UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Maíra Angélica Bolfe

# DIAGRAMAS DE FASE DO MODELO DE ISING DEFINIDO SOBRE DOIS GRAFOS ACOPLADOS

Santa Maria, RS 2017

Maíra Angélica Bolfe

## DIAGRAMAS DE FASE DO MODELO DE ISING DEFINIDO SOBRE DOIS GRAFOS ACOPLADOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**.

ORIENTADOR: Prof. Fernando Lucas Metz

Santa Maria, RS 2017 Ficha catalográfica elaborada através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Central da UFSM, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Bolfe, Maíra Angélica Diagramas de fase do modelo de Ising definido sobre dois grafos acoplados / Maíra Angélica Bolfe.- 2017. 59 f.; 30 cm
Orientador: Fernando Lucas Metz Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, RS, 2017
1. Redes complexas 2. Modelo acoplado 3. Conectividade finita 4. Transição de fase 5. Metaestabilidade I. Metz, Fernando Lucas II. Título.

#### ©2017

Todos os direitos autorais reservados a Maíra Angélica Bolfe. A reprodução de partes ou do todo deste trabalho só poderá ser feita mediante a citação da fonte.

Endereço: Av. Rodolfo Bher, nº 320

Fone (0xx) 51 998093650; End. Eletr.: mairabolfe@gmail.com

Maíra Angélica Bolfe

## DIAGRAMAS DE FASE DO MODELO DE ISING DEFINIDO SOBRE DOIS GRAFOS ACOPLADOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**.

Aprovado em 7 de agosto de 2017:

Fernando Lucas Metz, Dr. (UFSM) (Presidente/Orientador)

Fábio Mallmann Zimmer, Dr. (UFSM) - Videoconferênciade

Rubem Erichsen Junior, Dr. (UFRGS)

Santa Maria, RS 2017 DEDICATÓRIA

À minha amada Mãe!

## AGRADECIMENTOS

Ao término deste trabalho gostaria de agradecer a todos que estiveram presentes nessa caminhada. Em especial:

- Ao professor Fernando Lucas Metz, por ser um orientador sempre presente. Agradeço por sua paciência, seus ensinamentos e sua sabedoria que foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.
- À minha família, que mesmo longe se fez presente de alguma forma. Em especial agradeço minha mãe Cleci e minha irmã Martina que sempre me apoiaram e me deram forças para seguir.
- Ao meu namorado Fabrício, que sempre acreditou em mim e esteve ao meu lado me dando todo o apoio necessário, amo você.
- À Dona Edair, por todo o incentivo.
- Aos amigos e colegas do Laboratório de Teoria da Matéria Condensada e do Grupo de Informação Quântica e Fenômenos Emergentes, pelos bons momentos vividos.
- Aos amigos de curta e longa data, que sempre estiveram presentes em minha vida.
- A todos os professores que participaram da minha formação, sem eles não chegaria até aqui. E, também ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFSM.
- Ao Professor Lucas Nicolao, pelas contribuições neste trabalho.
- À Capes, pelo apoio financeiro.

## RESUMO

# DIAGRAMAS DE FASE DO MODELO DE ISING DEFINIDO SOBRE DOIS GRAFOS ACOPLADOS

## AUTORA: Maíra Angélica Bolfe ORIENTADOR: Fernando Lucas Metz

Neste trabalho estudamos o modelo de duas redes complexas acopladas, com o intuito de estudar os diagramas de fase e a metaestabilidade do sistema. As redes apresentam interações internas ferromagnéticas e são acopladas entre si através de interações antiferromagnéticas. O modelo possui conectividade finita, ou seja, cada spin de Ising interage com um número finito de outros spins. O número de conexões por sítio em cada rede é uma variável aleatória que segue uma distribuição de Poisson, o que caracteriza um grafo aleatório de Erdös-Rényi. O objetivo principal do trabalho é obter os diagramas de fase e as curvas que limitam a região de metaestabilidade em função dos parâmetros do modelo, como a conectividade média entre as redes, a intensidade da interação antiferromagnética entre as redes e a temperatura. Usando o método das réplicas, obtemos equações de auto-consistência para as distribuições de campos efetivos, a partir das quais podemos calcular a magnetização de cada rede e a energia livre do sistema. As equações de auto-consistência foram resolvidas numericamente através do algoritmo de dinâmica de populações. Nós calculamos numericamente a magnetização de cada rede, a energia livre e a partir disso construímos os diagramas de fase. Na primeira etapa dos resultados, consideramos que a conectividade média entre as redes é nula, e recuperamos alguns resultados conhecidos para o modelo de Ising com conectividade finita em um grafo aleatório de Erdös-Rényi. Para o caso de duas redes acopladas, construímos os diagramas de fase e calculamos a energia livre. O modelo possui uma fase paramagnética, onde a magnetização de cada rede é zero, e uma fase antiferromagnética, onde os grafos possuem magnetizações com sinais opostos. Com base no cálculo da energia livre nós mostramos que este modelo tem uma solução metaestável, onde o estado ferromagnético corresponde a um mínimo local de energia livre. Estudamos o limite de estabilidade da solução ferromagnética em função dos parâmetros do modelo. Além disso, observamos a presença de uma fase paramagnética a baixas temperaturas, que está relacionada à baixa conectividade entre as duas redes e no interior delas. Os resultados teóricos para o modelo de redes acopladas foram comparados com simulações de Monte-Carlo, mostrando uma ótima concordância.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Modelo acoplado. Conectividade finita. Transição de fase. Metaestabilidade.

# ABSTRACT

# PHASE DIAGRAMS OF THE ISING MODEL DEFINED ON TWO COUPLED GRAPHS

# AUTHOR: Maíra Angélica Bolfe ADVISOR: Fernando Lucas Metz

In this work we study a model of two coupled complex networks, with the purpose to study the phase diagrams and the metastability of the system. The networks have internal ferromagnetic interactions and are coupled to each other through antiferromagnetic interactions. The model has finite connectivity, i.e., each Ising spin interacts with a finite number of other spins. The number of connections per site in each network is a random variable that follows a Poisson distribution, which characterizes Erdös-Rényi random graphs. The main objective of this work is to obtain the phase diagrams and the curves that limit the region of metastability as a function of the model parameters, such as the average connectivity between the networks, the intensity of the antiferromagnetic interactions between the networks and the temperature. Using the replica method, we derive the self-consistent equations for the distributions of effective fields, from which we can calculate the magnetization of each network and the free energy of the system. The self-consistent equations have been solved numerically through the population dynamics algorithm. We calculate numerically the magnetization of each network and the free energy, from which we construct the phase diagrams. In the first part of the results, we consider a vanishing average connectivity between the networks and we recover some known results for the Ising model on an Erdös-Rényi random graph. For the case of two coupled networks, we construct the phase diagrams and we calculate the free energy. The model has a paramagnetic phase, where the magnetization of each network is zero, and an antiferromagnetic phase, where the graphs have magnetizations with opposite signs. Based on the calculation of the free-energy, we show that this model has a metastable solution, where the ferromagnetic state corresponds to a local minimum of the free energy. We study the stability limit of the ferromagnetic solution as a function of the parameters of the model. Besides that, we observe the presence of a paramagnetic phase at low temperatures that is related to the low connectivity between the two networks and inside them. The theoretical results for the model of coupled networks have been compared with Monte-Carlo simulations, showing a very good agreement.

**Keywords:** Complex networks. Coupled model. Finite connectivity. Phase transition. Metaestability.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 –	Exemplos de grafos. (a) Grafo completo com 10 nós. (b) Grafo aleatório de Erdös-Bényi com 30 nós.	16
Figura 3.1 –	Histogramas da distribuição de campos efetivos $W(u)$ para $c = 5, 0$ e uma população $D = 500000$ . Os valores de temperatura são: (a) $T = 0, 1$ , (b) $T = 0, 5$	38
Figura 3.2 –	Histogramas da distribuição de campos efetivos $W(u)$ para $c = 5, 0$ e uma população $D = 500000$ . Os valores de temperatura são: (a) $T = 0, 8$ e (b) $T = 0, 95$ .	39
Figura 3.3 -	- (a) Magnetização em função da temperatura, considerando valores de conectividade média distintos e uma população de D=500000. (b) Magnetização em função da conectividade média, considerando valores de temperatura distintos e uma população de $D = 500000$	40
Figura 3.4 -	- Energia livre por sítio em função de $c$ , para $T = 0,05$ e uma população $D = 500000$ .	41
Figura 3.5 –	Diagrama de fases no plano ( $c_{\sigma}$ , $c_{\tau}$ ), considerando dois diferentes valores de $U$ , $c_I = 5,0$ e $T = 0,05$ . Resultados obtidos por meio do algoritmo de diagrama de pagulaçãos page $D = 500000$	40
Figura 3.6 –	(a) Magnetização de cada rede em função de $c_{\sigma}$ , considerando $T = 0,05$ , $c_I = 5, 0, c_{\tau} = 5, 0, U = 0, 1$ e uma população $D = 1000000$ . (b) Energia livre por sítio em função de $c_{\sigma}$ para diferentes valores de $c_{\tau}$ , considerando $T = 0,05$ , $c_{\tau} = 5, 0, U = 0, 1$ e uma população $D = 500000$ .	42
Figura 3.7 -	- Diagrama de fases no plano $(U, c)$ para $c_I = 5, 0, T = 0,05$ e uma população $D = 500000$ , onde $c = c_z = c_z$	44
Figura 3.8 –	Diagrama de fase no plano ( $c_{\sigma}$ , $c_{\tau}$ ) para, $T = 0,05$ e uma população $D = 500000$ : (a) para $U = 0,1$ e diferentes valores de $c_I$ , (b) para diferentes valores de $U$ e $c_I$ , com o objetivo de visualizar em mais detalhe a fase	
Figura 3.9 -	paramagnética. - Magnetização em função de $c_{\sigma} = c_{\tau}$ , para $T = 0,05$ , $c_I = 0,5$ , uma população $D = 1000000$ e diferentes valores de $U$ , considerando que no gráfico patão procentos ma o ma para codo pago do $U$	45
Figura 3.10	– (a) Diagrama de fase no plano $(c_{\sigma}, c_{\tau})$ , considerando $U = 0, 1, c_I = 5, 0,$ uma população $D = 500000$ e dois diferentes valores de $T$ . (b) Diagrama de fase no plano $(c_{\sigma}, c_{\tau})$ para $c_I = 0, 5, U = 0, 1$ , uma população $D =$ 500000 e diferentes valores de $T$	40
Figura 3.11	- Magnetização em função de $c_{\sigma}=c_{\tau}$ para $U=0, 1, c_I=0, 5$ , uma popula- ção $D=1000000$ e diferentes valores de $T$ . No gráfico estão presentes $m_{\sigma}$ e $m_{\sigma}$ para cada valor de $T$	47
Figura 3.12	– Gráficos do módulo da magnetização em função da temperatura, considerando $c_I = 5, 0$ e $U = 0, 1$ . Para a simulação computacional foi variado o número total de spins do sistema, caracterizado por $N$ . Os resultados desta simulação são plotados com linhas e pontos sobrepostos. Os resultados teóricos foram obtidos por meio do algoritmo de dinâmica de populações para uma população de $D = 1000000$ e são caracterizados pela linha sólida. Os valores de $c_{\sigma} = c_{\tau}$ são (a) $c_{\sigma}=c_{\tau} = 10$ e (b) $c_{\sigma}=c_{\tau} = 3$ .	47

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- SRSimetria de RéplicasAFAntiferromagnético (a)
- *F* Ferromagnético (a)
- P Paramagnético (a)

## **SUMÁRIO**

1	INTRODUÇÃO	9
2	O MODELO DE ISING EM GRAFOS ACOPLADOS	15
2.1	O MODELO	15
2.1.1	Grafos aleatórios	16
2.1.2	Método das réplicas	18
2.1.3	Cálculo das equações de ponto de sela	19
2.1.4	Equações de auto-consistência em simetria de réplicas	25
2.1.5	Cálculo da energia livre	31
3	RESULTADOS	37
3.1	FERROMAGNETO EM UM GRAFO DE CONECTIVIDADE FINITA	38
3.2	RESULTADOS PARA O MODELO DE DUAS REDES ACOPLADAS	41
3.3	COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS COM SIMULAÇÕES DE MONTE-CARL	O 48
4	CONCLUSÃO	50
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	52
	APÊNDICE A – ANÁLISE DO DENOMINADOR DA EQUAÇÃO DE PONTO	
	DE SELA	55
	APÊNDICE B – ALGORITMO DE DINÂMICA DE POPULAÇÕES	57

### 1 INTRODUÇÃO

Em mecânica estatística, um dos métodos mais utilizados e simples para a resolução de problemas é o método de aproximação de campo médio. Essa aproximação consiste em modelar um sistema físico de muitos elementos interagentes (átomos, momentos magnéticos, indivíduos em redes sociais, etc) por uma rede completamente conectada, ou seja, cada elemento interage com um número infinito de outros elementos e as interações são de alcance infinito. Dentre os modelos estudados por esse método, destacamos o modelo de Ising, proposto por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernst Ising em 1924 (ISING, 1925), que é um dos modelos mais simples e muito utilizado para o estudo das transições de fase em sistemas magnéticos. O modelo de Ising totalmente conectado recebe o nome de modelo de Curie-Weiss (KOCHMAŃSKI; PASZKIEWICZ; WOLSKI, 2013) e pode ser resolvido exatamente. A partir dessa solução é possível estudar em detalhe as propriedades termodinâmicas do sistema.

No entanto, a topologia de modelos totalmente conectados é muito diferente de sistemas mais realísticos, que apresentam um número finito de conexões por sítio e são definidos em um espaço de dimensão finita (MONASSON, 1998). Por esse motivo, surgiu o interesse de aprimorar os modelos de campo médio, utilizando um sistema no qual a conectividade é finita, isto é, onde cada elemento do sistema interage com um número finito de outros elementos. Um dos primeiros artigos acerca de modelos de conectividade finita para sistemas magnéticos foi publicado em 1985 por Viana e Bray (1985), após isso muitos estudos foram realizados utilizando esta classe de modelos. Existe uma grande variedade de modelos de conectividade finita, também conhecidos como modelos de grafos aleatórios. De maneira simples, grafos aleatórios são definidos pela forma como o número finito de conexões entre os elementos do sistema é definido. Um modelo muito simples de grafos aleatórios foi introduzido por Erdös e Rényi (1960), que são também conhecidos como grafos de Poisson, pois a distribuição do número de vizinhos por sítio converge para uma distribuição de Poisson quando o grafo possui um número infinito de sítios. Modelos de conectividade finita são empregados em muitas áreas de estudo como no caso de vidros de spin (MÉZARD; PARISI, 1987; WONG; SHERRINGTON, 1987), redes neurais (WEMME-NHOVE; COOLEN, 2003), códigos de correção e detecção de erros (NERI; SKANTZOS; BOLLÉ, 2008; KABASHIMA; SAAD, 1999), entre outras.

Ainda assim, muitos sistemas reais diferem de grafos de Erdös-Rényi pelo fato de apresentarem um processo de formação e crescimento que não são totalmente aleatórios. Redes complexas reais são regidas por uma distribuição de conexões com um grau de complexidade mais elevado que a distribuição de Poisson, resultando em uma estrutura de rede com padrões mais complicados de interconexão. Por exemplo, grafos de Erdös-Rényi são caracterizados por uma distribuição de Poisson para o número de vizinhos por sítio, en-

quanto em muitos sistemas na natureza a mesma quantidade é distribuída de acordo com uma lei de potência. Com isso, surgiu o interesse de explicar a topologia de redes complexas. De modo geral, podemos modelar uma rede complexa como um grafo com padrões de conexões variados. Um exemplo familiar de rede complexa é a Internet, onde os computadores representam os nós (ou vértices) e os cabos de conexão ou as conexões sem fio representam as arestas do grafo, ou seja, as conexões entre os nós. Sendo assim, redes complexas têm uma estrutura de conexões não-trivial, ou seja, apresentam uma arquitetura bastante complicada, e o maior desafio é encontrar uma maneira completa e precisa de descrever de maneira coerente a estrutura desses sistemas (STROGATZ, 2001). Redes complexas possuem aplicações em diversos campos da ciência, como física, matemática, ciência da computação e sociologia. Além da rede de computadores (FALOUTSOS; FALOUTSOS; FALOUTSOS, 1999), existem outros exemplos de redes complexas em diferentes áreas, como mercado financeiro (LISEWSKI; LICHTARGE, 2010), redes biológicas (MASLOV; SNEPPEN, 2002), sistemas de transporte (KORNISS, 2007), redes de ligações químicas, entre outros (NEWMAN, 2003). Existem três modelos de redes complexas mais estudados na literatura, que são as redes aleatórias (ou grafos aleatórios) de Erdös-Rényi, as redes de pequeno mundo de Watts e Strogatz (WATTS; STROGATZ, 1998) e as redes sem escala de Barabási-Albert (ALBERT; BARABÁSI, 2002).

