomalous diffusion index for Lévy motions. *J. Stat. Phys.*, 123:685, 2006.
- [101] Scott A McKinley and Hung D Nguyen. Anomalous diffusion and the generalized Langevin equation. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 50(5):5119–5160, 2018.
- [102] Maike AF dos Santos. Analytic approaches of the anomalous diffusion: A review. *Chaos, Solitons & Fractals*, 124:86–96, 2019.
- [103] M. H. Vainstein, L. C. Lapas, and F. A. Oliveira. Anomalous diffusion. *Acta Physica Polonica B*, 39, 2008.
- [104] I. Santamaría-Holek, A. Pérez-Madrid, and J. M. Rubí. Local quasi-equilibrium description of slow relaxation systems. *J. Chem. Phys.*, 120:2818, 2004.
- [105] I. Santamaría-Holek, J. M. Rubí, and A. Gadomski. Thermokinetic approach of single particles and clusters involving anomalous diffusion under viscoelastic response. *J. Phys. Chem. B*, 111:2293, 2007.

- [106] I. Santamaría-Holek, M.H. Vainstein, J.M. Rubí, and F.A. Oliveira. Protein motors induced enhanced diffusion in intracellular transport. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 388(8):1515–1520, 2009.
- [107] F. D. A. Aarão Reis, D. Bolster, and V. R. Voller. Anomalous behaviors during infiltration into heterogeneous porous media. *Adv. Water Resour.*, 113:180–188, 2018.
- [108] C.C. Donato, F.A. Oliveira, and M.A.F. Gomes. Anomalous diffusion on crumpled wires in two dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 368(1):1 – 6, 2006.
- [109] F. A. Oliveira, B. A. Mello, and I. M. Xavier. Scaling transformation of random walk distributions in a lattice. *Phys. Rev. E*, 61:7200, 2000.
- [110] Harry Nyquist. Thermal agitation of electric charge in conductors. *Physical Review*, 32(1):110, 1928.
- [111] John Bertrand Johnson. Thermal agitation of electricity in conductors. *Physical Review*, 32(1):97, 1928.
- [112] Hidetosi Takahashi. Generalized theory of thermal fluctuations. *Journal of the Physical Society of Japan*, 7(5):439–446, 1952.
- [113] Ryogo Kubo. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 12(6):570–586, 1957.
- [114] Ryogo Kubo, Mario Yokota, and Sadao Nakajima. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 12(11):1203–1211, 1957.
- [115] Herbert B. Callen and Theodore A. Welton. Irreversibility and generalized noise. *Phys. Rev.*, 83:34–40, Jul 1951.
- [116] H. B. Callen and R. F. Greene. On a theorem of irreversible thermodynamics. *Phys. Rev.*, 86:702, 1952.
- [117] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes I. *Phys. Rev.*, 37:405, 1931.
- [118] I. V. L. Costa, R. Morgado, M. V. B. T. Lima, and F. A. Oliveira. The fluctuation-dissipation theorem fails for fast superdiffusion. *Europhys. Lett.*, 63:173, 2003.
- [119] Uli Dekker and Fritz Haake. Fluctuation-dissipation theorems for classical processes. *Physical Review A*, 11(6):2043, 1975.
- [120] R. Kubo. Response, relaxation and fluctuation. In G. Kirczenow and J. Marro, editors, *Transport Phenomena. Lecture Notes in Phys.*, volume 31, pages 74–124, Berlin, Heidelberg, 1974. Springer-Verlag.
- [121] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical Physics II*. Springer, Berlin, 1991.

- [122] David Ruelle. General linear response formula in statistical mechanics, and the fluctuation-dissipation theorem far from equilibrium. *Physics Letters A*, 245(3-4):220–224, 1998.
- [123] R. Zwanzig. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, New York, 2001.
- [124] Udo Seifert. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines. *Reports on Progress in Physics*, 75(12):126001, 2012.
- [125] Bartłomiej Dybiec, Juan M. R. Parrondo, and Ewa Gudowska-Nowak. Fluctuation-dissipation relations under Lévy noises. *EPL*, 98(5):50006, 2012.
- [126] Łukasz Kuśmierz, Bartłomiej Dybiec, and Ewa Gudowska-Nowak. Thermodynamics of superdiffusion generated by Lévy-Wiener fluctuating forces. *Entropy*, 20:658, 2018.
- [127] Łukasz Kuśmierz, J Miguel Rubi, and Ewa Gudowska-Nowak. Heat and work distributions for mixed Cauchy-Gauss process. *J. Stat. Mech. Theory and Experiment*, 2014(9):P09002, 2014.
- [128] Ewa Gudowska-Nowak, Fernando A. Oliveira, and Horacio Sergio Wio. Editorial: The fluctuation-dissipation theorem today. *Frontiers in Physics*, 10, 2022.
- [129] Umberto Marini Bettolo Marconi, Andrea Puglisi, Lamberto Rondoni, and Angelo Vulpiani. Fluctuation–dissipation: response theory in statistical physics. *Physics Reports*, 461(4-6):111–195, 2008.
- [130] A Sarracino and A Vulpiani. On the fluctuation-dissipation relation in non-equilibrium and non-hamiltonian systems. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 29(8):083132, 2019.
- [131] Mathias Winkler, Magnus Aa Gjennestad, Dick Bedeaux, Signe Kjelstrup, Raffaella Cabriolu, and Alex Hansen. Onsager-symmetry obeyed in athermal mesoscopic systems: Two-phase flow in porous media. *Frontiers in Physics*, 8:60, 2020.
- [132] G. N. Bochkov and Yu. E. Kuzovlev. General theory of thermal fluctuations in nonlinear systems. *Sov. Phys. JETP*, 45:125, 1977.
- [133] G. N. Bochkov and Yu. E. Kuzovlev. Nonlinear fluctuation-dissipation relations and stochastic models in nonequilibrium thermodynamics : I. Generalized fluctuation-dissipation theorem. *Physica A*, 106:443–479, 1981.
- [134] C. Jarzynski. Nonequilibrium equality for free energy differences. *Phys. Rev. Lett.*, 78(14):2690–2693, Apr 1997.
- [135] Christopher Jarzynski. Hamiltonian derivation of a detailed fluctuation theorem. *Journal of Statistical Physics*, 98(1-2):77–102, 2000.
- [136] Gavin E Crooks. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Physical Review E*, 60(3):2721, 1999.

