

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Instituto de Ciências Exatas – ICEX

Programa de Pós-Graduação em Física

AMOSTRAGEM ENTRÓPICA TOMOGRÁFICA:  
aprimoramento e aplicações ao modelo de Ising  
antiferromagnético com campo externo e ao problema  
de flow shop scheduling

Bruno Jeferson Lourenço

Belo Horizonte

2016

Bruno Jeferson Lourenço

**AMOSTRAGEM ENTRÓPICA TOMOGRÁFICA:  
aprimoramento e aplicações ao modelo de Ising  
antiferromagnético com campo externo e ao problema de flow  
shop scheduling**

Tese de doutorado apresentado ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Física.

**Orientador:** Ronald Dickman

Belo Horizonte  
2016

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por me dar todas as condições possíveis para estar realizando mais este sonho.

À minha família pelo apoio incondicional, incentivo, carinho e amizade ao longo de todos esses anos e em todos os momentos.

Ao meu orientador Ronald Dickman – com o qual me sinto um privilegiado em trabalhar – pela oportunidade, confiança, dedicação e paciência.

Às minhas professoras Adriana Dickman e Maria Eugênia pelo incentivo, dedicação, apoio e confiança.

Aos meus amigos e colegas de estudos e grupo pela amizade e ajuda.

Aos funcionários da biblioteca do departamento de Física pelo excelente atendimento, atenção e ajuda.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

# Epígrafe

*“O cientista não estuda a natureza por sua utilidade prática; ele a estuda por prazer, que advém do fato de ela ser bela. Se a natureza não fosse bela, não valeria a pena conhecê-la, e se não valesse a pena conhecê-la, não valeria a pena viver.”*

Henry Poincaré

# Resumo

Nesse trabalho apresentamos uma nova implementação do algoritmo de amostragem entrópica tomográfica (*tomographic entropic sampling* – TES) baseada no algoritmo  $1/t$ . Nessa nova implementação utilizamos  $t^{-\alpha}$  (com  $\alpha = 0, 1/2, 1$  e  $2$ ) como fator de refinamento de  $\Omega(\Gamma)$  (número de configurações de uma determinada classe de configurações,  $\Gamma$ ). Analisamos a taxa de convergência do calor específico máximo,  $c_{max}$ , ao longo das iterações para o modelo de Ising antiferromagnético (AF) com campo externo na rede quadrada, com interação de primeiros vizinhos, assim como para o problema de *shop scheduling* (“agendamento de tarefas”) – área de estudo típica de ciência da computação e engenharia de produção. Pudemos verificar em ambos sistemas estudados que a convergência só ocorre de forma mais confiável para  $\alpha = 1$ ; para  $\alpha = 1/2$  também há um indício de convergência, porém mais lenta do que para  $\alpha = 1$ . Já para  $\alpha = 0$  e  $2$  não há convergência. Realizamos, então, simulações do modelo de Ising AF para sistemas de tamanhos  $L = 10$  a  $30$ , com  $\Delta L = 2$ . A linha crítica do modelo de Ising AF no plano temperatura–campo externo e expoentes críticos são calculados via análise de escala de tamanho finito usando amostragem entrópica para  $\alpha = 0$  e  $1$ . Também realizamos amostragens de Metropolis para tamanhos maiores ( $L \leq 320$ ) tendo em vista refinar as estimativas dos pontos e expoentes críticos, bem como do cumulante de Binder de quarta ordem, ao longo da linha crítica. Essas estimativas críticas estão em boa concordância com os respectivos valores conhecidos na literatura para a classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Verificamos também que o do calor específico escala com  $\sim \ln L$  ao longo da linha crítica, como esperado.

# Abstract

We propose and test a new implementation of the tomographic entropic sampling (TES) algorithm based on the  $1/t$  algorithm. We use  $t^{-\alpha}$  (with  $\alpha = 0, 1/2, 1$  and  $2$ ) as a refinement factor of  $\Omega(\Gamma)$  (number of configurations in configuration class  $\Gamma$ ). The rate of convergence is evaluated for the maximum of the specific heat,  $c_{max}$ , for the antiferromagnetic (AF) Ising model with external field on the square lattice, as well for the shop scheduling problem – a typical subject of computer science and production engineering. We verify for both systems that convergence occurs for  $\alpha = 1$ ; for  $\alpha = 1/2$  there is also convergence, slower than for  $\alpha = 1$  though. For  $\alpha = 0$  and  $2$ , however, there is no convergence. We simulated the AF Ising model for systems of sizes  $L = 10$  to  $30$  with  $\Delta L = 2$ ; the critical line in the temperature–external field; critical exponents are evaluated via finite size scaling using TES for  $\alpha = 0$  and  $1$ . We also employed Metropolis sampling for larger sizes ( $L \leq 320$ ) in order to improve the estimates of critical points and exponents, as well the reduced fourth order Binder cumulant, along the critical line. These critical estimates are in good agreement with their respective known literature values of the universality class of the two-dimensional Ising model. We also verify that the specific heat scales as  $\sim \ln L$  along the critical line, as expected.