Recentemente, percebeu-se que, além da topologia de conexões, existem outros fatores que influenciam no comportamento de uma determinada rede. Podemos citar o exemplo da rede de transporte marítimo (KALUZA et al., 2010), onde os portos representam os nós e as rotas de navegação as arestas. Para que essa rede tenha um fluxo de carga eficiente, ela depende de fatores externos como o transporte terrestre, o qual realoca as cargas que os navios deixam no porto. Se o porto estiver com muita carga para despachar, os navios que estão por chegar não conseguem descarregar, complicando todo o sistema. Este é um exemplo claro da influência mútua entre duas redes complexas. O acoplamento entre grafos aleatórios pode ser utilizado para modelar muitos tipos de sistemas que consistem de muitas redes que interagem entre si. No artigo de revisão de Kivela et al. (2014), é mapeado o vasto campo de estudos nesta área e a evolução nos últimos anos. De modo geral, no estudo do acoplamento de redes complexas, se busca entender como o sistema se comporta quando algum dos parâmetros que caracterizam a sua estrutura é alterado. Por exemplo, no caso da rede de transporte marítimo, podemos nos perguntar o que aconteceria com o fluxo de carga se mudássemos as rotas de navegação, ou então, alterássemos a logística do transporte terrestre. Portanto, o estudo de redes acopladas é importante para inúmeros sistemas reais.

Um tópico muito importante no estudo do comportamento coletivo de sistemas compostos de muitos elementos interagentes é o estudo das transições de fase. De maneira geral, uma transição de fase consiste em uma mudança nas propriedades macroscópicas de um sistema quando alteramos algum parâmetro externo, como a temperatura. Em outras palavras, a mudança de uma condição externa ao sistema pode alterar o estado de ordenamento dos elementos microscópicos que o constituem. Um exemplo típico de sistema que sofre uma transição de fase é a água. Quando aquecida até uma temperatura específica à pressão constante, a água entra em ebulição, o que caracteriza a transição do líquido para o vapor. Sendo assim, dizemos que a água passa por uma transição de fase. De modo geral, uma transição de fase é identificada como uma alteração no comportamento macroscópico de um sistema com muitos elementos de acordo com a variação dos parâmetros, essa alteração pode ser suave ou repentina. Transições de fase constituem um tópico muito importante no estudo de redes complexas. De fato, redes complexas exibem uma variedade de fenômenos críticos, como mudanças estruturais abruptas, fenômenos de percolação, transições de fase magnéticas e a transição de sincronização em redes de osciladores (DOROGOVTSEV; GOLTSEV; MENDES, 2008).

Embora o assunto de transições de fase em redes tem sido muito estudado, ainda se conhece muito pouco acerca do comportamento de sistemas de redes acopladas. Em particular, transições de fase em redes acopladas são muito importantes no estudo de sistemas sociais, como discutido no artigo de revisão de Castellano, Fortunato e Loreto (2009), onde são mostrados exemplos de transições de fase em dinâmica de opiniões, dinâmica cultural, dinâmica da linguagem e fenômenos de propagação social. Em sistemas sociais, um dos objetivos é caracterizar o comportamento coletivo de grupos de indivíduos em relação a uma certa opinião. Podemos imaginar, por exemplo, que existem dois partidos políticos, onde cada partido é modelado por uma rede, cujos sítios representam a opinião de cada indivíduo. Os acoplamentos dentro de cada rede tendem a reforçar uma certa opinião, de modo a produzir um consenso no interior do partido. Considerando que a opinião de um partido interfere no outro, podemos modelar esta influência por meio de um acoplamento entre as redes e nos perguntar se os dois partidos são capazes de chegar a um consenso. Sendo assim, para compreender mudanças coletivas de opinião, muitos estudos de sistemas sociais utilizam modelos estudados em física. Um modelo bastante utilizado é o modelo de Ising, que podemos interpretar como um modelo de opinião, onde o ordenamento ferromagnético caracteriza um consenso (os indivíduos compartilham da mesma opinião) e um estado coletivo desordenado caracteriza a discórdia entre os indivíduos. Portanto, entender as transições de fase no acoplamento de redes é importante para estudar sistemas sociais, além de outras áreas já citadas, que utilizam modelos similares.

Modelos de mecânica estatística definidos sobre redes acopladas já foram estudados em algumas áreas de conhecimento e resultados interessantes em relação a transições de fase já foram discutidos, além de outros pontos interessantes como a existência de percolação (BIANCONI; RADICCHI, 2016) e de uma região de metaestabilidade. A metaestabilidade ocorre quando o sistema encontra um mínimo local de energia, o que dificulta a transição para o mínimo de energia global, ou seja, o estado de menor energia que representa o equilíbrio termodinâmico. A metaestabilidade afeta a dinâmica do sistema, pois o mesmo pode permanecer por um determinado intervalo de tempo em um mínimo de energia local, até atravessar a barreira de energia e atingir o mínimo de energia global que caracteriza o estado de equilíbrio termodinâmico. A presença de metaestabilidade foi estudada, por exemplo, em um grafo aleatório regular (DOMMERS, 2017), onde o autor utiliza o modelo de Ising ferromagnético com campo externo. Com isso, ele analisa o tempo que o sistema permanece no estado metaestável por meio de simulações computacionais, ou seja, o trabalho estuda as propriedades dinâmicas do modelo. A presença de estados metaestáveis também foi verificada em sistemas sociais. Um exemplo disso é o artigo de Klemm et al. (2003), que estuda o modelo cultural de Axelrod em duas topologias de redes: as redes de pequeno mundo e as redes sem escala. O modelo de Axelrod consiste em descrever a disseminação cultural, composta por agentes caracterizados por um conjunto de fatores culturais. Os autores estudam o modelo para redes de pequeno mundo e redes sem escala e fazem uma comparação dos resultados obtidos, nos dois modelos de rede, em relação à transição entre os estados ordenados e desordenados. O estudo de metaestabilidade tem sido desenvolvido, também, em redes acopladas, no qual nos deparamos com exemplos em redes biológicas (DANZIGER et al., 2017). Neste caso, os autores utilizam redes de muitas camadas e analisam a interdependência e a competitividade de interação em sistemas dinâmicos reais, como no caso de um modelo para a propagação de epidemias. Ainda, podemos citar o estudo da metaestabilidade em um modelo de competição de linguagem (CARRO; TORAL; MIGUEL, 2016), no qual os autores consideram duas redes de indivíduos bilíngues e analisam as interações entre os falantes dos idiomas e as propriedades específicas de cada falante. Portanto, a metaestabilidade desempenha um papel importante em diversos sistemas modelados por grafos aleatórios.

Na mecânica estatística, o primeiro passo para estudar transições de fase é utilizar o modelo de Ising, que é um modelo fundamental nesta área. Esse modelo é muito utilizado para a compreensão de sistemas magnéticos devido à sua simplicidade e solução exata em alguns casos. Observamos que já existem alguns trabalhos na literatura que estudam o modelo de Ising em redes acopladas. No artigo de Galam, Salinas e Shapir (1995), os autores estudam dois modelos de Ising aleatoriamente acoplados e utilizam as técnicas de campo médio para construir diagramas de fase e analisar como a intensidade do acoplamento entre os dois modelos influencia nas transições de fase do sistema. No mesmo caminho, Jang et al. (2015) estudam as influências culturais em um sistema de redes acopladas. Para isso, os autores utilizam um modelo de spin chamado de modelo de Askin-Teller. Este modelo é formado por duas espécies de spins de Ising, onde cada espécie é colocada em uma camada de uma rede de camada dupla. Os cálculos são realizados utilizando a aproximação de campo médio e são construídos diagramas de fase para analisar as diferentes fases que o sistema apresenta. Além disso, Agliari, Burioni e Sgrignoli (2010) exploraram, via simulações de Monte-Carlo, um modelo composto por dois grafos de Erdös-Rényi acoplados, cada um deles contendo um número de sítios distintos, com o objetivo de analisar as propriedades críticas do sistema.

Considerando essa linha de pesquisa, Suchecki e Hołyst (2006) (SH) estudaram o acoplamento de modelos de Ising, onde todas as interações entre os spins são ferromagnéticas. Além disso, os autores consideram que cada modelo de Ising é definido sobre uma rede sem escala. Nestas redes a distribuição do número de vizinhos por sítio obedece a uma lei de potência, e os cálculos realizados são baseados em uma aproximação. Nos resultados numéricos, os autores analisam a coexistência de dois estados estáveis (as magnetizações globais das duas redes possuem o mesmo sinal ou sinais opostos) para baixas temperaturas e estimam os valores das temperaturas críticas onde esses estados estáveis desaparecem, dando origem a uma fase paramagnética. Além disso, eles estudam como as temperaturas críticas dependem do acoplamento entre as redes. Como no primeiro trabalho não foi possível explicar detalhadamente esse fenômeno, mais tarde Suchecki e Hołyst (2009) publicaram uma extensão do estudo, no qual utilizam, também, as redes sem escala e a topologia de grafos aleatórios regulares, que são grafos onde todos os nós apresentam o mesmo número de conexões por sítio. Neste segundo artigo, SH discutem a existência de uma região com duas soluções estáveis para baixas temperaturas e concluem que existem duas temperaturas críticas. Uma delas limita a região de consistência de soluções, e a segunda temperatura crítica descreve a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética. Como discutido no primeiro artigo, essa temperatura depende da intensidade do acoplamento entre as redes. No entanto, o trabalho de SH não permite concluir qualquer coisa a respeito da estabilidade das soluções na região de coexistência. A estabilidade pode ser caracterizada somente através do cálculo da energia livre. Além disso, SH não estudam, em seus trabalhos, os efeitos dos parâmetros estruturais da rede na presença da coexistência das soluções e não apresentam diagramas de fase completos.

Desta forma, com o intuito de analisar minuciosamente as transições de fase que surgem devido ao acoplamento entre as redes, nesta dissertação estudamos um modelo semelhante ao estudado por SH. Para isso, consideramos duas redes acopladas, onde cada sítio é descrito por uma variável de Ising, como SH. Porém, nosso modelo difere do modelo SH, pois consideramos a topologia de grafos aleatórios de Erdös-Rényi com conectividade finita, o que resulta em um modelo mais simples e que pode ser resolvido exatamente usando métodos de mecânica estatística de vidros de spin, o que permite uma análise detalhada dos diagramas de fase.

Portanto, o objetivo deste trabalho é estudar um modelo de redes acopladas com conectividade finita em equilíbrio térmico, onde as interações entre os elementos no interior de cada rede são ferromagnéticas e as interações entre as redes são antiferromagnéticas, para analisar em detalhe o comportamento das transições de fase por meio de diagramas de fase. Além disso, queremos caracterizar a metaestabilidade em termos da energia livre e estudar seu comportamento à medida que alteramos determinados parâmetros do sistema, como a conectividade média no interior de cada rede, a conectividade média e a intensidade de interação entre as redes, e a temperatura. Ou seja, buscamos fazer um estudo detalhado das propriedades de equilíbrio desse tipo de modelo estatístico. Para isso, utilizamos as técnicas aplicadas ao estudo de modelos de vidros de spin definidos sobre grafos aleatórios (MÉZARD; PARISI, 2001; MÉZARD; PARISI, 1987; LEONE et al., 2002).

De maneira geral, a partir deste estudo construímos diagramas de fase e caracterizamos por meio da energia livre a fase paramagnética, a fase antiferromagnética e a metaestabilidade que é representada por uma solução ferromagnética. Entre os principais resultados, destacamos a presença de uma fase paramagnética a baixas temperaturas, por causa da topologia das redes, ou seja, quando a conectividade média no interior de cada rede é muito baixa. Isto ocorre em consequência da transição de percolação, que é caracterizada pela formação de pequenos aglomerados de spins interconectados entre si, devido à baixa conectividade entre os spins. A partir dos diagramas de fase, analisamos também a influência da variação da conectividade média no interior de cada rede e da conectividade média entre as redes. Em particular, a metaestabilidade é mais robusta frente à variação da temperatura, pois mesmo submetido a altas temperaturas o sistema se mantém ordenado. Se considerarmos que todas as conectividades médias tendem para valores infinitos, obtemos um modelo de duas redes completamente conectadas, isto é, dois modelos de Curie-Weiss acoplados. Além disso, confirmamos os resultados teóricos por meio de simulações computacionais de Monte-Carlo.

No próximo capítulo, introduzimos o Hamiltoniano do modelo proposto e alguns conceitos da teoria de grafos aleatórios. Na sequência, discutimos o método das réplicas, como são obtidas as equações de ponto de sela e calculamos as equações das distribuições de campos efetivos, que são resolvidas numericamente via o algoritmo de dinâmica de populações. Desta forma, podemos calcular a magnetização de cada rede e a energia livre. Em seguida, no capítulo 3, apresentamos os resultados obtidos a partir do modelo proposto, onde na primeira seção consideramos nulo o acoplamento entre as redes e discutimos os resultados obtidos para um único grafo de Erdös-Rényi. Na segunda seção, considerando a variação da conectividade média, da intensidade de interação entre as redes e da temperatura, apresentamos os resultados para o modelo de duas redes acopladas na forma de diagramas de fase. Na ultima seção do capítulo, realizamos a comparação entre os dados obtidos teoricamente com os dados obtidos via simulação de Monte-Carlo. Por fim, são feitas algumas considerações finais sobre o trabalho e apresentamos algumas perspectivas futuras.

#### 2 O MODELO DE ISING EM GRAFOS ACOPLADOS

A proposta deste capítulo é introduzir e resolver o modelo de Ising em grafos acoplados com conectividade finita. O estudo desse tipo de modelo não é uma tarefa fácil, como discutido no artigo de Mézard e Parisi (1987), onde se observa que a solução de sistemas com conectividade finita é dada em termos de equações mais complicadas de resolver do que em modelos que consideram interações de alcance infinito. Assim, neste capítulo obtemos as equações que permitem calcular a magnetização de cada rede, a energia livre por sítio e obtemos as equações para os parâmetros de ordem do modelo proposto.

#### 2.1 O MODELO

O modelo é composto por dois conjuntos  $\{\sigma_i\}$  e  $\{\tau_i\}$  de variáveis de spin, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H = -\sum_{i < j} \frac{c_{ij}^{\sigma}}{c_{\sigma}} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i < j} \frac{c_{ij}^{\tau}}{c_{\tau}} \tau_i \tau_j + U \sum_{i,j} \frac{c_{ij}^I}{c_I} \sigma_i \tau_j,$$
(2.1)

onde  $\sigma_i \in \{-1,1\}(i = 1, ..., N)$  e  $\tau_i \in \{-1,1\}(i = 1, ..., N)$  descrevem as variáveis de spin do sistema. A soma  $\sum_{i < j}$  nos termos referentes às redes  $\sigma$  e  $\tau$  é realizada sobre os pares distintos de spins, enquanto no termo de acoplamento a soma  $\sum_{i,j}$  é realizada sobre todos os valores possíveis de i e j. A quantidade  $c_{ij} \in \{0,1\}$  é uma variável aleatória que indica se existe  $(c_{ij} = 1)$  ou se não existe  $(c_{ij} = 0)$  uma conexão entre os spins i e j do grafo, sendo que  $c_{ij}^{\sigma}$ ,  $c_{ij}^{\tau}$  e  $c_{ij}^{I}$  são independentes. As variáveis  $\{c_{i,j}\}$  são acomodadas em uma matriz chamada matriz de adjacência. Portanto, o elemento de matriz  $c_{ij}$  diz se existe ou não uma conexão entre os sítios i e j. A variável U > 0 representa a intensidade do acoplamento antiferromagnético entre as redes.

Considerando que a matriz de adjacência  $\{c_{ij}^I\}$  é simétrica e que os termos da diagonal principal são nulos  $(c_{ii}^I = 0)$ , é possível reescrever o terceiro termo do Hamiltoniano, o qual retrata o acoplamento entre os grafos, da seguinte forma:

$$\sum_{i,j} c_{ij}^{I} \sigma_{i} \tau_{=} \sum_{i < j} c_{ij}^{I} (\sigma_{i} \tau_{j} + \sigma_{j} \tau_{i}), \qquad (2.2)$$

logo,

$$H = -\sum_{i < j} \frac{c_{ij}^{\sigma}}{c_{\sigma}} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i < j} \frac{c_{ij}^{\tau}}{c_{\tau}} \tau_i \tau_j + U \sum_{i < j} \frac{c_{ij}^I}{c_I} (\sigma_i \tau_j + \sigma_j \tau_i),$$
(2.3)

onde todas as somas são realizadas sobre todos os pares distintos de spins. Na equação (2.3) quando *c* tende para infinito, obtemos um sistema de duas redes completamente conectadas (dois modelos de Curie-Weiss) e acopladas entre si. Destinamos a subseção 2.1.1 para discutir a topologia das conexões no modelo proposto.

