

JOÃO MARCOS BATISTA DE SOUZA MACIEL

**MÉTODO DE MONTE CARLO MICROCANÔNICO APLICADO AO
MODELO DO ANEL AUTO-GRAVITANTE**

Brasília
2011



Universidade de Brasília

MÉTODO DE MONTE CARLO MICROCANÔNICO APLICADO AO MODELO DO ANEL AUTO-GRAVITANTE

João Marcos Batista de Souza Maciel

Dissertação de mestrado do curso de pós-graduação *stricto sensu* em Física Teórica, orientada pelo
Dr. Marco A. Amato e coorientada pelo Dr. Anníbal D. Figueiredo Neto
e aprovada no dia 19 de agosto de 2011

UnB
Brasília
2011

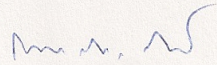
**“Método Monte Carlo Microcanônico aplicado ao modelo do
anel auto gravitante”**

Por

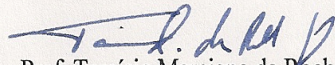
João Marco Batista de Souza Maciel

Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como
parte dos requisitos para a obtenção do grau de mestre em Física.

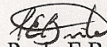
Aprovada por:



Prof. Marco Antônio Amato
IF/UnB



Prof. Tarcísio Marciano da Rocha Filho
IF/UnB



Prof. Paulo E Brito
FUP/UnB

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana
Coordenador de Pós-Graduação
Instituto de Física

“God used beautiful mathematics in creating the world”
Paul Dirac

*Aos meus pais Gercy e Eula,
à minha irmã Raquel
e à minha querida Jessyka*

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelas oportunidades que tem me oferecido, pela família, namorada e amigos que me deu e pela sabedoria concedida para entender sua criação.

Agradeço aos meus pais, Gercy e Eula, pelo exemplo de vida, pelo carinho, pela educação e disciplina desde o berço, pela dedicação e por todo o apoio e financiamento nos meus estudos. Devo a vocês tudo que consegui.

Agradeço ao meu orientador e professor Marco Amato pela paciência com o seu aprendiz, pela orientação, sabedoria e disciplina e pelas grandes ideias e pela confiança no meu trabalho desde a época de iniciação científica. Muito obrigado pelo apadrinhamento intelectual.

Agradeço aos professores Anníbal Dias Figueiredo Neto e Tarcísio Marciano Rocha Filho por discussões úteis ao trabalho. Também agradeço ao meu amigo Evandro Rodrigues por discussões úteis sobre informática, computação e programação.

Agradeço à minha namorada Jessyka, pelo apoio emocional, por estar sempre ao meu lado me ajudando e suportando e pela revisão de português desta dissertação. Amo-te.

Agradeço a toda a minha família por todo apoio que me deram nos meus estudos, em especial à minha avó, dona Maria pelo cuidado, paciência e sabedoria desde quando era pequeno até o presente.

Agradeço aos meus amigos pela torcida, encorajamento e apoio durante as lutas. Agradeço aos amigos de curso pela caminhada juntos, sempre um ajudando o outro.

Agradeço à CAPES pelo financiamento da pesquisa e ao Instituto de Física pela oportunidade concedida de cursar o mestrado na instituição.

Enfim, a todos que participaram diretamente ou indiretamente da execução deste trabalho os meus sinceros agradecimentos.

RESUMO

Na termodinâmica, o estudo dos sistemas com interações de longo alcance apresentam problemas não usuais e mais desafiadores do que aqueles associados à sistemas com interações de curto alcance. Isso é bem ilustrado pela existência de estados *quasi*-estacionários não-gaussianos, calor específico negativo de sistemas isolados e inequivalência dos ensembles. Uma interação é dita de longo alcance se, para longas distâncias, decai com $r^{-\alpha}$ sendo $\alpha \leq d$, onde d é a dimensão espacial. A razão para essa definição é que, mesmo no limite termodinâmico, tais sistemas não são aditivos. Exemplos de sistemas com interações de longo alcance são o modelo de Hamiltoniano de Campo Médio (HMF), plasmas não-neutros e Sistemas Auto-Gravitantes (SGS), estes serão objeto de estudo neste trabalho. O estudo de sistemas SGS tridimensionais é particularmente difícil e complicado. Um modelo simplificado chamado de modelo do Anel Auto-Gravitante (SGR) foi proposto com o intuito de possibilitar o estudo das características e do comportamento do problema gravitacional de muitos corpos. Esse modelo consiste em partículas interagindo por forças gravitacionais newtonianas tridimensionais, mas cujo movimento está confinado a uma circunferência. O modelo SGR mantém as características peculiares do problema tridimensional, possui uma fase com calor específico negativo e uma transição de fase. Para entender como o calor específico negativo surge, para um estado estacionário, o teorema do virial nos conduz à seguinte relação: $E = (\alpha - 2) K$ onde K é a energia cinética do sistema. Para o caso gravitacional $\alpha = 1$, portanto o calor específico é negativo para sistemas auto-gravitantes no equilíbrio do virial, uma vez que, no ensemble microcanônico, a temperatura é proporcional à energia cinética média do sistema. O problema gravitacional tem a dificuldade da divergência do potencial a curtas distâncias. Isto requer uma regularização no potencial para tais distâncias. Neste trabalho, ao invés de usar o parâmetro de *softening* usual para evitar a divergência a curtas distâncias, foi levado em conta o tamanho das partículas, introduzindo um potencial de partícula impenetrável. Para a execução dos cálculos foi empregado o uso do Método de Monte Carlo Microcanônico. Os resultados para a curva calórica e para o parâmetro de ordem do SGR são mostrados e revelam que a introdução do potencial de partícula impenetrável representa bem o equilíbrio do virial. Também gostaria de assinalar que as simulações de Monte Carlo foram implementadas com um algoritmo rápido.

ABSTRACT

In thermodynamics, the study of long-range interacting systems presents a plethora of unusual and challenging problems than those associated with short-range interacting systems. This fact is well illustrated by the existence of *quasi*-stationary non-gaussian states, negative specific heat of isolated systems and the inequivalence of ensembles. An interaction is long-ranged if it decays, for long distances, as $r^{-\alpha}$ with $\alpha \leq d$, where d is the spatial dimension. The reason for this definition is that, even in the thermodynamic limit, such systems are not additive. Examples of systems with long-range interactions are the Hamiltonian Mean Field (HMF), non-neutral plasmas and Self-Gravitating Systems (SGS), which will be the object of study in this work. The study of three-dimensional SGS are particularly heavy. A simplified model called Self-Gravitating Ring (SGR) model was proposed in order to understand the features and the behaviour of the gravitational many-body problem. It consists in particles interacting through the true newtonian three-dimensional forces, but whose movement are constrained to a ring. The SGR model maintains the peculiar features of the three-dimensional problem, showing a negative specific heat and a phase transition. In order to understand how the negative heat arises, for a stationary state, the virial theorem yields to $E = (\alpha - 2)K$ where K is the kinetic energy of the system. For the gravitational case $\alpha = 1$, thus the specific heat is negative for SGS in the virial equilibrium, once, in the microcanonical ensemble, and temperature is proportional to the average kinetic energy of the system. The gravitational problem has the difficulty of the short distances divergence in the potential. This requires a regularization in the potential. In this work, instead of using the usual softening parameter, we take into account the size of particle, introducing the hardcore potential to avoid the divergence at short distances. For performing the calculations we employed the Microcanonical Monte Carlo Simulation. The results for the caloric curve and for the order parameter of the SGR are shown and reveals that the introduction of the hardcore particles represents well the virial equilibrium. We also would like to point out that the Monte Carlo Simulations was implemented with a fast algorithm.

Errata

Página	Figura	Onde se lê	Leia-se
60	(4.4.1)	Interação	Iteração
61	(4.4.2a)	Interação	Iteração
61	(4.4.2b)	Interação	Iteração
62	(4.4.2c)	Interação	Iteração

Lista de Figuras

	<u>Página</u>
2.2.1 Gráfico comparativo do potencial gravitacional entre partículas impenetráveis e partículas penetráveis	31
2.3.1 Curva Calórica para o modelo simplificado de estrela binária.....	34
2.4.1 Geometria do Anel Auto-Gravitante	35
3.1 Relação Teoria – Experimento – Simulação	39
3.3.1 Teste gráfico de qualidade para gerador de números aleatórios de baixa qualidade.....	48
3.3.2 Teste gráfico de qualidade do gerador Ran2.....	49
4.1.1 Convergência do MMCM no tempo	60
4.1.2 Dependência da convergência do MMCM com relação ao número de partículas.....	61, 62
4.2.1 Curva calórica para o modelo SGR com partículas penetráveis.....	63
4.2.2 Curva calórica para o modelo SGR com partículas impenetráveis.....	64
4.3.1 Dependência da curva calórica com o número de partículas.....	66
4.3.2 Dependência da curva calórica com o número de células.....	68
4.4.1 Curvas calóricas renormalizadas para diferentes valores de espaço relativo ocupado no anel.....	70, 71
4.4.2 Dependência da curva calórica com relação ao espaço relativo ocupado no anel.....	72
4.4.3 Gráfico da energia de transição em função do espaço relativo ocupado no anel.....	73

4.4.4 Curva calórica com maior resolução na transição de fase	74
4.5.1 “Magnetização” para o SGR com partículas penetráveis.....	75
4.5.2 “Magnetização” para o SGR com partículas impenetráveis.....	77
4.5.3 Histograma da distribuição de partículas no anel preenchido por partículas impenetráveis.....	78
4.5.4 Histograma da distribuição de partículas no anel preenchido por partículas penetráveis.....	79
4.5.5 Ilustração da distribuição do equilíbrio do virial para o SGR com partículas rígidas.....	80
4.5.6 Ilustração da distribuição de equilíbrio para a fase halo com o anel preenchido por partículas penetráveis.....	80

Lista de Siglas e Abreviaturas

- HMF – Modelo Hamiltoniano de Campo Médio (*Hamiltonian Mean Field*)
- SGS – Sistema Auto-Gravitante (*Self-Gravitating System*)
- SGR – Anel Auto-Gravitante (*Self-Gravitating Ring*)
- SMC – Simulação de Monte Carlo
- MMCM – Método de Monte Carlo Microcanônico

Sumário

página

Introdução.....	01
1. Termodinâmica de sistemas com interações de longo alcance.....	04
1.1 Definição.....	05
1.2 Não-aditividade e Não-extensividade.....	06
1.3 Concavidade e estabilidade.....	10
1.4 Coexistência de fases.....	12
1.5 Inequivalência dos ensembles.....	13
2. Modelo do Anel Auto-Gravitante.....	21
2.1 Modelos Auto-Gravitantes.....	22
2.2 Divergência do potencial a curtas distâncias.....	27
2.3 Modelo simplificado: Estrela Binária.....	32
2.4 Modelo do Anel Auto-gravitante.....	35

3. Método de Monte Carlo Microcanônico.....	39
3.1 Média de ensemble e média de ensemble por amostragem.....	42
3.2 Cadeias de Markov e Princípio do Balanço Detalhado.....	44
3.3 Geradores de números pseudo-aleatórios.....	46
3.4 Algoritmo de Metrópolis.....	50
3.5 Algoritmo microcanônico.....	53
4. Resultados.....	58
4.1 Convergência do Método de Monte Carlo Microcanônico.....	59
4.2 Comparação entre as curvas calóricas para partículas penetráveis e para partículas rígidas.....	62
4.3 Dependência da curva calórica com relação à quantidade de partículas e células do sistema.....	66
4.4 Dependência da curva reescalada com relação ao espaço ocupado no anel.....	69
4.5 Parâmetro de ordem.....	74
Conclusões.....	81
Referências Bibliográficas.....	84
Apêndice A	88

Introdução

O estudo de sistemas termodinâmicos com interações de longo alcance apresentam problemas mais desafiadores do que os associados aos sistemas com interações de curto alcance. Tais sistemas tem a peculiaridade de serem não-extensivos e não-aditivos, razão pela qual seu comportamento ainda é pouco compreendido, como por exemplo a existência de estados *quasi*-estacionários não-gaussianos e a inequivalência entre os ensembles microcanônico e canônico [1]. Uma interação é dita de longo alcance se o potencial não decai suficientemente rápido para longas distâncias, dessa forma, a energia da partícula dependerá das outras que se encontram suficientemente distantes e no limite com $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$ a energia total divergirá [2]. Nesse caso, a energia total de um sistema não será mais somente a soma entre as energias internas de cada subsistema, porque a contribuição da interação entre os subsistemas não será negligenciável [1,2]. Para que o potencial decaia rapidamente e mantenha-se a aditividade da energia, para longas distâncias, o potencial deve decair proporcional a $r^{-\alpha}$ com α maior do que a dimensão espacial do sistema [1]. Dessa forma a contribuição da energia de interação entre os subsistemas pode ser negligenciada no limite termodinâmico [2].

O potencial gravitacional é um exemplo de interação de longo alcance. Para o caso de forças gravitacionais clássicas $V(r) \propto r^{-1}$ e, portanto, para $d \geq 1$ a força

gravitacional será de longo alcance, para qualquer dimensão espacial. Uma peculiaridade da força gravitacional é que o teorema do virial conduz ao seguinte resultado: $E \propto -T$ [3], onde T é a temperatura e E é a energia total. Sistemas que interagem por meio de forças gravitacionais tem calor específico negativo no equilíbrio do virial. Esse resultado se deve ao fato de que, diferentemente dos plasmas neutros, sistemas auto-gravitantes não possuem uma blindagem das interações, como a blindagem de Debye, por exemplo [4].

Existem muitos objetos no universo cujo comportamento pode ser entendido somente considerando as forças gravitacionais, como por exemplo aglomerados globulares e aglomerados de galáxias. A dificuldade central de estudar tais sistemas é que, além de serem não-extensivos e não aditivos, não atingem o equilíbrio termodinâmico, uma vez que o potencial gravitacional diverge a curtas distâncias e partículas podem evaporar desses sistemas [1]. O estudo da dinâmica e da estatística do problema gravitacional tridimensional é complicado e necessita uma regularização no potencial para evitar a divergência a curtas distâncias [1]. Alguns modelos simplificados foram propostos para tentar descrever o comportamento dos sistemas gravitacionais como por exemplo o modelo da folha gravitacional e o modelo do anel auto-gravitante. Este último será o objeto de estudo deste trabalho.

O modelo do anel auto-gravitante consiste em partículas que interagem por forças gravitacionais tridimensionais newtonianas, mas cujo movimento está confinado em um anel unidimensional [5]. Este modelo é interessante pois mantém as

peculiaridades da força gravitacional e apresenta uma transição de fase [6]. Este modelo tem sido estudado com partículas penetráveis, introduzindo-se um parâmetro de corte no potencial chamado de parâmetro de *softening*. Neste trabalho ao invés de partículas penetráveis, um potencial de partículas impenetráveis para evitar a divergência no potencial será introduzido.

Este modelo será estudado por simulações de Monte Carlo, pois não possui solução analítica. Sistemas gravitacionais encontram-se isolados, além disso a distribuição canônica não pode ser obtida a partir da distribuição microcanônica quando o sistema tiver interações de longo alcance, devido à falta de aditividade não pode-se considerar o sistema dividido em duas partes: sistema e banho térmico. Por isso faz-se necessário o uso de um algoritmo microcanônico, ao invés do algoritmo canônico convencional. Esse algoritmo será apresentado no capítulo 3.

Esta dissertação está organizada como da seguinte forma: No capítulo 1 será discutida a termodinâmica de sistemas com interações de longo alcance, e as suas peculiaridades devido a não-extensividade e não-aditividade. No capítulo 2 serão discutidos os sistemas auto-gravitantes e também será apresentado o modelo do anel auto-gravitante com maior detalhes. No capítulo 3 as simulações de Monte Carlo serão discutidas e a derivação de um algoritmo microcanônico de Monte Carlo para ser usado no estudo do anel auto-gravitante. No capítulo 4 serão expostos os resultados e a análise dos dados obtidos nas simulações de Monte Carlo Microcanônico.

Capítulo 1

Termodinâmica de Sistemas Com Interações de Longo Alcance

Na termodinâmica, o estudo de sistemas com interações de longo alcance apresenta uma plethora de problemas singulares e mais desafiadores do que aqueles associados aos sistemas com interações de curto alcance. No entanto, sabe-se muito menos sobre as propriedades estatísticas e dinâmicas associadas aos sistemas com interações de longo alcance, do que as associadas aos sistemas de curto alcance. Esses fatos são bem ilustrados pela existência de estados *quasi*-estacionários não-gaussianos, saltos de temperatura em temperaturas críticas, calor específico negativo e inequivalência entre os ensembles canônico e microcanônico. Como exemplos de sistemas com interações de longo alcance tem-se: sistemas auto-gravitantes, plasmas não neutros e alguns modelos simplificados tais como o HMF (Hamiltonian Mean Field) e o Laser de elétrons livres.

Uma interação é dita de longo alcance se seu potencial decai, para longas distâncias, com $r^{-\alpha}$ sendo α menor do que a dimensão espacial do sistema [1]. A razão dessa definição está em que, no limite de N muito grande, todas as diferenças físicas entre curto e longo alcance são devidas a essa propriedade do potencial [1]. Se o potencial de interação não decai suficientemente rápido a energia por partícula

diverge e, então, a energia total cresce superlinearmente com o volume à densidade constante, e isso viola a extensividade e a aditividade [1].

Este capítulo foi estruturado como da seguinte maneira: na seção 1.1 define-se o que é uma interação de longo alcance. Na seção 1.2, mostra-se como as propriedades da não-aditividade e não-extensividade estão ligadas aos sistemas com interações de longo alcance, estes sistemas são intrinsecamente não-aditivos e geralmente não-extensivos. Na seção 1.3, discute-se as relações entre estabilidade e aditividade são discutidas e é mostrado como a estabilidade de sistemas termodinâmicos está ligado à concavidade da entropia, bem como a possibilidade de existência de regiões com calor específico negativo. Na seção 1.4, mostra-se que não pode haver coexistência de fases para sistemas com interações de longo-alcance e na seção 1.5 discute-se a inequivalência dos ensembles e suas implicações, como por exemplo a presença de calor específico negativo no ensemble microcanônico e a existência de estados com distribuições não-gaussianas.

1.1 Definição

A energia total por partícula é dada por [1]:

$$E/N = \epsilon = \int d^d r \rho(p, q) J / r^\alpha, \quad (1.1.0)$$

onde o potencial é dado por $V = J / r^\alpha$ e ρ é uma densidade generalizada. Tomando como limite inferior para a integração uma pequena vizinhança de raio δ para evitar a

divergência a curtas distâncias, tem-se:

$$\epsilon = \rho J \Omega_d \int_{\delta}^R dr r^{d-1-\alpha} \quad (1.1.1)$$

$$\epsilon = \rho J \Omega_d (R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}) / (d-\alpha) \quad (1.1.2)$$

onde Ω_d é o volume angular de dimensão d . Se $\alpha > d$ então a energia por partícula permanece finita mesmo com $R \rightarrow \infty$. A interação nesse caso é dita de curto alcance [1,2].

Se $\alpha \leq d$, a energia de uma partícula dependerá também de partículas que estão suficientemente afastadas. Portanto a energia da partícula divergirá no caso de $R \rightarrow \infty$, ou seja, a energia cresce superlinearmente com o número de partículas (ou logaritmicamente caso $\alpha = d$) [1,2]. Isso implica na perda das propriedades da aditividade e da extensividade: a energia total de um sistema não é simplesmente a soma das energias dos subsistemas constituintes e a energia não é uma função extensiva dos parâmetros termodinâmicos. A interação nesse caso é dita de longo alcance.

1.2 Não-aditividade e não-extensividade

Muitas características das interações de longo alcance surgem do fato desses sistemas serem intrinsecamente não aditivos [1], ou seja, a soma das energias dos subsistemas constituintes não é igual à energia total do sistema.

Ao dividirmos um sistema termodinâmico, por exemplo, em dois subsistemas a energia total do sistema será igual à:

$$E_{Total} = E_1 + E_2 + E_{1,2} \quad , \quad (1.2.1)$$

onde $E_{1,2}$ é a energia de interação entre os dois subsistemas. Para sistemas com forças de curto alcance, a energia de interação entre os dois subsistemas no limite termodinâmico é muito pequena em relação à soma das energias internas dos dois subsistemas, isso se deve ao fato de as partículas mais distantes do vínculo de separação dos subsistemas não interagirem com as partículas do outro subsistema, evidenciado pela equação (1.1.2) para o caso curto alcance ($\alpha > d$). Para essas interações tem-se:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} E_{inte} / (E_1 + E_2) = 0 \quad . \quad (1.2.2)$$

Logo, no limite termodinâmico, a energia total é:

$$E_{Total} = E_1 + E_2 \quad . \quad (1.2.3)$$

Tal propriedade é chamada de aditividade.

Para potenciais de longo alcance isso não ocorre, uma vez que todas as partículas de um subsistema interagem com as partículas dos outros subsistemas. Para esses sistemas a energia total no limite termodinâmico é dada pela equação (1.2.1), que não é aditiva.

Muitas consequências matemáticas surgem da propriedade da aditividade dos sistemas, uma delas é a propriedade da extensividade. A propriedade da aditividade formula que a energia interna de um sistema composto é meramente a soma das energias dos subsistemas constituintes [7]:

$$E(S, V, N) = \sum_{\kappa} E_{\kappa}(S_{\kappa}, V_{\kappa}, N_{\kappa}) \quad e \quad (1.2.4)$$

$$S = \sum_{\kappa} S_{\kappa} \quad V = \sum_{\kappa} V_{\kappa} \quad N = \sum_{\kappa} N_{\kappa} \quad . \quad (1.2.5)$$

Se dividirmos os sistema em N subsistemas com uma partícula em cada um

($N_{\kappa}=1$):

$$S = N S_{\kappa} \quad V = N V_{\kappa} \quad , \quad (1.2.6)$$

o que implica que

$$S_{\kappa} = S/N \quad V_{\kappa} = V/N \quad (1.2.7)$$

e, portanto,

$$E(S, V, N) = \sum_{\kappa}^N E_{\kappa}(S/N, V/N, 1) \quad , \quad (1.2.8)$$

$$E(S, V, N) = N E(S/N, V/N, 1) \quad , \quad (1.2.9)$$

$$E(S/N, V/N, N/N) = 1/N E(S, V, N) \quad . \quad (1.2.10)$$

Esta é a extensividade. A extensividade é a propriedade que diz se alguma grandeza termodinâmica é proporcional ao tamanho do sistema [1]. A aditividade

implica extensividade, portanto, sistemas aditivos são sistemas extensivos, mas não o contrário [1].

Sistemas com interações de longo alcance são intrinsecamente não-aditivos, portanto não-extensivos. Porém, a extensividade ainda pode ser restaurada pela prescrição de Kac. A prescrição de Kac é um artifício matemático de renormalização do potencial com a finalidade de tornar as contribuições das energia cinéticas e potencial em contribuições de magnitude comparáveis para a função hamiltoniana. Como veremos depois, a temperatura é proporcional à energia cinética média das partículas e efetuar a prescrição de Kac para restaurar a extensividade da energia e intensividade da temperatura corresponde, também, a uma mudança na unidade de tempo [1].