- [137] O-P Saira, Y Yoon, T Tanttu, Mikko Möttönen, DV Averin, and Jukka P Pekola. Test of the Jarzynski and Crooks fluctuation relations in an electronic system. *Physical Review Letters*, 109(18):180601, 2012.
- [138] Miguel A Rodríguez and Horacio S Wio. Stochastic entropies and fluctuation theorems for a discrete one-dimensional Kardar-Parisi-Zhang system. *Physical Review E*, 100(3):032111, 2019.
- [139] A Barrat. Monte Carlo simulations of the violation of the fluctuation-dissipation theorem in domain growth processes. *Physical Review E*, 57(3):3629, 1998.
- [140] L. Bellon, L. Buisson, M. Ciccotti, S. Ciliberto, and F. Douarche. Thermal noise properties of two aging materials. cond-mat/0501324, 2005.
- [141] Ludovic Bellon and Sergio Ciliberto. Experimental study of the fluctuation dissipation relation during an aging process. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 168:325–335, 2002.
- [142] Andrea Crisanti and Felix Ritort. Violation of the fluctuation–dissipation theorem in glassy systems: basic notions and the numerical evidence. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(21):R181, 2003.
- [143] T. S. Grigera and N. E. Israeloff. Observation of fluctuation-dissipation-theorem violations in a structural glass. *Phys. Rev. Lett.*, 83:5038, 1999.
- [144] F. Ricci-Tersenghi, D. A. Stariolo, and J. J. Arenzon. Two time scales and violation of the fluctuation-dissipation theorem in a finite dimensional model for structural glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4473, 2000.
- [145] Kumiko Hayashi and Mitsunori Takano. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in a protein system. *Biophysical journal*, 93(3):895–901, 2007.
- [146] Agustin Pérez-Madrid, Luciano Calheiros Lapas, and J. Miguel Rubí. Heat exchange between two interacting nanoparticles beyond the fluctuation-dissipation regime. *Phys. Rev. Lett.*, 103:048301, Jul 2009.
- [147] Dmitri V. Averin and Jukka P. Pekola. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in time-dependent mesoscopic heat transport. *Phys. Rev. Lett.*, 104:220601, Jun 2010.
- [148] M. H. Vainstein, R. Morgado, F. A. Oliveira, F. A. B. F. de Moura, and M. D. Coutinho-Filho. Stochastic description of the dynamics of the random-exchange Heisenberg chain. *Phys. Lett. A*, 339:33–38, 2005.
- [149] M. H. Vainstein, R. Morgado, and F. A. Oliveira. Spatio-temporal conjecture for diffusion. *Physica A*, 357:109–114, 2005.
- [150] L. C. Lapas, I. V. L. Costa, M. H. Vainstein, and F. A. Oliveira. Entropy, non-ergodicity and non-gaussian behaviour in ballistic transport. *Europhys. Lett.*, 77:37004, 2007.
- [151] R. M. S. Ferreira, M. V. S. Santos, C. C. Donato, J. S. Andrade, and F. A. Oliveira. Analytical results for long-time behavior in anomalous diffusion. *Phys. Rev. E*, 86:021121, Aug 2012.