# Lista de Figuras

2.1	Subredes interpenetrantes da rede quadrada . . . . .	11
2.2	Estados de um sistema próximos do ponto crítico . . . . .	13
2.3	Linha crítica do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo obtida por Müller-Hartmann e Zittartz . . . . .	18
2.4	Energia de diferentes configurações em função de $h$ para $T = 0$ . . . . .	19
2.5	Diagrama de Gantt . . . . .	22
4.1	Espaço de classes de configurações de uma rede quadrada . . . . .	36
4.2	Análise de escala de tamanho finito via TES para $\alpha = 1$ e $T = 0.5$ . . . . .	39
5.1	Incerteza de $c_{max}$ e $h(c_{max})$ ao longo de 50 iterações . . . . .	43
5.2	Calor específico e suscetibilidade alternada na 50a iteração em função de $h$ para $T = 0.2$ . . . . .	45
5.3	Superfícies do parâmetro de ordem e calor específico no plano $h - T$ . . . . .	46
5.4	Diagrama de fase no plano $h - T$ : resultados simulacionais e estimativas teóricas . . . . .	47
5.5	Comparação entre as estimativas simulacionais e teóricas dos pontos críti- cos para $\alpha = 1$ . . . . .	49
5.6	Análise de curvatura para $T = 1.0$ . . . . .	51
5.7	Curvatura em função do campo externo para $T = 1.0$ . . . . .	52
5.8	Comportamento do calor específico nos pontos críticos em função de $\ln L$ . . . . .	53
6.1	Estimativa de $\Omega$ em função do makespan para $20 \times 5$ . . . . .	55
6.2	Estimativa de $\Omega$ em função do makespan para $20 \times 10$ . . . . .	55
6.3	$\Omega$ exato para $5 \times 5$ em função do makespan . . . . .	57
6.4	Erro relativo de $\Omega$ entre resultados simulacionais e exatos para $5 \times 5$ . . . . .	58
6.5	Erro relativo de $\Omega$ entre resultados simulacionais e exatos para $6 \times 5$ . . . . .	58

6.6	Análise de convergência de $\Omega$ entre resultados simulacionais e exatos para $6 \times 5$ . . . . .	59
6.7	Análise de convergência para $20 \times 5$ . . . . .	60
6.8	Análise de convergência para $20 \times 10$ . . . . .	61
6.9	Média do análogo do calor específico, $c$ , em função da temperatura . . . . .	62
6.10	Média da energia (makespan) em função da temperatura . . . . .	63
6.11	Incerteza relativa do calor específico em função da temperatura . . . . .	63
6.12	Incerteza relativa da energia em função da temperatura . . . . .	64



# Lista de Tabelas

2.1	Tempo de processamento de 5 jobs em 4 máquinas. . . . .	21
5.1	Comparação entre resultados simulacionais e previsões teóricas para $h_c(T)$ . $\bar{\varepsilon}$ é a diferença relativa média entre teoria e simulação via TES- $1/t^\alpha$ com $\alpha = 1$ e $0$ , e via simulação de Metropolis. . . . .	48
5.2	Estimativas via TES para $h_c(T)$ , $\gamma/\nu$ e $\beta/\nu$ : comparação dos resultados entre $\alpha = 1$ e $\alpha = 0$ . . . . .	49
5.3	Estimativa via simulação de Metropolis dos pontos críticos, expoentes crí- ticos, e cumulante de Binder de quarta ordem. . . . .	51
6.1	Custos mínimos e máximos para cada instância de Taillard para $j = 20$ jobs, com $m = 5$ e $10$ máquinas. . . . .	56
6.2	Comparação do erro relativo médio sobre makespan para a 50 <sup>a</sup> iteração da simulação e os resultados exatos para $6 \times 5$ . . . . .	59

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Breve história do magnetismo . . . . .	1
1.2 Modelos matemáticos e física estatística . . . . .	2
1.3 Shop scheduling . . . . .	3
1.4 Justificativa . . . . .	4
1.5 Objetivos . . . . .	6
1.6 Organização do Trabalho . . . . .	6
<b>2 Revisão da Literatura</b>	<b>8</b>
2.1 Sistemas Magnéticos . . . . .	8
2.1.1 Paramagnetismo . . . . .	8
2.1.2 Ferromagnetismo . . . . .	9
2.1.3 Antiferromagnetismo . . . . .	10
2.2 Interação de troca e o modelo de Heisenberg . . . . .	14
2.3 Modelo de Ising . . . . .	16
2.3.1 Modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada . . . . .	17
2.4 Trabalhos correlatos – Ising AF na rede quadrada . . . . .	19
2.5 Permutation flow shop scheduling . . . . .	20
<b>3 Termodinâmica, transições de fase e métodos de Monte Carlo</b>	<b>24</b>
3.1 Médias Termodinâmicas . . . . .	24
3.2 Transições de Fase e Criticalidade . . . . .	25
3.3 Método de Monte Carlo . . . . .	28
3.3.1 Algoritmo de Metropolis . . . . .	28