#### 2.1.1 Grafos aleatórios

Um grafo consiste em um conjunto de pontos que são chamados de nós, vértices ou sítios. Cada par de nós pode ou não ser conectado por uma linha que recebe o nome de aresta. A forma matemática usual para representar um grafo é como um conjunto de vértices e arestas (BOLLOBÁS, 1979). As conexões dos grafos podem ser expressas por uma matriz de adjacência  $C = c_{ij}$ , onde o elemento de matriz  $c_{ij}$  toma valor um, se existe conexão, ou zero se não existe. Um grafo é dito completamente conectado se cada vértice é conectados a todos os outros.

Quando as propriedades dos grafos são escolhidas aleatoriamente, chamamos de grafos aleatórios. Este ramo da matemática foi introduzido por Erdös e Rényi (1960). Na figura (2.1) apresentamos dois exemplos de grafos.

Figura 2.1 – Exemplos de grafos. (a) Grafo completo com 10 nós. (b) Grafo aleatório de Erdös-Rényi com 30 nós.



Fonte: (CASTILLO, 2004).

O grafo de Poisson ou grafo de Erdös-Rényi é um exemplo de grafo aleatório. Neste caso, os elementos da matriz de adjacência  $c_{ij}$  são sorteados independentemente de acordo com a seguinte distribuição de probabilidade :

$$p(c_{ij}) = \frac{c}{N} \delta_{c_{ij,1}} + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta_{c_{ij,0}},$$
(2.4)

onde *c* representa o número médio de conexões por nó, *N* é o número total de nós e  $\delta$  representa a função delta de Kronecker. Os índices *i* e *j* da equação (2.4) representam sítios diferentes e a matriz de adjacência é simétrica ( $c_{ij} = c_{ji}$ ). Dessa maneira podemos introduzir o grau do sítio *i* que delimita o número de vizinhos do sítio *i*,  $k_i = \sum_{j=1}^{N} c_{ij}$ , e assim expressar *c* da seguinte forma:

$$c = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i} k_i.$$
 (2.5)

Para  $N \rightarrow \infty$ , a distribuição de grau possui a seguinte forma (ERDÖS; RÉNYI, 1959):

$$P(k) = \frac{c^k e^{-c}}{k!}.$$
 (2.6)

O nosso modelo é formado por dois grafos de Erdös-Rényi acoplados entre si. Portanto os elementos  $c_{ij}^{\sigma}$ ,  $c_{ij}^{\tau}$  e  $c_{ij}^{I}$  são sorteados independentemente de acordo com as distribuições:

$$p_{\sigma}(c_{ij}) = \frac{c_{\sigma}}{N} \delta_{c_{ij,1}} + \left(1 - \frac{c_{\sigma}}{N}\right) \delta_{c_{ij,0}},\tag{2.7}$$

$$p_{\tau}(c_{ij}) = \frac{c_{\tau}}{N} \delta_{c_{ij,1}} + \left(1 - \frac{c_{\tau}}{N}\right) \delta_{c_{ij,0}},$$
(2.8)

$$p_I(c_{ij}) = \frac{c_I}{N} \delta_{c_{ij,1}} + \left(1 - \frac{c_I}{N}\right) \delta_{c_{ij,0}},$$
(2.9)

onde  $p_{\sigma}(c_{ij})$  representa a distribuição de probabilidade da rede  $\sigma$ ,  $p_{\tau}(c_{ij})$  a distribuição de probabilidade da rede  $\tau$  e  $p_I(c_{ij})$  representa a distribuição de probabilidade para as conexões entre as duas redes. O modelo proposto é formado por duas redes, sendo que uma rede tem conectividade média interna  $c_{\sigma}$ , a outra rede tem conectividade média interna  $c_{\tau}$  e a conectividade média de acoplamento entre as redes é  $c_I$ .

Uma propriedade importante de grafos de Erdös-Renyi para o nosso trabalho é a existência de uma transição de percolação. Em grafos aleatórios, quando a conectividade média é menor que 1 (c < 1), existe em média menos que uma conexão por sítio. Quando isso ocorre, o grafo é formado por pequenos aglomerados desconectados entre si. Se a conectividade média é igual a 1 existe em média uma conexão por sítio, e com isso os

spins se conectam e formam um grade aglomerado com um número de sítios proporcional ao tamanho do sistema, ou seja, contendo O(N) sítios (CHRISTENSEN, 2002).

#### 2.1.2 Método das réplicas

Considerando que o sistema encontra-se em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico à temperatura T, utilizamos o formalismo do ensemble canônico. Desta forma, a energia livre é dada por:

$$f = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{\beta N} \left\langle \ln Z \right\rangle, \tag{2.10}$$

onde  $\langle ... \rangle$  denota a média sobre  $c_{ij}$ ,  $\beta = \frac{1}{T}$  é o inverso da temperatura multiplicada pela constante de Boltzmann  $k_B^1$  e Z é a função de partição do ensemble canônico :

$$Z = \sum_{\vec{\sigma}\vec{\tau}} e^{-\beta H(\vec{\sigma},\vec{\tau})},$$
(2.11)

onde  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, ..., \sigma_N)$  e  $\vec{\tau} = (\tau_1, ..., \tau_N)$  representam os N spins de cada rede. Retomando a equação (2.10), observa-se que é necessário calcular a média sobre o logaritmo da função de partição, o que não é trivial com a expressão escrita desta maneira. Por esse motivo, utilizamos o método das réplicas, que foi inicialmente aplicado por Edwards e Anderson (1975) e Sherrington e Kirkpatrick (1975), e consiste em transformar a média sobre o logaritmo por meio de uma identidade matemática. Podemos escrever:

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle e^{n l n Z} \right\rangle.$$
 (2.12)

Expandindo a exponencial descrita acima em série de Taylor, obtemos a identidade:

$$\lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \ln \left[ 1 + n \left\langle \ln Z \right\rangle + O(n^2) \right] = \left\langle \ln Z \right\rangle.$$
(2.13)

Desta forma, pode-se reescrever a média sobre o logaritmo da equação (2.11) em termos da média da função de partição elevada na n, ou seja, o método das réplicas consiste, basicamente, em introduzir n réplicas no sistema. Assumindo que n é um inteiro e positivo, é possível calcular a função de partição replicada n vezes no limite  $N \to \infty$  e no final dos cálculos é tomado o limite de  $n \to 0$ 

$$f = -\lim_{n \to 0} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{\beta N n} \ln \langle Z^n \rangle, \qquad (2.14)$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>A constante de Boltzmann vale  $1.346 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$ , mas para nossos cálculos consideramos  $k_B = 1$ .

onde  $Z^n$  representa a função de partição replicada n vezes. Usando o método das réplicas é possível calcular a energia livre no limite termodinâmico. Note que, para obter a equação (2.14), os limites de  $N \to \infty$  e  $n \to 0$  foram invertidos. A validade deste procedimento de inversão dos limites foi demonstrada por Van Hemmen e Palmer (1979) para o modelo de Sherrington-Kirkpatrick.

### 2.1.3 Cálculo das equações de ponto de sela

A partir da equação (2.14), analisamos a função de partição replicada separadamente

$$Z^{n} = \prod_{\alpha=1}^{n} \sum_{\vec{\sigma}_{\alpha}, \vec{\tau}_{\alpha}} e^{-\beta \sum_{\alpha=1}^{n} H(\sigma_{1}^{\alpha}, \dots, \sigma_{N}^{\alpha}, \tau_{1}^{\alpha}, \dots, \tau_{N}^{\alpha})},$$
(2.15)

onde  $\alpha$  rotula as n réplicas distintas e não interagentes do sistema, e os vetores  $\vec{\sigma}_{\alpha} \in \vec{\tau}_{\alpha}$ são os vetores referentes aos estados coletivos dos N sítios de cada grafo na réplica  $\alpha$ . De acordo com 2.14, é necessário calcular a média da função de partição em relação aos  $c_{ij}$ , sendo assim podemos reescrever esta expressão como uma integral sobre as distribuições de probabilidade, referentes às variáveis  $c_{ij}^{\sigma}$ ,  $c_{ij}^{\tau} \in c_{ij}^{I}$ :

$$\langle Z^n \rangle = \int \prod_{i < j} dc^{\sigma}_{ij} p(c^{\sigma}_{ij}) dc^{\tau}_{ij} p(c^{\tau}_{ij}) dc^{I}_{ij} p(c^{I}_{ij}) Z^n.$$
(2.16)

Substituído o Hamiltoniano (2.3) na equação (2.16), obtemos:

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_n} \sum_{\vec{\tau}_1, \dots, \vec{\tau}_n} \int \left[ \left[ \prod_{i < j} dc^{\sigma}_{ij} p_{\sigma}(c^{\sigma}_{ij}) \exp\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}} \sum_{\alpha=1}^n c^{\sigma}_{ij} \sigma^{\alpha}_i \sigma^{\alpha}_j\right) \right] \right]$$

$$\times \left[ \prod_{i < j} dc^{\tau}_{ij} p_{\tau}(c^{\tau}_{ij}) \exp\left(\frac{\beta}{c_{\tau}} \sum_{\alpha=1}^n c^{\tau}_{ij} \tau^{\alpha}_i \tau^{\alpha}_j\right) \right]$$

$$\times \left[ \prod_{i < j} dc^{I}_{ij} p_{I}(c^{I}_{ij}) \exp\left(-\frac{\beta U}{c_I} \sum_{\alpha=1}^n c^{I}_{ij} (\sigma^{\alpha}_i \tau^{\alpha}_j + \sigma^{\alpha}_j \tau^{\alpha}_i)\right) \right].$$

$$(2.17)$$

Resolvendo as integrais sobre  $c^{\sigma}_{ij},\,c^{\tau}_{ij}$  e  $c^{I}_{ij},$  temos que:

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_n} \sum_{\vec{\tau}_1, \dots, \vec{\tau}_n} \left\{ \prod_{i < j} \left( 1 + \frac{c_{\sigma}}{N} \left[ \exp\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha}\right) - 1 \right] \right) \right.$$

$$\times \left( 1 + \frac{c_I}{N} \left[ \exp\left(\frac{\beta U}{c_I} \sum_{\alpha=1}^n (\sigma_i^{\alpha} \tau_j^{\alpha} + \sigma_j^{\alpha} \tau_i^{\alpha}) \right) - 1 \right] \right)$$

$$\times \left( 1 + \frac{c_{\tau}}{N} \left[ \exp\left(\frac{\beta}{c_{\tau}} \sum_{\alpha=1}^n \tau_i^{\alpha} \tau_j^{\alpha}\right) - 1 \right] \right) \right\}.$$

$$(2.18)$$

Como as conectividades médias são finitas e N é muito grande, é possível usar a seguinte aproximação  $1 + O\left(\frac{1}{N}\right) \approx exp\left(O\left(\frac{1}{N}\right)\right)$ , para reescrever a equação (2.18). Além disso, consideramos que  $\sum_{i < j} = \frac{1}{2} \sum_{i,j}$ . E, com isso, reescrevemos a expressão da seguinte forma:

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}_1 \dots \vec{\sigma}_n} \sum_{\vec{\tau}_1 \dots \vec{\tau}_n} \exp\left[\frac{c_{\sigma}}{2N} \sum_{i,j} \left(e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha}} - 1\right) + \frac{c_{\tau}}{2N} \sum_{i,j} \left(e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \sum_{\alpha=1}^n \tau_i^{\alpha} \tau_j^{\alpha}} - 1\right) + \frac{c_I}{2N} \sum_{i,j} \left(e^{\frac{\beta U}{c_I} \sum_{\alpha=1}^n (\sigma_i^{\alpha} \tau_j^{\alpha} + \sigma_j^{\alpha} \tau_i^{\alpha})} - 1\right)\right].$$

$$(2.19)$$

Para resolver a soma sobre as variáveis de spin, é necessário introduzir as funções delta de Kronecker descritas abaixo, pois na equação  $\langle Z^n \rangle$  existe uma exponencial interna e não é permitido fazer qualquer expansão pois as conectividades médias são finitas. Para as variáveis  $\vec{\sigma}$ , temos que:

$$1 = \sum_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}\vec{\sigma}_i} \quad \forall \ i,$$
(2.20)

onde  $\vec{\sigma}_i$ , a partir de agora, é o vetor de dimensão n que representa os estados de um único spin nas n réplicas e  $\vec{\sigma}$  é conhecido como spin auxiliar, de modo que  $\delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_i} = 1$  se  $\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_i$ , caso contrário a delta de Kronecker é zero. De modo similar, temos a seguinte identidade para as variáveis  $\vec{\tau}$ :

$$1 = \sum_{\vec{\tau}} \delta_{\vec{\tau}\vec{\tau}_i} \quad \forall \ i.$$
(2.21)

Podemos inserir estas identidades em 2.19

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_N} \sum_{\vec{\tau}_1, \dots, \vec{\tau}_N} \left[ \exp\left(\frac{c_{\sigma}}{2N} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \delta_{\vec{\sigma}', \vec{\sigma}_j} \left(e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1\right) + \frac{c_I}{2N} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}'} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \delta_{\vec{\tau}', \vec{\tau}_j} \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}} \delta_{\vec{\sigma}', \vec{\sigma}_j} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\tau}_i} \left(e^{\frac{\beta U}{c_I} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1\right) + \frac{c_{\tau}}{2N} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\tau}'} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\tau}_i} \delta_{\vec{\tau}', \vec{\tau}_j} \left(e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1\right) \right) \right]$$

$$(2.22)$$

onde  $\vec{\sigma}'$  e  $\vec{\tau}'$  são os spins auxiliares.

Introduzimos neste ponto os parâmetros de ordem, os quais representam a fração de sítios com uma determinada configuração:

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma}\vec{\sigma}_{i}},$$
(2.23)

$$P_{\tau}(\vec{\tau}) = \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\tau}\vec{\tau}_{i}}, \qquad (2.24)$$

$$P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_i} \delta_{\vec{\tau},\vec{\tau}_i}.$$
(2.25)

Neste ponto, em métodos tradicionais, por exemplo em modelos completamente conectados, a exponencial interna na figura (2.22) é expandida em série de potências (Lage (1977)). Porém, no caso estudado as conectividades médias são finitas e não conseguimos fazer qualquer expansão na exponencial interna, pois essa conduz para uma quantidade infinita de parâmetros de ordem. Para contornar esse problema introduzimos os parâmetros de ordem das equações (2.23)-(2.25) por meio das identidades:

- para  $\sigma$ :

$$1 = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma}} dP_{\sigma}(\vec{\sigma}) \right] \prod_{\vec{\sigma}} \delta \left[ P_{\sigma}(\vec{\sigma}) - \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} \right],$$

$$1 = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma}} \frac{dP_{\sigma}(\vec{\sigma}) d\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma})}{2\pi} \right] \exp \left( i \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) \left[ P_{\sigma}(\vec{\sigma}) - \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} \right] \right),$$
(2.26)

- para  $\tau$ 

$$1 = \int \left[\prod_{\vec{\tau}} dP_{\tau}(\vec{\tau})\right] \prod_{\vec{\tau}} \delta \left[P_{\tau}(\vec{\tau}) - \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\tau},\vec{\tau}_{i}}\right]$$
(2.27)  
$$1 = \int \left[\prod_{\vec{\tau}} \frac{dP_{\tau}(\vec{\tau})d\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau})}{2\pi}\right] \exp\left(i \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) \left[P_{\tau}(\vec{\tau}) - \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\tau},\vec{\tau}_{i}}\right]\right),$$