Um exemplo clássico de um modelo não-aditivo e não-extensivo é o modelo magnético de Curie-Weiss [1, 2]:

$$H_{CW} = -J/2 \sum_{i,j=1}^N S_i S_j . \quad (1.2.11)$$

Se o sistema se encontrar em uma configuração com metade dos *spins* no estado para cima e metade do *spins* no estado para baixo, pode-se dividi-lo em dois subsistemas, um com spins para cima e outro com spins para baixo. A energia de cada um dos subsistemas é $E_1 = E_2 = -(JN^2)/8$, porém a energia total do sistema é nula. Logo a energia de interação entre estes dois subsistemas é $E_{1,2} = (JN^2)/4$, o que

prova que o sistema não é aditivo e não-extensivo, mesmo no limite termodinâmico.

O fator $1/N$ pode ser introduzido para restaurar a extensividade do sistema:

$$H_{CW} = -(J/2)(1/N) \sum_{i,j=1}^N S_i S_j , \quad (1.2.12)$$

assim, no limite termodinâmico, mesmo que haja a divergência no termo de *spin*, a energia por partícula terá convergência garantida - que é um requerimento físico. Este artifício matemático é a prescrição de Kac.

1.3 Concavidade e Estabilidade

Uma propriedade interessante dos sistemas aditivos é a concavidade da entropia e, conseqüentemente, a positividade do calor específico. Todavia sistemas com interações de longo-alcance são não-aditivos. Para esses há a possibilidade da existência de calor específico negativo no ensemble microcanônico.

Para mostrar como a concavidade da entropia está relacionada com a estabilidade de sistemas aditivos considere dois subsistemas idênticos e aditivos, cada um com energia E e entropia $S=S(E)$, separados por uma parede que impede a transferência de energia. A energia total do sistema e a entropia serão dados pelas relações (1.3.1) e (1.3.2):

$$E_{total} = 2E \quad e \quad (1.3.1)$$

$$S_{inicial} = 2S(E) \quad . \quad (1.3.2)$$

Se a parede for removida e um dos dois sistemas ceder uma quantidade de energia ΔE para o outro sistema então a nova entropia será [7]:

$$S_{final} = S(E + \Delta E) + S(E - \Delta E) \quad . \quad (1.3.3)$$

A condição de estabilidade para este sistema é [7-9]:

$$S(E + \Delta E) + S(E - \Delta E) \leq 2S(E) \quad . \quad (1.3.4)$$

No limite com $\Delta E \rightarrow 0$ a equação (1.3.4) se reduz à sua forma diferencial:

$$\partial^2 S / \partial E^2 \leq 0 \quad . \quad (1.3.5)$$

Porém, a equação (1.3.5) é menos restritiva do que a equação (1.3.4), que só vale para o limite $\Delta E \rightarrow 0$ [7].

Como $\partial S / \partial E = 1/T$ e $\partial E / \partial T = C_V$, logo

$$\partial^2 S / \partial E^2 = -1/(T^2 C_V) \quad . \quad (1.3.6)$$

Segue-se que a condição de estabilidade é:

$$C_V \geq 0 \quad . \quad (1.3.7)$$

Note que para obter-se esta expressão é necessário que o sistema seja aditivo, portanto esta condição de estabilidade não se aplica a sistemas com interações de longo alcance. Em sistemas de longo alcance tanto há a possibilidade de calor

específico negativo como compressibilidade térmica negativa, uma vez que o raciocínio para a condição de estabilidade do calor específico é o mesmo para a compressibilidade térmica.

1.4 Coexistência de fases

Considere um sistema constituído de M subsistemas de N_p partículas com energias E_p . A energia do sistema é:

$$E = \sum_p^m N_p E_p + \sum_{j,k} N_j N_k E_{j,k}, \quad (1.4.1)$$

onde $E_{j,k}$ é a energia de interação entre o subsistema j e o subsistema k . Se o sistema for aditivo, então a energia total do sistema (1.4.1) pode ser escrita somente como:

$$E = \sum_p N_p E_p \quad (1.4.2)$$

sendo N o número total de partículas do sistema e λ_p o número relativo de partículas com energia E_p :

$$N = \sum_p N_p \quad (1.4.3.a)$$

$$\lambda_p = N_p / N \quad (1.4.3.b)$$

A energia por partícula fica:

$$E/N = \epsilon = \sum_p \lambda_p E_p . \quad (1.4.4)$$

Cada subsistema pode ser entendido como uma fase diferente. Se o sistema for aditivo, é possível que haja diversas fases coexistindo.

Se o sistema for não-aditivo, então o termo de interação entre os subsistemas não permitirá que o sistema seja em diversos subsistemas independentes. Não seria possível entender um sistema com interações de longo alcance formado por um sistema bifásico e a energia total sendo a soma das energias internas como o sistema água-gelo, por exemplo. Portanto, para sistemas não aditivos a coexistência de fases não é permitida no ensemble microcanônico [1], o sistema sempre estará em uma única fase e na transição de fase não passará gradativamente de uma fase para outra, mas passará por completo de uma fase para outra. Para que haja a coexistência de fases, a energia deve ser aditiva [1].

1.5 Inequivalência dos ensembles

A função microcanônica de partição é dada por:

$$\Omega(E, V, N) = \int d^{Nd} q d^{Nd} p \delta(E - H(p, q)) \quad (1.5.1)$$

e a entropia de Boltzmann é definida por:

$$S(E, V, N) = k_b \ln \Omega(E, V, N) , \quad (1.5.2)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann.

Para construir o ensemble canônico, considere um sistema isolado com energia E e divida esse sistema em duas partes - uma menor com energia E_1 e outra maior com energia E_2 que fará o papel de banho térmico.

A probabilidade de encontrar o sistema com energia E_1 é, então:

$$P(E_1) = \int \Omega_2(E_2) \delta(E_1 + E_2 + E_{1,2} - E) , \quad (1.5.3)$$

onde $E_{1,2}$ é a energia de interação entre as duas partes.

Se o sistema é aditivo, então $E_{1,2}$ é desprezível no limite termodinâmico, assim:

$$P(E_1) = \int \Omega_2(E_2) \delta(E_1 + E_2 - E) e \quad (1.5.4)$$

$$P(E_1) = \Omega_2(E - E_1) . \quad (1.5.5)$$

Utilizando a equação (1.5.2):

$$\Omega_2(E - E_1) = \exp(S_2(E - E_1)/k_b) e \quad (1.5.6)$$

$$P(E_1) = \exp(S_2(E - E_1)/k_b) \quad (1.5.7)$$

expandindo em termos de $E - E_1$:

$$P(E_1) \approx \exp(K_B^{-1}) \exp[S_2(E) - E_1(\partial S_2/\partial E) + \dots] , \quad (1.5.8)$$

$$P(E_1) \approx \exp(S_2(E)/k_b) \exp(-E_1/k_b T) , \quad (1.5.9)$$

$$P(E_1) \approx \Omega_2(E) \exp(-\beta E_1) , \quad (1.5.10)$$

que é a distribuição usual do ensemble canônico.

Ao expandir a equação (1.5.10) em torno do valor médio da energia, obtemos a forma de uma distribuição gaussiana centrada no valor médio da energia:

$$P(E_1) \propto \exp(-(\beta^2/2NC_V)(E_1 - \bar{E})^2) \quad (1.5.11)$$

Note que para chegar a esse resultado é necessário que o sistema seja aditivo, ou seja, no limite termodinâmico, a energia de interação entre as duas partes - sistema e banho térmico - seja desprezada, e a energia total seja a soma das energias do banho e do sistema. Mas isso não é o que ocorre para sistemas com interação de longo alcance. Tais sistemas são não-aditivos e por isso pode ocorrer a não equivalência dos ensembles canônico e microcanônico. Para esses sistemas, a distribuição do ensemble canônico não está bem definida. Para esse caso foi proposto definir a função de partição canônica com a distribuição usual simplesmente como um formalismo matemático [4]. No entanto, a interação entre o banho térmico e o sistema pode ser de curto alcance, nesse caso é possível obter-se a distribuição de Boltzmann da maneira usual [1], mas se ocorrer o calor específico negativo os ensembles canônico e microcanônico serão inequivalentes.

A função de partição do ensemble canônico é dada por:

$$Z(\beta, V, N) = 1/N! \int d^N p d^N q \exp(-\beta H(p, q)) , \quad (1.5.12)$$

$$Z(\beta, V, N) = 1/N! \int d^N p d^N q \int dE \delta(E - H(p, q)) \exp(-\beta E) , \quad (1.5.13)$$

$$Z(\beta, V, N) = 1/N! \int dE \Omega(E, V, N) \exp(-\beta E) , \quad (1.5.14)$$

$$Z(\beta, V, N) = 1/N! \int dE \exp(-N(\beta \epsilon - s(\epsilon, \nu))) . \quad (1.5.15)$$

Se $s(\epsilon, \nu)$ é concava, o termo $\beta \epsilon - s(\epsilon, \nu)$ é a transformação de Legendre para a energia livre de Helmholtz que é definida, no limite termodinâmico, como:

$$f(\beta, \nu) = -1/\beta \lim_{N \rightarrow \infty} 1/N \ln Z(\beta, V, N) , \quad (1.5.16)$$

ou em uma forma reescalada por β :

$$\Phi(\beta, \nu) = \beta f(\beta, \nu) = \lim_{n \rightarrow \infty} 1/N \ln Z(\beta, V, N) . \quad (1.5.17)$$

Se $s(\epsilon, \nu)$ não for uma função concava, então não é possível realizar a inversão da transformação de Legendre, ou seja, não é possível ir de um ensemble para outro indiscriminadamente. Isto quer dizer que o comportamento físico do sistema é diferente em cada ensemble. Por essa razão, diz-se que não há equivalência dos ensembles.

A equivalência dos ensembles é baseada em algumas propriedades das funções de partição. De (1.5.15) e (1.5.16) podemos obter que para um N muito grande:

$$\exp(-\beta N f(\beta, \nu)) = (1/N!) \int dE \exp(-N[\beta \epsilon - s(\epsilon, \nu)]) \quad (1.5.18)$$

ou seja

$$\Phi(\beta, \nu) = \inf_{\beta} [\beta \epsilon - s(\epsilon, \nu)] \quad (1.5.19a)$$

$$s(\beta, \nu) = \inf_{\beta} [\beta \epsilon - \Phi(\epsilon, \nu)] \quad (1.5.19b)$$

a operação *inf* indica que $s(\beta, \nu)$ é um valor mínimo para todos os elementos de $\beta \epsilon - \Phi(\epsilon, \nu)$, e que não há nenhum outro valor maior para $s(\beta, \nu)$ que seja menor ou igual a todos os elementos de $\beta \epsilon - \Phi(\epsilon, \nu)$. Em outras palavras, há uma correspondência única de cada valor de ϵ para cada valor de β satisfazendo as equações (1.5.19a) e (1.5.19b), provando a equivalência dos ensembles para sistemas aditivos. Para sistemas não-aditivos pode não ocorrer essa correspondência única, e para cada valor de β no ensemble canônico corresponder a vários valores de ϵ no ensemble microcanônico.

Uma forma de verificar a inequivalência dos ensembles é calcular o calor específico nos dois ensembles. O calor específico por partícula é, por definição:

$$C_v = (\beta^2/N) (\partial U / \partial \beta)_{(V, N)} . \quad (1.5.20)$$

É fácil notar que a energia média no ensemble canônico é dada por:

$$U = \bar{E} = -(1/Z) (\partial Z / \partial \beta)_{(V, N)} \quad (1.5.21)$$

e a energia média quadrática é:

$$U = \overline{E^2} = (1/Z) (\partial^2 Z / \partial \beta^2)_{(V,N)} . \quad (1.5.22)$$

Expandindo (1.5.20) :

$$C_V = (\beta^2/N) [(1/Z) (\partial^2 Z / \partial \beta^2)_{(V,N)} - (1/Z)^2 (\partial Z / \partial \beta)_{(V,N)}^2] \quad (1.5.23)$$

e substituindo (1.5.22) em (1.5.21) tem-se que:

$$C_V = (\beta^2/N) [\overline{E^2} - (\overline{E})^2] \quad (1.5.24)$$

$$C_V = (\beta^2/N) \Delta E^2 \quad (1.5.25)$$

O calor específico é sempre positivo no ensemble canônico, enquanto que, como visto na seção 1.3, para sistemas com interações de longo alcance no ensemble microcanônico não há restrições para o calor específico, este pode ser tanto positivo, como negativo. Quando o calor específico for negativo, a entropia será uma função com uma região convexa e, assim, não será possível realizar a inversão da transformada de Legendre como dito anteriormente.

Mesmo com calor específico positivo há situações em que os ensembles podem não ser equivalentes. Na situações em que C_V for muito grande ou em que N for pequeno – sistemas pequenos - pois as flutuações relativas de energia são proporcionais ao calor específico ($\Delta E/E \propto \sqrt{(C_V/N)}$) [11].

A equivalência dos ensembles traz duas implicações físicas importantes [1]:

- No limite termodinâmico as flutuações relativas da energia tendem a desaparecer ou ficar muito pequenas $\Delta E/E \propto 1/\sqrt{N}$.
- Estados macroscópicos físicos que são realizáveis em um ensemble são realizáveis, também em outro ensemble.

A equivalência os ensembles é muito importante no estudo das transições de fases. Transições de fases estão associadas a singularidades presentes nos parâmetros termodinâmicos [10]. Portanto as transições de fases são demarcadas por descontinuidades nas derivadas de primeira ou segunda ordem de s ou f . Essas descontinuidades surgem da chamada *Construção de Maxwell*, quando há uma região convexa para a entropia no ensemble microcanônico, causando instabilidade [7] ou quando há uma região de divergência para o calor específico no ensemble canônico.

Como já visto na seção 1.3, para sistemas aditivos a condição de estabilidade é que a entropia seja uma função côncava, essa também é a condição para que haja equivalência dos ensembles. Para sistemas aditivos, estados nas regiões convexas para a entropia são instáveis, não podem ser observados. Para tais sistemas foi mostrado numericamente que ao atingir o limite termodinâmico (ou seja, sair de um sistema finito que é não-aditivo e ir a um sistema aditivo) a entropia se aproxima do envelope côncavo da Construção de Maxwell [11].

Para sistemas com interações de longo alcance a condição da concavidade da entropia para estabilidade, bem como a equivalência dos ensembles não são válidas e a construção de Maxwell que leva ao envelope côncavo não pode ser realizada e a coexistência de fase não é permitida [1].

Capítulo 2

Modelo do Anel Auto-gravitante

Considere um sistema de N partículas que só interagem por forças gravitacionais newtonianas. Para $N=2$ a solução se resume ao problema de Kepler, em que as equações podem ser desacopladas facilmente por meio do tratamento do centro de massa e da massa reduzida. Para $N=3$ existem algumas soluções simplificadas, já que as equações de movimento são não integráveis, caóticas e só podem ser desacopladas para algumas condições iniciais específicas, como por exemplo, o problema de três corpos de Euler [12]. Em geral, para N no intervalo de 3 a 1000 o problema pode ser resolvido numericamente [4]. Para N muito grande, maior do que 10^5 partículas, não é viável, nem vantajoso seguir as órbitas individuais das partículas, portanto torna-se mais eficiente trabalhar com as propriedades termodinâmicas desses sistemas.

Sistemas interagindo por forças gravitacionais são um exemplo de sistemas com interações de longo alcance. Como visto no capítulo anterior, uma força é dita de longo alcance se $\alpha \leq d$, onde d é a dimensão do sistema. O potencial de interação da força gravitacional newtoniana é dado por: $V(r) \propto -1/r$, ou seja, para a interação newtoniana $\alpha=1$ e para qualquer dimensão os sistemas que interagem

por forças gravitacionais newtonianas são considerados de longo alcance e toda a discussão do capítulo 1 é válida para sistemas gravitacionais.

Este capítulo está estruturado da seguinte forma: na seção 2.1 os Modelos Auto-gravitantes, suas peculiaridades e o equilíbrio do virial para forças gravitacionais serão discutidos; na seção 2.2 será discutida a necessidade de uma regularização do potencial gravitacional a curtas distâncias para evitar a divergência a curtas distâncias; na seção 2.3 será resolvido um modelo simplificado e solúvel para o estudo de uma estrela binária e na seção 2.4 será proposto o modelo a ser estudado neste trabalho, o modelo do Anel Auto-gravitante com partículas impenetráveis.

2.1 Modelos Auto-Gravitantes

Muitas estruturas astrofísicas no universo consistem em corpos que interagem por meio de forças gravitacionais: sistemas estelares, galáxias, aglomerados globulares, sistemas planetários, dentre outros. Se esses sistemas forem isolados de forças externas, são chamados de sistemas auto-gravitantes (SGS - do inglês *Self-Gravitating Systems*) [5]. O comportamento estatístico das grandezas desses sistemas são caracterizados por distribuições não-gaussianas das velocidades após sofrer uma relaxação violenta [5,13], relações de escala entre densidade de massa e o tamanho do sistema [5,14] e estruturas fractais [5,15].

Tais sistemas são não-extensivos e não-aditivos e, portanto, podem apresentar um comportamento diferente daqueles associados a forças de curto alcance como gases ou plasmas neutros. Sistemas gravitacionais diferem de plasmas neutros devido à existência da Blindagem de *Debye* no plasma [3], enquanto que para forças gravitacionais não há blindagem. Um exemplo clássico dessa diferença é que no equilíbrio do virial, sistemas gravitacionais possuem calor específico negativo, enquanto que para gases ou plasmas neutros o calor específico negativo representaria uma região de instabilidade.

Considere um sistema com N partículas se movimentando e interagindo entre si por meio de forças conservativas e ausentes de forças externas. Seja a grandeza G definida como (conforme Ref. [16]):

$$G = \sum_i \vec{P}_i \cdot \vec{r}_i \quad (2.1.1)$$

Tomando a variação da grandeza G no tempo, temos:

$$\dot{G} = \sum_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{p}_i + \sum_i \vec{r}_i \cdot \dot{\vec{p}}_i \quad (2.1.2)$$

da 2ª lei de Newton as forças são dadas por : $\vec{F}_k = \dot{\vec{p}}_k$, assim a equação (2.1.2) fica:

$$\dot{G} = \sum_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{p}_i + \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \quad (2.1.3)$$

O primeiro somatório na relação (2.1.3) pode ser reescrito como:

$$\sum_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{p}_i = \sum_i (\vec{P}_i/m_i) \cdot \vec{P}_i = \sum_i (P_i^2)/m_i = \sum_i 2K_i = 2K, \quad (2.1.4)$$

substituindo (2.1.4) em (2.1.3):

$$\dot{G} = 2K + \sum_i \vec{r}_i \cdot \dot{\vec{p}}_i. \quad (2.1.5)$$

Tomando a média de \dot{G} no tempo:

$$(1/\tau) \int_0^\tau \dot{G} dt = 2 \langle K \rangle + \sum_i \langle \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i \rangle \quad (2.1.6)$$

$$(1/\tau)(G(\tau) - G(0)) = 2 \langle K \rangle + \sum_i \langle \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i \rangle. \quad (2.1.7)$$

Se as coordenadas e os momentos se manterem finitos ao longo do tempo, ou seja, se as partículas estiverem confinadas a um volume, então pode-se escolher um τ suficientemente grande para que o termo à esquerda da igualdade seja aproximadamente zero. Assim, na ausência de forças externas, o Teorema do *Virial* é:

$$2 \langle K \rangle = - \sum_{i=1}^N \langle \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i \rangle \quad (2.1.8)$$

onde K é a energia cinética, \vec{F}_i é a força de interação da partícula i e \vec{r}_i é a posição desta partícula.

Como a força gravitacional é uma força conservativa, então a força pode ser relacionada com o gradiente do potencial:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla} V_i, \quad (2.1.9)$$

para um potencial do tipo $V_i = -ar^{-\alpha}$, onde a é uma constante positiva:

$$\vec{F}_i = (\alpha V_i / r_i) \hat{r}_i \quad (2.1.10)$$

nesse caso a equação (2.1.8) resume-se a:

$$2 \langle K \rangle = -\alpha \langle V \rangle \quad (2.1.11)$$

para o caso gravitacional $\alpha = 1$:

$$\langle V \rangle = -2 \langle K \rangle \quad (2.1.12)$$

e a energia interna do sistema fica [5]:

$$E = -\langle K \rangle \quad (2.1.13)$$

No ensemble microcanônico a temperatura é proporcional à energia cinética média das partículas ($T = 2 \langle K \rangle / 3Nk_b$ [3], esta relação será demonstrada no capítulo 3), portanto a equação (2.1.13) implica que sistemas no equilíbrio do virial possuem calor específico negativo constante [3,13].

$$E = -(3Nk_b T) / 2 \quad (2.1.14)$$

$$C_v = -(3Nk_b) / 2 \quad (2.1.15)$$

Este fato ilustra o comportamento peculiar das grandezas termodinâmicas dos sistemas gravitacionais. Para sistemas que são aditivos, regiões com calor específico negativo representam estados instáveis - uma vez que a concavidade da entropia é uma condição de estabilidade para sistemas com interações de curto alcance – enquanto que, para sistemas não-aditivos estados macroscópicos com calor específico negativo podem representar estados estáveis.

A equivalência dos ensembles está relacionada com o calor específico ser positivo. Para sistemas gravitacionais no equilíbrio do virial os ensembles canônicos e microcanônicos são inequivalentes. Sistemas auto-gravitantes no equilíbrio do virial terão comportamentos no ensemble microcanônico diferente do comportamento no ensemble canônico e, por essa razão, faz-se necessário a escolha de um ensemble específico para o estudo de tais sistemas. Como sistemas gravitacionais encontram isolados, sem contato com banho térmico, então isto implica que o ensemble microcanônico é o ideal para estudar sistemas auto-gravitantes [4].

Sistemas gravitacionais reais são abertos, o movimento das partículas não está confinado a nenhuma região do espaço. Desde que tenha energia suficiente, as partículas podem alcançar qualquer localização no espaço, isto é, podem evaporar do sistema. Porém as integrais que definem as funções de partição irão divergir se forem extendidas ao infinito, ou seja, se o movimento das partículas não estiver confinado a um volume, plano ou curva qualquer. A mesma divergência é encontrada em outros sistemas, como gases, se estes não estiverem confinados em uma caixa. É necessário

que haja o confinamento do movimento das partículas. Essa hipótese é justificada se a taxa de evaporação de um sistema gravitacional real for muito pequena.

Outra peculiaridade dos sistemas gravitacionais é que eles não possuem limite termodinâmico. A entropia nunca é um máximo absoluto, mas um máximo local, quando houver. Mesmo no limite $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, a energia interna do sistema pode divergir e V/N pode não ser constante devido à divergência do potencial a curtas distâncias - quanto mais partículas no sistema, maior seria a densidade, devido ao fenômeno conhecido como *Catástrofe Gravitacional* [5,3]. Essa divergência será discutida com mais detalhes na próxima subseção.