3.3.2	Algoritmo de Wang-Landau . . . . .	30
3.3.3	Algoritmo $1/t$ . . . . .	31
3.3.4	Amostragem entrópica tomográfica . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Metodologia</b>	<b>35</b>
4.1	Amostragem Entrópica Tomográfica “ $t^{-\alpha}$ ” . . . . .	35
4.1.1	Implementação: modelo de Ising AF . . . . .	36
4.1.2	Implementação: flow shop scheduling . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Análise dos Resultados – Ising AF</b>	<b>42</b>
5.1	Análise de convergência via TES- $1/t^\alpha$ . . . . .	42
5.2	Amostragem entrópica tomográfica – $1/t^\alpha$ . . . . .	45
5.3	Simulações de Metropolis . . . . .	50
<b>6</b>	<b>Análise dos Resultados – Flow shop scheduling</b>	<b>54</b>
6.1	Estimativa de $\Omega$ . . . . .	54
6.2	Análise de convergência: resultados simulacionais e exatos . . . . .	56
6.3	Análise de convergência: instâncias de Taillard . . . . .	59
6.4	Uma possível transição de fase no problema flow shop . . . . .	61
<b>7</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>65</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>68</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Breve história do magnetismo

A história do magnetismo confunde-se em muito com a história da ciência. Fenômenos magnéticos provavelmente teriam sido um dos primeiros fenômenos naturais observados pelo homem – evidências indicam que fenômenos magnéticos foram observados séculos antes da era cristã [1]. Minerais naturais como a magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), por exemplo, instigavam a curiosidade e a imaginação das pessoas devido ao fato de atraírem remotamente peças de ferro, bem como o fato de agulhas magnetizadas apontarem na direção norte-sul da Terra (levando ao advento da bússola, que teve importantes consequências históricas, como nas expedições marítimas que culminaram nas descobertas de outros continentes).

Fenômenos como esses eram misteriosos, cujas explicações eram baseadas apenas em argumentos fictícios e supersticiosos até o início do século XVII, quando William Gilbert conduziu um tratado que é conhecido como o primeiro estudo científico sobre o magnetismo, jogando por terra qualquer misticismo [2]. Gilbert descobriu que as bússulas eram alinhadas pela Terra em si, e não pelas estrelas (como se pensava até então). Além disso, ele inferiu que a própria Terra é um “ímã”.

A relação entre magnetismo e eletricidade foi descoberta em 1820 pelo físico dinamarquês Hans Christian Oersted. A partir daí foram desenvolvidos vários experimentos envolvendo efeitos magnéticos e campos elétricos por André-Marie Ampère e Michael Faraday, de maneira independente, como a indução eletromagnética, por exemplo. Tais experimentos levaram James Clerk Maxwell a formular uma fascinante teoria unificando eletricidade, magnetismo e luz em 1864, através das quatro famosas “equações de Maxwell”.

Diversos avanços tecnológicos ocorreram desde então, como o advento de motores e geradores elétricos, redes elétricas e sistemas de comunicação, que tiveram grande impacto na sociedade.

Importantes contribuições foram dadas por Pierre Curie e Pierre Weiss no início do século XX. Curie estudou o efeito da temperatura nas propriedades magnéticas de alguns materiais, como ferro, por exemplo, e observou que a magnetização era extinta reversivelmente acima de uma temperatura crítica. Em 1907 Weiss formulou uma teoria que explicava esse fenômeno observado por Curie.

Apesar desses avanços científicos e tecnológicos, o fato de alguns sólidos serem ferromagnéticos (ver Seção 2.1.2) ainda era um mistério. O magnetismo continuou a ser um desafio para a física clássica por mais alguns anos, e o conhecimento atual sobre magnetismo, com explicações satisfatórias, só começaram após o surgimento da mecânica quântica e de alguns modelos teóricos propostos pelos alemães Wilhelm Lenz, Ernest Ising e Werner Heisenberg.

## 1.2 Modelos matemáticos e física estatística

Frequentemente é desejável estudar e descrever o comportamento de sistemas ou fenômenos por meio de modelos matemáticos, que são tentativas de representação de fenômenos reais. A eficácia de um modelo pode ser avaliada de acordo com a comparação dos resultados fornecidos pelo mesmo e o fenômeno real em análise. Um bom modelo pode possibilitar análises qualitativas, quantitativas e/ou numéricas de um determinado fenômeno, assim, fornecendo informações pertinentes à dinâmica do sistema em estudo.