- para  $\sigma$ , $\tau$ :

$$1 = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} dP_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) \right] \prod_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \delta \left[ P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) - \frac{1}{N} \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} \delta_{\vec{\tau},\vec{\tau}_{i}} \right]$$
(2.28)

$$1 = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \frac{dP_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}))d\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}{2\pi} \right] \exp\left(i\sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) \left[ P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) - \frac{1}{N}\sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} \delta_{\vec{\tau},\vec{\tau}_{i}} \right] \right),$$

onde o parâmetro de ordem  $\hat{P}$  foi introduzido por meio de uma representação integral da função delta de Dirac. Portanto, inserimos as identidades (2.26)-(2.28) introduzimos os parâmetros de ordem na equação (2.22) e obtemos:

$$\begin{split} \langle Z^n \rangle &= \sum_{\vec{\sigma}_1 \dots \vec{\sigma}_N} \sum_{\vec{\tau}_1 \dots \vec{\tau}_N} \int \left[ \prod_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \frac{dP_{\sigma}(\vec{\sigma}) d\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) dP_{\tau}(\vec{\tau}) d\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) dP_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) d\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau})}{(2\pi)^3} \right] \end{split} \tag{2.29} \\ &\times \exp\left( i \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}) + i \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}) + i \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) - \frac{i}{N} \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_{i}} - \frac{i}{N} \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) \sum_{i} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\tau}_{i}} - \frac{i}{N} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) \sum_{i} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_{i}} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\tau}_{i}} + \frac{c_{\sigma}N}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}') \left( e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1 \right) + \frac{c_{\tau}N}{2} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}') \left( e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1 \right) \\ &+ \frac{c_{I}N}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}') \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}) \left( e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau}')} - 1 \right) \right). \end{split}$$

Podemos reescrever a equação (2.29) considerando a seguinte mudança de variável  $\hat{P} \rightarrow N\hat{P}$ :

$$\langle Z^n \rangle = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \frac{N^3 dP_{\sigma}(\vec{\sigma}) d\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) dP_{\tau}(\vec{\tau}) d\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) dP_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) d\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}{(2\pi)^3} \right]$$

$$\times \exp \left[ N \left( i \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}) + i \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) + i \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}) \right. \\ \left. + \frac{c_{\sigma}}{2} \sum_{\vec{\sigma},\vec{\sigma'}} P_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma'}) \left( e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma'}} - 1 \right) + \frac{c_{\tau}}{2} \sum_{\vec{\tau},\vec{\tau'}} P_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau'}) \left( e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau'}} - 1 \right) \right. \\ \left. + \frac{c_{I}}{2} \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau'}} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau'}) \sum_{\vec{\sigma'},\vec{\tau}} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma'},\vec{\tau}) \left( e^{\frac{-\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau'} + \vec{\sigma'} \cdot \vec{\tau})} - 1 \right) \right. \\ \left. + \ln \left[ \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} e^{i(-\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})} \right] \right) \right].$$

Finalmente, podemos reescrever a expressão acima na forma:

$$\langle Z^n \rangle = \int \left[ \prod_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \frac{N^3 dP_{\sigma}(\vec{\sigma}) d\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) dP_{\tau}(\vec{\tau}) d\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) d\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}{(2\pi)^3} \right] \exp(Ng[P,\hat{P}]),$$
(2.31)

onde a função g é dada por:

$$g[P, \hat{P}] = i \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}) + i \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) + i \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau})$$

$$+ \ln \left[ \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} e^{i(-\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - \hat{P}_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}))} \right] + \frac{c_{\sigma}}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}') \left( e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1 \right) \right.$$

$$+ \frac{c_{\tau}}{2} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}') \left( e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1 \right) \\
+ \frac{c_{I}}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}'} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}') \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}) \left( e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1 \right).$$
(2.32)

Para resolver a integral da equação (2.31) no limite termodinâmico  $N \to \infty$ , precisamos utilizar o método de integração de ponto de sela (ver apêndice I do livro Coolen e Sollich (2005)), que consiste em aproximar a integral pelos valores de  $\hat{P}$  e P onde g é um extremo. O método é exato no limite  $N \to \infty$ . Com isso, podemos reescrever a equação (2.31) como:

$$\langle Z^n \rangle = e^{Ng[P,\hat{P}]},\tag{2.33}$$

onde  $P \in \hat{P}$ , a partir de agora, são os valores específicos que extremizam a função g. Assim, podemos substituir a equação (2.33) na equação da energia livre (2.14)

$$f = \lim_{n \to 0} \frac{1}{\beta n} g[P, \hat{P}].$$
 (2.34)

A equação (2.34) representa a energia livre em termos dos parâmetros  $P \in \hat{P}$ . Agora, precisamos encontrar as equações de ponto de sela, para isso derivamos a equação (2.32) em relação aos parâmetros  $P \in \hat{P}$  que extremizam g. Portanto:

• para  $P_{\sigma}(\vec{\sigma})$ :

$$\frac{\delta g[P, \hat{P}]}{\delta P_{\sigma}(\vec{\sigma})} = 0, \tag{2.35}$$

$$\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) = ic_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}'} - 1).$$
(2.36)

$$\frac{\delta g[P,\hat{P}]}{\delta \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma})} = 0, \tag{2.37}$$

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \frac{\sum_{\vec{\tau}} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - i\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}}{\sum_{\vec{\sigma}'',\vec{\tau}} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - i\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}}.$$
(2.38)

• Para  $P_{\tau}(\vec{\tau})$ :

$$\frac{\delta g[P,\hat{P}]}{\delta P_{\tau}(\vec{\tau})} = 0, \tag{2.39}$$

$$\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) = ic_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}'} - 1).$$
(2.40)

$$\frac{\delta g[P,\hat{P}]}{\delta \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau})} = 0, \tag{2.41}$$

$$P_{\tau}(\vec{\tau}) = \frac{\sum_{\vec{\sigma}} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - i\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}}{\sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}''} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - i\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}}.$$
(2.42)

• Para  $P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})$ :

$$\frac{\delta g[P,\hat{P}]}{\delta P_{\sigma,\tau}(\sigma,\tau)} = 0, \tag{2.43}$$

$$\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = ic_I \sum_{\vec{\sigma}',\vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}',\vec{\tau}') (e^{-\frac{\beta U}{c_I}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}'+\vec{\sigma}'\cdot\vec{\tau})} - 1).$$
(2.44)

$$\frac{\delta g[P, \hat{P}]}{\delta \hat{P}_{\sigma,\tau}(\sigma, \tau)} = 0,$$
(2.45)

24

$$P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = \frac{e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\sigma) - i\hat{P}_{\tau}(\tau) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\sigma,\tau)}}{\sum_{\sigma'',\tau''} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\sigma) - i\hat{P}_{\tau}(\tau) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\sigma,\tau)}}.$$
(2.46)

#### 2.1.4 Equações de auto-consistência em simetria de réplicas

Para prosseguir com os cálculos, devemos realizar a soma sobre os spins e obter a dependência da energia livre com relação a *n*. Isso só é possível considerando alguma hipótese sobre a forma da função *P*. Essa hipótese deve satisfazer as equações para os parâmetros de ordem descritos nas equações (2.23)-(2.25). Desta maneira, consideramos que *P* permanece invariante em relação às permutações dos spins entre as diferentes réplicas. Essa hipótese é chamada de simetria de réplicas (SR)(MÉZARD; PARISI, 1985; MONASSON, 1998). No modelo estudado utilizamos as seguintes hipóteses de simetria de réplicas:

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \int du W_{\sigma}(u) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}}}{[2\cosh(\beta u)]^{n}},$$
(2.47)

$$P_{\tau}(\vec{\tau}) = \int dv W_{\tau}(v) \frac{e^{\beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}}{[2\cosh(\beta v)]^n},$$
(2.48)

$$P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = \int du dv Q(u,v) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} + \beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}{[4\cosh(\beta u)\cosh(\beta v)]^n}$$
(2.49)

onde  $W_{\sigma}(u)$ ,  $W_{\tau}(v)$  e Q(u, v) representam as distribuições de probabilidade dos campos efetivos que devem ser determinadas de modo auto-consistente. A distribuição dada na equação (2.49) representa o acoplamento entre as duas redes do sistema e é utilizada, neste trabalho, para calcular a energia livre por sítio. Quando calculamos a soma sobre  $\vec{\sigma}$  na equação (2.47) e a soma sobre  $\vec{\tau}$  na equação (2.48), observamos que as equações são normalizadas, ou seja, satisfazem as condições impostas pelos parâmetros de ordem definidos nas equações (2.24) e (2.23). Para a hipótese de SR, dada na equação (2.49), consideramos que a distribuição de campos efetivos Q(u, v) satisfaz as seguintes propriedades:

$$\int dv Q(u,v) = W_{\sigma}(u), \qquad (2.50)$$

$$\int du Q(u,v) = W_{\tau}(v).$$
(2.51)

Essas propriedades garantem que  $\sum_{\sigma} P(\sigma, \tau) = P_{\tau}(\tau) \in \sum_{\tau} P(\sigma, \tau) = P_{\sigma}(\sigma)$ , ou seja, são consistentes com a definição do parâmetro de ordem dado pela equação (2.25). Os argumentos  $u \in v$  representam os campos efetivos. Para compreender isso, supomos que o campo  $u_i$  atue em um determinado sitio i, e em consequência da ação deste campo efetivo, o spin do sitio i apresenta uma magnetização local dada por  $m_i = \tanh(\beta u_i)$ . Sendo assim, podemos escrever a equação de campo efetivo para o sítio, como  $u = \frac{1}{\beta} atanh(\langle \sigma_i \rangle)$ , sendo que  $m_i = \langle \sigma_i \rangle$  representa a média térmica da magnetização de cada sítio (KANTER; SOMPOLINSKY, 1987). O mesmo vale para o campo efetivo v. A hipótese de SR é exata para o modelo em questão (MÉZARD; PARISI, 1987; LEONE et al., 2002), pois o sistema não apresenta desordem e frustração. As hipóteses de SR devem satisfazer as equações de ponto de sela. Sendo assim, utilizamos as equações de ponto de sela e as hipóteses de SR para encontrar as distribuições de probabilidade dos campos efetivos. Como discutido no Apêndice (A) , nas equações (2.36), (2.40) e (2.46) podemos negligenciar o denominador, pois este tende a 1 quando  $n \to 0$ . Com isso, mostramos a seguir os cálculos para obter as distribuições de probabilidade de campos efetivos  $W_{\sigma}(u), W_{\tau}(v) \in Q(u, v)$ .

Para obter uma equação para  $W_{\sigma}(u)$ , consideramos a equação (2.38) e substituímos as equações (2.36), (2.40) e (2.44),

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \sum_{\vec{\tau}} \exp\left[c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') \left(e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}'} - 1\right) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') \left(e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}'} - 1\right) + c_{I} \sum_{\vec{\sigma}'\vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}',\vec{\tau}') \left(e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}'+\vec{\sigma}'\cdot\vec{\tau})} - 1\right)\right].$$
(2.52)

Representando as exponenciais da equação (2.52) em séries de potência, obtemos:

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \sum_{\vec{\tau}} \left[ \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} \frac{c_{\sigma}^{k_{\sigma}} e^{-c_{\sigma}}}{k_{\sigma}!} \sum_{\vec{\sigma}_{1}',...,\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}_{1}')...P_{\sigma}(\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}') \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}_{l}'} \right]$$

$$\times \left[ \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} \frac{c_{\tau}^{k_{\tau}} e^{-c_{\tau}}}{k_{\tau}!} \sum_{\vec{\tau}_{1}',...,\vec{\tau}_{k_{\tau}}'} P_{\tau}(\vec{\tau}_{1}')...P_{\tau}(\vec{\tau}_{k_{\tau}}') \prod_{p=1}^{k_{\tau}} e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}_{p}'} \right]$$

$$\times \left[ \sum_{k_{I}=0}^{\infty} \frac{c_{I}^{k_{I}} e^{-c_{I}}}{k_{I}!} \sum_{\vec{\sigma}_{1}',...,\vec{\sigma}_{k_{I}}'} \sum_{\vec{\tau}_{1}',...,\vec{\tau}_{k_{I}}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{1}',\vec{\tau}_{1}')...P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{k_{I}}',\vec{\tau}_{k_{I}}') \prod_{m=1}^{k_{I}} e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}_{m}'+\vec{\sigma}_{m}'\cdot\vec{\tau})} \right].$$

Para facilitar os cálculos, dividimos a equação (2.53) em três partes:

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \sum_{\vec{\tau}} X_1(\vec{\sigma}) X_2(\vec{\tau}) X_3(\vec{\sigma}, \vec{\tau}),$$
(2.54)

onde  $X_1(\vec{\sigma})$ ,  $X_2(\vec{\tau})$  e  $X_3(\vec{\sigma},\vec{\tau})$  são dados por:

$$X_1(\vec{\sigma}) = \sum_{k_\sigma=0}^{\infty} \frac{c_{\sigma}^{k_\sigma} e^{-c_\sigma}}{k_\sigma!} \sum_{\vec{\sigma}'_1, \dots, \vec{\sigma}'_{k_\sigma}} P_{\sigma}(\vec{\sigma}'_1) \dots P_{\sigma}(\vec{\sigma}'_{k_\sigma}) \prod_{l=1}^{k_\sigma} e^{\frac{\beta}{c_\sigma} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'_l},$$
(2.55)

$$X_{2}(\vec{\tau}) = \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} \frac{c_{\tau}^{k_{\tau}} e^{-c_{\tau}}}{k_{\tau}!} \sum_{\vec{\tau}_{1}',...,\vec{\tau}_{k_{\tau}}'} P_{\tau}(\vec{\tau}_{1}')...P_{\tau}(\vec{\tau}_{k_{\tau}}') \prod_{p=1}^{k_{\tau}} e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}_{p}'},$$
(2.56)

$$X_{3}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = \sum_{k_{I}=0}^{\infty} \frac{c_{I}^{k_{I}} e^{-c_{I}}}{k_{I}!} \sum_{\vec{\sigma}_{1}',\dots,\vec{\sigma}_{k_{I}}'} \sum_{\vec{\tau}_{1}',\dots,\vec{\tau}_{k_{I}}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{1}',\vec{\tau}_{1}')\dots P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{k_{I}}',\vec{\tau}_{k_{I}}') \prod_{m=1}^{k_{I}} e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}_{m}'+\vec{\sigma}_{m}'\cdot\vec{\tau})}.$$
(2.57)

Sendo assim, resolvemos primeiro  $X_1(\vec{\sigma})$ :

$$X_1(\vec{\sigma}) = \sum_{k_\sigma=0}^{\infty} p_\sigma(k_\sigma) \sum_{\vec{\sigma}_1',\dots,\vec{\sigma}_{k_\sigma}'} P_\sigma(\vec{\sigma}_1')\dots P_\sigma(\vec{\sigma}_{k_\sigma}') \prod_{l=1}^{k_\sigma} e^{\frac{\beta}{c_\sigma}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}_l'},$$
(2.58)

onde  $p_{\sigma}(k_{\sigma}) = \frac{c_{\sigma}^{k_{\sigma}}e^{-c_{\sigma}}}{k_{\sigma}!}$  é a distribuição de Poisson. Substituindo na equação (2.58) a hipótese de SR dada na equação (2.47), temos que:

$$X_{1}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \int \frac{du_{l} W_{\sigma}(u_{l})}{[2\cosh(\beta u_{l})]^{n}} \sum_{\vec{\sigma}_{1}',\dots,\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}'} \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \exp\left[\beta u_{l} \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l}' + \frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}_{l}'\right].$$
(2.59)

Considerando que podemos escrever, para  $n \rightarrow 0$ ,  $x^n = exp(nln(x)) \approx 1 + nln(x)$ , obtemos:

$$X_1(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \int \frac{du_l W_{\sigma}(u_l)}{[2\cosh(\beta u_l)]^n} \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \exp\left\{\sum_{\alpha=1}^n \left(\ln\sum_{\sigma'_{\alpha l}} e^{\beta u_l \sigma'_{\alpha l} + \frac{\beta}{c_{\sigma}} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha l}}\right)\right\}.$$
 (2.60)

Sabendo que  $\sigma_{\alpha l}^{'}=\pm 1,$  podemos realizar a soma sobre  $\sigma_{\alpha l}^{'},$ 

$$X_1(\vec{\sigma}) = \sum_{k_\sigma=0}^{\infty} p_\sigma(k_\sigma) \int \prod_{l=1}^{k_\sigma} \frac{du_l W_\sigma(u_l)}{[2\cosh(\beta u_l)]^n} \prod_{l=1}^{k_\sigma} \exp\left\{\sum_{\alpha=1}^n \ln 2 \cosh\left(\beta u_l + \frac{\beta}{c_\sigma}\sigma_\alpha\right)\right\}.$$
 (2.61)

Na equação (2.61), temos uma dependência em relação a  $\sigma_{\alpha}$ , que queremos remover do interior da função hiperbólica. Portanto, utilizamos a equação (2.20) e a seguinte representação para a função delta de Kronecker:

$$\delta_{\sigma,\sigma_{\alpha}} = \frac{1}{2}(1 + \sigma\sigma_{\alpha}). \tag{2.62}$$