2.2 Divergência do Potencial Gravitacional a Curtas Distâncias

Uma dificuldade que surge dos potenciais do tipo $V(r) \propto 1/r$, como os potenciais gravitacionais e coulombianos, é a divergência a curtas distâncias. O volume do espaço de fases é dado por:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r d^{3N} p \Theta(E - H(p, r)) \quad (2.2.1)$$

onde Θ é a função degrau unitário de *Heavyside* e $H(p_i, r_i) = \sum_i P_i^2/2m + \sum_{i,j} V(r_{ij})$.

Substituindo a hamiltoniana na integral:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r d^{3N} p \Theta(E - \sum_{i,j} V(r_{ij}) - \sum_i P_i^2/2m) , \quad (2.2.2)$$

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r d^{3N} p \Theta(K(r_{ij}) - \sum_i P_i^2/2m) , \quad (2.2.3)$$

onde $K(r_{ij})$ é a energia cinética em função das posições, $K(r_{ij}) = E - \sum_{i,j} V(r_{ij})$.

Como $\Theta(K - \sum_i P_i^2/2m) = \Theta(2mK - \sum_i P_i^2)$, então

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r d^{3N} p \Theta(2mK(r) - \sum_i P_i^2) . \quad (2.2.4)$$

A integração nos momentos será repetida N vezes, então pode ser reescrita como:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r \left[\int d^3 p \Theta(2mK(r) - P^2) \right]^N , \quad (2.2.5)$$

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r \left[\int d^3 p \Theta(\sqrt{2mK(r)} - P) \right]^N , \quad (2.2.6)$$

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r \left[4\pi \int_0^\infty dp p^2 \Theta(\sqrt{2mK(r)} - P) \right]^N . \quad (2.2.7)$$

Reescrevendo a variável p como $v = \sqrt{2mK(r)} - P$, então:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r \left[-4\pi \int_{-\infty}^{\sqrt{2mK(r)}} dv [\sqrt{2mK(r)} - v]^2 \Theta(v) \right]^N , \quad (2.2.8)$$

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r \left[-4\pi \int_{-\infty}^{\sqrt{2mK(r)}} dv [2mK(r) - 2v\sqrt{2mK(r)} - v^2] \Theta(v) \right]^N \quad (2.2.9)$$

Sabendo que a integral da função degrau unitário de Heavyside é:

$$\int (df/dx) \Theta(x) dx = f(x) \Theta(x) , \quad (2.2.10)$$

então:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} r [(4\pi/3)(2mK(r))^{3/2} \Theta(2mK(r))]^N, \quad (2.2.11)$$

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N, m) \int d^{3N} r (E - V(r))^{3N/2} \Theta(E - V(r)). \quad (2.2.12)$$

A função de partição microcanônica é dada por:

$$\Omega(E, V, N) = (\partial \Gamma(E, V, N) / \partial E)_{V, N}, \quad (2.2.13)$$

$$\Omega(E, V, N) = C''(N, m) \int d^{3N} r (E - V(r))^{3N/2-1} \Theta(E - V(r)) \quad (2.2.14)$$

Para sistemas gravitacionais a relação (2.2.14) é escrita da seguinte forma [4]:

$$\Omega(E, V, N) = C(N) \int d^{3N} \vec{X} (E + \sum_{i,j} Gm^2/|\vec{X}_i - \vec{X}_j|)^{3N/2-1} \Theta(E + \sum_{i,j} Gm^2/|\vec{X}_i - \vec{X}_j|) \quad (2.2.15)$$

Fazendo uma mudança de variável do tipo $\vec{S} = \vec{X}_1 - \vec{X}_2$ pode-se reescrever a equação (2.2.3) desta forma:

$$\Omega(E, V, N) = C(N) \int d^3 \vec{X}_2 d^3 \vec{X}_3 \dots d^3 \vec{X}_N I(\vec{X}_2, \vec{X}_3 \dots \vec{X}_N), \quad (2.2.16a)$$

onde:

$$I(\vec{X}_2, \vec{X}_3 \dots \vec{X}_N) = \int d\vec{S} (E + Gm^2/S + \sum_{j=3} Gm^2/|\vec{S} + \vec{X}_2 - \vec{X}_j| + \sum_{i,j=2} Gm^2/|\vec{X}_i - \vec{X}_j|)^{(3N/2-1)} \quad (2.2.16b)$$

em $\vec{S}=0$ a integral (2.2.16b) é divergente e o termo dominante é Gm^2/S . Assim, próximo a $S=0$, temos:

$$I'(\vec{X}_2, \vec{X}_3 \dots \vec{X}_N) = 4\pi \lim_{\xi \rightarrow 0} \int_0^\xi dS S^2 (Gm^2/S)^{(3N/2-1)}, \quad (2.2.17)$$

$$I'(\vec{X}_2, \vec{X}_3 \dots \vec{X}_N) = 4\pi Gm^2 \lim_{\xi \rightarrow 0} \xi^{(4-3N/2)}, \quad (2.2.18)$$

I' divergirá se $N \geq 3$ e também I , portanto o volume do espaço de fase também irá divergir ao levar em conta o comportamento do potencial a curtas distâncias. Por isto, o problema gravitacional real somente pode ser resolvido analiticamente para dois corpos. Para estudar sistemas gravitacionais com muitos corpos é necessário que se altere o sistema real com o uso de artificialidades que evitem a divergência a curtas distâncias.

Há basicamente dois tipos de sistemas gravitacionais [4]. O primeiro consiste em sistemas astrofísicos como galáxias, sistemas planetários, estelares etc, constituído de partículas clássicas (em alguns casos deve ser levado em conta correções relativísticas quando as partículas se aproximarem muito). O segundo consiste em sistemas com partículas elementares quânticas como halos de matéria escura, estrelas de nêutrons, anãs brancas etc.

Para o primeiro tipo a divergência no potencial pode ser evitada com a introdução de um potencial de partícula rígida - as partículas são impenetráveis. Esse mesmo tratamento muitas vezes é usado para o estudo de gases simples e outros sistemas clássicos. Nesse caso o tamanho das partículas é levado em consideração

Para o segundo caso, correções quânticas são necessárias para o comportamento a curtas distâncias [4]. T. Padmanabhan mostrou que para tais partículas há um estado fundamental de energia gravitacional [4]. Assim como

sistemas coulombianos, como por exemplo os átomos, têm sua estabilidade devido a alguns princípios da mecânica quântica como a incerteza e a exclusão de Pauli, sistemas gravitacionais também devem sua estabilidade a princípios quânticos.

Para sistemas do segundo tipo desenvolveram a ideia do parâmetro de *softening*, uma regularização do potencial de forma que a partir de uma certa distância as partículas não mais interagem entre si, isto é, o potencial não é mais somente do tipo $V(r) \propto r^{-1}$, mas introduz-se um parâmetro de forma que se torna $V(r) \propto (r + \epsilon)^{-1}$, se r vai a zero, então $V(0) \propto 1/\epsilon$.

Abaixo os gráficos dos dois tipos de potencial:

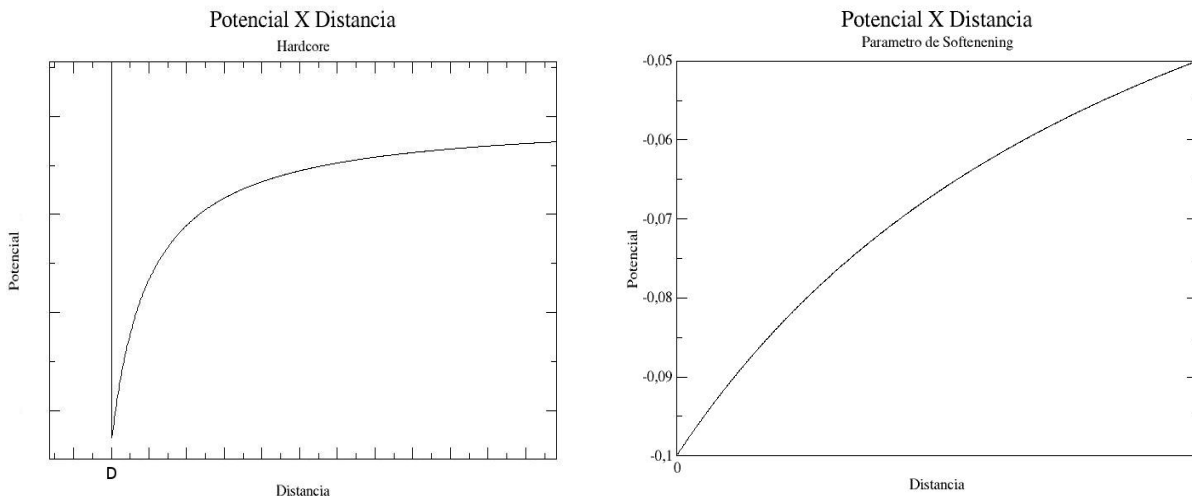


Figura (2.2.1) – O gráfico à esquerda mostra o potencial do caso clássico em que as partículas são impenetráveis e o gráfico à direita mostra o caso em que é usado o parametro de softening.

2.3 Modelo Simplificado: Estrela Binária

Um modelo simplificado de um sistema auto-gravitante é um sistema formado por uma estrela binária. Esse sistema foi proposto por T. Padmanabhan [4]. O problema poderia ser analisado pelo problema de dois corpos de Kepler, no entanto não pode ser resolvido por tal método, pois o movimento das partículas está confinado dentro de uma esfera de raio R .

O hamiltoniano deste sistema é a hamiltoniana de Kepler por:

$$H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2) = p_1^2/2m + p_2^2/2m - Gm^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \quad (2.3.1)$$

O volume do espaço de fases do sistema é:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 \Theta(E - H(r_1, r_2, p_1, p_2)) \quad (2.3.2)$$

ao realizar a integração sobre os momentos com o hamiltoniano da equação (2.3.2), como feito na seção anterior e substituindo o valor do potencial na equação (2.2.12):

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N, m) \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 (E - Gm^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)^{3/2} \Theta(E - Gm^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (2.3.3)$$

Reescrevendo as variáveis em coordenada de posição do centro de massa e coordenada de posição relativa das duas partículas:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N, m) \int d^3\vec{R} d^3\vec{r} (E - Gm^2/r)^3 \Theta(E - Gm^2/r) \quad (2.3.4)$$

dessa forma a integração sobre a coordenada do centro de massa é trivial:

$$\Gamma(E) = C'(N, m) R^3 \int_a^R dr r^2 (E - Gm^2/r)^3 \Theta(E - Gm^2/r) , \quad (2.3.5)$$

onde o parâmetro a mostra a partir de qual distância o potencial sofre o corte, isto é, é regularizado para que as partículas não interajam entre si.

A função de partição pode ser escrita como:

$$\Omega(E, V, N) = \partial \Gamma(E, V, N) / \partial E , \quad (2.3.6)$$

$$\Omega(E) = C'(N, m) R^3 \int_a^R dr r^2 (E - Gm^2/r)^2 \Theta(E - Gm^2/r) . \quad (2.3.7)$$

Realizando a integração [4], o que se obtém são suas expressões, uma para baixas energias e outra para altas energias:

$$\Omega_1(E) = -C'(N, m) (R^3/E) (1 + aE/Gm^2)^3, \text{ para } -Gm^2/a < E < -Gm^2/R , \quad (2.3.8a)$$

$$\Omega_2(E) = -C'(N, m) (R^3/E) [(1 + RE/Gm^2)^3 - (1 + aE/Gm^2)^3], \text{ para } -Gm^2/R < E < \infty \quad (2.3.8b)$$

A temperatura é dada por:

$$T^{-1} = k_b \partial \ln \Omega / \partial E . \quad (2.3.9)$$

Aplicando a equação (2.3.8a) em (2.3.9) e tomando $G=1$ e $m=1$ obtém-se a temperatura para baixas energias:

$$k_b T = (1 + aE) / (2a - 1/E) , \quad (2.3.10)$$

ou reescalando temperatura e a energia com $T'=aT$ e $E'=aE$ [4]:

$$k_b T' = (1 + E') / (2 - 1/E') \quad (2.3.11)$$

No caso de partículas rígidas $a \rightarrow 0$ a equação (2.3.10) se reduz a:

$$E = -k_b T \quad (2.3.12)$$

que está de acordo com a equação (2.1.14) que representa o equilíbrio do virial para sistemas auto-gravitantes.

Aplicando a equação (2.3.8b) em (2.3.9) e tomando $G=1$ e $m=1$ obtém-se a temperatura para altas energias:

$$\beta = (k_b T)^{-1} = E^{-1} - 3[R(1 + RE)^2 - a(1 + aE)^2] / [(1 + RE)^3 - (1 + aE)^3] \quad (2.3.13)$$

Os gráficos obtidos por Padmanabhan [4] para as temperaturas do sistema binário são apresentados na figura 2.3.1

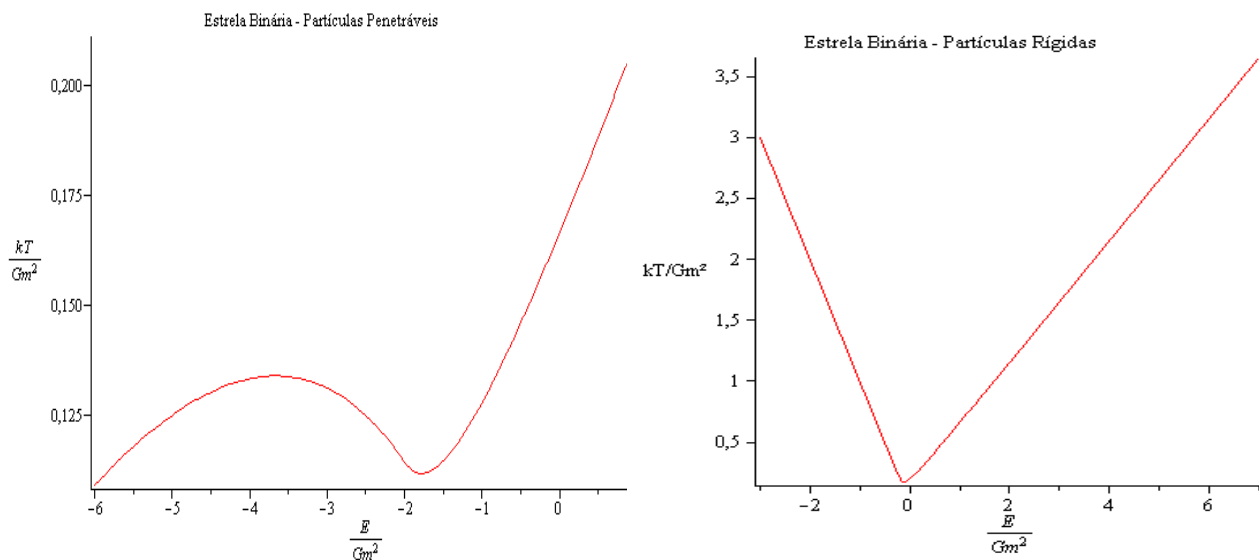


Figura (2.3.1) – Gráfico à esquerda mostra a curva calórica do sistema binário, para partículas penetráveis, com o corte no potencial (parâmetro a). O gráfico à direita mostra o comportamento do sistema binário para partículas impenetráveis, com potencial de esfera rígida ($a \rightarrow 0$).

2.4 Anel Auto-Gravitante

Agora será introduzido o modelo estudado neste trabalho. O modelo do anel auto-gravitante (modelo SGR, do inglês *Self-Gravitating Ring*) foi primeiramente proposto no ano de 2001 por Sota *et al.* [5]. O modelo consiste de partículas que interagem pela força gravitacional newtoniana tridimensional, mas o movimento das partículas está confinado em um anel unidimensional. É um modelo interessante, pois mesmo sendo unidimensional é possível estudar transições de fases gravitacionais por ele.

Considere um sistema constituído de N partículas de massa “ m ” interagindo por força gravitacional newtoniana tridimensional e cujo movimento está confinado a um anel unidimensional de raio r conforme a figura (2.4.1)

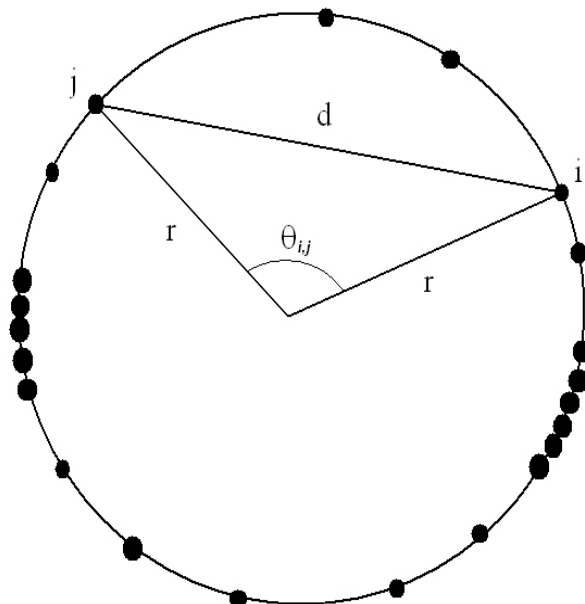


Figura (2.4.1) – Geometria do modelo SGR. A distância d entre as partículas é calculada usando a lei do cossenos.

A distância entre duas partículas em coordenadas polares é dada por:

$$d = r \sqrt{2} \sqrt{(1 - \cos \theta_{(i,j)})} \quad (2.4.1)$$

tomando um eixo polar como a reta de referência para contagem angular:

$$d = r \sqrt{2} \sqrt{(1 - \cos(\theta_i - \theta_j))} \quad (2.4.2)$$

A função hamiltoniana do sistema é:

$$H = \sum_{i=1}^N P_i / 2mr^2 - (1/2) \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij}(\theta_i, \theta_j) \quad (2.4.3)$$

onde $V_{ij}(\theta_i, \theta_j) = Gm^2 / r \sqrt{2} \sqrt{(1 - \cos(\theta_i - \theta_j))}$ e o fator $1/2$ é introduzido para evitar a contagem dupla no somatório.

A hamiltoniana (2.4.3) é uma função não-extensiva com relação ao número de partículas, uma vez que o potencial é do tipo potencial de pares e é proporcional ao número de pares do sistema que é $N(N-1)$. No entanto, como discutido na seção (1.2) do capítulo anterior, a extensividade dessa hamiltoniana pode ser restaurada pela prescrição de Kac, um artifício matemático que torna as contribuições da energia cinética e da energia potencial de magnitudes comparáveis para a energia total do sistema. Assim a equação (2.4.3) pode ser reescrita pela prescrição de Kac como sendo

$$H = \sum_{i=1}^N P_i / 2mr^2 - (1/2N) \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij}(\theta_i, \theta_j) \quad (2.4.4)$$

Para evitar a divergência a curtas distâncias, Tatekawa et al. [3,8] têm utilizado o parâmetro de *softening* em seus estudos com o modelo SGR e obtiveram resultados compatíveis com a solução exata do modelo simplificado de Padmanabhan [4]. O potencial utilizado por eles foi $V_{ij}(\theta_i, \theta_j) = Gm^2 / [r \sqrt{2} \sqrt{(1 - \cos(\theta_i - \theta_j) + \varepsilon)}]$ onde ε é o parâmetro de *softening*, que desempenha o corte no potencial – mesma função desempenhada pelo parâmetro “a” utilizado na seção (2.3) .

Neste trabalho não será utilizado o parâmetro de softening para evitar a divergência a curtas distâncias. Ao invés disso será usado o potencial de partícula rígida para partículas clássicas. Em termos de simulação computacional, dividimos o círculo em “Ncell” números de células e o tamanho λ de cada partícula fica como:

$\lambda = (2 \pi r) / N_{cell}$. Portanto, neste trabalho utilizaremos o potencial:

$$V_{ij}(\theta_i, \theta_j) = Gm^2 / [r \sqrt{2} \sqrt{(1 - \cos(\theta_i - \theta_j))}], \text{ se } |\theta_i - \theta_j| > \lambda / r \quad (2.4.5a)$$

$$V_{ij}(\theta_i, \theta_j) = + \infty, \text{ se } |\theta_i - \theta_j| \leq \lambda / r \quad (2.4.5b)$$

Para simplificar os cálculos, definiu-se as constantes de Boltzmann e gravitacional com valor unitário $G=1$, $k_b=1$. Além disso, a massa das partículas do sistemas e o raio do anel foram tomadas com sendo unitários - $r=1$, $m=1$. A hamiltoniana foi reescalada, outra vez, por N para propósitos computacionais, para que os valores para o potencial não ultrapassassem o valor disponibilizado para a memória computacional.

Dessa forma, a hamiltoniana do sistema é dada por:

$$H' = H/N = \sum_{i=1}^N P_i/2N - (1/2N^2) \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij}(\theta_i, \theta_j) \quad (2.4.6)$$

onde:

$$V(\theta_i, \theta_j) = 1/[\sqrt{2}\sqrt{(1-\cos(\theta_i-\theta_j))}], \text{ se } |\theta_i-\theta_j| \geq \lambda \quad (2.4.7a) \quad (2.4.7a)$$

$$V(\theta_i, \theta_j) = +\infty, \text{ se } |\theta_i-\theta_j| < \lambda \quad (2.4.7b) \quad (2.4.7b)$$

Para a análise do comportamento estatístico do SGR utilizou-se o método de Monte Carlo Microcanônico que será descrito no próximo capítulo.

Capítulo 3

Método de Monte Carlo Microcanônico

Simulações computacionais são uma ferramenta poderosa na física da matéria condensada [17] e simulações que usam o Método de Monte Carlo têm sido aplicadas extensivamente na física teórica [18-20], econometria [21] e biologia molecular [22].

Na física, o objetivo das simulações computacionais é criar o entendimento dos fenômenos e das propriedades físicas fazendo o uso do total controle sobre as condições “experimentais” do sistema estudado. Assim, vantagem das simulações computacionais é que cada aspecto da configuração do sistema pode ser examinado com detalhes [23], pois esse controle não pode ser realizado no laboratório. Por isso os resultados da simulação devem estar de acordo com a teoria e o experimento real como é mostrado na figura (3.1) (Cf. Ref [23]).

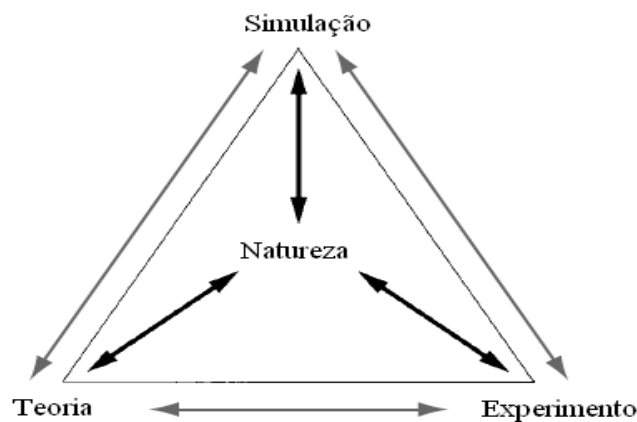


Figura (3.1) – Relação Teoria-Experimento-Simulação (cf Ref. [23])

Considere descrever o comportamento dinâmico de um sistema constituído de N partículas interagindo através de um potencial $V(r)$. Utilizando, para isso, a mecânica clássica tem-se $6N$ equações diferenciais acopladas para a descrição do movimento das partículas. Isto seria uma tarefa impossível se N for da ordem de 10^{23} . Mas ainda que fosse uma tarefa possível, seria necessário uma memória computacional imensa - tão grande que não existiria nos computadores de hoje - para armazenar a solução das equações e também para usar a solução para o cálculo das grandezas macroscópicas. Ainda assim, essas grandezas macroscópicas iriam apresentar variações extremamente rápidas e em distâncias muito curtas. Disso surgiria a necessidade do cálculo das médias dessas grandezas macroscópicas, para que essas variações fossem em tempo e espaço de ordem macroscópicas. As simulações de Monte Carlo (SMC) tentam simular e calcular as referidas médias sem realizar o roteiro impossível descrito acima, utilizando para isso a mecânica estatística[20].