- [152] M. H. Lee. Why irreversibility is not a sufficient condition for ergodicity. *Phys. Rev. Lett.*, 98:190601, 2007.
- [153] Mehran Kardar. *Statistical physics of fields*. Cambridge University Press, 2007.
- [154] Cardy J. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, volume 5. 1996.
- [155] Márcio S. Gomes-Filho and Fernando A. Oliveira. The hidden fluctuation-dissipation theorem for growth. *EPL (Europhysics Letters)*, 133(1):10001, 2021.
- [156] Petrus H. R. dos Anjos, Márcio S. Gomes-Filho, Washington S. Alves, David L. Azevedo, and Fernando A. Oliveira. The fractal geometry of growth: Fluctuation–dissipation theorem and hidden symmetry. *Frontiers in Physics*, 9, 2021.
- [157] Márcio S. Gomes-Filho, Pablo de Castro, Danilo B. Liarte, and Fernando A. Oliveira. Restoring the fluctuation–dissipation theorem in kardar–parisi–zhang universality class through a new emergent fractal dimension. *Entropy*, 26(3), 2024.
- [158] Ernst Ising. *Beitrag zur theorie des ferro-und paramagnetismus*. PhD thesis, Grefe & Tiedemann Hamburg, Germany, 1924.
- [159] Stephen G. Brush. History of the lenz-ising model. *Review of Modern Physics*, 39(4):883–895, 1967.
- [160] Martin Niss. History of the lenz–ising model 1965–1971: the role of a simple model in understanding critical phenomena. *Archive for History of Exact Sciences*, 65:625–658, 2011.
- [161] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3 e 4):117, 1944.
- [162] W. P. Wolf. The ising model and real magnetic materials. *Brazilian Journal of Physics*, 30(4):794, 2000.
- [163] Isys F. Mello, Lucas Squillante, Gabriel O. Gomes, Antonio C. Seridonio, and Mariano de Souza. Epidemics, the ising-model and percolation theory: A comprehensive review focused on covid-19. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 573, 2021.
- [164] Henrique Alves de Lima. Redistribuição de renda como uma transição de fase em sistemas econômicos. Mestrado em física, Universidade de Brasília, Brasília, 2022.
- [165] Jonas M. B. Haslbeck, Sacha Epskamp, Maarten Marsman, and Lourens J. Waldorp. Interpreting the ising model: The input matters. *Multivariate Behavioral Research*, page 303, 2020.
- [166] Chin-Kun Hu. Historical review on analytic, monte carlo, and renormalization group approaches to critical phenomena of some lattice models. *Chinese Journal of Physics*, 52(1):1–76, 2014.

- [167] Larina Fernandez, E. Marinari, V. Martin-Mayor, Greg Parisi, and J. Ruiz-Lorenzo. Universal critical behavior of the two-dimensional ising spin glass. *Physical Review B*, 94, 07 2016.
- [168] David P. Landau Kurt Binder. *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. 3 edition, 2009.
- [169] Mark EJ Newman and Gerard T Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, 1999.
- [170] Cuda toolkit. <https://docs.nvidia.com/cuda/doc/index.html>. Accessed em: 2024-02-13.
- [171] Tobira Preis, Peter Virnau, and Johannes J. Schneider Wolfgang Paul. Gpu accelerated monte carlo simulation of 2d and 3d ising model. *Journal of Computational Physics*, 228:4468–4477, 2009.
- [172] Fernando Pérez, Brian E. Granger, and John D. Hunter. Python: An ecosystem for scientific computing. *Computing in Science Engineering*, 13(2):13–21, 2011.
- [173] Pauli Virtanen, Ralf Gommers, Travis E Oliphant, Matt Haberland, Tyler Reddy, David Cournapeau, Evgeni Burovski, Pearu Peterson, Warren Weckesser, Jonathan Bright, et al. Scipy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in python. *Nature methods*, 17(3):261–272, 2020.
- [174] Chouaib el Hachimi, Salwa Belaqziz, Saïd Khabba, and A. Chehbouni. Data science toolkit: An all-in-one python library to help researchers and practitioners in implementing data science-related algorithms with less effort. *Software Impacts*, 12:100240, 01 2022.
- [175] Numpy. <https://numpy.org>. Accessed: 2024-02-14.
- [176] Charles R Harris, K Jarrod Millman, Stéfan J Van Der Walt, Ralf Gommers, Pauli Virtanen, David Cournapeau, Eric Wieser, Julian Taylor, Sebastian Berg, Nathaniel J Smith, et al. Array programming with numpy. *Nature*, 585(7825):357–362, 2020.
- [177] Scipy. <https://scipy.org>. Accessed: 2024-02-14.
- [178] Numba. <https://numba.readthedocs.io/en/stable/user/overview.html>. Accessed: 2024-02-15.
- [179] Box counting in numpy. [urlhttps://francescoturci.net/2016/03/31/box-counting-in-numpy/](https://francescoturci.net/2016/03/31/box-counting-in-numpy/). Accessed 01/05/2023.
- [180] M. H. Vainstein, I. V. L. Costa, R. Morgado, and F. A. Oliveira. Non-exponential relaxation for anomalous diffusion. *Europhys. Lett.*, 73:726–732, 2006.
- [181] Luciano C Lapas, Rogelma MS Ferreira, J Miguel Rubí, and Fernando A Oliveira. Anomalous law of cooling. *J. Chem. Phys.*, 142(10):104106, 2015.