Substituindo na equação (2.61), obtemos:

$$X_{1}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right]$$

$$\times \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \exp\left\{ \sum_{\alpha=1}^{n} \sum_{\sigma=\pm 1}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + \sigma \sigma_{\alpha}) \ln 2 \cosh\left(\beta u_{l} + \frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) \right\},$$
(2.63)

onde tomamos o limite de  $n \to 0$  no termo  $2 \cosh(\beta u_l)$ , o qual podemos negligenciar como pode ser averiguado no Apêndice A. Realizando a soma sobre  $\sigma$ :

$$X_{1}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right] \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \exp\left\{ \left( \frac{1}{2}n + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \right.$$

$$\times 2 \cosh\left( \beta u_{l} + \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) + \left( \frac{1}{2}n - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) 2 \cosh\left( \beta u_{l} + \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) \right\}.$$

$$(2.64)$$

No limite de  $n \rightarrow 0$ , podemos escrever a equação (2.64) como:

$$X_{1}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right]$$

$$\times \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{2 \cosh\left(\beta u_{l} + \frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)}{2 \cosh\left(\beta u_{l} - \frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)} \right] \right\}.$$
(2.65)

Usando a identidade matemática  $\frac{1}{2} \ln \left( \frac{1-x}{1+x} \right) = \operatorname{atanh}(x)$ , podemos reescrever  $X_1(\vec{\sigma})$  como:

$$X_{1}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right]$$

$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{l=1}^{k_{\sigma}} \operatorname{atanh} \left[ \operatorname{tanh}(\beta u_{l}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) \right] \right\}.$$
(2.66)

Para reescrever  $X_2(\vec{\tau})$  e  $X_3(\vec{\sigma}, \vec{\tau})$ , seguimos os mesmos passos descritos para  $X_1(\vec{\sigma})$ , e obtemos:

$$X_{2}(\vec{\tau}) = \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) \int \left[ \prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p} W_{\tau}(v_{p}) \right]$$

$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha} \right) \sum_{p=1}^{k_{\tau}} \operatorname{atanh} \left[ \operatorname{tanh}(\beta v_{p}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta}{c_{\tau}} \right) \right] \right\},$$
(2.67)

onde  $p_{\tau}(k_{\tau}) = \frac{c_{\tau}^{k_{\tau}}e^{-c_{\tau}}}{k_{\tau}!}$ . Para  $X_3(\vec{\sigma}, \vec{\tau})$ , obtemos:

$$X_{3}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) = \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} dv_{m} Q(u_{m},v_{m}) \right]$$

$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha} \right) \sum_{m=1}^{k_{I}} \operatorname{atanh} \left[ \operatorname{tanh}(\beta u_{m}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta U}{c_{I}} \right) \right] \right\}$$

$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{m=1}^{k_{I}} \operatorname{atanh} \left[ \operatorname{tanh}(\beta v_{m}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta U}{c_{I}} \right) \right] \right\}.$$

$$(2.68)$$

onde  $p_I(k_I) = \frac{c_I^{k_I} e^{-c_I}}{k_I!}$ . Agora, retornamos à equação (2.54) e substituímos as equações (2.66), (2.67) e (2.68)

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \sum_{\vec{\tau}} \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right] \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) \int \left[ \prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p} W_{\tau}(v_{p}) \right]$$

$$\times \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} dv_{m} Q(u_{m}, v_{m}) \right]$$

$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{l=1}^{k_{\sigma}} \operatorname{atanh} \left[ \tanh(\beta u_{l}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right) \right]$$

$$+ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha} \right) \sum_{p=1}^{k_{T}} \operatorname{atanh} \left[ \tanh(\beta v_{p}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]$$

$$+ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{m=1}^{k_{I}} \operatorname{atanh} \left[ \tanh(\beta v_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]$$

$$+ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{m=1}^{k_{I}} \operatorname{atanh} \left[ \tanh(\beta v_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right] \right\}.$$
(2.69)

Podemos agora executar a soma sobre  $\vec{\tau}$  e tomar o limite  $n \to 0$  nos termos que dependem

de  $\vec{\tau}$ :

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right] \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} W_{\sigma}(u_{m}) \right]$$
(2.70)  
 
$$\times \exp\left\{ \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{l=1}^{k_{\sigma}} \operatorname{atanh} \left( \operatorname{tanh}(\beta u_{l}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) \right) + \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \right) \sum_{m=1}^{k_{I}} \operatorname{atanh} \left( \operatorname{tanh}(\beta v_{m}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta U}{c_{I}} \right) \right) \right\}.$$

Tendo em vista as propriedades da função delta de Dirac, podemos reescrever a equação (2.70) da seguinte forma:

$$P_{\sigma}(\vec{\sigma}) = \int du \Biggl\{ \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \Biggl[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \Biggr] \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \Biggl[ \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} W_{\sigma}(u_{m}) \Biggr]$$
(2.71)  
$$\times \delta \Biggl( u - \sum_{l=1}^{k_{\sigma}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \Biggl[ \operatorname{tanh}(\beta u_{l}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) \Biggr]$$
$$- \sum_{m=1}^{k_{I}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \Biggl[ \operatorname{tanh}(\beta v_{m}) \operatorname{tanh} \left( \frac{\beta U}{c_{I}} \right) \Biggr] \Biggr) \Biggr\} e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}}.$$

Comparando a equação (2.71) e a hipótese de SR (equação 2.47) no limite  $n \rightarrow 0$  encontramos a expressão para a distribuição de probabilidade de campos efetivos na rede  $\sigma$ :

$$W_{\sigma}(u) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \right] \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} W_{\sigma}(u_{m}) \right]$$
(2.72)

$$\times \delta \left\{ u - \frac{1}{\beta} \left[ \sum_{l=1}^{n_{\sigma}} \operatorname{atanh}\left( \operatorname{tanh}(\beta u_{l}) \operatorname{tanh}\left( \frac{\beta}{c_{\sigma}} \right) \right) + \sum_{m=1}^{n_{I}} \operatorname{atanh}\left( \operatorname{tanh}(\beta v_{m}) \operatorname{tanh}\left( \frac{\beta U}{c_{I}} \right) \right) \right] \right\}$$

As equações para as distribuições de campos efetivos  $W_{\tau}(v)$  e Q(u, v), obtidas de modo similar ao realizado para  $W_{\sigma}(u)$ , são dadas por:

$$W_{\tau}(v) = \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) \int \left[ \prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p} W_{\tau}(v_{p}) \right] \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} dv_{m} W_{\tau}(v_{m}) \right]$$
(2.73)  
$$\times \delta \left\{ v - \frac{1}{2} \left[ \sum_{k_{\tau}}^{k_{\tau}} \operatorname{atanh}\left( \operatorname{tanh}(\beta v_{p}) \operatorname{tanh}\left( \frac{\beta}{-} \right) \right) + \sum_{k_{I}}^{k_{I}} \operatorname{atanh}\left( \operatorname{tanh}(\beta u_{m}) \operatorname{tanh}\left( \frac{\beta U}{-} \right) \right) \right] \right\}$$

$$\delta \left\{ v - \frac{1}{\beta} \left[ \sum_{p=1} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta v_p) \tanh\left(\frac{\beta}{c_\tau}\right) \right) + \sum_{m=1} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta u_m) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_I}\right) \right) \right] \right\}$$

$$Q(u,v) = \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \left[\prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l})\right] \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) \int \left[\prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p} W_{\tau}(v_{p})\right]$$

$$\times \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \left[\prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} dv_{m} Q(u_{m}, v_{m})\right]$$

$$\times \delta \left[u - \sum_{l=1}^{k_{\sigma}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta u_{l}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) \right) - \sum_{m=1}^{k_{I}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta v_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right) \right]$$

$$\times \delta \left[v - \sum_{p=1}^{k_{\tau}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta v_{p}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right) \right) - \sum_{m=1}^{k_{I}} \frac{1}{\beta} \operatorname{atanh} \left( \tanh(\beta u_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right) \right].$$

As equações (2.72), (2.73) e (2.74) devem ser resolvidas numericamente, para isso utilizamos o algoritmo de dinâmica de populações. Esse método é discutido no artigo de Mézard e Parisi (2001) e no livro de Mézard e Montanari (2009). Para o nosso modelo esse método foi adaptado e está descrito no Apêndice B.

Após calcularmos as distribuições de campos efetivos, podemos calcular outras quantidades físicas. Sendo assim, calculamos a magnetização de cada rede do sistema, ou seja, as equações para  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$ . A partir das hipóteses de SR podemos calcular a magnetização de cada rede. Com isso, usamos a equação (2.47) e realizamos a soma sobre os spins, e obtemos:

$$m_{\sigma} = \sum_{\sigma^{1}...\sigma^{n}} P_{\sigma}(\vec{\sigma})\sigma^{1} \Longrightarrow m_{\sigma} = \int du W_{\sigma}(u) \tanh(\beta u).$$
(2.75)

Agora, utilizamos a equação (2.48)

$$m_{\tau} = \sum_{\tau^1 \dots \tau^n} P_{\tau}(\vec{\tau}) \tau^1 \Longrightarrow m_{\tau} = \int dv W_{\tau}(v) \tanh(\beta v).$$
(2.76)

Além das equações para a magnetização de cada rede, na próxima seção encontramos a expressão da equação da energia livre em termos das distribuições de campos efetivos.

#### 2.1.5 Cálculo da energia livre

Após encontrarmos as equações para as distribuições de probabilidade de campos efetivos, podemos calcular a energia livre. Para isso, vamos considerar a equação (2.34),

mostrada abaixo:

$$f = -\lim_{n \to 0} \frac{1}{\beta n} \Biggl\{ i \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}) + i \sum_{\vec{\tau}} \hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}) + i \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}) - 1 \Biggr\} + \frac{c_{\sigma}}{2} \sum_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}) P_{\sigma}(\vec{\sigma}') (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}'} - 1) + \frac{c_{\tau}}{2} \sum_{\vec{\tau},\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}) P_{\tau}(\vec{\tau}') (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}'} - 1) + \frac{c_{\tau}}{2} \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}') \sum_{\vec{\sigma}',\vec{\tau}} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}',\vec{\tau}) (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}'+\vec{\sigma}'\cdot\vec{\tau})} - 1) + \ln \left[ \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} e^{i(-\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma})-\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau})-\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau}))} \right] \Biggr\}.$$

Substituindo as equações (2.36), (2.40) e (2.46) na equação (2.77), obtemos:

$$f = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c_{\sigma}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') P_{\sigma}(\vec{\sigma}) (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) + \frac{c_{\tau}}{2\beta n} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') P_{\tau}(\vec{\tau}) (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1) \right.$$
(2.78)  
$$\left. + \frac{c_{I}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}'} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}') \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}) [e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1] \right. \\\left. - \frac{1}{\beta n} \ln \left[ \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \exp\left( c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1) \right. \\\left. + c_{I} \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}'} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}') (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1) \right) \right] \right\}.$$

Agora, precisamos substituir as hipóteses de SR e efetuar as somas sobre os valores dos spins. Para realizar este cálculo, dividimos a expressão (2.78) em quatro termos

$$f = f_1 + f_2 + f_3 + f_4, (2.79)$$

onde  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $f_3$  e  $f_4$  são dados por:

$$f_1 = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c_{\sigma}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') P_{\sigma}(\vec{\sigma}) (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) \right\},\tag{2.80}$$

$$f_2 = \lim_{n \to 0} \frac{c_{\tau}}{2\beta n} \sum_{\vec{\tau}, \vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') P_{\tau}(\vec{\tau}) (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1),$$
(2.81)

$$f_{3} = \lim_{n \to 0} \frac{c_{I}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}'} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}, \vec{\tau}') \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}} P_{\sigma, \tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}) (e^{-\frac{\beta}{c_{I}}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1),$$
(2.82)

$$f_{4} = -\lim_{n \to 0} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \exp \left[ c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}', \vec{\tau}') (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1) \right] \right\}.$$

$$(2.83)$$

Desta forma, para  $f_1$  (equação (2.80)) aplicamos a hipótese de SR descrita na equação (2.36) e obtemos:

$$f_{1} = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c_{\sigma}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \int du W_{\sigma}(u) du' W_{\sigma}(u') \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} + \beta u' \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}}{[2\cosh(\beta u)]^{n} [2\cosh(\beta u')]^{n}} \right.$$

$$\times \left[ \exp\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}} \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha}'\right) - 1 \right] \right\}.$$

$$(2.84)$$

Como a soma sobre os vetores  $\vec{\sigma} \in \vec{\sigma}'$  não alteram a integral, conseguimos reescrever a equação acima como:

$$f_{1} = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c_{\sigma}}{2\beta n} \int du du' W_{\sigma}(u) W_{\sigma}(u') \left[ \prod_{\alpha=1}^{n} \sum_{\sigma_{\alpha}, \sigma_{\alpha}'} \frac{e^{\beta u' \sigma_{\alpha}' + \beta u \sigma_{\alpha} + \frac{\beta}{c_{\sigma}} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha}'}}{[2\cosh(\beta u)]^{n} [2\cosh(\beta u')]^{n}} - 1 \right] \right\}.$$
(2.85)

Em seguida, realizamos a soma sobre os spins ( $\sigma \in \sigma'$ ) e podemos reescrever a expressão acima, como:

$$f_{1} = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c}{2\beta n} \int du du' W_{\sigma}(u) W_{\sigma}(u') \right.$$

$$\times \left\{ \left[ \frac{e^{\beta u + \beta u' + \frac{\beta}{c_{\sigma}}} + e^{-\beta u - \beta u' + \frac{\beta}{c_{\sigma}}} + e^{-\beta u + \beta u' - \frac{\beta}{c_{\sigma}}} + e^{\beta u - \beta u' - \frac{\beta}{c_{\sigma}}}}{4\cosh(\beta u)\cosh(\beta u')} \right]^{n} - 1 \right\} \right\}.$$

$$(2.86)$$

Utilizando as seguintes identidades trigonométricas:

$$e^x + e^{-x} = 2\cosh(x),$$
 (2.87)

$$\cosh(x \pm y) = \cosh(x)\cosh(x) \pm \sinh(x)\sinh(y), \qquad (2.88)$$

e considerando alguns passos algébricos chegamos em:

$$f_{1} = \lim_{n \to 0} \left\{ \frac{c}{2\beta n} \int du du' W_{\sigma}(u) W(u') \right\}$$

$$\times \left\{ \left[ \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) + \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) \tanh(\beta u) \tanh(\beta u') \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) \right]^{n} - 1 \right\} \right\}.$$
(2.89)

Nosso objetivo agora é tomar o limite  $n \rightarrow 0$ , para isso expandimos a equação (2.89) expressão para n pequeno até primeira ordem, e encontramos:

$$f_{1} = \frac{c_{\sigma}}{2\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) + \frac{c_{\sigma}}{2\beta} \int du W_{\sigma}(u) du' W_{\sigma}(u')$$

$$\times \ln\left\{1 + \tanh(\beta u) \tanh(\beta u') \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)\right\}.$$
(2.90)

Este é o resultado final para o termo  $f_1$  da equação (2.78).