A SMC é o procedimento numérico que busca analisar o comportamento termodinâmico de equilíbrio de um sistema que se comporta de maneira estocástica por meio do sorteio de um grande número de configurações aleatórias no espaço de fase, e ao atingir uma configuração de equilíbrio calcular as médias apropriadas. A ideia principal do método consiste em, a partir de uma configuração inicial arbitrária, efetuar um grande número de transições aleatórias que obedeçam a um princípio conhecido como *Princípio do Balanço Detalhado* (que será explicado na seção 3.4)

até que as variáveis macroscópicas adquiram valores estáveis [20]. Um dos criadores do método, S. Ulam, define o procedimento como se segue [24]: Tome um sistema com um ensemble de partículas cada uma representada por uma série de números que especificam as componentes dos vetores velocidade e posição, o tempo, e a natureza das partículas. Processos aleatórios são iniciados, modificando essa série inicial de números, levando-a a uma série de novos valores que são ou não aceitos dependendo de uma probabilidade de aceitação. Após um intervalo de tempo esse sistema terá atingido uma distribuição de probabilidade de equilíbrio, em que poderá ser calculadas as médias das grandezas macroscópicas do ensemble. Por usar um número muito grande de sorteios e ser uma pesquisa secreta, o método foi batizado de Monte Carlo por S. Ulam e Von Neumann em referência ao cassino Monte Carlo em Mônaco [19,25].

No entanto, a SMC traz algumas dificuldades: limitações computacionais e erros estatísticos [19,23]. A velocidade de processamento e a memória dos computadores são fatores limitantes para a execução de simulações. Simulações que requerem meses de processamento múltiplo e simulações que requerem maior memória para alocação das configurações do sistema do que a que está disponível no computador são impraticáveis [23], um exemplo disso seria tentar simular 10^{23} partículas de uma amostra real. Outro fator limitante de custo computacional é a necessidade de gerar números aleatórios com o computador, que é uma máquina determinística. O que na verdade é realizado é gerar os chamados números pseudo-

aleatórios (uma melhor discussão sobre o assunto se encontra na seção 3.3). A falta de uma sequência de números realmente aleatórios e a diminuição do número de partículas para tornar viável a execução da simulação leva a erros estatísticos [19,23].

Este capítulo está estruturado como se segue: na seção 3.1 uma explicação de como calcula-se as médias das grandezas macroscópicas do sistema e de como as mesmas médias são calculadas numericamente pelo computador. Na seção 3.2 o princípio do balanço detalhado, que dá o peso de aceitação das transições nos métodos de Monte Carlo, é discutido. Na seção 3.3 uma discussão mais abrangente sobre geradores de sequências de números aleatórios e sobre alguns testes para a qualidade desses. Na seção 3.4 será explicado o algoritmo de Metropolis que é um método de simulação de Monte Carlo para sistemas em contato com um banho térmico. E por fim, na seção 3.5 será explicado o algoritmo de Monte Carlo Microcanônico, este usa os mesmos procedimentos do algoritmos de Metropolis, mas com pesos de aceitação diferentes. O Monte Carlo Microcanônico será usado para os cálculos do modelo Anel Autogravitante.

3.1 Média de Ensemble e Média de Ensemble por Amostragem

A média de ensemble de uma grandeza G é a média aritmética dos valores de G sobre todos os sistemas do ensemble:

$$\langle G \rangle = (1/N) \sum_{i=1}^N G(p_i, p_i) = \sum_{n=1}^N P_n G_n \quad , \quad (3.2.1)$$

onde P_i é a probabilidade de encontrar o sistema no microestado i . Em termos de uma densidade de probabilidade contínua, a média de ensemble da grandeza m é:

$$\langle G \rangle = \int dp^{(3N)} dq^{(3N)} \rho(q, p) G(q, p) , \quad (3.2.2)$$

onde $\rho(q, p)$ está sujeito ao vínculo:

$$\int dp^{(3N)} dq^{(3N)} \rho(q, p) = 1 . \quad (3.2.3)$$

Para simulações computacionais, muitas vezes torna-se inviável calcular a média de ensemble para um número muito grande de partículas ($N \rightarrow \infty$). Por razões computacionais de memória e processamento, é necessário diminuir o número de partículas do sistema, diminuindo o número de microestados acessíveis ao sistema. Por isso, ao invés de calcular a média de ensemble sobre as partículas do sistema, sorteia-se uma amostra de M microestados conforme a distribuição de probabilidades [20]:

$$\langle G \rangle \approx G_M = (1/M) \sum_{i=1}^M G(p_i, q_i) , \quad (3.2.4)$$

onde G_M é chamado estimador de G . Quanto maior for M , melhor será a aproximação.

Dessa maneira, durante a simulação, o sistema não passará por todos os microestados possíveis. No entanto, um litro de gás nas CNTP tem, em ordem de grandeza, $(10^{27})^{10^{22}}$ microestados possíveis ($\Omega(T, V, N) \propto [(V/h^3)(3mk_b T)^{3/2}]^N$), com cada partícula tendo um comprimento de onda térmico de $\lambda_T \approx 10^{-10} m$ e uma

velocidade média quadrática $v_{rms} \approx 10^3 m/s$, ainda assim demoraria $10^{10^{23}}$ vezes a idade do universo para que o gás passasse por todos os estados disponíveis. Sendo assim, a aproximação do método de Monte Carlo tomando uma distribuição de estados menor do que a disponível, é razoável quando a quantidade M de microestados for muito grande.

3.2 Cadeias de Markov e Princípio do Balanço Detalhado

O conceito de Cadeias de Markov é central nas simulações de Monte Carlo [23]. Considere um processo estocástico em um tempo discreto $t_1, t_2, t_3, \dots, t_n$, para um sistema com um conjunto finito de possíveis estados $S_1, S_2, S_3, \dots, S_n$ e X_{t_n} o estado que o sistema ocupa no tempo t_n . Um processo é chamado processo de Markov se a distribuição de probabilidade de se encontrar S_j no instante t_n ($P(S_j, t_n)$) for dependente somente do estado anterior a esse (estado no qual o sistema se encontra em t_{n-1}). Dessa forma processos de Markov obedecem a seguinte relação:

$$P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i, X_{t_{n-2}} = S_k, \dots, X_{t_{n-3}} = S_z) = P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i), \quad (3.3.1)$$

onde $P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i)$ é a probabilidade condicional de encontrar S_j no instante t_n dado que era S_i no instante t_{n-1} . A equação principal para a probabilidade é:

$$dP(S_j, t)/dt = \sum_i P(S_i, t_n | S_j, t_{n-1}) P(S_j, t_{n-1}) - \sum_i P(S_j, t_n | S_i, t_{n-1}) P(S_i, t_{n-1}) \quad (3.3.2)$$

A equação acima pode ser interpretada como uma equação de continuidade para a probabilidade [23]. Toda a probabilidade de se obter i que é perdida na transição para j é ganha na probabilidade de obter j .

No equilíbrio $dP(S_j, t)/dt = 0$, então, um requerimento físico razoável é que, no equilíbrio, a equação (3.3.2) obedeça a relação [20,23]:

$$P(S_j, t_n | S_i, t_n - \Delta t) P(S_i, t_n - \Delta t) = P(S_i, t_n | S_j, t_n - \Delta t) P(S_j, t_n - \Delta t), \quad (3.3.3)$$

onde $\Delta t = t_n - t_{n-1}$. Tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$:

$$P(S_i) d(P(S_j \rightarrow S_i, t))/dt = P(S_j) d(P(S_i \rightarrow S_j, t))/dt, \quad (3.3.4)$$

$$P(S_i) \Lambda_{ji} = P(S_j) \Lambda_{ij}, \quad (3.3.5)$$

$$\Pi_{(i \rightarrow j)} = \Lambda_{ji} / \Lambda_{ij} = P(S_j) / P(S_i), \quad (3.3.6)$$

o termo Λ_{ji} é a derivada temporal da probabilidade condicional de encontrar S_j no instante t dado que era S_i no instante anterior, assim, Λ_{ji} representa a probabilidade de transição para o estado S_j dado que estava no estado S_i no tempo anterior, e o termo $\Pi_{(i \rightarrow j)}$ é o peso probabilístico de aceitação da transição do estado i para o estado j . A equação (3.3.6) é conhecida como princípio do balanço detalhado para as cadeias de Markov e determina a probabilidade de transição univocamente [23].

Essa equação representa a condição para que a distribuição seja de equilíbrio. No equilíbrio, um micro-estado será tão mais populado quanto maior for a probabilidade de transição dos demais estados para ele em relação à probabilidade de transição deste estado para os demais [20].

3.3 Geradores de Números Pseudo-Aleatórios

As SMC são fortemente dependentes de geradores de números aleatórios rápidos e eficientes para a execução dos sorteios [23]. No entanto a geração de números realmente aleatórios é impraticável ou muito dispendiosa. Por esta razão, ao invés de gerar números aleatórios, gera-se números pseudo-aleatórios, que certamente possuem limitações que precisam ser compreendidas. Para efeito de encurtamento de escrita, ao mencionar números aleatórios, estarei me referindo aos números pseudos-aleatórios

Geradores de números pseudo-aleatórios são algoritmos determinísticos que produzem uma sequência uniforme de números não correlacionados e com período extremamente longo [23]. A qualidade de um gerador será avaliada nesses três itens, quanto mais uniforme, quanto maior for o período e quanto menos correlacionados forem os números da sequência, melhor será a qualidade do gerador.

Alguns testes para a qualidade dos geradores são apresentados a seguir

- Teste Gráfico: plotar em um espaço d-dimensional, onde cada uma das coordenadas são determinadas por “d” sucessivas chamadas do gerador de números aleatórios. A figura (3.3.1) e a figura (3.3.2) mostram a comparação entre 2 geradores de números aleatórios: a primeira figura tem o teste para um gerador ruim e a segunda para um bom gerador.
- Sistemas solúveis: executar uma SMC para sistemas que possuem solução analítica e comparar os resultados da SMC com os resultados exatos.
- Kolmogorov-Smirnov: gerar uma sequência grande de números aleatórios no intervalo entre 0 e 1 e verificar se o conjunto de dados adere a uma distribuição uniforme, como por exemplo a gaussiana.

Press et al. [25], desenvolveram bons algoritmos de geradores de números aleatórios que foram testados e serão usados nas SMC do modelo SGR neste trabalho.

Para uma discussão mais aprofundada sobre testes de qualidade de gerador de números aleatórios consulte o livro: “*The Art of Computer Programming, Vol II*” de Donald Knuth (ver referência [26]).

Teste Gráfico

Gerador Congruencial Ruim

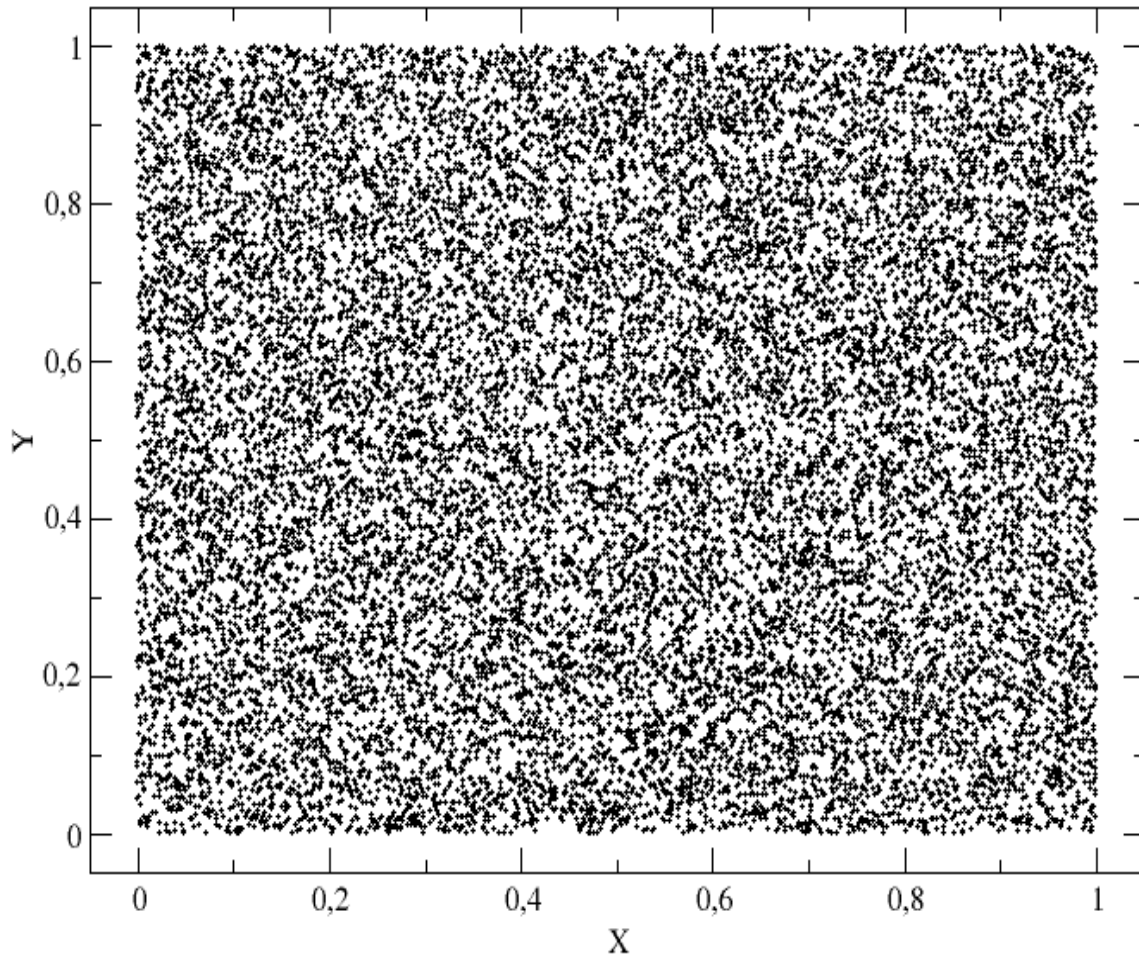


Figura (3.3.1) – Teste gráfico para geradores de números aleatórios. No gráfico um gerador de baixa qualidade (é possível notar padrões nos pontos gerados).

Teste Grafico

Gerador Ran2

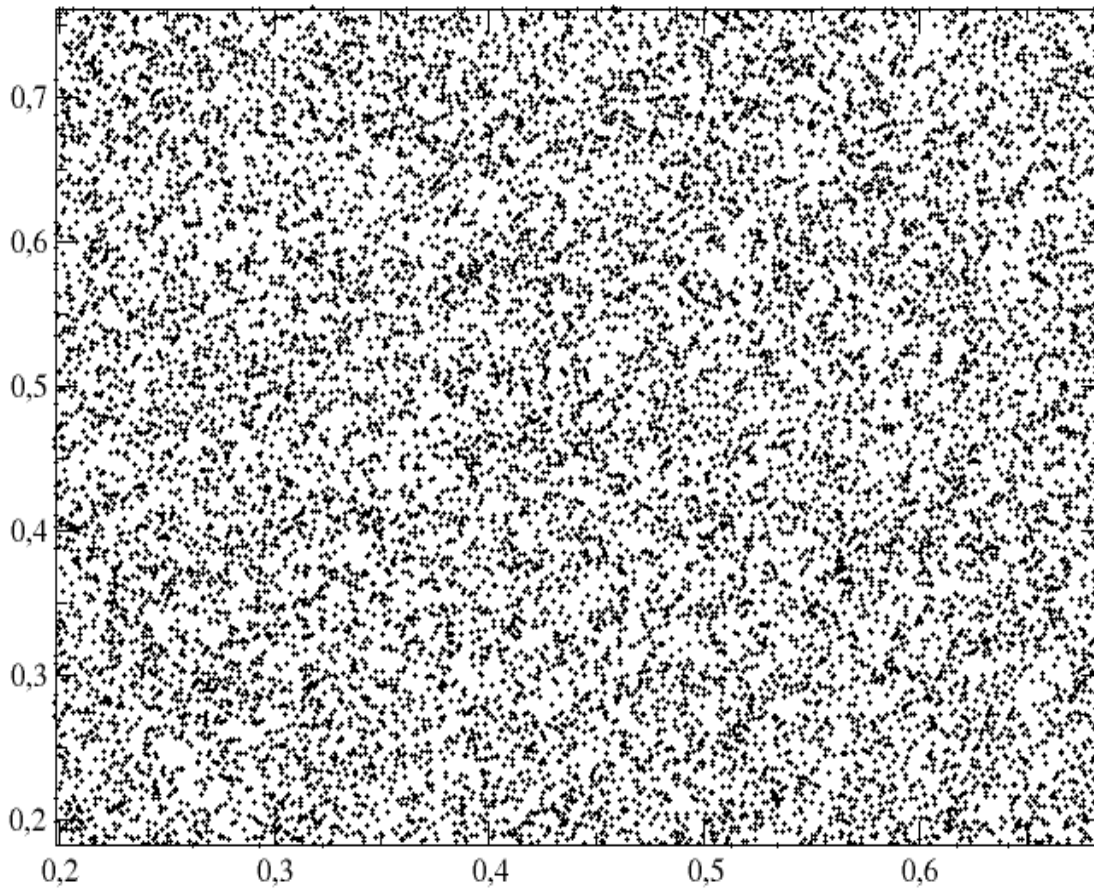


Figura (3.3.2) – Teste gráfico para geradores de números aleatórios Ran2 do livro “*Numerical recipes in Fortran 77: The art of scientific computing*”[25] que será utilizado nas simulações deste trabalho.

3.4 Algoritmo de Metropolis

Durante o Projeto *Manhattan*, no laboratório de Los Alamos, Metropolis *et al.* [27] desenvolveram um algoritmo de Monte Carlo para estudar sistemas termodinâmicos em contato com banho térmico. Mais tarde este algoritmo ficou conhecido como algoritmo de Metropolis.

Por simular sistemas termodinâmicos com contato com banho térmico, o algoritmo de Metropolis determina a configuração do ensemble canônico. Para esse ensemble a equação (3.2.2) torna-se:

$$\langle G \rangle = \int dp^{(3N)} dq^{(3N)} G(q, p) \exp[-E/(K_b T)] / Z(T, V, N) , \quad (3.4.1)$$

onde $Z(T, V, N) = \int dp^{(3N)} dq^{(3N)} \exp[-E/(K_b T)]$.

Isto indica que a probabilidade de encontrar um sistema com energia E é:

$$\rho(E) = \exp[-E/(K_b T)] . \quad (3.4.2)$$

Para realizar as transições aleatórias é necessário um sorteio de um microestado. Seja $S(E)$ a probabilidade de obter um microestado com energia E no sorteio . Dessa forma a probabilidade total de se obter um microestado com energia E é:

$$P(E) = S(E)\rho(E) = S(E) \exp[-E/(K_b T)] . \quad (3.4.3)$$

Para que o sorteio seja confiável, deve-se escolher um gerador de números aleatórios de forma a obter uma distribuição uniforme, não correlacionada, isto é:

$$S(E) = S(E') \quad , \quad (3.4.4)$$

para todos os valores de E. Como já discutido na seção anterior, geradores que obedecem rigorosamente à equação (3.4.4) é dispendioso, portanto deve-se utilizar um gerador que se aproxime ao máximo da equação (3.4.4).

microcanônico.....53 Tendo uma probabilidade de sorteio que obedeça a equação (3.4.4), então o princípio do balanço detalhado expresso pela equação (3.3.7) fica:

$$\Pi_{(E \rightarrow E')} = \exp[-(E' - E)/(K_b T)] \quad . \quad (3.4.5)$$

A peso de transição de um estado com energia E para um estado com energia E' é dado pela equação (3.4.5).

O procedimento do algoritmo de Metropolis é descrito como se segue [20,27]:

1. Sorteia-se um microestado de origem δ e um microestado de destino γ .
2. Se a energia do microestado γ for menor do que a do microestado δ aceita-se γ como a nova configuração.

3. Se a energia do microestado γ for maior do que a do microestado δ aceita-se γ com uma probabilidade dada por $P_{(\delta \rightarrow \gamma)} = \min[1, \exp(-\beta \Delta E)]$, onde $\Delta E = E_\gamma - E_\delta$ e $\beta = 1/K_b T$.

4. Compara-se o valor da probabilidade $P_{(\delta \rightarrow \gamma)}$ com o valor de um número aleatório gerado no intervalo entre 0 e 1. Se $P_{(\delta \rightarrow \gamma)}$ for maior do que o número aleatório, aceita-se γ , se for menor o sistema permanece em δ .

5. Calcula-se as grandezas macroscópicas e guarda-se os resultados

6. Repete-se os itens 1 a 5 até que as grandezas macroscópicas cheguem a um equilíbrio, isto é, adquiram um valor estacionário.

7. Calcula-se os valores médios das grandezas macroscópicas quando o sistema se encontrar no equilíbrio.

O algoritmo de Metropolis representa na verdade um método de Monte Carlo modificado, pois, ao invés de escolher configurações aleatoriamente e pesá-las com o peso de aceitação, gera-se uma amostragem de estados com uma distribuição de

probabilidade pré-fixadas [27].

3.5 Algoritmo Microcanônico

Como já dito na seção anterior, o algoritmo de Metropolis é usado para estudar sistemas em contato com um banho térmico, ou seja, sistemas no ensemble canônico. No entanto, como também foi discutido no capítulo 1 e 2, há situações em que o ensemble canônico não é equivalente ao ensemble microcanônico, o comportamento físico de um sistema no ensemble canônico pode ser diferente do comportamento desse mesmo sistema no ensemble microcanônico. Para estudar sistemas gravitacionais, o ensemble apropriado é o ensemble microcanônico [4], já que sistemas gravitacionais encontram-se isolados. Da inequivalência dos ensembles surge a necessidade de ser desenvolvido um algoritmo que simule um sistema termodinâmico isolado, um algoritmos que simule um sistema no ensemble microcanônico.