Da mesma maneira, calculamos a expressão para  $f_2$ , aplicando a hipótese de SR (2.40) e realizando os mesmos passos algébricos de  $f_1$ . Com isso chegamos em:

$$f_{2} = \frac{c_{\tau}}{2\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right) + \frac{c_{\tau}}{2\beta} \int dv W_{\tau}(v) dv' W_{\tau}(v')$$

$$\times \ln\left\{1 + \tanh(\beta v) \tanh(\beta v') \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right)\right\}.$$
(2.91)

Para o termo  $f_3$ , substituímos a equação (2.49) na equação (2.82)

$$f_{3} = \frac{c_{I}}{2\beta n} \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}'} \sum_{\vec{\sigma}',\vec{\tau}} \int du dv' du' dv Q(u,v') Q(u',v) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} + \beta v' \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}'}{[4\cosh(\beta v')\cosh(\beta u)]^{n}]}$$
(2.92)  
 
$$\times \frac{e^{\beta u' \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}' + \beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}{[4\cosh(\beta v')\cosh(\beta u)]^{n}]} (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} \sum_{\alpha=1}^{n} (\sigma_{\alpha} \tau_{\alpha}' + \sigma_{\alpha}' \tau_{\alpha})} - 1),$$

e, seguindo os passos discutidos para  $f_1$ , obtemos:

$$f_{3} = \frac{c_{I}}{2\beta n} \left[ \int du dv' du' dv Q(u, v') Q(u', v) \right]$$

$$\times \left[ \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) + \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \tanh(\beta u) \tanh(\beta v') \tanh\left(-\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]^{n} \\ \times \left[ \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) + \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \tanh(\beta u') \tanh(\beta v) \tanh\left(-\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]^{n} \right].$$
(2.93)

Expandindo a expressão acima para n tendendo a zero, obtemos:

$$f_{3} = \frac{c_{I}}{2\beta} \int du dv' Q(u, v') \ln \left[ 1 - \tanh(\beta u) \tanh(\beta v') \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]$$

$$+ \frac{c_{I}}{2\beta} \int du' dv Q(u', v) \ln \left[ 1 - \tanh(\beta u') \tanh(\beta v) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right]$$

$$+ \frac{c_{I}}{\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right).$$

$$(2.94)$$

O termo  $f_4$  é dado pela equação (2.83). Considerando as exponenciais representa-

das por séries de potências, podemos escrever:

$$f_{4} = \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \left[ \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} \frac{e^{-c_{\sigma}c^{k_{\sigma}}}}{k_{\sigma}!} \sum_{\vec{\sigma}_{1}',...,\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}_{1}'), ..., P_{\sigma}(\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}') \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l}'} \right] \right\}$$

$$\times \left[ \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} \frac{e^{-c_{\tau}c^{k_{\tau}}}}{k_{\tau}!} \sum_{\vec{\tau}_{1}'...\vec{\tau}_{k}'} P_{\tau}(\vec{\tau}_{1}') ... P_{\tau}(\vec{\tau}_{k_{\tau}}') \prod_{p=1}^{k_{\tau}} (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha} \tau_{\alpha p}'}) \right] \left[ \sum_{k_{I}=0}^{\infty} \frac{e^{-c_{I}c^{k_{I}}}}{k_{I}!} \right]$$

$$\times \sum_{\vec{\sigma}_{1}'...\vec{\sigma}_{k_{\sigma}}'} \sum_{\vec{\tau}_{1}'...\vec{\tau}_{k_{\tau}}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{1}',\vec{\tau}_{1}') ... P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}_{k_{I}}',\vec{\tau}_{k_{I}}') \prod_{m=1}^{k_{I}} e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} \sum_{\alpha=1}^{n} (\sigma_{\alpha} \tau_{\alpha m}' + \tau_{\alpha} \sigma_{\alpha m}')} \right]$$

$$(2.95)$$

Substituindo a hipótese de SR (equação (2.49)) em  $f_4$  (equação (2.83)), é possível realizar as somas sobre as variáveis  $\vec{\sigma}' \in \vec{\sigma}'$ . Após isso, substituímos a identidade trigonométrica descrita na equação (2.87), obtendo

$$f_{4} = -\frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma},\vec{\tau}} \left[ \sum_{k_{\sigma}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) \int \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \frac{du_{l}W_{\sigma}(u_{l})}{(2\cosh(\beta u_{l}))^{n}} \right] \right\}$$

$$\times \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \prod_{\alpha=1}^{n} 2\cosh\left(\beta u_{l} + \frac{\beta J}{c_{\sigma}}\sigma_{\alpha}\right) \left[ \sum_{k_{\tau}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) \int \prod_{p=1}^{k_{\tau}} \frac{dv_{p}W_{\tau}(v_{p})}{(2\cosh(\beta v_{p}))^{n}} \right]$$

$$\times \prod_{p=1}^{k_{\tau}} \prod_{\alpha=1}^{n} 2\cosh\left(\beta v_{p} + \frac{\beta}{c_{\tau}}\tau_{\alpha}\right) \left[ \sum_{k_{I}=0}^{\infty} p_{I}(k_{I}) \int \prod_{m=1}^{k_{I}} \frac{du_{m}dv_{m}Q(u_{m},v_{m})}{(4\cosh(\beta u_{m})\cosh(\beta v_{m}))^{n}} \right]$$

$$\times \prod_{\alpha=1}^{n} \left[ \prod_{m=1}^{k_{I}} 2\cosh\left(\beta v_{m} - \frac{\beta U}{c_{I}}\tau_{\alpha}\right) \prod_{m=1}^{k_{I}} 2\cosh\left(\beta u_{m} - \frac{\beta U}{c_{I}}\sigma_{\alpha}\right) \right] \right]$$

Calculamos então o traço sobre  $\sigma$  e  $\tau$ 

$$f_{4} = -\frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{k_{\sigma}, k_{\tau}, k_{I}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) p_{\tau}(k_{\tau}) p_{I}(k_{I}) \int \left( \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \frac{du_{l} W_{\sigma}(u_{l})}{(2 \cosh(\beta u_{l}))^{n}} \right) \right.$$
(2.97)  
$$\times \int \left( \prod_{p=1}^{k_{\tau}} \frac{dv_{p} W_{\tau}(v_{p})}{(2 \cosh(\beta v_{p}))^{n}} \right) \int \left( \prod_{m=1}^{k_{I}} \frac{du_{m} dv_{m} Q(u_{m}, v_{m})}{(4 \cosh(\beta u_{m}) \cosh(\beta v_{m}))^{n}} \right) \right.$$
$$\times \left\{ \sum_{\lambda=\pm 1} \left[ \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} 2 \cosh\left(\beta u_{l} + \lambda \frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) \prod_{m=1}^{k_{I}} 2 \cosh\left(\beta v_{m} - \lambda \frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right] \right\}^{n} \\\times \left\{ \sum_{\lambda=\pm 1} \left[ \prod_{p=1}^{k_{\tau}} 2 \cosh\left(\beta v_{p} + \lambda \frac{\beta}{c_{\tau}}\right) \prod_{m=1}^{k_{I}} 2 \cosh\left(\beta u_{m} - \lambda \frac{\beta U}{c_{I}}\right) \right] \right\}^{n} \right\}.$$

Após alguns passos algébricos e utilizando as identidades trigonométricas descritas nas equações (2.87) e (2.88), podemos realizar a expansão para n muito pequeno e escrever

a equação (2.97) de forma mais concisa:

$$f_{4} = -\frac{c_{\sigma}}{\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) - \frac{c_{\tau}}{\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right) - \frac{2c_{I}}{\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right)$$

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k_{\sigma},k_{I}=0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma})p_{I}(k_{I}) \int \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l}W_{\sigma}(u_{l}) \int \prod_{m=1}^{k_{I}} dv_{m}W_{\tau}(v_{m})$$

$$\times \ln\left[\sum_{\lambda=\pm 1}\prod_{l=1}^{k_{\sigma}} \left(1 + \lambda \tanh(\beta u_{l}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)\right)\prod_{m=1}^{k_{I}} \left(1 - \lambda \tanh(\beta v_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right)\right)\right]$$

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k_{\tau},k_{I}=0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau})p_{I}(k_{I}) \int \prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p}W_{\tau}(v_{p}) \int \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m}W_{\sigma}(u_{m})$$

$$\times \ln\left[\sum_{\lambda=\pm 1}\prod_{p=1}^{k_{\tau}} \left(1 + \lambda \tanh(\beta v_{p}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right)\right)\prod_{m=1}^{k_{I}} \left(1 - \lambda \tanh(\beta u_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right)\right)\right].$$

Assim, chegamos na expressão final para a energia livre em simetria de réplicas como função das distribuições de campos efetivos, ou seja:

$$f = -\frac{c_{\sigma}}{2\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right) - \frac{c_{\tau}}{2\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right) - \frac{c_{I}}{\beta} \ln \cosh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right)$$

$$+ \frac{c_{\sigma}}{2\beta} \int du W_{\sigma}(u) du' W_{\sigma}(u') \ln\left\{1 + \tanh(\beta u) \tanh(\beta u') \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)\right\}$$

$$+ \frac{c_{\tau}}{2\beta} \int dv W_{\tau}(v) dv' W_{\tau}(v') \ln\left\{1 + \tanh(\beta v) \tanh(\beta v') \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right)\right\}$$

$$+ \frac{c_{I}}{\beta} \int du dv' Q(u, v') \ln\left[1 - \tanh(\beta u) \tanh(\beta v') \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right)\right]$$

$$- \frac{1}{\beta} \sum_{k_{\sigma}, k_{I} = 0}^{\infty} p_{\sigma}(k_{\sigma}) p_{I}(k_{I}) \int \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} du_{l} W_{\sigma}(u_{l}) \int \prod_{m=1}^{k_{I}} dv_{m} W_{\tau}(v_{m})$$

$$\times \ln\left[\sum_{\lambda = \pm 1}^{k_{\sigma}} \prod_{l=1}^{k_{\sigma}} (1 + \lambda \tanh(\beta u_{l}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\sigma}}\right)) \prod_{m=1}^{k_{I}} (1 - \lambda \tanh(\beta v_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right))\right]$$

$$- \frac{1}{\beta} \sum_{k_{\tau}, k_{I} = 0}^{\infty} p_{\tau}(k_{\tau}) p_{I}(k_{I}) \int \prod_{p=1}^{k_{\tau}} dv_{p} W_{\tau}(v_{p}) \int \prod_{m=1}^{k_{I}} du_{m} W_{\sigma}(u_{m})$$

$$\times \ln\left[\sum_{\lambda = \pm 1}^{k_{\sigma}} \prod_{p=1}^{k_{\tau}} (1 + \lambda \tanh(\beta v_{p}) \tanh\left(\frac{\beta}{c_{\tau}}\right)) \prod_{m=1}^{k_{I}} (1 - \lambda \tanh(\beta u_{m}) \tanh\left(\frac{\beta U}{c_{I}}\right))\right]$$

A partir das distribuições dos campos efetivos, das equações da magnetização de cada rede e da energia livre por sítio podemos obter numericamente os resultados, que são discutidos no próximo capítulo.

### 3 RESULTADOS

No estudo de sistemas magnéticos ou do modelo de Ising, um dos objetivos é entender como o sistema se comporta em função da variação dos parâmetros, como por exemplo a temperatura e a conectividade média. Nessas condições, o sistema passa por transições de fase, que são caracterizadas por mudanças nas propriedades macroscópicas, como a magnetização, que no caso estudado é um importante parâmetro de análise. Em nosso sistema, que é composto por duas redes acopladas, possuímos duas magnetizações, onde  $m_{\sigma}$  representa a magnetização da rede do conjunto de spins  $\sigma$  e  $m_{\tau}$  representa a magnetização da rede do conjunto de spins  $\tau$ . A partir do cálculo da magnetização de cada rede, é possível caracterizar as possíveis soluções presentes, sendo cada solução identificada por valores diferentes de  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$ . No caso da solução ferromagnética (F), os spins estão todos alinhados no mesmo sentido, devido a isso as magnetizações são ambas positivas ( $m_{\sigma} > 0$  e  $m_{\tau} > 0$ ) ou ambas negativas ( $m_{\sigma} < 0$  e  $m_{\tau} < 0$ ). A solução paramagnética (P) é identificada pela ausência de magnetização, ou seja,  $m_{\sigma} = m_{\tau} = 0$ . Nesta fase os spins apresentam uma configuração desordenada e isso acarreta uma magnetização nula. Quando as magnetizações do sistema possuem sinais opostos ( $m_{\sigma} > 0$  e  $m_{\tau} < 0$ ) temos uma solução que denominamos antiferromagnética (AF), pelo fato dessa solução ser induzida pelo acoplamento AF entre as redes. A maneira que a solução AF é identificada em redes, é diferente da encontrada em sistemas com dimensões finitas, onde os spins estão alinhados em direções opostas em relação aos seus primeiros vizinhos (Hartmann (2005)).

A partir do cálculo da energia livre, observamos que o sistema apresenta fases termodinâmicas e uma região de metaestabilidade. Esta região é caracterizada pela presença de duas soluções estáveis, onde uma é caracterizada por um mínimo local e a outra por um mínimo global de energia livre. Nos resultados, apresentamos diferentes diagramas de fases, que incluem os limites da região de metaestabilidade e das fases termodinâmicas.

Com isso, neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos para o modelo com conectividade finita proposto. Inicialmente vamos apresentar os resultados obtidos quando a conectividade média entre os grafos é zero ( $c_I = 0, 0$ ), o que é idêntico ao comportamento de um único grafo com interações ferromagnéticas e conectividade finita. Após isso, apresentamos os resultados obtidos para o modelo proposto nesta dissertação. Em ambos os casos, discutimos os resultados obtidos numericamente por meio do algoritmo de dinâmica de populações para as distribuições de campos efetivos, a magnetização de cada rede e a energia livre.

#### 3.1 FERROMAGNETO EM UM GRAFO DE CONECTIVIDADE FINITA

Quando consideramos  $c_I = 0, 0$ , obtemos dois grafos sem acoplamento entre si, que caracterizam dois modelos de Ising, com interações ferromagnéticas, cada um deles definido em um grafo de conectividade finita. Sendo assim, analisamos apenas um grafo para obter os resultados desta seção. Para calcular a distribuição de probabilidade W(u)dos campos efetivos, utilizamos o algoritmo de dinâmica de populações, onde a distribuição W(u) é representada em termos de um conjunto de  $u_1, ..., u_D$  variáveis ou campos, atualizados de acordo com o algoritmo discutido no apêndice B. Portanto, D é o número total de variáveis que caracterizam a população de campos utilizada no algoritmo. A distribuição de campos efetivos é inicializada por meio de uma distribuição Gaussiana, com média  $\mu = \frac{1}{2}$  e desvio padrão  $\sigma = 1$ . Com isso obtemos uma gama maior de valores de campos efetivos positivos que favorecem a solução ferromagnética, ou seja, o estado com magnetização m = 1. A equação da distribuição gaussiana nesse cado é dada por:

$$W(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(u - \frac{1}{2}\right)^2\right],$$
 (3.1)

Nas figuras (3.1) e (3.2) apresentamos os resultados numéricos para W(u) no caso de c = 5, 0 e diferentes valores de temperatura.

Figura 3.1 – Histogramas da distribuição de campos efetivos W(u) para c = 5,0 e uma população D = 500000. Os valores de temperatura são: (a) T = 0, 1, (b) T = 0, 5





Figura 3.2 – Histogramas da distribuição de campos efetivos W(u) para c = 5,0 e uma população D = 500000. Os valores de temperatura são: (a) T = 0,8 e (b) T = 0,95.



Fonte: Autor.

Considerando a figura 3.1 (a), observamos que existem vários picos em u > 0, os quais sugerem que a maioria dos spins apontam para a mesma direção e são positivos, sendo assim a distribuição dos campos W(u) é discreta e podemos afirmar que nessas condições o sistema é ferromagnético, ou seja, obtemos uma magnetização diferente de zero ( $m \neq 0$ ). À medida que a temperatura aumenta ( ver figuras 3.1 (b) e 3.2(a)) verificamos que W(u) torna-se contínua, porém o sistema permanece ferromagnético. Na figura 3.2 (b) a temperatura utilizada vale T = 0,95, sendo essa uma temperatura muito próxima da transição da fase ferromagnética para a fase paramagnética (que analisamos em mais detalhes posteriormente) que ocorre em T = 1,0. Nessa temperatura, W(u) forma um pico em torno de u = 0, o que caracteriza um sistema paramagnético, ou seja, os spins estão desordenados e a magnetização é nula (m = 0).

Após obter numericamente W(u), construímos gráficos da magnetização em função da temperatura e em função da conectividade média do grafo (c), conforme mostrado na figura 3.3. Figura 3.3 – (a) Magnetização em função da temperatura, considerando valores de conectividade média distintos e uma população de D=500000. (b) Magnetização em função da conectividade média, considerando valores de temperatura distintos e uma população de D = 500000.



Fonte: Autor.

Observamos, na figura 3.3 (a), a presença de duas fases magnéticas. Para temperaturas baixas (T = 0 até T = 1), existe a fase ferromagnética onde a magnetização é positiva. Acima de T = 1 a magnetização é nula, o que caracteriza a fase paramagnética. Portanto, o sistema passa por uma transição de fase quando a temperatura é aproximadamente 1. Observamos também que o valor de m diminui continuamente, o que caracteriza uma transição de segunda ordem. À medida que diminuímos o valor da conectividade média da rede, observamos que ocorre um decréscimo no valor da magnetização. Isso ocorre pois, quanto menor o valor de c, menos conectados estão os spins da rede, pois o número médio de conexões por sítio é menor. Quando consideramos uma conectividade média c = 1 a magnetização é praticamente zero. O fato da magnetização ser aproximadamente nula surge quando  $c \leq 1$ , pois ocorre uma transição de percolação, ou seja, a conectividade média é menor que um e, devido a isso, o número médio de conexões por sítios é muito pequeno. A transição de percolação ocorre quando os spins se conectam e formam um aglomerado gigante contendo O(N) sítios. Na figura 3.3 (b), onde calculamos m em função de c considerando três valores distintos de temperatura, constatamos que o sistema é paramagnético no intervalo  $0 < c \leqslant 1$ , em consequência da baixa conectividade entre os spins do grafo. Para c > 1 o sistema passa a ser ferromagnético. Quando consideramos o limite para c muito grande  $(c \to \infty)$  na equação da distribuição de campos efetivos para um único grafo, recuperamos os resultados para o modelo de Curie-Weiss resolvido pela teoria de campo médio tradicional. Esses resultados podem ser encontrados no artigo de Kochmański, Paszkiewicz e Wolski (2013), onde são discutidos os resultados de equilíbrio para o modelo com e sem campo magnético externo.

A partir da distribuição de campos efetivos é viável, também, calcular a energia livre por sítio, a partir da equação (2.99). Na figura 3.4 mostramos o gráfico da energia livre em função da conectividade do grafo.

Figura 3.4 – Energia livre por sítio em função de c, para T = 0,05 e uma população D = 500000.



Fonte: Autor.

### 3.2 RESULTADOS PARA O MODELO DE DUAS REDES ACOPLADAS

Como discutido na seção anterior, após calculado analiticamente as equações de ponto de sela, encontramos as equações das distribuições de probabilidade para os campos efetivos, a magnetização de cada rede (equações (2.75) e (2.76)) e a equação da energia livre (equação (2.99)) em termos dos parâmetros de ordem do sistema (W(u),  $W(v) \in Q(u, v)$ ). Para obter uma solução numérica para estas distribuições, utilizamos o método de dinâmica de populações (ver Apêndice B). Com isso obtemos os valores numéricos da magnetização de cada rede e da energia livre por sítio. O primeiro passo do algoritmo de dinâmica de populações é inicializar as distribuições dos campos efetivos ( $W_{\sigma}(u) \in W_{\tau}(v)$ ). Para a inicialização do algoritmo consideramos duas distribuições Gaussianas, uma relativa a rede  $\sigma$  e a outra a rede  $\tau$ . Ambas as distribuições Gaussianas têm média  $\mu = 5, 5$  e desvio padrão  $\sigma = 1$ , e com isso a distribuição é deslocada para a região positiva do eixo de  $u \in v$ , respectivamente. A equação de distribuição Gaussiana é dada

por:

$$W(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(u-5,5\right)^2\right], W(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(v-5,5\right)^2\right].$$
 (3.2)

Esta inicialização para as distribuições de campos efetivos favorece a solução ferromagnética do sistema.

Sendo assim, o primeiro passo é calcular via o algoritmo de dinâmica de populações a magnetização de cada rede, ou seja,  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$ . Desta forma, construímos diagramas de fase onde é possível visualizar as regiões de parâmetros onde as soluções paramagnética (P), antiferromagnética (AF) e ferromagnética (F) surgem, conforme variamos as conectividades médias no interior de cada rede, a conectividade média entre as redes, a intensidade da interação antiferromagnética e a temperatura. Para a construção dos diagramas de fase, levamos em consideração que o modelo é simétrico no plano ( $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$ ), ou seja, o Hamiltoniano (equação (2.1)) permanece invariante frente a troca das variáveis  $\vec{\sigma}$  e  $\vec{\tau}$  e das conectividades médias no interior de cada rede.

Na figura 3.5, mostramos o diagrama de fase no plano  $(c_{\sigma}, c_{\tau})$  para T = 0,05,  $c_I = 5,0$  e diferentes valores de U. O diagrama de fase é obtido resolvendo as equações para as distribuições de campos efetivos (2.72) e (2.73) para cada ponto no plano  $(c_{\sigma}, c_{\tau})$  e calculando a magnetização de cada rede (equações (2.75) e (2.76)). No diagrama de fase mostrado na figura 3.5 (a), apresentamos duas soluções, sendo que na região F as magnetizações são ambas positivas ou ambas negativas, e na fase AF as magnetizações do sistema têm sinais opostos ( $m_{\sigma} > o$  e  $m_{\tau} > 0$ ).

Figura 3.5 – Diagrama de fases no plano ( $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$ ), considerando dois diferentes valores de U,  $c_I = 5,0$  e T = 0,05. Resultados obtidos por meio do algoritmo de dinâmica de populações para D = 500000.



Fonte: Autor.

A transição AF-F é descontínua e delimita onde pode aparecer a metaestabilidade do sistema, ou seja, na região F existem duas soluções possíveis para a magnetização de cada rede. A fase AF corresponde ao estado de equilíbrio termodinâmico do sistema, enquanto a solução F corresponde a um mínimo local de energia livre (ver figura 3.6). De acordo com a figura 3.5, quando ocorre um aumento de *U* entre as redes, verificamos que a região da fase AF aumenta, favorecendo assim a solução antiferromagnética.

Figura 3.6 – (a) Magnetização de cada rede em função de  $c_{\sigma}$ , considerando T = 0,05,  $c_I = 5, 0, c_{\tau} = 5, 0, U = 0, 1$  e uma população D = 1000000. (b) Energia livre por sítio em função de  $c_{\sigma}$  para diferentes valores de  $c_{\tau}$ , considerando  $T = 0,05, c_I = 5,0, U = 0, 1$  e uma população D = 500000.



Fonte: Autor.

Na figura 3.6, analisamos com mais clareza a região de metaestabilidade. Podemos verificar que a solução metaestável perde a estabilidade de maneira descontínua, ou seja, na figura 3.6(a), o sistema encontra-se em uma solução AF para  $c_{\sigma} \leq 2, 2$  e após a transição metaestável, que ocorre em  $c_{\sigma} \approx 2, 2$ , o sistema apresenta uma solução F. A solução F só aparece devido à inicialização do sistema que favorecem essa solução. Na figura 3.6 (b), onde mostramos o comportamento da energia livre por sítio, observamos que existem duas soluções na região F, sendo que uma é o mínimo global de energia livre (estado termodinâmico) que coincide com a solução AF (linha sólida), e a solução F corresponde a um mínimo local de energia livre (linha pontilhada), a qual corresponde à energia livre da solução metaestável.

O efeito do aumento da interação antiferromagnética na transição AF-F pode ser verificado na figura 3.7, onde é apresentado o diagrama de fases no plano (U, c), considerando  $c = c_{\sigma} = c_{\tau}$ .

Figura 3.7 – Diagrama de fases no plano (U, c) para  $c_I = 5, 0, T = 0, 05$  e uma população D = 500000, onde  $c = c_{\sigma} = c_{\tau}$ 



Fonte: Autor.

A figura 3.7 mostra que, com o aumento do acoplamento AF entre as redes  $\sigma$  e  $\tau$ , é necessário que a conectividade média no interior de cada grafo seja cada vez maior para que seja possível haver uma transição metaestável.

Após compreender o comportamento do sistema quando variamos a intensidade da interação antiferromagnética entre as redes, investigamos o comportamento do sistema quando a conectividade média entre as redes é alterada. Para isso, construímos o diagrama de fase no plano ( $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$ ) para diferentes conectividades médias entre as redes ( $c_I$ ).

Figura 3.8 – Diagrama de fase no plano ( $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$ ) para, T = 0,05 e uma população D = 500000: (a) para U = 0, 1 e diferentes valores de  $c_I$ , (b) para diferentes valores de U e  $c_I$ , com o objetivo de visualizar em mais detalhe a fase paramagnética.



Fonte: Autor.

Na figura 3.8, observamos duas transições: a transição de fase P-AF, que representa de fato uma transição entre os estados de equilíbrio termodinâmico do sistema, e a transição AF-F, que representa uma transição metaestável. Para a transição AF-F, constatamos que ela ocorre para valores de  $c_{\sigma}$  e  $c_{\tau}$  cada vez menores, à medida que  $c_I$  diminui. Isso ocorre porque as interações entre os spins dentro das redes são ferromagnéticas. A transição P-AF ocorre quando  $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$  e  $c_{I}$  assumem valores pequenos, ou seja, próximos de 1. A transição P-AF aparece devido à transição de percolação que surge em cada rede quando a conectividade média interna de cada rede é igual a 1. Quando as conectividades no interior de cada rede são menores que 1, as redes são compostas por pequenos aglomerados de spins, com diferentes valores de magnetização, sem interação, caracterizando assim uma magnetização global nula. Conforme diminuímos o valor de c<sub>1</sub>, observamos que aumenta a região P do sistema. Isso advém do fato de que quando  $c_I$  é pequeno existem poucas conexões entre as redes, dificultando a ligação entre os pequenos aglomerados formados nas diferentes redes. Para visualizarmos melhor a transição P-AF, construímos o diagrama de fases 3.8(b), no qual notamos que quanto menor o  $c_I$ , mais próximo de  $c_{\sigma} = c_{\tau} = 1$  encontra-se o limite da transição de fase, e esse limite não é alterado de maneira significativa quando se aumenta a interação antiferromagnética (U), pois a conectividade média no interior de cada rede e a conectividade média entre as redes são pequenas.

O comportamento da magnetização ao longo da transição P-AF é mostrado na figura (3.9). Figura 3.9 – Magnetização em função de  $c_{\sigma} = c_{\tau}$ , para  $T = 0, 05, c_I = 0, 5$ , uma população D = 1000000 e diferentes valores de U, considerando que no gráfico estão presentes  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$  para cada caso de U.



Fonte: Autor.

Analisando a figura 3.9, verificamos o comportamento da magnetização de cada rede,  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$ , nas duas transições, sendo a transição P-AF contínua e a transição AF-F descontínua. O aumento no valor de U não altera o limite da transição P-AF. Porém, a transição AF-F ocorre para valores de conectividade média diferentes, conforme foi discutido na figura 3.5, onde constatamos que a localização da transição metaestável depende do valor de U.

Além dos parâmetros já analisados, investigamos também o comportamento do diagrama de fase para diferentes valores de temperatura. Verificamos que o aumento da temperatura ocasiona um aumento na região da fase AF e a transição de metaestabilidade surge para valores de conectividades médias maiores. O aumento da temperatura ocasiona uma mudança dos estados do sistema de maneira frequente ao longo do tempo favorecendo o equilíbrio termodinâmico. Outro ponto que pode ser observado na figura 3.10 (b) é que, quanto maior a temperatura, considerando um  $c_I$  pequeno, mais abrangente é a região da fase paramagnética. Isso ocorre porque o aumento da temperatura ocasiona a desordem nos spins do sistema que mudam seus estados de maneira frequente ao longo do tempo. Apesar disso, mostramos na figura 3.10 (a) que a solução F é robusta frente ao aumento de temperatura, ou seja, apesar de T = 0, 8 ser próximo da temperatura transição metaestável o sistema apresenta a solução F.

Figura 3.10 – (a) Diagrama de fase no plano  $(c_{\sigma}, c_{\tau})$ , considerando  $U = 0, 1, c_I = 5, 0$ , uma população D = 500000 e dois diferentes valores de T. (b) Diagrama de fase no plano  $(c_{\sigma}, c_{\tau})$ para  $c_I = 0, 5, U = 0, 1$ , uma população D = 500000 e diferentes valores de T.



Fonte: Autor.

Porém, para o sistema exibir a solução F é necessário que a conectividade média interna das redes seja grande. Analisamos numericamente o caso para  $T \approx 1, 1$  e percebemos que nesta temperatura a solução P domina o diagrama de fase, isso para  $c_I = 0, 5$  e U = 0, 1. O aumento da fase P, ocasionado pelo aumento da temperatura, também pode ser verificado na figura 3.11.

Figura 3.11 – Magnetização em função de  $c_{\sigma}=c_{\tau}$  para  $U=0, 1, c_{I}=0, 5$ , uma população D=1000000 e diferentes valores de T. No gráfico estão presentes  $m_{\sigma}$  e  $m_{\tau}$  para cada valor de T.



Na figura 3.11 plotamos a magnetização de cada rede em função das conectividades médias internas das redes para dois valores de temperatura e podemos analisar o comportamento das fases magnéticas. Verificamos que para temperaturas maiores existe apenas a transição P-AF, por exemplo para T = 0, 9, como mostramos na figura (3.11).

Observamos no decorrer da análise dos resultados que as conectividades médias influenciam nas soluções apresentadas nos diagramas de fases. Sendo assim, consideramos o limite das conectividades médias internas das redes e a conectividade média entre as redes tendendo a infinito, ou seja, para  $c_{\sigma} = c_{\tau} = c_I \rightarrow \infty$ , obtemos, analiticamente, as seguintes equações para a magnetização de cada rede e para a energia livre por sítio:

$$m_{\sigma} = \tanh[\beta(m_{\sigma} - Um_{\tau})], \qquad (3.3)$$

$$m_{\tau} = \tanh[\beta(m_{\tau} - Um_{\sigma})], \tag{3.4}$$

$$f = \frac{m_{\sigma}^2}{2} - Um_{\sigma}m_{\tau} + \frac{m_{\tau}^2}{2} - \frac{1}{\beta}\ln 2\cosh[\beta(m_{\sigma} - Um_{\tau})]$$

$$-\frac{1}{\beta}\ln 2\cosh[\beta(m_{\tau} - Um_{\sigma})].$$
(3.5)

Estas equações permitem estudar o comportamento de dois modelos de Curie-Weiss acoplados. Ou seja, dois grafos totalmente conectados com acoplamento entre eles, onde um dado spin de um grafo interage com todos spins do mesmo grafo e todos os spins do outro grafo.

### 3.3 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS COM SIMULAÇÕES DE MONTE-CARLO

Os resultados teóricos discutidos até agora podem ser verificados por meio da comparação com os resultados obtidos via simulação numérica de Monte-Carlo<sup>1</sup>. Na situação estudada aqui, a magnetização apresenta o mesmo valor absoluto para as duas redes que constituem o sistema. Sendo assim, plotamos os gráficos do módulo da magnetização das redes em função da temperatura, como pode ser averiguado na figura 3.12.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Simulações realizadas pelo Dr. Lucas Nicolao da Universidade Federal de Santa Catarina.

Figura 3.12 – Gráficos do módulo da magnetização em função da temperatura, considerando  $c_I = 5, 0$  e U = 0, 1. Para a simulação computacional foi variado o número total de spins do sistema, caracterizado por N. Os resultados desta simulação são plotados com linhas e pontos sobrepostos. Os resultados teóricos foram obtidos por meio do algoritmo de dinâmica de populações para uma população de D = 1000000 e são caracterizados pela linha sólida. Os valores de  $c_{\sigma} = c_{\tau}$  são (a)  $c_{\sigma}=c_{\tau} = 10$  e (b)  $c_{\sigma}=c_{\tau} = 3$ .



Fonte: Autor.

Levando em consideração a figura 3.12, percebemos que os resultados teóricos convergem para os resultados obtidos via simulação computacional. À medida que o tamanho do sistema N aumenta na simulação, a transição metaestável acontece em uma região cada vez mais estreita de temperaturas, e é cada vez mais abrupta. Sendo assim, observamos que a transição metaestável tende para o valor teórico, que pode ser visualizado na figura 3.12 ((a) e (b)) e corresponde a um valor aproximado de temperatura  $T \approx 0.8$  para a figura 3.12(a). Esses resultados sugerem que a SR é exata para o modelo proposto.

### 4 CONCLUSÃO

Neste trabalho, analisamos um modelo de conectividade finita que engloba duas redes de spins de lsing, com interações internas ferromagnéticas, e acopladas entre si por meio de interações antiferromagnéticas. Essas redes apresentam uma topologia de grafos de Erdös-Rényi, que seguem uma distribuição de Poisson para o número de vizinhos por sítio. O objetivo principal do trabalho foi investigar o comportamento das transições de fase e da região de metaestabilidade do sistema proposto, considerando a variação da conectividade média entre as redes  $(c_I)$ , da intensidade da interação antiferromagnética (U) e da temperatura (T), através da construção de diagramas de fase. O modelo foi resolvido analiticamente no limite  $N \rightarrow \infty$ , como é mostrado no capítulo 2. Para realizar o cálculo, utilizamos o método das réplicas e a hipótese de simetria de réplicas. Com isso calculamos as equações de ponto de sela e obtivemos as expressões analíticas para as distribuições de campos efetivos, as equações para a magnetização de cada rede e para a energia livre por sítio. As equações para as distribuições de campos efetivos foram resolvidas numericamente via o algoritmo de dinâmica de populações. No capítulo 3, apresentamos os resultados numéricos obtidos a partir da solução do modelo proposto.

Inicialmente, consideramos o comportamento de um único grafo de Erdös-Rényi com interações ferromagnéticas e construímos histogramas da distribuição de campos efetivos para alguns valores de temperatura. Verificamos que as diferentes fases dependem da forma desta distribuição. Após isso, analisamos o comportamento da magnetização da rede para valores distintos de conectividade média e temperatura. Quando a conectividade média no interior da rede tende a valores grandes ( $c \rightarrow \infty$ ), recuperamos os resultados referentes ao modelo de Curie-Weiss. De modo contrário, quando *c* admite valores pequenos ( $c \leq 1$ ), constatamos uma fase paramagnética, que é caracterizada pela formação de pequenos aglomerados de spins desconectados entre si na rede.