O primeiro a propor um algoritmo de Monte Carlo microcanônico foi Creutz [28]. O algoritmo de Creutz foi desenvolvido para sistemas sem energia cinética e introduziu um artifício matemático chamado de “demônio” com energia E_D de forma que a energia total seja $E_{total} = U(q) + E_D$. A energia total é constante mas pode haver troca entre o potencial do sistema e a energia do demônio. Se o demônio tiver energia suficiente para alterar a configuração de um microestado do sistema,

então o microestado é alterado, senão, mantém-se a configuração e, também no caso em que a configuração não for o estado de menor energia possível, então o sistema muda a configuração e cede energia ao demônio [23]. Este método traz informações importantes sobre estados metaestáveis [12], no entanto tal algoritmo somente pode ser utilizado para sistemas sem energia cinética, onde as partículas encontram-se bem localizadas, como uma rede cristalina, por exemplo [23].

Em 1991, J. Ray [30] publicou seu trabalho em que desenvolveu um Método de Monte Carlo Microcanônico (MMCM) com um procedimento semelhante ao Monte Carlo de Metropolis, adequando a probabilidade de transição à distribuição microcanônica.

O volume no espaço de fases é:

$$\Gamma(E, V, N) = C(N) \int dq^{(dN)} dp^{(dN)} \Theta(E - H(p, q)) \quad , \quad (3.5.1)$$

onde $C(N)$ é uma função que representa o número total de permutações possível de se realizar com as N partículas do sistema nas configurações com energia E , d é a dimensão do sistema (graus de liberdade) e Θ é a função degrau de *Heaviside*.

Seja a função hamiltoniana da forma:

$$H(p_i, q_i) = \sum_i P_i^2 / 2m + U(q_i) \quad . \quad (3.5.2)$$

Então, efetuando a integração nos momentos de modo análogo ao que está demonstrado na seção 2.2, no capítulo 2 - equações (2.2.1) a (2.2.12) - têm-se que:

$$\Gamma(E, V, N) = C'(N) \int dq^{(dN)} (E - U(q))^{(dN/2)} \Theta(E - U(q)) \quad , \quad (3.5.3a)$$

e a função microcanônica de partição:

$$\Omega(E, V, N) = (\partial \Gamma / \partial E)_{V, N} = C'(N) \int dq^{(dN)} (E - U(q))^{(dN/2-1)} \Theta(E - U(q)) \quad . \quad (3.5.3b)$$

Portanto, a probabilidade de se encontrar o estado com energia E é:

$$P(E) = (E - U(q))^{(dN/2-1)} \Theta(E - U(q)) \quad , \quad (3.5.4)$$

e o princípio do balanço detalhado leva à seguinte relação:

$$\Pi_{(q \rightarrow q')} = \Theta(E - U(q')) [(E - U(q')) / (E - U(q))]^{(dN/2-1)} \quad . \quad (3.5.5)$$

A transição é aceita com probabilidade $P(q \rightarrow q') = \min[1, \Pi_{(q \rightarrow q')}]$.

Falta agora determinar como obter a curva calórica utilizando este método. Da definição de Boltzmann para a entropia:

$$S(E, V, N) = k_b \ln \Omega(E, V, N) \quad . \quad (3.5.6)$$

A temperatura é dada por:

$$1/T = \partial S(E, V, N) / \partial E \quad (3.5.7)$$

$$1/T = (k_b / \Omega) (\partial \Omega / \partial E) \quad , \quad (3.5.8)$$

a derivada parcial na equação (3.5.8) é dada por:

$$\partial \Omega / \partial E = C(N) \int dq^{(dN)} [(dN)/2] [E - U(q)]^{((dN/2)-2)} \Theta(E - U(q)) , \quad (3.5.9)$$

Substituindo (3.5.3b) e (3.5.9) em (3.5.8) a relação para a temperatura é:

$$\beta = (k_b T)^{-1} = dN/2 \langle K^{-1} \rangle , \quad (3.5.10)$$

Ou:

$$T = [2 / (dN k_b)] \langle K \rangle . \quad (3.5.11)$$

O procedimento do algoritmo de Monte Carlo Microcanônico é descrito como se segue [30]:

1. Sorteia-se um microestado de origem δ e um microestado de destino γ .

2. Calcula-se a energia cinética do sistema na configuração γ e na configuração δ pela diferença entre a energia

total do sistema e a energia potencial total($K = E - \sum_{i,j} V_{ij}$).

3. Aceita-se γ como a nova configuração com uma probabilidade

$$P_{(\delta \rightarrow \gamma)} = \min [1, \Theta(K(q')) [(K(q')) / (K(q))]^{(3N/2-1)}] , \quad \text{onde}$$

$K(q')$ é a energia cinética do sistema no estado γ e

$K(q)$ no estado δ .

4. Compara-se o valor da probabilidade $P_{(\delta \rightarrow \gamma)}$ com o valor de um número aleatório gerado no intervalo entre 0 e 1. Se $P_{(\delta \rightarrow \gamma)}$ for maior do que o número aleatório, aceita-se γ , se for menor o sistema permanece em δ .
5. Calcula-se as grandezas macroscópicas e guarda-se os resultados.
6. Repete-se os itens 1 a 5 até que as grandezas macroscópicas cheguem ao equilíbrio, isto é, adquiram um valor estacionário.
7. Calcula-se os valores médios das grandezas macroscópicas quando o sistema se encontra no equilíbrio.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo apresentarei os resultados do modelo SGR obtidos nas simulações de Monte Carlo Microcanônico. A introdução do potencial de partícula dura muda o comportamento das propriedades termodinâmicas em relação àquele observado com o anel preenchido com partículas penetráveis. Na verdade, a introdução das partículas do tipo esfera rígida representa melhor a situação de equilíbrio do virial para forças gravitacionais do que quando o potencial é regularizado pelo parâmetro de *softening*, isso porque a introdução do potencial de partícula rígida possui dois regimes, um regime de altas energias, e outro de baixas energias, este com calor específico negativo e constante. Outro resultado interessante é a distribuição das partículas no anel que, ao contrário do que é observado quando se utiliza o *softening*, não formam um único núcleo denso (distribuição análoga à distribuição ferromagnética), mas vários aglomerados de partículas (distribuição análoga à distribuição antiferromagnética).

As simulações foram desenvolvidas em linguagem *FORTRAN* (consultar Apêndice A para ver os códigos fonte). Para a análise gráfica dos dados obtidos foram utilizados os programas *GRACE* e *ORIGIN 8.0*.

O Capítulo 4 está estruturado da seguinte forma: na seção 4.1 discutirei a convergência da SMC do anel auto-gravitante; na seção 4.2 apresentarei os resultados obtidos para a forma da curva calórica e comparar com a curva calórica do anel preenchido com partículas penetráveis; na seção 4.3 mostrarei a dependência da curva calórica com relação ao tamanho das partículas e à quantidade de partículas no anel; na seção 4.4 mostrarei a curva calórica reescalada pelo menor valor de energia possível para o sistema e o comportamento da curva com relação ao espaço total ocupado pelas partículas no anel; por fim na seção 4.5 apresentarei os resultados para o parâmetro de ordem do anel e histograma da distribuição de partículas, bem como compará-los com os resultados obtidos para o anel preenchido por partículas penetráveis.

4.1 Convergência do MMCM

Os gráficos das figuras (4.1.1) e (4.1.2) mostram a convergência da temperatura com relação ao número de vezes que uma transição aleatória é testada pelo Monte Carlo Microcanônico.

Pelo gráfico da figura (4.1.1) pode-se perceber que o sistema atinge rapidamente uma configuração de equilíbrio, aproximadamente 5000 iterações são necessárias para atingir o equilíbrio. Assim, para garantir que o sistema se encontrava no equilíbrio, os valores das grandezas para o cálculo das médias foram tomadas a partir de 50000 iterações.

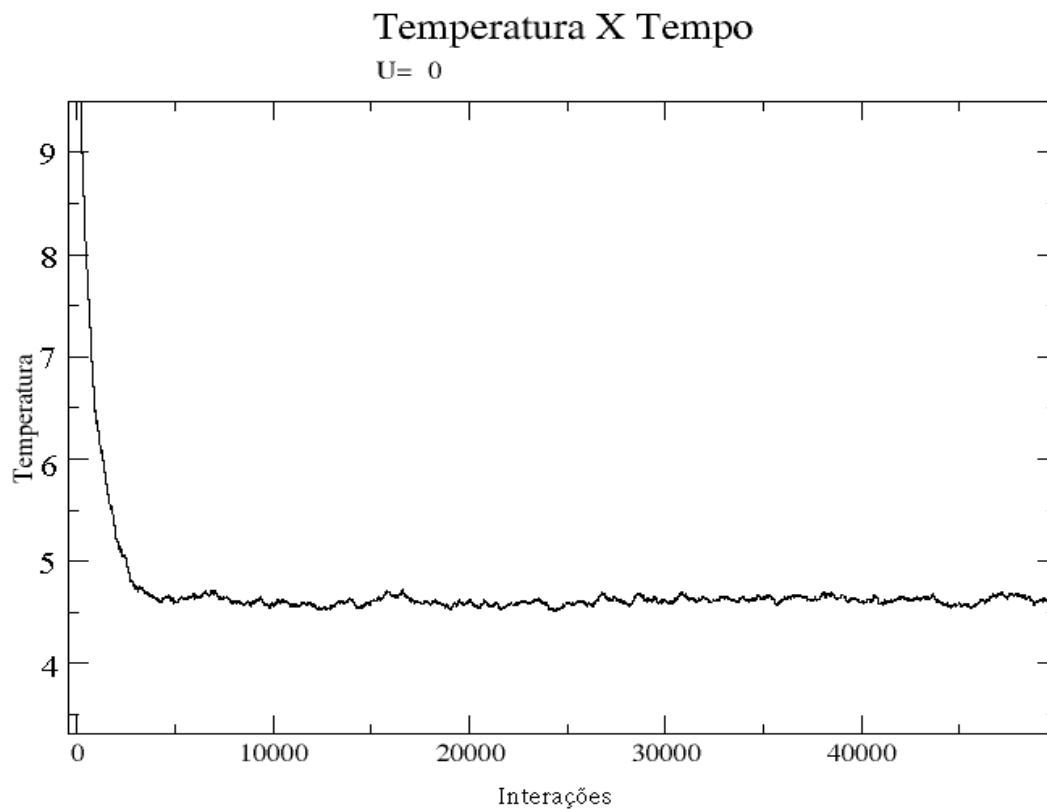


Figura (4.1.1) – Gráfico mostrando a convergência da simulação de MMCM no tempo

Os gráficos da figura (4.1.2) mostram a relação da convergência da temperatura com o número de partículas. Quanto maior o número de partículas, menores são as oscilações da temperatura. Dessa maneira, o desvio padrão do valor médio da temperatura diminui com o aumento do número de partículas e melhora a estatística da simulação.

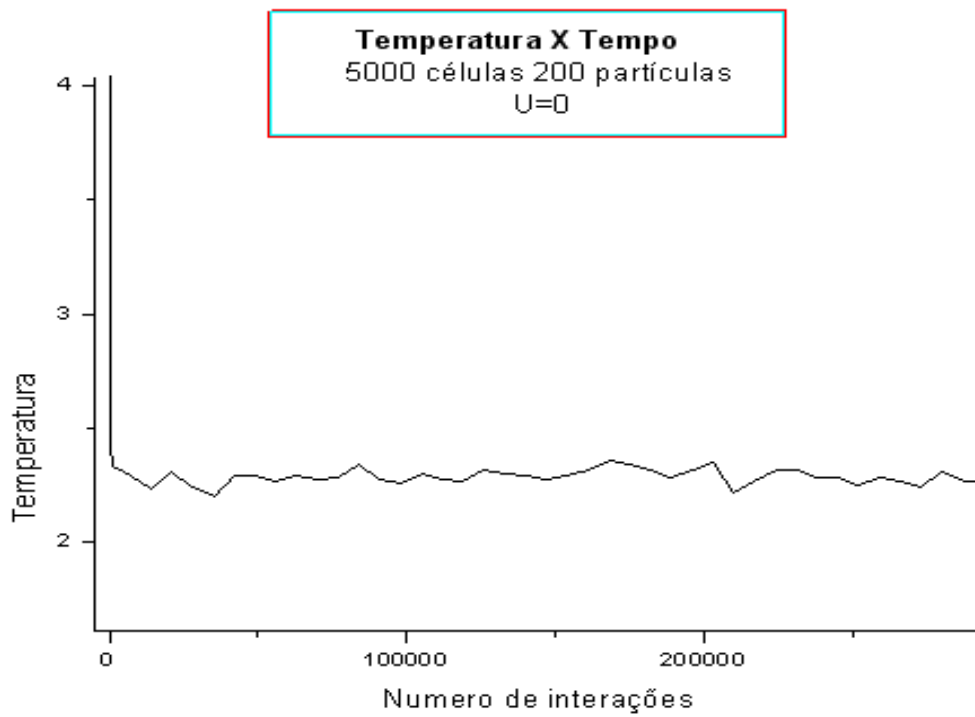


Figura (4.1.2a) – Convergência do MMCM no tempo para 5000 células e 200 partículas

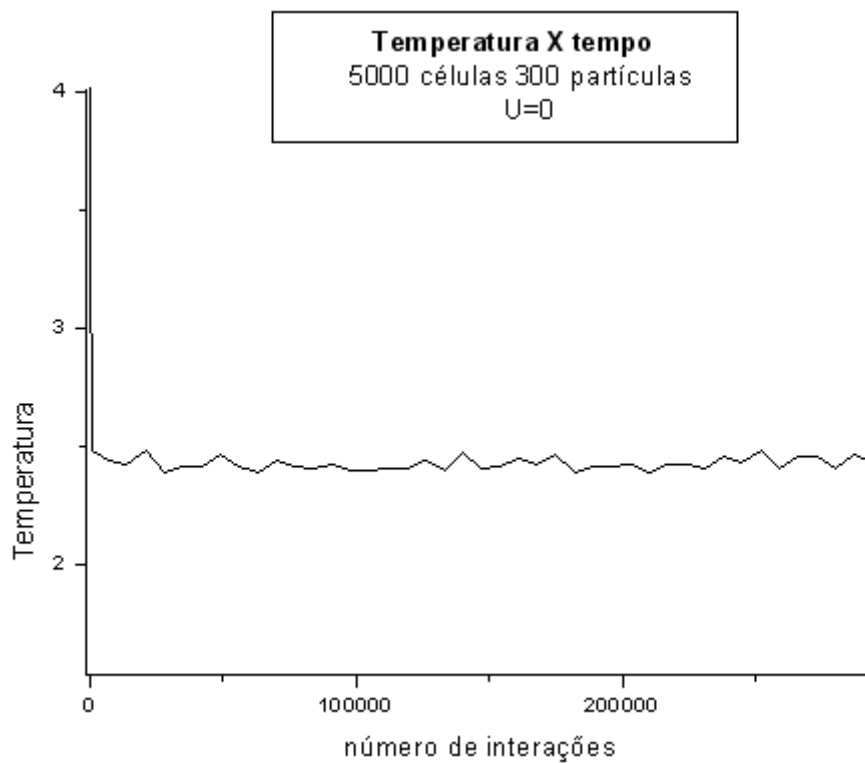


Figura (4.1.2b) – Convergência do MMCM no tempo para 5000 células e 300 partículas

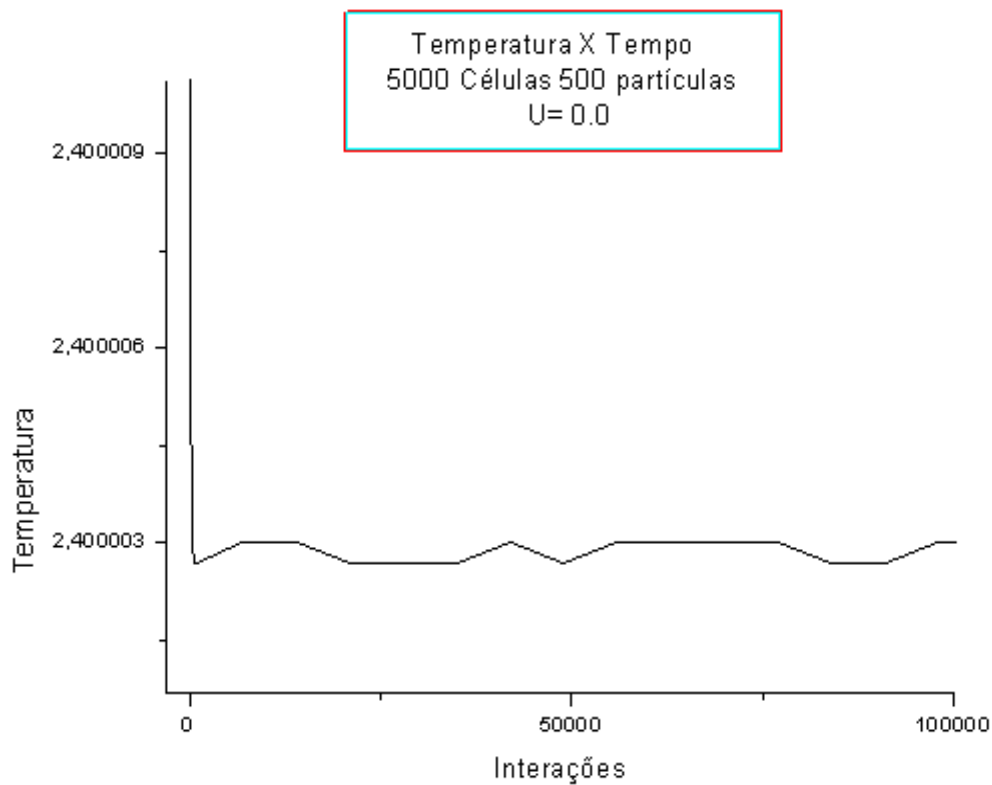


Figura (4.1.2c) – Convergência do MMCM no tempo para 5000 células e 500 partículas

4.2 Comparação entre Curvas Calóricas para Partículas Penetráveis e Partículas Rígidas

O gráfico da figura (4.2.1) mostra a curva calórica obtida pela simulação para o caso de partículas penetráveis. O resultado mostrado é consistente com os resultados obtidos por Padmanabhan [4], Sota *et al.* [5] e Ruffo *et al.* [6] mostrado no primeiro gráfico da figura (2.3.1), isso mostra que o algoritmo da simulação funciona corretamente.

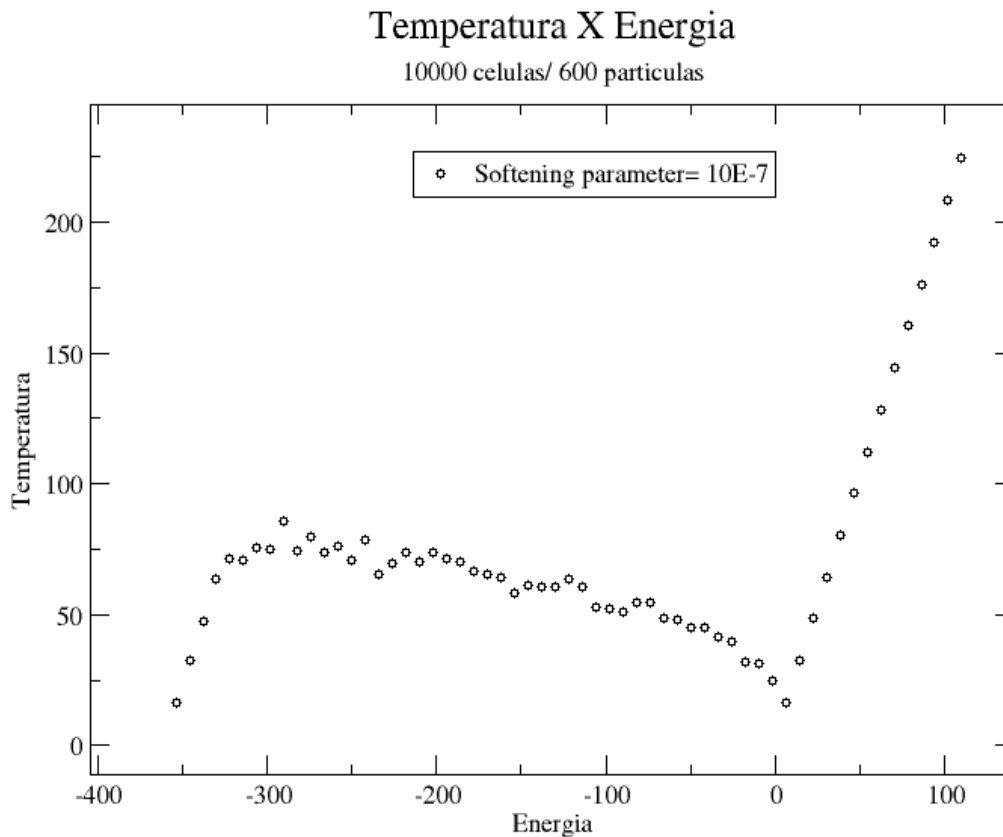


Figura (4.2.1) – Resultado da Simulação de Monte Carlo Microcanônico para o modelo SGR com partículas penetráveis

Para partículas penetráveis, o modelo SGR apresenta três regimes: regime colapsado, regime halo e regime gás [5]. O regime colapsado é o regime a baixas energias ($U \leq U_c$), altamente inhomogêneo, com calor específico positivo, onde a maior parte das partículas encontram-se colapsadas em um aglomerado denso [5]. O regime halo é caracterizado por um regime de energias intermediárias ($U_c < U < U_g$), uma menor inhomogeneidade e calor específico negativo [5]. E o regime gás é caracterizado por um regime de altas energias ($U \geq U_g$) e o calor específico é positivo e constante além de ser uma regime com uma distribuição homogênea de

partículas no anel. Neste regime a energia do sistema é grande em comparação à energia potencial gravitacional do sistema [4] e, assim, as partículas se movem livremente sem formar aglomerados [5].

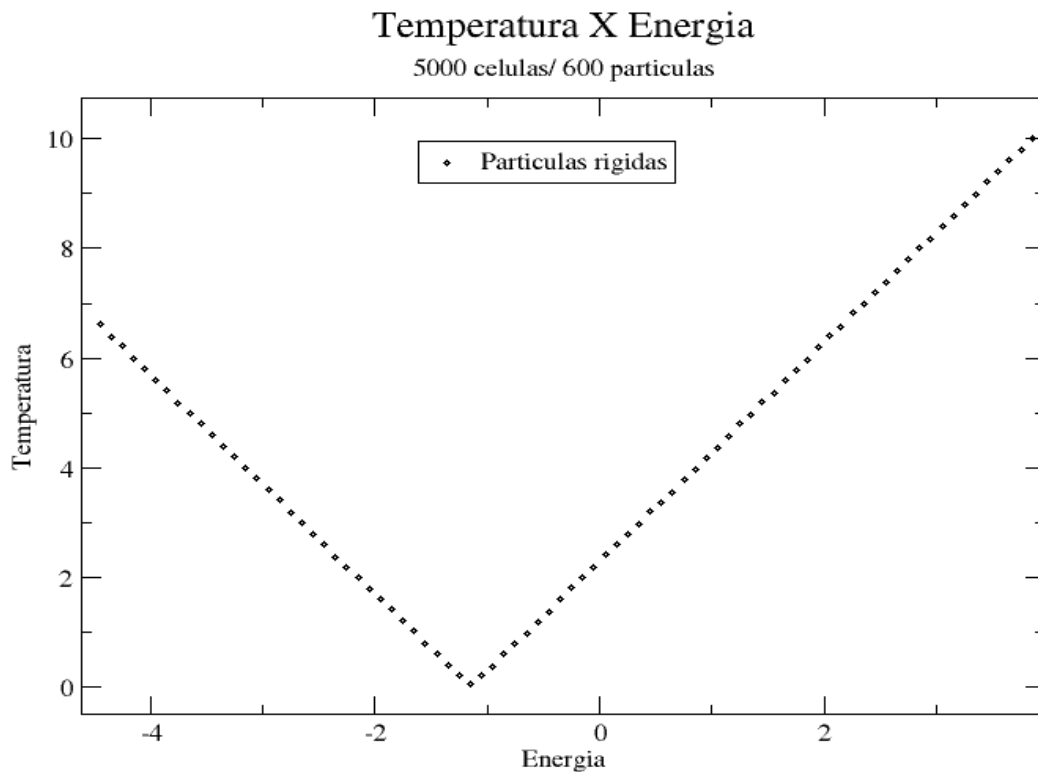


Figura (4.2.2) – Resultado da Simulação de Monte Carlo Microcanônico para o model SGR com partículas rígidas.