Na seção 3.2, apresentamos o estudo detalhado do modelo de duas redes acopladas, onde construímos diagramas de fase no plano ( $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$ ) para analisar o limite da região metaestável e da fases termodinâmicas frente à variação de  $c_I$ ,  $U \in T$ . Sendo assim, quando alteramos o valor de U observamos um favorecimento da fase AF, já que é necessário um maior acoplamento no interior das redes  $\sigma \in \tau$  para que ocorra a metaestabilidade. Por outro lado, quando a conectividade média entre as redes é pequena, observamos uma fase paramagnética a baixas temperaturas, a qual não é influenciada pela alteração no valor de U. Esta fase paramagnética surge como consequência da formação de muitos aglomerados pequenos de spins que não se conectam entre si. Estes aglomerados ocorrem em consequência da baixa conectividade interna de cada rede. Quando estes aglomerados se conectam entre si e formam um aglomerado gigante contendo O(N) sítios ocorre a transição de percolação. Outro aspecto que merece destaque é o efeito da variação da conectividade média entre as redes, mostrado no diagrama de fase da figura 3.8. Observamos que para valores pequenos de  $c_I$  a solução F é favorecida, considerando que as redes são ferromagnéticas e a conectividade média entres as redes é pequena. Quando admitimos que os valores de  $c_{\sigma}$ ,  $c_{\tau}$  e  $c_I$  tendem para infinito, obtemos um sistema de duas redes totalmente conectadas e acopladas entre si, ou seja, dois modelos de Curie-Weiss acoplados.

Além disso, percebemos que a temperatura também altera a região de metaestabilidade, pois o aumento da temperatura causa um desordenamento nos spins, dificultando a presença da solução F. Do ponto de vista dinâmico, a temperatura pode ajudar o sistema a escapar do mínimo local de energia que caracteriza a metaestabilidade.

Realizamos a comparação entre os resultados teóricos e simulações computacionais de Monte-Carlo, e percebemos que os resultados teóricos estão de acordo com os resultados obtidos via simulações . Isto porque, à medida que aumentamos o número de spins do sistema na simulação, obtemos resultados que convergem para os resultados teóricos. De acordo com os resultados teóricos, a transição metaestável ocorre para uma temperatura  $T \approx 0.8$ , quando consideramos a conectividade média interna de cada rede e a conectividade média entre as redes maiores que 1. Além disso, podemos constatar, a partir dessa comparação, que a hipótese de SR é exata para o modelo estudado, isso porque o sistema não possui frustração.

O próximo passo é aplicar o modelo de redes acopladas, desenvolvido nesta dissertação, para estudar um sistema de nanopartículas magnéticas, considerando que cada nanopartícula é uma rede composta por um grande número de spins, onde cada spin no interior de uma nanopartícula interage com um número finito de spins dentro da nanopartícula em questão, além de interagir também com um conjunto finito de spins pertencendo a nanopartículas vizinhas. Sendo assim, o objetivo é aplicar o modelo estudado aqui para o caso de várias nanopartículas acopladas de maneira aleatória. A partir disso, pretendemos estudar as diferentes fases supermagnéticas por meio de diagramas de fase, pois o estudo teórico desses materiais, no momento, esta limitado a simulações computacionais (BEDANTA; KLEEMANN, 2009).

Além disso, podemos aprimorar o modelo, acrescentando uma determinada dinâmica ao sistema, para estudar sistemas sociais. Neste caso, cada rede é descrita como um grupo de indivíduos, que podem compartilhar ou não da mesma opinião. Os spins do sistema caracterizam a opinião de cada indivíduo. Por exemplo, se todos os indivíduos compartilham da mesma opinião o sistema está ordenado, descrevendo uma solução ferromagnética. Quando acoplamos duas redes, podemos analisar a maneira que um grupo pode influenciar o outro grupo, considerando diferentes opiniões, diferentes culturas, entre outros exemplos.

### **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

AGLIARI, E.; BURIONI, R.; SGRIGNOLI, P. A two-populations ising model on diluted random graphs. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2010, n. 07, p. P07021, 2010.

ALBERT, R.; BARABÁSI, A.-L. Statistical mechanics of complex networks. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, p. 47–97, 2002.

BEDANTA, S.; KLEEMANN, W. Supermagnetism. Journal of Physics D: Applied Physics, v. 42, n. 1, p. 013001, 2009.

BIANCONI, G.; RADICCHI, F. Percolation in real multiplex networks. **Phys. Rev. E**, v. 94, p. 060301, Dec 2016.

BOLLOBÁS, B. Graph Theory: An Introductory Course. New York: Springer Verlag, 1979. ISBN 978-1-4612-9967-7.

CARRO, A.; TORAL, R.; MIGUEL, M. S. Coupled dynamics of node and link states in complex networks: a model for language competition. **New Journal of Physics**, v. 18, n. 11, p. 113056, 2016.

CASTELLANO, C.; FORTUNATO, S.; LORETO, V. Statistical physics of social dynamics. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 2, p. 591–646, 2009.

CASTILLO, I. P. **The use of statistical Mechanics in modelling disordered systems**. 2004. 159 f. Tese (Ph.D. Physics) — Katholieke Universiteit Leuven, Lovaina, Bélgica, 2004.

CHRISTENSEN, K. Percolation Theory. london: Imperial College London, 2002. 40 p.

COOLEN, R. K. A. C. C.; SOLLICH, P. Theory of Neural Information Processing Systems. New York: Oxford University Press, USA, 2005. 586 p. ISBN 9780198530244,0198530242.

DANZIGER, M. M. et al. Dynamic interdependence and competition in multilayer networks. 2017. Disponível em: <a href="https://arxiv.org/pdf/1705.00241">https://arxiv.org/pdf/1705.00241</a>.

DOMMERS, S. Metastability of the ising model on random regular graphs at zero temperature. **Probability Theory and Related Fields**, v. 167, n. 1, p. 305–324, 2017. ISSN 1432-2064.

DOROGOVTSEV, S. N.; GOLTSEV, A. V.; MENDES, J. F. F. Critical phenomena in complex networks. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, p. 1275–1335, Oct 2008.

EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. **Journal of Physics F: Metal Physics**, v. 5, n. 5, p. 965, 1975.

ERDÖS, P.; RÉNYI, A. On random graphs I. **Publ. Math. Debrecen**, v. 6, p. 290–297, 1959.

\_\_\_\_\_. On the evolution of random graphs. In Publication of the mathematical institute of hungarian academy of sciences, p. 17–61, 1960.

FALOUTSOS, M.; FALOUTSOS, P.; FALOUTSOS, C. On power-law relationships of the internet topology. **Computer Communication Review**, v. 29, p. 251–262, 1999.

GALAM, S.; SALINAS, S. R.; SHAPIR, Y. Randomly coupled ising models. **Physical Review B**, v. 51, p. 2864–2871, 1995.

HARTMANN, M. W. A. K. Phase transitions in combinatorial optimization problems: basics, algorithms and statistical mechanics. [S.I.]: Wiley-VCH, 2005. ISBN 9783527404735,3527404732.

HEMMEN, J. L. V.; PALMER, R. G. The replica method and solvable spin glass model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 12, n. 4, p. 563, 1979.

ISING, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeitschrift fur Physik**, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.

JANG, S. et al. Ashkin-teller model and diverse opinion phase transitions on multiplex networks. **Physical Review E**, v. 92, p. 022110, Aug 2015.

KABASHIMA, Y.; SAAD, D. Statistical mechanics of error-correcting codes. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 45, n. 1, p. 97, 1999.

KALUZA, P. et al. The complex network of global cargo ship movements. **Journal of The Royal Society Interface**, v. 7, n. 48, p. 1093–1103, 2010. ISSN 1742-5689.

KANTER, I.; SOMPOLINSKY, H. Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number. **Phisical Review Letters**, v. 58, n. 2, p. 164–167, 1987.

KIVELA, M. et al. Multilayer networks. **Journal of Complex Networks**, v. 2, n. 3, p. 203, 2014.

KLEMM, K. et al. Nonequilibrium transitions in complex networks: A model of social interaction. **Physical Review E**, v. 67, p. 026120, 2003.

KOCHMAŃSKI, M.; PASZKIEWICZ, T.; WOLSKI, S. Curie–weiss magnet—a simple model of phase transition. **European Journal of Physics**, v. 34, n. 6, p. 1555, 2013. Disponível em: <a href="http://stacks.iop.org/0143-0807/34/i=6/a=1555">http://stacks.iop.org/0143-0807/34/i=6/a=1555</a>.

KORNISS, G. Synchronization in weighted uncorrelated complex networks in a noisy environment: Optimization and connections with transport efficiency. **Physical Review E**, v. 75, p. 051121, 2007.

LAGE, E. J. S. A new approach to the quenched bond-diluted ising model. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 10, n. 5, p. 701, 1977.

LEONE, M. et al. Ferromagnetic ordering in graphs with arbitrary degree distribution. **The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems**, v. 28, n. 2, p. 191–197, 2002. ISSN 1434-6036.

LISEWSKI, A. M.; LICHTARGE, O. Untangling complex networks: risk minimization in financial markets through accessible spin glass ground states. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 389, n. 16, p. 3250–3253, 2010.

MASLOV, S.; SNEPPEN, K. Specificity and stability in topology of protein networks. Science, v. 296, n. 5569, p. 910–913, 2002. ISSN 0036-8075.

MÉZARD, M.; MONTANARI, A. Information, Physics and Computation. New York: Oxford Graduate Texts, 2009. 324 p.

MÉZARD, M.; PARISI, G. Replicas and optimization. **Journal de Physique Letttres**, v. 46, n. 17, p. 771–778, 1985.

\_\_\_\_\_. Mean-field theory of randomly frustrated systems with finite connectivity. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 3, n. 10, p. 1067, 1987.

MÉZARD, M.; PARISI, G. The bethe lattice spin glass revisited. **The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems**, v. 20, n. 2, p. 217–233, 2001. ISSN 1434-6036.

MONASSON, R. Optimisation problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin-glasses. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 31, n. 2, p. 513–529, 1998.

NERI, I.; SKANTZOS, N. S.; BOLLÉ, D. Gallager error-correcting codes for binary asymmetric channels. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2008, n. 10, p. P10018, 2008.

NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, n. 2, p. 167–256, 2003.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. **Physical Review** Letters., v. 35, p. 1792–1796, 1975.

STROGATZ, S. H. Exploring complex networks. Nature, v. 410, p. 268 – 276, Mar 2001.

SUCHECKI, K.; HOŁYST, J. A. Ising model on two connected barabasi-albert networks. **Physical Review E**, v. 74, p. 011122, 2006.

\_\_\_\_\_. Bistable-monostable transition in the ising model on two connected complex networks. **Physical Review E**, v. 80, p. 031110, Sep 2009.

VIANA, L.; BRAY, A. J. Phase diagrams for dilute spin glasses. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 18, n. 15, p. 3037, 1985.

WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of 'small-world' networks. **Nature**, v. 393, p. 440 – 442, 1998.

WEMMENHOVE, B.; COOLEN, A. C. C. Finite connectivity attractor neural networks. Journal of Physics A: Mathematical and General, v. 36, n. 37, p. 9617, 2003.

WONG, K. Y. M.; SHERRINGTON, D. Graph bipartitioning and spin glasses on a random network of fixed finite valence. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 20, n. 12, p. L793, 1987.

## APÊNDICE A – ANÁLISE DO DENOMINADOR DA EQUAÇÃO DE PONTO DE SELA

Consideramos o denominador da equação (2.38), que é dado por:

$$M = \left[\sum_{\vec{\sigma}'', \vec{\tau}} e^{-i\hat{P}_{\sigma}(\vec{\sigma}) - i\hat{P}_{\tau}(\vec{\tau}) - i\hat{P}_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma},\vec{\tau})}\right]^{-1},$$
(A.1)

onde substituímos as equações de ponto de sela (2.36), (2.40) e (2.44), e obtemos:

$$M = \left\{ \sum_{\vec{\sigma}'',\vec{\tau}} \exp\left[ c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} P_{\sigma}(\vec{\sigma}') (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}}\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma}'} - 1) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} P_{\tau}(\vec{\tau}') (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}}\vec{\tau}\cdot\vec{\tau}'} - 1) + c_{I} \sum_{\vec{\sigma}',\vec{\tau}'} P_{\sigma,\tau}(\vec{\sigma}',\vec{\tau}') (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}}(\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}'+\vec{\sigma}'\cdot\vec{\tau})} - 1) \right] \right\}^{-1}.$$
(A.2)

Agora, aplicamos o limite para n muito pequeno e substituímos as hipóteses de SR, dadas nas equações (2.47)-(2.49), na equação acima. Desta forma, podemos reescrever a equação como:

$$M = \lim_{n \to 0} \left\{ \sum_{\vec{\sigma}'', \vec{\tau}} \exp\left[ c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} \int dh W_{\sigma}(u) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}}}{[2 \cosh(\beta u)]^{n}} (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} \int dv W_{\tau}(v) \frac{e^{\beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}}{[2 \cosh(\beta v)]^{n}} (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1) + c_{I} \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}'} \int du dv Q(u, v) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} + \beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}{[4 \cosh(\beta u) \cosh(\beta v)]^{n}} (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1) \right] \right\}^{-1}.$$
(A.3)

Consideramos que  $a^x = e^{x \ln a} = e^{\ln a^x}$ , e a partir disso, analisamos o seguinte denominador:

$$\lim_{n \to 0} \frac{1}{[2\cosh(\beta u)]^n} = \lim_{n \to 0} [2\cosh(\beta u)]^{-n} = \lim_{n \to 0} e^{-n[2\cosh(\beta u)]}.$$
 (A.4)

Assumindo os mesmos passos, para os outros dois cossenos hiperbólicos da equação

(A.3),:

$$M = \lim_{n \to 0} \left\{ \sum_{\vec{\sigma}'', \vec{\tau}} \exp\left[c_{\sigma} \sum_{\vec{\sigma}'} \int dh W_{\sigma}(u) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha}}}{n[2 \cosh(\beta u)]} (e^{\frac{\beta}{c_{\sigma}} \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma}'} - 1) \right.$$

$$\left. + c_{\tau} \sum_{\vec{\tau}'} \int dv W_{\tau}(v) \frac{e^{\beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}}{[n[2 \cosh(\beta v)]]} (e^{\frac{\beta}{c_{\tau}} \vec{\tau} \cdot \vec{\tau}'} - 1) \right.$$

$$\left. + c_{I} \sum_{\vec{\sigma}', \vec{\tau}'} \int du dv Q(u, v) \frac{e^{\beta u \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{\alpha} + \beta v \sum_{\alpha=1}^{n} \tau_{\alpha}}}{n[2 \cosh(\beta u)] n[2 \cosh(\beta v)]} (e^{-\frac{\beta U}{c_{I}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}' + \vec{\sigma}' \cdot \vec{\tau})} - 1) \right] \right\}^{-1} = 1.$$

Ou seja, o denominador tende a 1, quando aplicamos o limite de  $n \rightarrow 0$ . Sendo assim, é permitido negligenciar o denominador da equação (2.36). O mesmo vale para as equações (2.42) e (2.46).

### **APÊNDICE B – ALGORITMO DE DINÂMICA DE POPULAÇÕES**

Para resolver as equações de densidade de probabilidade de campos é necessário utilizar o método numérico de dinâmica de populações. Esse método consiste em :

- Inicializamos a população (u) com uma determinada condição inicial;
  - Escolhemos uma população aleatória de D campos,  $\rightarrow \{ u_i ... u_D \};$
  - Sorteamos um número k de acordo com uma distribuição de Poisson de média
     c;

$$P(k) = \frac{c^k e^{-c}}{k!}.$$

- Escolhemos os k campos da população, aleatoriamente de acordo com uma distribuição uniforme  $\rightarrow$  {  $u_1...u_k$  } ;
- Com essa população de k membros escolhida, podemos calcular o somatório que aparece na função delta (equação (2.72), como exemplo) :

$$u_i \to \frac{1}{\beta} \left[ \sum_{l=1}^{k_\sigma} \operatorname{atanh}\left( \operatorname{tanh}(\beta u_l) \operatorname{tanh}\left( \frac{\beta}{c_\sigma} \right) \right) \right].$$
 (B.1)

- Esse resultado é atribuído aleatoriamente a outro campo  $\rightarrow u_i = F(u_1...u_k)$ 

Este procedimento é realizado até que a população de campos convirja para uma distribuição estacionária da distribuição de campos efetivos. Para conseguir varrer toda a população devemos considerar uma número grande de iterações.