O gráfico da figura (4.2.2), mostra o resultado da simulação quando as partículas do sistema são rígidas. A introdução das partículas rígidas é rapidamente notada, pois permite somente a existência de dois regimes: um regime com calor específico negativo constante e outro com calor específico positivo constante. O

resultado também mostra-se consistente com o resultado obtido por Padmanabhan [4], mostrado no segundo gráfico da figura (2.3.1).

A presença do regime com calor específico positivo a baixas energias é removida. E esse regime foi apontada por Sota *et al.* [5] como sendo, realmente, devido ao corte no potencial exercido pelo parâmetro de *softening*, sem o qual as partículas cairiam na singularidade do potencial.

É importante notar que para os dois casos (partículas penetráveis e rígidas) o sistema possui um regime com calor específico positivo constante para altas energias. Este regime para partículas rígidas equivale ao regime gás para partículas penetráveis. As partículas se movem livremente sem formar aglomerados e a energia do sistema é muito maior do que a energia potencial gravitacional.

O regime com calor específico negativo a baixas energias representa o equilíbrio do virial para forças gravitacionais, discutido no capítulo 2. Sistemas com interações gravitacionais no equilíbrio do virial têm calor específico negativo e constante - equações (2.1.14) e (2.1.15). Por este motivo o modelo com a introdução das partículas rígidas representa as propriedades intrínsecas da gravidade e sem a necessidade da introdução de parâmetros arbitrários como o parâmetro de *softening* e sim com a introdução de um parâmetro menos arbitrário que é o tamanho das partículas.

4.3 Dependência da curva calórica com relação à quantidade de células e partículas do sistema

O gráfico mostrado na figura (4.3.1) mostra a dependência da curva calórica com a quantidade de partículas do sistema. Esse gráfico mostra o que já foi discutido na seção 4.1, o número de partículas não altera o valor médio da temperatura, somente melhora a estatística do sistema, isto é, a temperatura é uma grandeza intensivo com relação ao número de partículas. As curvas calóricas são exatamente as mesmas para quantidade de partículas diferentes. Uma vez que a temperatura do sistema é um parâmetro intensivo, esse resultado é consistente com a teoria.

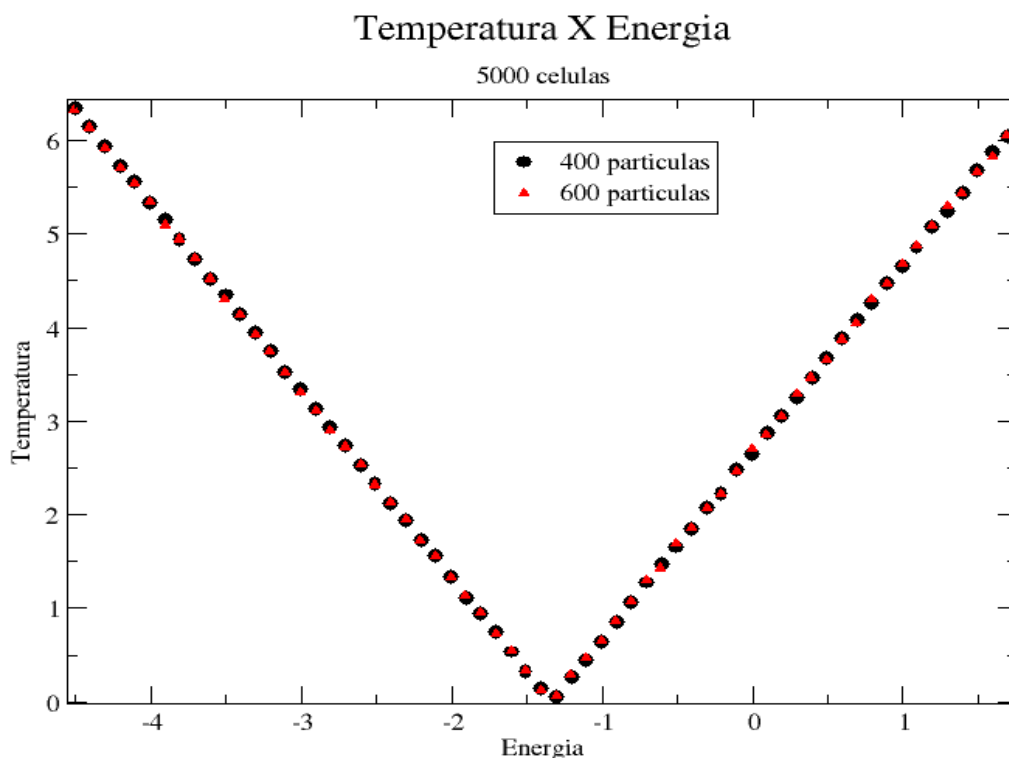


Figura (4.3.1) – Dependência da curva calórica com o número de partículas no anel

O gráfico da figura (4.3.2) mostra a dependência da curva calórica com relação ao tamanho das partículas do anel. O comprimento do anel unitário é fixo e igual a 2π , mas o número de células pode variar. O tamanho de cada célula é dado por:

$$L = 2\pi / N_c , \quad (4.3.1)$$

onde N_c é o número de células do anel. Como cada célula só pode abrigar uma partícula, então o tamanho da célula é o tamanho da partícula.

À medida que o tamanho das partículas diminuem, para uma quantidade fixa de partículas, diminui-se o espaço ocupado no anel. Como há um espaço vazio maior no anel para as partículas ocuparem, então as partículas ficam mais uniformemente distribuídas e o regime gás é atingido para energias menores. Isto causa o deslocamento observado nas curvas calóricas do gráfico da figura (4.3.2).

Deve-se notar também que, à medida que o tamanho das partículas diminui, elas podem se aproximar mais uma das outras. Por consequência, o menor valor de energia possível para o sistema (quando todas as partículas estivessem juntas, uma ao lado da outra) decresce quando as partículas diminuem de tamanho. Assim, uma melhor análise seria reescalar a energia em relação ao valor absoluto do menor valor de energia possível para o anel:

$$E' = E / |E_{min}| , \quad (4.3.2)$$

onde E_{min} é o menor valor de energia possível para o sistema. Dessa maneira, a energia reescalada seria o valor relativo da energia com relação ao menor valor de

energia possível. O menor valor possível para a energia reescalada é de -1 (adimensional) para qualquer configuração de parâmetros.

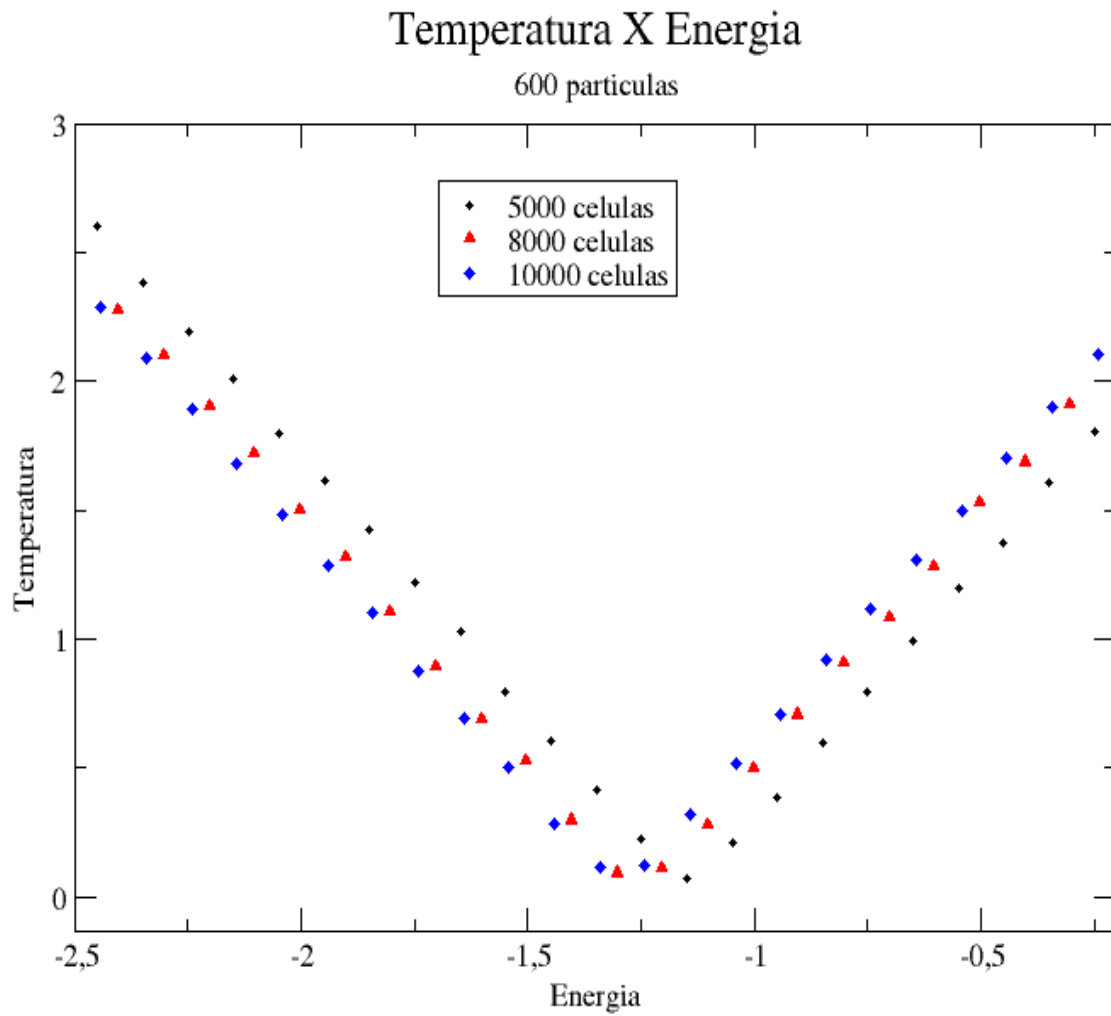


Figura (4.3.2) – Dependência da curva calórica com o número de células no anel

4.4 Dependência da curva calórica reescalada com relação ao espaço ocupado no anel

Ao obter os gráficos reescalados, obtivemos que o parâmetro que modificava a curva calórica não era mais a quantidade de células do sistema (ou o tamanho das partículas), mas sim a razão número de partículas por número de células, como é possível notar nos gráficos das figuras (4.4.1a), (4.4.1b) e (4.4.1c). Essa razão entre o número de partículas e o número de células do sistema representa a razão do espaço ocupado no anel pelo espaço total do anel e é chamada de ocupação relativa do anel.

O espaço ocupado por partículas é:

$$S = N L \quad . \quad (4.4.1)$$

Substituindo o valor da equação (4.3.1) na relação acima, ficamos com

$$S = 2\pi N / N_c \quad . \quad (4.4.2)$$

Como a circunferência total do anel (C) é 2π , então:

$$\rho = S / C = N / N_c \quad , \quad (4.4.3)$$

ρ é a ocupação relativa do anel.

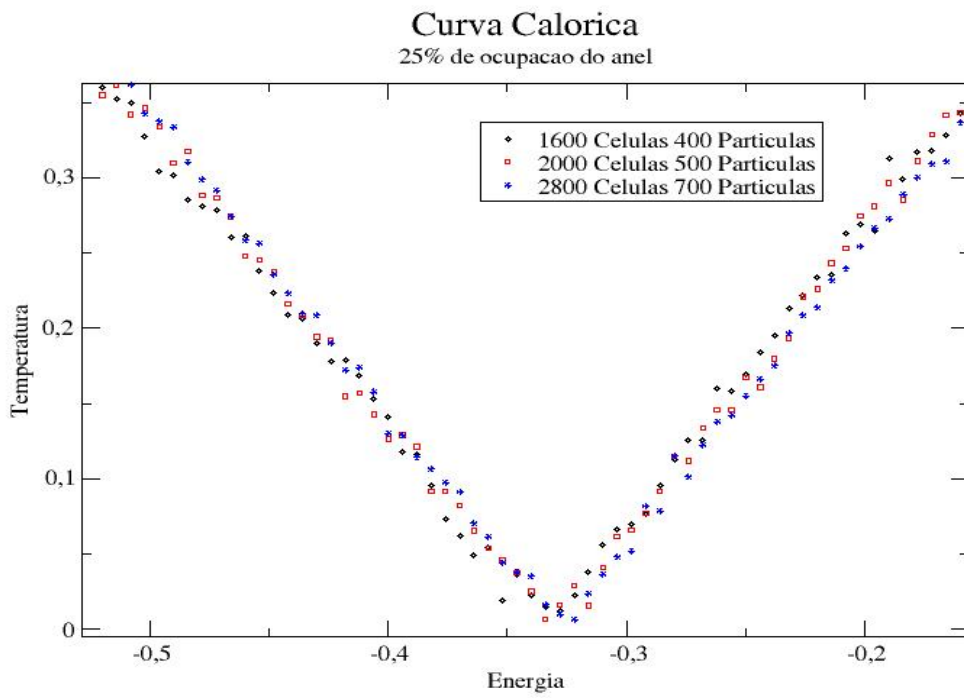


Figura (4.4.1a) – Curva calorica reescalada para 25% do anel preenchido

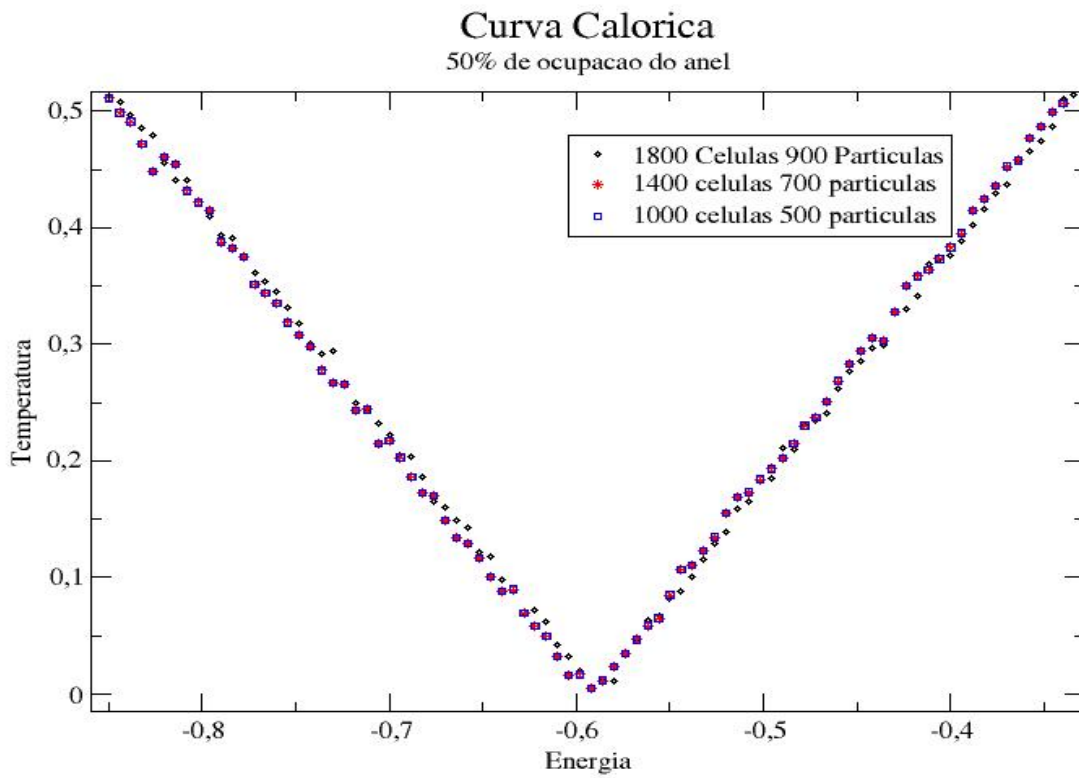


Figura (4.4.1b) – Curva calórica reescalada para 50% do anel preenchido

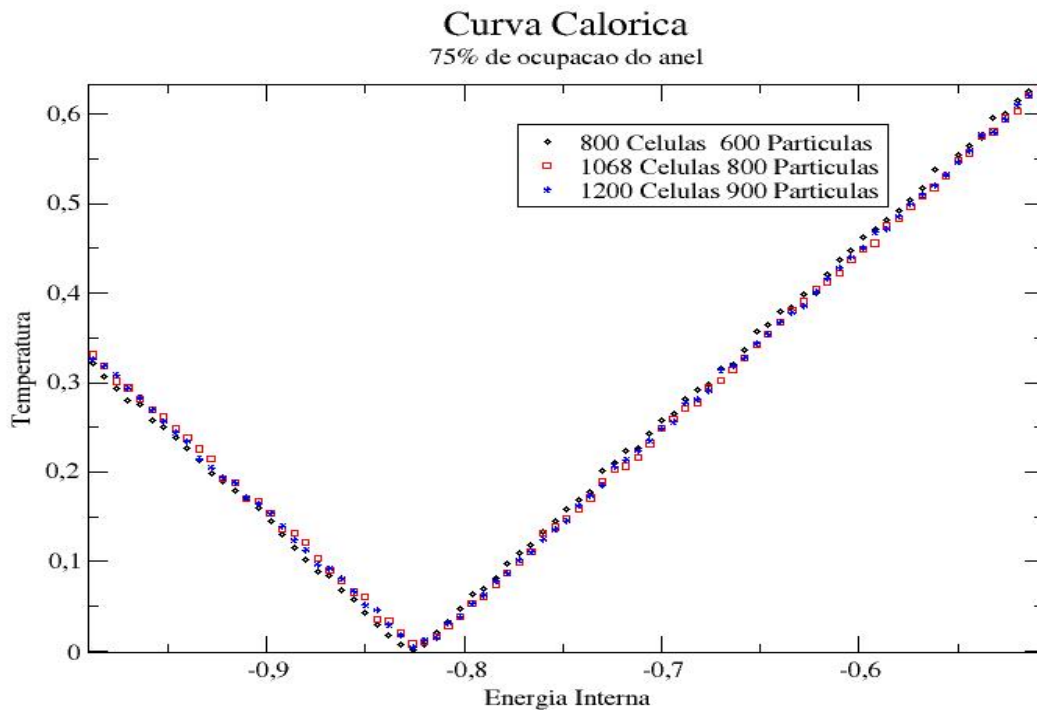


Figura (4.4.1c) – Curva calórica reescalada para 75% do anel preenchido

Na figura (4.4.2) é possível ver a dependência da curva calórica com relação à ocupação relativa do anel. Quanto mais preenchido o anel está, o regime homogêneo é atingido para menores valores de energia comparados ao menor valor de energia possível. Isso até que para uma determinada ocupação, o regime com calor específico negativo está ausente. Este resultado é explicado pelo fato de que, quanto mais ocupado o anel está, as partículas estão mais uniformemente distribuídas no anel e, assim, o regime gás é atingido para valores menores de energia. Na figura (4.4.3) é possível ver o gráfico da energia relativa de transição pela ocupação relativa do anel.

O resultado do gráfico da figura (4.4.2) é consistente com o equilíbrio do virial, em que a temperatura reescalada fica da forma:

$$E_{\min} = (1/N) \sum_i^N L^{-1} = N/L = -(N \rho)/(2\pi) \quad , \quad (4.4.4)$$

$$T' = T / |(E_{\min})| \propto -2\pi/S = -1/\rho \quad , \quad (4.4.5)$$

onde ρ é a ocupação relativa do anel. Assim, no regime com calor específico negativo, quanto mais preenchido o anel está, menor deve ser sua temperatura, isso é observado no gráfico da figura (4.4.2).

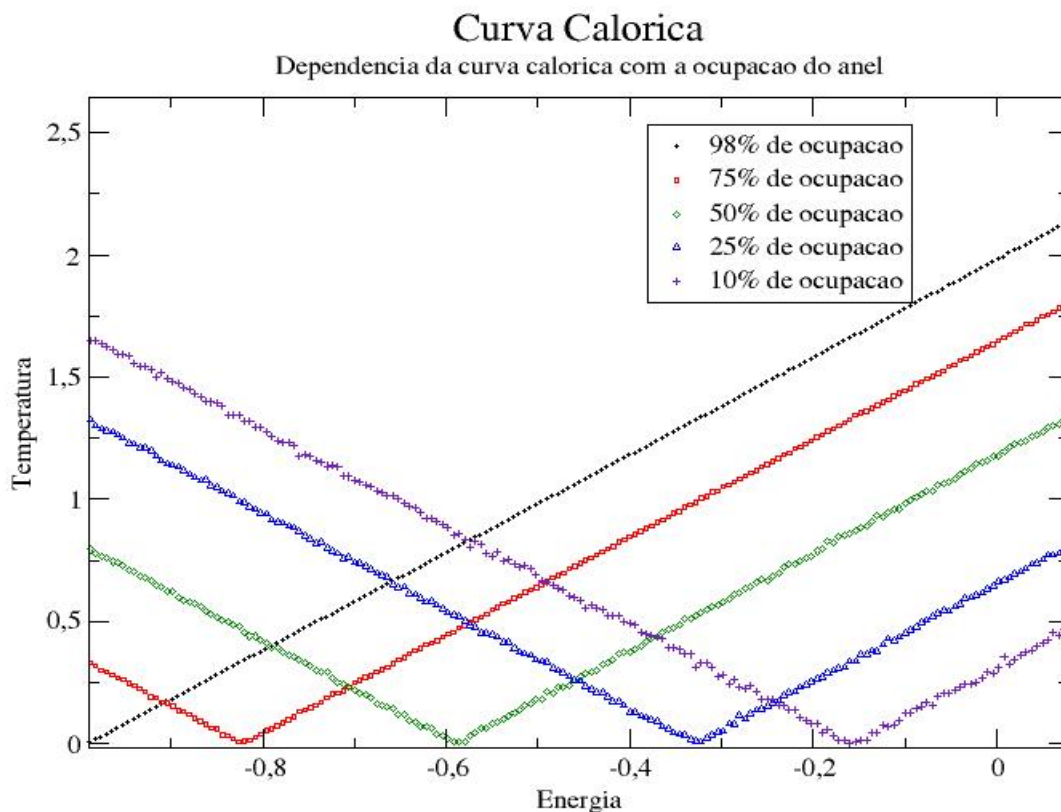


Figura (4.4.2) – Dependência da curva calórica com relação à ocupação relativa do anel

Energia de Transicao X Densidade

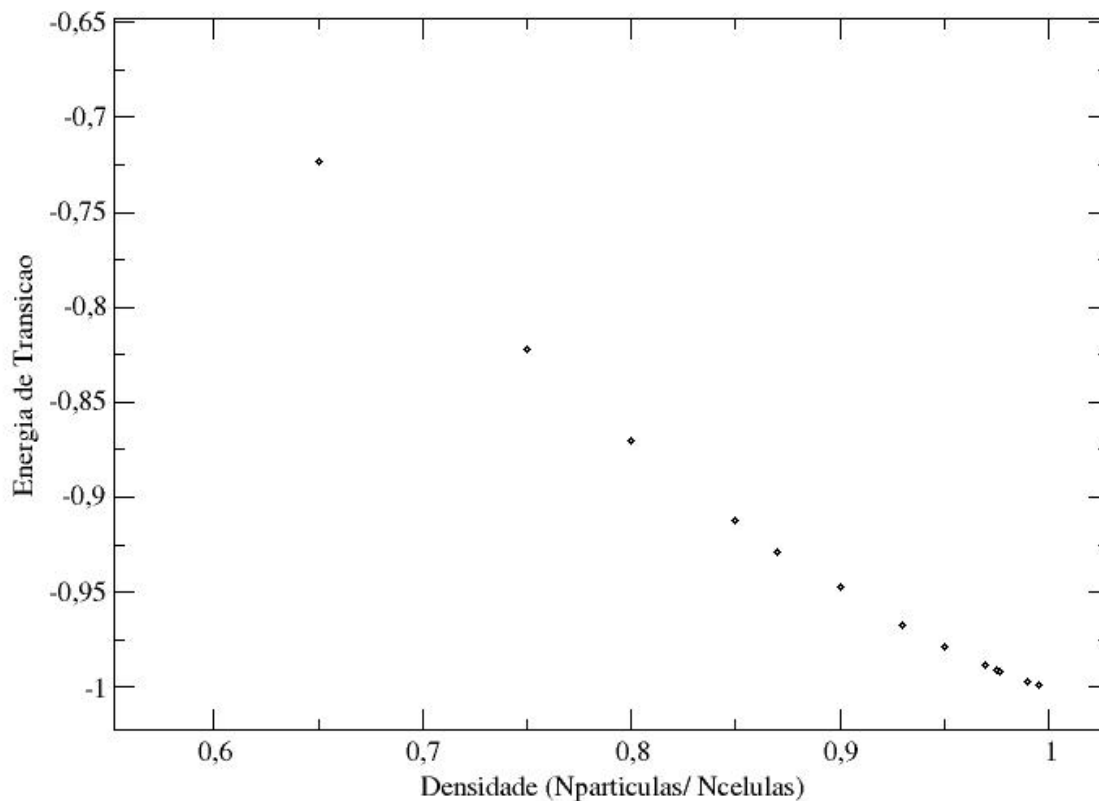


Figura (4.4.3) – Gráfico mostrando a dependência da energia de transição de regime com relação ao espaço relativo ocupado no anel

O gráfico da figura (4.4.4) foi feito com uma maior resolução de pontos na região da transição de regime. É possível verificar que, ao invés de um formato de quina ou salto de temperatura o qual a curva calórica parece ter nos outros gráficos, o formato da curva é contínuo e diferenciável. Este gráfico mostra que se aí houver uma transição de fase, essa seria uma transição de fase contínua e não de primeira ordem.

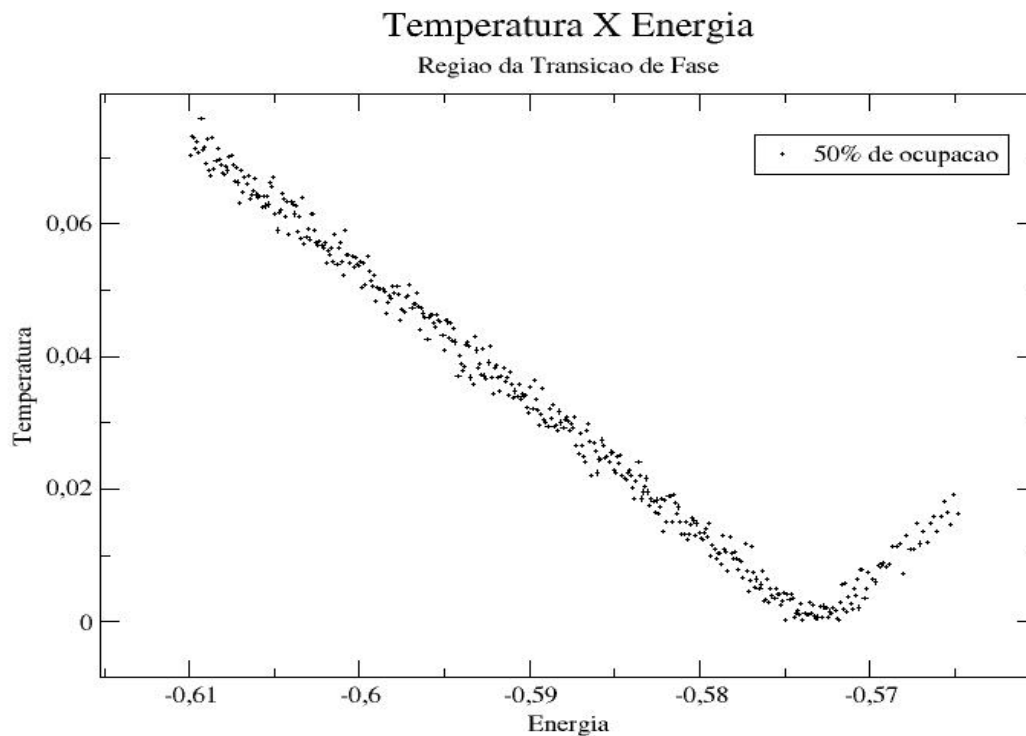


Figura (4.4.4) – Curva calórica com maior resolução de pontos, mostrando uma possível transição de fase de segunda ordem

4.5 Parâmetro de ordem

Antes de apresentar e discutir os resultados é necessário definir qual é grandeza que desempenha o papel de parâmetro de ordem para o modelo SGR. O parâmetro de ordem para o modelo SGR é comumente chamado na literatura de “magnetização” em analogia aos modelo magnéticos [1,6,31]. A “magnetização” M para o modelo SGR indica se há alguma parte do anel onde as partículas estão concentradas assimetricamente em relação ao resto do anel, isto é, quando a distribuição de partículas no anel é homogênea.

Por definição, o parâmetro de ordem é:

$$M = \sqrt{\langle \sin \theta \rangle^2 + \langle \cos \theta \rangle^2} . \quad (4.5.1)$$

A figura (4.5.1) mostra o resultado obtido pelo programa para o caso de partículas penetráveis. O resultado concorda com aqueles previamente obtidos por Tatekawa *et al.* [5,6] mostrando o regime colapsado, que é altamente inhomogêneo e colapsado em um aglomerado de partículas, seguida por uma transição de regime e em seguida o regime gás que é homogêneo.

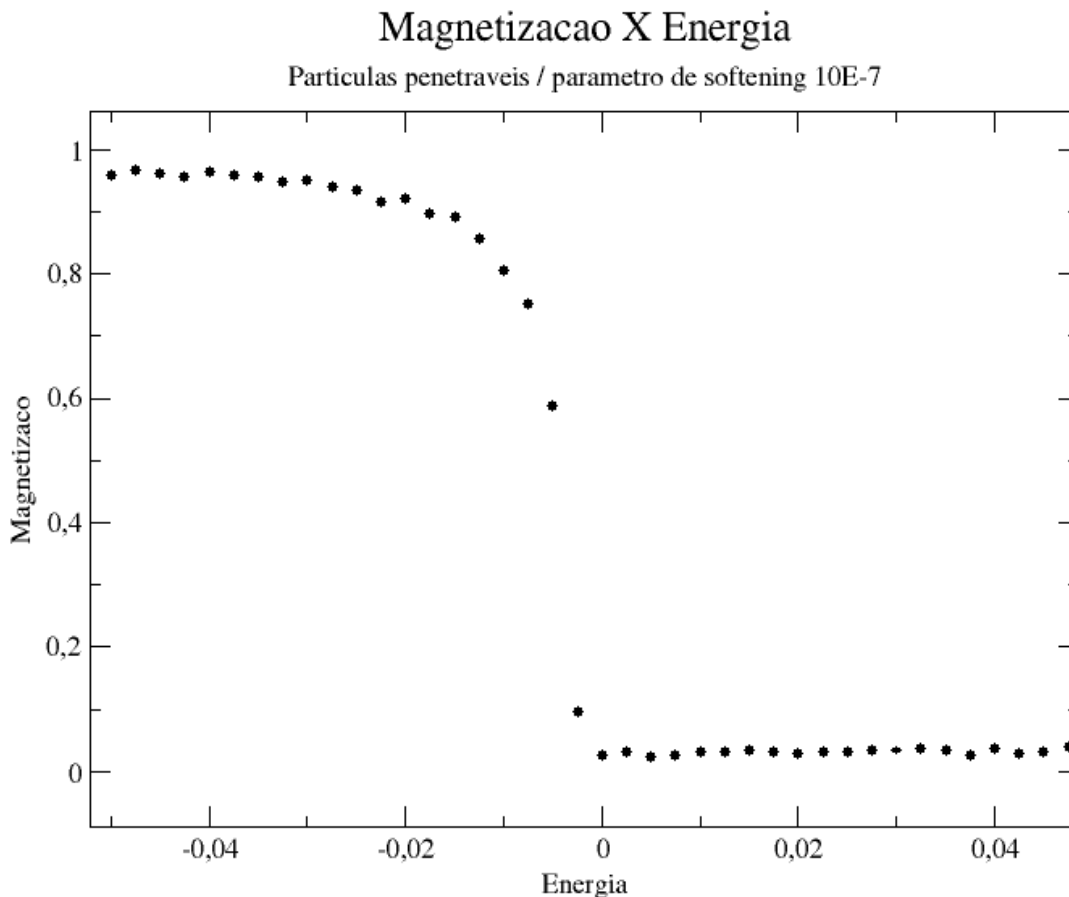


Figura (4.5.1) - “Magnetização” em função da energia para o caso de partículas penetráveis, com o parâmetro de softening 10^{-7} .

A figura (4.5.2) mostra a “magnetização” em função da energia para o caso de partículas rígidas. A introdução das partículas rígidas é rapidamente notada, pois ao introduzi-las ocorre uma mudança em como as partículas se distribuem no anel. Ao invés de se distribuírem de maneira inhomogênea, as partículas se distribuem de maneira homogênea para qualquer um dos regimes observados na curva calórica, com exceção do menor valor de energia possível para o sistema. A figura (4.5.3) e (4.5.4) mostram a forma como as partículas se distribuem no anel para o regime de energia que representa o equilíbrio do virial para sistemas gravitacionais.

As figuras (4.5.3) e (4.5.4) mostram o histograma da distribuição das partículas no anel para os casos de partículas impenetráveis e penetráveis respectivamente. Conforme o histograma da figura (4.5.3), o que ocorre para as partículas rígidas é que as partículas formam vários aglomerados envolvidos por partículas halo que evaporam dos aglomerados, ao invés do que ocorre para as partículas penetráveis, situação em que as partículas formam um único aglomerado denso envolvido por partículas halo que evaporam desse aglomerado, conforme pode-se verificar pela figura (4.5.4). A figura (4.5.5) e (4.5.6) mostram ilustrações de configurações de equilíbrio para o regime com calor específico negativo para o caso de partículas rígidas e de partículas penetráveis respectivamente.

Uma possível explicação para tais resultados é que ocorre a formação de uma distribuição análoga à distribuição antiferromagnética, na qual estados homogêneos são estáveis para todos os valores de energia e exibem a formação de vários núcleos,

S. Ruffo [4] *et al. apud* T. Dauxois *et al.* [32-35].

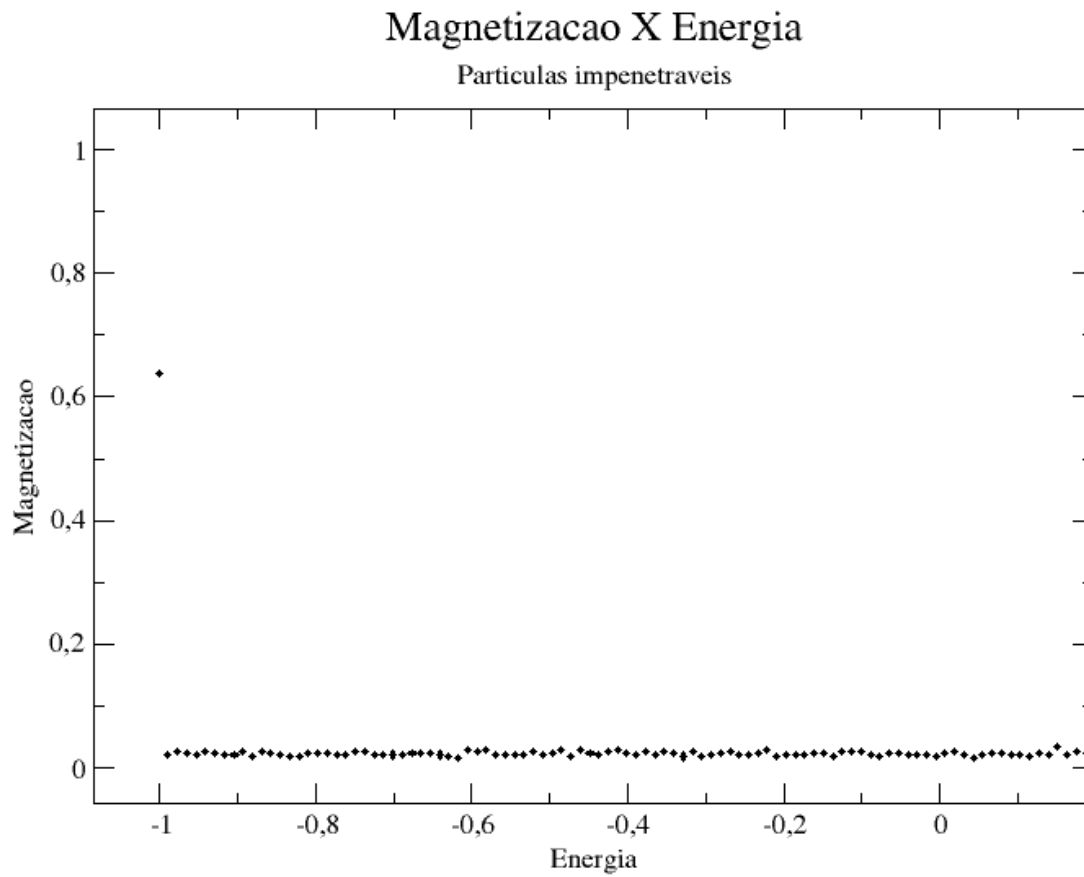


Figura (4.5.2) - “Magnetização” em função da energia para o caso com partículas rígidas. Estados homogêneos são estáveis para todas as energias

Histograma da Distribuicao do Anel

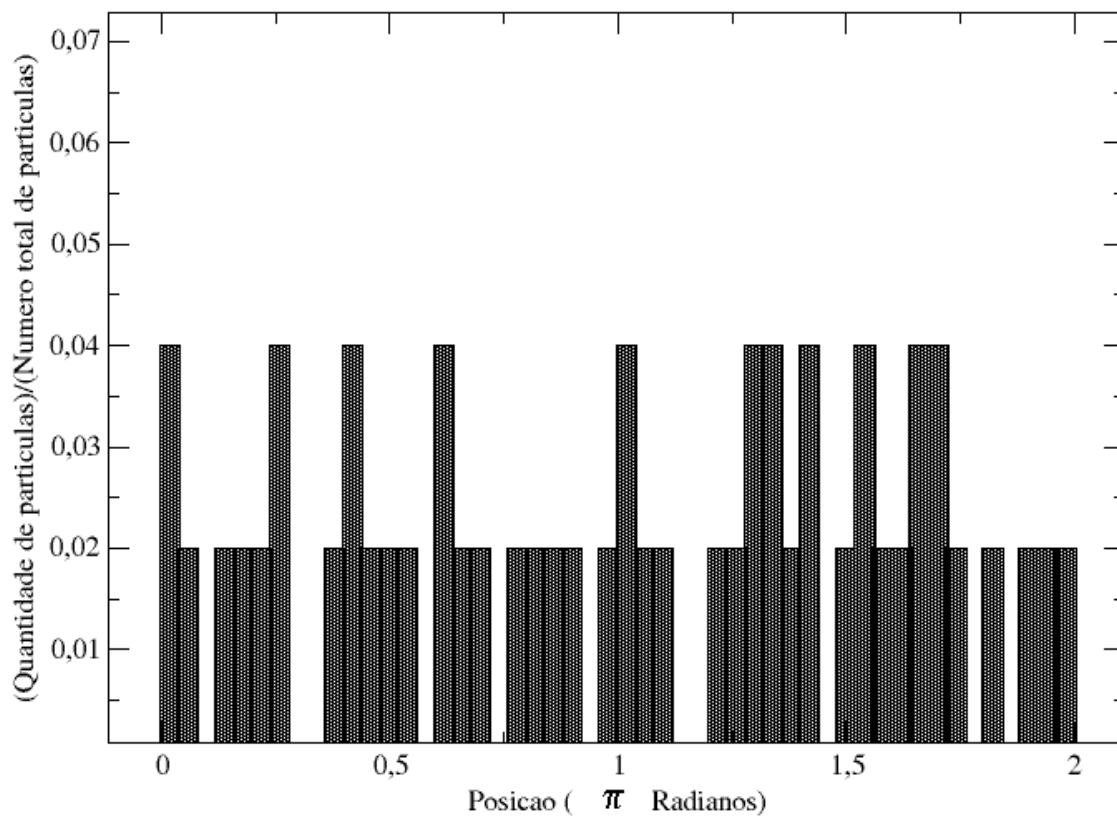


Figura (4.5.3) – Histograma da distribuição de partículas no anel preenchido por partículas rígidas.

Histograma Da Distribuicao

Anel com particulas penetraveis

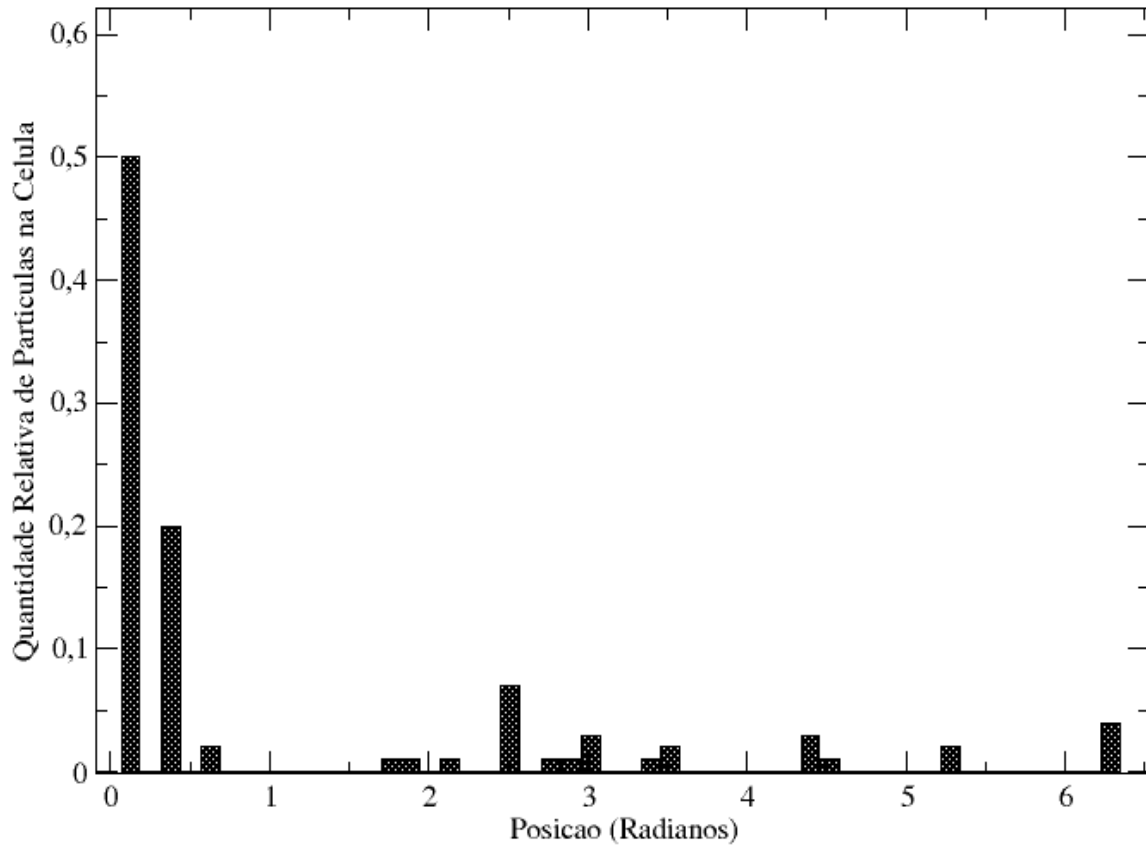


Figura (4.5.4) – Histograma da distribuição de partículas no anel preenchido por partículas penetráveis.

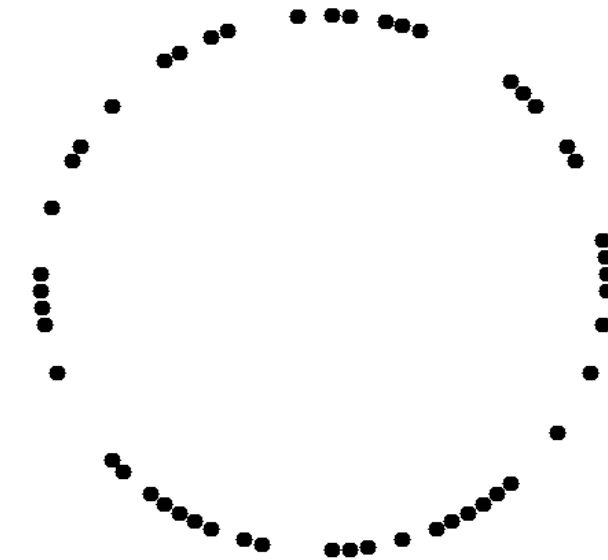


Figura (4.5.5) – Ilustração que mostra uma distribuição de equilíbrio para o regime de energia com calor específico negativo para o caso de partículas rígidas. É possível notar a formação de vários aglomerados.

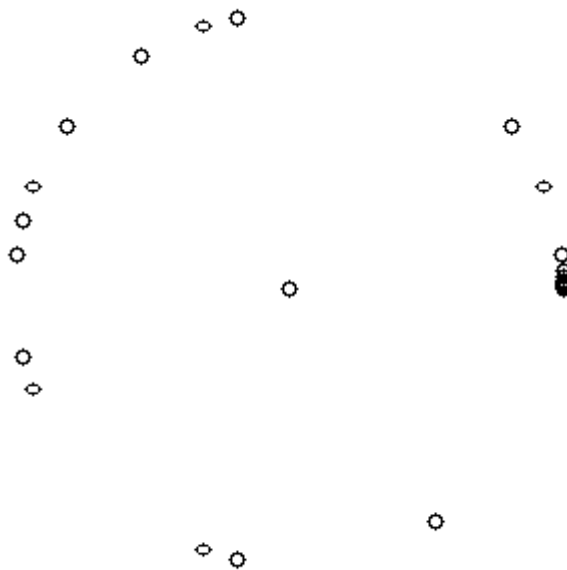


Figura (4.5.6) – Ilustração que mostra uma distribuição de equilíbrio para o regime de energia com calor específico negativo para o caso de partículas penetráveis. Há somente a formação de um aglomerado denso à direita.

Conclusões

Após as análises dos dados gerados nas simulações usando o MMCM para o modelo SGR encontramos resultados interessantes acerca do comportamento de sistemas que interagem exclusivamente por forças de longo alcance.

A substituição das partículas penetráveis, que usualmente são usadas nesse modelo, por partículas impenetráveis é rapidamente notada, pois altera o formato da curva calórica. O regime de energia com calor específico positivo a baixas energias é removida, e, essa fase é, de fato, gerada pela regularização do potencial para curtas distâncias (parâmetro de *softening*). Para o sistema estudado, há dois regimes de energia: um regime de aglomerados com calor específico negativo e constante e um regime gás com calor específico positivo e constante. O modelo SGR com partículas impenetráveis também representa bem o comportamento de sistemas no equilíbrio do viral para forças de longo alcance por ter um regime com calor específico negativo e constante.

Para entender a dependência da curva calórica com relação ao tamanho das partículas diminuimos o tamanho dessas. Ao fazer isto o espaço vazio no interior do anel aumenta, dessa maneira as partículas ficam mais uniformemente distribuídas e o regime gás é atingido para valores menores de energia. Entretanto, reduzindo o

tamanho das partículas, diminuímos também o valor do estado fundamental de energia para o sistema, portanto, este resultado não servia, comparativamente, para determinar qual sistema atingia o regime gás mais rapidamente. Para essa análise reescalamos a função hamiltoniana e a energia pelo menor valor de energia possível para o sistema.

Ao reescalarmos a energia do sistema, notamos que não mais o tamanho das partículas alterava a curva calórica, mas sim o espaço relativo ocupado pelas partículas no sistema. Quanto mais preenchido estava o anel, o regime gás era atingido para valores menores de energia, até o ponto em que o anel estivesse totalmente ocupado e o regime de aglomerados desaparecesse. O resultado é consistente, pois nessa condição, menos espaço há para as partículas transitarem, então, mais facilmente elas ficam distribuídas uniformemente no anel.

Outro resultado interessante obtido foi que a possível transição de fase entre o regime aglomerado e o regime gás seria uma transição contínua, pois não ocorre de maneira abrupta, mas de forma suave, contínua e diferenciável.

Estudamos também o parâmetro de ordem para o SGR. Com o mesmo programa obtivemos os resultados previamente obtidos por Tatekawa et al. [5, 6], nos quais há uma fase inhomogênea caracterizada pela formação de um aglomerado no anel (*core*) e algumas partículas que evaporam do anel (*halo*) e uma fase homogênea na qual as partículas se distribuem uniformemente pelo anel. Para o modelo com

partículas rígidas, o que ocorre é a formação de um único aglomerado para o menor valor de energia possível para o sistema e a formação de vários aglomerados que se distribuem uniformemente pelo anel para os outros valores de energia até a energia de transição, na qual as partículas se distribuem uniformemente no anel e não mais por aglomerados.

Uma possível explicação para o comportamento do SGR com partículas impenetráveis é que ocorre uma distribuição análoga a uma distribuição antiferromagnética do modelo HMF (Hamiltoniano de Campo Médio), em que os estados homogêneos são estáveis para todas as energias [32-35].

Para o futuro investigarei: (i) um melhor estudo sobre o parâmetro de ordem do sistema, (ii) o motivo que leva o sistema se distribuir uniformemente em aglomerados ao introduzir partículas impenetráveis, (iii) estudar outras propriedades termodinâmicas do SGR como a compressibilidade, (iv) estudar o comportamento do sistema ao alterar a geometria do modelo, como por exemplo ao invés de estudar partículas auto-gravitantes no anel, estudá-las em uma linha infinita, ou finita.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Campi, T. Dauxois and S. Ruffo, *Statistical Mechanics and dynamics of solvable models with long range interactions*, arXiv: 0907.03232v2 [cond-mat.stat-mech] (2009).
- [2] T. Dauxois *et al.*, *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, 1ª edição, Springer, Berlin (2002)
- [3] D Lynden-bell, *Physica A*, **263**, 293-304 (1999)
- [4] T. Padmanabhan, *Phys. Rept.* **188**, 285 (1990)
- [5] Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatekawa, K. Maeda, *Phys. Rev. E*, **64**, 056133 (2001)
- [6] T. Tatekawa, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo, *Phys. Rev. E*, **71**, 056111 (2005)
- [7] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to Thermostatistics*, 2ª Edição, John Wiley & Sons, Inc., New York (1985)
- [8] R. B. Griffiths, *J. Math. Phys.* **5**, 1215 (1964)
- [9] L. Galgani, A. Scotti, *Physica* **40**, 150 (1968)
- [10] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc. (1987)

- [11] D. H. Gros, *Microcanonical Thermodynamics*, World Scientific, Singapore (2001)
- [12] Euler I, *Nov. Comm. Acad. Imp. Petropolitanae*, **10**, pp. 207–242, **11**, pp. 152–184
- [13] W. Zurek, P. Quinn, J. Salmon, M. Warren, *Astrophys. J.*, **431**, 559 (1994)
- [14] F. Labini, M. Montuori, L. Pietronero, *Phys. Rep.*, **293**, 61 (1998)
- [15] G. Vaucoulers, *Science*, **167**, 1203 (1970)
- [16] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Longman, Inc., 2^a edição, Reading (1980), p. 82-83
- [17] R. Lusting, *J. Chem. Phys.* **109**, 20 (1998)
- [18] M. H. Kalos, P. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1986)
- [19] M. E. J. Newmann, G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Claredon Press, Oxford (1999)
- [20] C. Scherer, *Métodos Computacionais da Física*, 1^a ed., Editora Livraria da Física, São Paulo (2005)
- [21] D. L. McLeish, *Monte Carlo Simulations and Finance*, John Wiley and Sons,

Inc., New Jersey (2005)

[22] T. A. Van Der Straaten, G. Kathawala, A. Trellakis, R.S. Eisenberg, U. Ravaioli, *Molecular Simulation* **31**, 151 (2005)

[23] D.P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*, 3^a ed., Cambridge University Press, Cambridge (2009)

[24] N. Metropolis, S. Ulam, *J. of the American Statistical Association* **44**, 247 (1949)

[25] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press; 2^a edição (1992)

[26] D. E. Knuth (1986), *The Art of Computer Programming*, Addison-Wesley Longman, Inc., Reading, (1997), p. 41–115.

[27] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953)

[28] M. Creutz, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1411 (1983)

[29] R. Harris, *Phys. Lett.* **111A**, 299 (1985)

[30] J. R. Ray, *Phys. Rev. A* **44**, 4061 (1991)

- [31] A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, M. A. Amato, *Euro Phys. Letters*, **83**, 30011 (2008)
- [32] T. Dauxois, J. Barré, F. Bouchet, S. Ruffo, *Physical Review Letters*, **89**, 110601 (2002)
- [33] T. Dauxois, J. Barré, F. Bouchet, S. Ruffo, *European Physical Journal B*, **29**, 577 (2002)
- [34] T. Dauxois, J. Barré, S. Ruffo, *Physica A*, **386**, 212 (2002)
- [35] T. Dauxois, P. Holdsworth, S. Ruffo, *European Physical Journal B*, **16**, 659 (2000)

Apêndice A

Código fonte do MMCM para o modelo SGR

PROGRAM SGR

```
*****
*
* Universidade de Brasilia - UnB
* Instituto de Física - IF/UnB
* Programa criado por João Marcos B. S. Maciel
* Data de Criação: 21/12/2009
* Última modificação: 23/01/2011
* Email para contato: jmarcosmaciel@gmail.com
*
*****
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!           !declaração das variáveis           !
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
IMPLICIT NONE
INTEGER*8 CEL, NCEL, NPART, LOCATION, UCOUNT
INTEGER*8 CTRLSEED, INTERAC, ICOUNT, imat, PONTOS
REAL*8 EV, EKin, ETOT, RESOLUCAO
REAL*8 POTINI, U, TEMPERATURA, TMED
DIMENSION CEL(1000), LOCATION (500)
DIMENSION TEMPERATURA(10000)
PARAMETER (NCEL=1000, NPART=500, PONTOS=150)
PARAMETER (INTERAC=60000, RESOLUCAO=0.00002)
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!CEL representa a matriz de ocupação das células, binaria pode ter !
!valores entre 0 e 1, 0 - vazia, 1- ocupada !
!LOCATION representa a matriz de localização das partículas !
!NPART e NCEL representam o numero de partícula e de células !
!EKin a energia cinética por partícula, EV energia potencial !
!TMED temperatura média para uma dada energia !
!PONTOS quantidade total de pontos no grafico TempXU !
!RESOLUCAO intervalo entre os ponto no grafico TempXU !
!INTERAC número de vezes que o monte carlo deve ser testado !
!POTINI menor valor para energia potencial !
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```

C*****
C*****INÍCIO DO PROGRAMA PRINCIPAL*****
C*****

```

```

!arquivo onde será impresso o resultado
OPEN(UNIT=8, FILE= '99_6.dat', STATUS= 'UNKNOWN')

```

```

!inicia as matrizes
CALL INICIAR(NCEL,NPART,LOCATION,CEL)

```

```

!calcula o menor potencial possível para o sistema
CALL ENERGIAPOT,LOCATION,NPART,NCEL,POTINI)
POTINI=ABS(POTINI)

```

```

!determina quantos pontos de energia o gráfico terá
DO UCOUNT=1, PONTOS

```

```

!calcula o potencial para o sistema na configuração inicial
CALL ENERGIAPOT (LOCATION, NPART, NCEL, EV)

```

```

!energia interna e pontecial renormalizados
U= -1 + ((Ucount-1)*RESOLUCAO)
EV=EV/POTINI

```

```

!executa o Monte Carlo um numero muito grande de vezes
DO ICOUNT=1, INTERAC

```

```

CTRLSEED=ICOUNT !evita que icount seja modificado na subrotina

```

```

ETOT=U !evita que U seja modificado na subrotina

```

```

!subrotina que testa monte carlo e executa ou não a transição
CALL TRANSICAO(EV,LOCATION,CEL,NPART,NCEL,ETOT,CTRLSEED,POTINI)

```

```

!para o sistema estabilizado próximo à configuração de equilibrio
!coleta-se as temperaturas para tomar as médias
IF (ICOUNT.GT.50000) THEN
    imat=ICOUNT-49999
    EKin=U-EV
    TEMPERATURA(imat)= ABS(2*EKin)
ENDIF

```

```

ENDDO

```



```
!Subrotina que calcula as médias das grandezas
CALL MEDIAS (INTERAC, TEMPERATURA, TMED)
```

```
!imprime os resultados
WRITE (*,*) UCOUNT, ' ', U, ' ', TMED
WRITE (8,*) U, ' ', TMED
```

```
ENDDO
```

```
CLOSE (UNIT=8)
END
```

```
C*****
C*****FIM DO PROGRAMA PRINCIPAL*****
C*****
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
*****
```

```
!inicializa as matrizes
SUBROUTINE INICIAR(NCEL, NPART, LOCATION, CEL)
```

```
!variáveis da subrotina iniciar
IMPLICIT NONE
INTEGER*8 I, NPART, NCEL, G
INTEGER*8 LOCATION, CEL
DIMENSION location(Npart), Cel (NCEL)
```

```
!código da subrotina iniciar
```

```
!zera a matriz cel por completo
DO I=1, NCEL
  CEL(I)=0
ENDDO
```

!inicializa as matrizes

DO I=1, NPART

!aloca as particulas uma ao lado da outra

LOCATION(I)= I

!ocupa a matriz de ocupacao

G=Location(I)

CEL(G)=1

ENDDO

RETURN

END

!subrotina que testa o monte carlo

SUBROUTINE TRANSICAO(VPOST,LOCATION,CEL,NPART,NCEL,U,COUNTER,REN)

!declaracao de variáveis da subrotina transicao

IMPLICIT NONE

INTEGER*8 I,P,Q,R, NPART, NCEL, SEED, COUNTER

INTEGER*8 LOCATION, CEL

REAL*8 W, U, VANT, VPOST, POTIA, POTIP, KANT, KPOST

REAL*8 ALEAT, RANDO, PROBABILIDADE, PESO, REN

DIMENSION CEL(NCEL), LOCATION(NPART)

!!

! I - particula a sofrer a transicao e q sua posicao no anel

! P - sitio destino da transicao e r sua ocupacao (vazio ou cheio)

! KANT, VANT - energias cinetica e potencial das configurações anteriores

! KPOST, VPOST - energias cineticas e potencial das configurações posteriores

! POTIA, POTIP - energia potencial devido a partícula i na configurações anterior e posterior

! SEED - semente periódica para o gerador de números aleatórios

! REN - menor valor de energia potencial possível para a renormalização

! W - mudanca na entropia local devido a troca de configurações

!PESO - peso estatístico associado a transição

!PROBABILIDADE - número aleatório entre 0 e 1 a ser comparado ao peso

!!

!código da subrotina transicao

!cria uma semente periódica tipo dente de serra
SEED= MOD(COUNTER,200)+1

!escolhe a partícula a sofrer a transição
CALL GERADOR(SEED,ALEAT)
I=INT((NPART*ALEAT)+1)
Q=LOCATION(I)

!escolhe o destino da transição
CALL GERADOR(SEED,RANDO)
P=INT((NCEL*RANDO)+1)
R=CEL(P)

!se a célula estiver ocupa nao ocorre a transição (efeito hardcore)
IF(R.EQ.1) THEN
 LOCATION(I)=Q
 CEL(Q)=1
ENDIF

!se a célula não estiver ocupada pode ocorrer a transição
IF(R.EQ.0) THEN

 !calcula a interação da partícula i no estado anterior
 CALL POTPARCIAL(LOCATION,NPART,NCEL,POTIA,I,REN)

 !aloca a partícula no sitio p
 LOCATION(I)=P

 !calcula a interação da partícula i no sítio de destino
 CALL POTPARCIAL(LOCATION,NPART,NCEL,POTIP,I,REN)

 VANT=VPOST

C Para agilizar o processo computaciona calcula-se o potencial total posterior diminuindo o
C potencial da particula i no estado anterior e adicionando o potencial da particula i no estado
C posterior

 !calcula o potencial posterior a transição
 VPOST= VANT - POTIA +POTIP

 !calcula as energias cinéticas da transição
 KPOST=U-VPOST
 KANT=U-VANT

```
!calcula o peso estatístico associado a transição
W= (NPART/2.0)*LOG(KPOST/KANT)
PESO= 1/(1+EXP(W))
```

```
!testa monte carlo
```

```
CALL GERADOR(SEED,PROBABILIDADE)
```

```
!se o peso estatístico da transição for maior que um número
!aleatório ocorre a transição
```

```
IF(PESO.GT.PROBABILIDADE) THEN
    LOCATION(I)=P
    CEL(P)=1
    CEL(Q)=0
ENDIF
```

```
!se for menor a partícula permanece onde estava
```

```
IF(PESO.LE.PROBABILIDADE) THEN
    LOCATION(I)=Q
    CEL(Q)=1
    CEL(P)=0
    VPOST=VANT
ENDIF
```

```
ENDIF
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
*****
```

```
*****
```

C sobrotina que calcula a energia potencial total do sistema

```
SUBROUTINE ENERGIAPOT(LOCATION,NPART,NCEL,POTENCIAL)
```

```
! declaração de variáveis da subrotina energiapot
```

```
IMPLICIT NONE
```

```
INTEGER*8 I, J, NPART, NCEL, LOCATION
REAL*8 BC, PI, POTENCIAL, TAM, M, N, R,ALP
REAL*8 EV
DIMENSION EV(NPART,NPART)
DIMENSION LOCATION(NPART)
PARAMETER (BC=0.7071, PI=3.1416)
PARAMETER (ALP=-0.5, R=1)
```

```

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! TAM - representa a distância angular mínima entre 2 sítios
! POTENCIAL - energia potencial total do sistema
! EV(I,J) - potencial de interação entre as partículas i e j
! BC=1/SQRT(2), PI é o numero π
! ALP - o expoente de decaimento do potencial
! R- o raio do anel
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! código da subrotina

!define o a distancia mínima entre 2 sitios (circum/ncel)
TAM=(2*PI)/(NCEL*1.0)

!cálculo do potencial

POTENCIAL=0

DO I= 1, NPART
  DO J=1, NPART
    IF (I.NE.J) THEN
      !passa os valores location i e j para reais
      M= LOCATION(I)*(1.0)
      N= LOCATION(J)*(1.0)
      !potencial de interacao entre as partículas no círculo
      EV(I,J)=-((BC/R)*((1- COS(TAM*(M-N)))**(ALP)))/NPART*NPART
    ENDIF

    !evita que se conte interação da partícula com ela mesma
    IF (I.EQ.J) THEN
      EV(I,J)= 0
    ENDIF

    !soma os potenciais de interacao de pares
    POTENCIAL= POTENCIAL+ EV(I,J)

  ENDDO
ENDDO

!elimina a dupla contagem
POTENCIAL=POTENCIAL/2

RETURN
END
*****

```

```

*****
!calcula o potencial de interacao da partícula i no sistema
SUBROUTINE POTPARCIAL(LOCATION,NPART,NCEL,POTENCIAL,I,INICIAL)

    !variáveis da subrotina potparcial
    IMPLICIT NONE
    INTEGER*8 I, J, NPART, LOCATION, NCEL
    REAL*8 M, N, B1, PI, POTENCIAL, TAM, INICIAL, R, ALP
    REAL*8 EV
    DIMENSION EV(NPART)
    DIMENSION LOCATION (NPART)
    PARAMETER (B1=0.7071, PI=3.1416)
    PARAMETER (alp=-0.5, R=1)
    ! TAM - representa a distância angular mínima entre 2 sítios
    ! POTENCIAL - energia potencial total do sistema
    ! EV(J) - potencial de interação entre as partículas i com a j
    !INICIAL - representa o menor valor de energia potencial para o sistema , para a
renormalização
    ! BC=1/SQRT(2), PI é o numero π
    ! ALP - o expoente de decaimento do potencial
    ! R- o raio do anel

    TAM=(2*PI)/(NCEL*1.0)

    !nesta subrotina matem-se i fixo e varia-se j
!o comando abaixo passa o valor location(i) para real
    N=(1.0)*LOCATION(I)

    POTENCIAL=0
    DO J= 1, NPART
        IF (J.NE.I) THEN
            !processo idem a subrotina energiapot
            M= (1.0)*LOCATION(J)
            EV(J)=-((B1/R)*((1- COS(TAM*(M-N))))*(ALP))/(NPART*NPART)
        ENDIF

        IF (J.EQ.I) THEN
            EV(J)= 0
        ENDIF

        !diferente da subrotina energiapot
        !aqui o valor do potencial é renormalizado pelo menor potencial possível para o sistema

        POTENCIAL= POTENCIAL + EV(J)/INICIAL

    ENDDO

    RETURN
END
*****

```

!subrotina que calcula as médias do sistema

SUBROUTINE MEDIAS (INTERAC, TEMPERATURA, TMEDIA)

!variáveis da subrotina medias

IMPLICIT NONE

INTEGER*8 SELECAO, CONTROL, J, INTERAC,imat

REAL*8 SOMAT, JREAL, TPT, TMEDIA

REAL*8 TEMPERATURA (10000)

!SELECAO determina quais configuracoes entrarao no calculo das médias s

!SOMAT soma das temperaturas de todas as configuracoes selecionadas

!J E JREAL contam quanto elementos foram somados em somat

!TMEDIA é a temperatura media da dada energia

! código da subrotina

SOMAT=0

J=0

DO CONTROL=50000, INTERAC

imat=control-49999

SELECAO=mod(control,66)

IF (SELECAO.EQ.0) THEN

TPT= TEMPERATURA(imat)

SOMAT= SOMAT + TPT

J=J+1

ENDIF

ENDDO

JREAL=J*1.0

TMEDIA = SOMAT/JREAL

END

! gerador de números aleatório - numerical recipes in fortran 77

!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! !!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! RAN 2 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!! !!
!!

SUBROUTINE GERADOR(IDUM, ALEATORIO)

INTEGER*8 IDUM,IM1,IM2,IMM1,IA1,IA2,IQ1,IQ2,IR1,IR2,NTAB,NDIV
REAL*8 ALEATORIO,AM,EPS,RNMX
PARAMETER (IM1=2147483563,IM2=2147483399,AM=1.0/IM1,IMM1=IM1-1)
PARAMETER (IA1=40014,IA2=40692,IQ1=53668,IQ2=52774,IR1=12211)
PARAMETER (IR2=3791,NTAB=32,NDIV=1+IMM1/NTAB,EPS=1.2E-7)
PARAMETER (RNMX=1.0-EPS)
INTEGER IDUM2,J,K,IV(NTAB),IY

SAVE IV,IY,IDUM2
DATA IDUM2/123456789/, IV/NTAB*0/, IY/0/

IF (IDUM .LE. 0) THEN
IDUM = MAX(-IDUM,1)

IDUM2 = IDUM
DO J = NTAB+8, 1, -1
K = IDUM/IQ1
IDUM = IA1*(IDUM-K*IQ1)-K*IR1
IF (IDUM.LT.0) IDUM = IDUM+IM1
IF (J.LE.NTAB) IV(J) = IDUM
END DO
IY = IV(1)

END IF
K = IDUM/IQ1
IDUM = IA1*(IDUM-K*IQ1)-K*IR1
IF (IDUM.LT.0) IDUM=IDUM+IM1
K = IDUM2/IQ2
IDUM2 = IA2*(IDUM2-K*IQ2)-K*IR2
IF (IDUM2.LT.0) IDUM2=IDUM2+IM2
J = 1+IY/NDIV
IY = IV(J)-IDUM2
IV(J) = IDUM
IF (IY.LT.1) IY=IY+IMM1
ALEATORIO = MIN(AM*IY,RNMX)
RETURN
END