Como são poucos os modelos que apresentam soluções analíticas e também devido ao advento e evolução de poderosas ferramentas computacionais ao longo dos últimos anos, os métodos computacionais vêm recebendo cada vez mais importância nas ciências.

A física da matéria condensada é uma área de pesquisa em que as simulações computacionais desempenham um papel importante, uma vez que essa lida com sistemas compostos por muitas partículas que interagem entre si. As dinâmicas desses sistemas são regidas por determinadas funções hamiltonianas que, em geral, não possuem soluções analíticas das respectivas equações de movimento. Entretanto, lançando-se mão de ferramentas fornecidas pela mecânica estatística, esses problemas podem ser contornados,

tratando-os justamente através de um ponto de vista probabilístico: conhecendo-se a função partição de um sistema, todas as quantidades termodinâmicas de interesse podem ser obtidas.

Os métodos de Monte Carlo [3, 4] têm se mostrado bastante úteis na análise e estudo de propriedades termodinâmicas de equilíbrio de modelos físicos, os quais vão desde cadeias de polímeros até sistemas magnéticos. Exemplos de modelos utilizados para simular sistemas magnéticos, além do modelo de Ising que provavelmente é o mais conhecido, são o de Potts [5, 6], *clock model* [7], Heisenberg [8] e *ice models* [3]. Vários algoritmos de Monte Carlo vêm sendo desenvolvidos com o intuito de otimizar as simulações em si e, conseqüentemente, os resultados obtidos. Dentre eles podemos citar como exemplos o de Metropolis [9], Wolff [10], Swendsen-Wang [11] e de Wang-Landau [12, 13].

Os estudos de transições de fase e fenômenos críticos de sistemas magnéticos iniciaram entre o final do século XIX e o início do século XX, período em que Wilhelm Lenz propôs, ao seu então aluno Ernst Ising, um modelo de interação dos momentos magnéticos. Tal modelo é conhecido como “modelo de Ising” ou “modelo de Lenz-Ising” e provavelmente é um dos mais conhecidos e explorados desde que Lars Onsager [14] encontrou sua solução analítica na rede quadrada em 1944.

Uma vez que determinadas quantidades termodinâmicas de sistemas que sofrem transições de fase divergem no ponto crítico, os métodos aproximativos analíticos e numéricos apresentam grande importância ao entendimento das propriedades desses sistemas na região crítica. Dessa forma, a simulação de Monte Carlo do modelo de Ising é de fundamental importância a esses estudos, por exemplo, através da análise de escala de tamanho finito [3].

### 1.3 Shop scheduling

Planejamento e organização são elementos fundamentais em qualquer processo de produção que demanda várias etapas de operações e tarefas, as quais em geral têm prazos pré-estabelecidos para serem finalizadas. Esse gerenciamento tem o intuito de otimizar os processos em todas suas etapas. As tarefas são das mais variadas formas. Na indústria, por exemplo, o objetivo em geral é produzir com o menor tempo de execução e gastos possíveis. Portanto o planejamento de uma linha de produção visa maximizar a eficiência

das operações, o que conseqüentemente aumenta a produtividade e o lucro.

Considere, por exemplo, uma rede de computadores com 10 CPUs na qual são submetidos 50 programas/processos distintos, seguindo uma certa ordem na fila. Em geral os tempos exatos de processamento não são conhecidos a priori. Além disso cada processo pode ter diferentes níveis de prioridade. Nesse caso o objetivo é minimizar o tempo total de execução de todos os processos.

O sistema em geral divide os processos, de modo a evitar uma situação em que um processo que demadasse relativamente pouco tempo de execução ficasse muito tempo no sistema aguardando processos mais longos e com maior prioridade terminarem. Ou seja, o sistema operacional faz uma espécie de rodízio entre os processos. Assim, todos os processos são executados parcialmente por um certo tempo. Então, teoricamente, se uma tarefa exige pouco tempo de processamento, ela será finalizada relativamente rápido.

Tendo essas situações em vista, podemos nos questionar: será que existe um ordenamento “ótimo” dos processos de modo a reduzir o tempo de execução total? Será que seria útil investir numa procura por um ordenamento dos processos que otimizasse o tempo de execução, mesmo que exista um enorme número de possibilidades (como  $50! \simeq 3 \times 10^{64}$ , no caso dos processos na rede de computadores do exemplo citado acima)? Na prática, de fato, observa-se que o planejamento influencia de maneira significativa no tempo total de execução, e portanto faz sentido investir esforços na busca de um planejamento ótimo.

Entretanto essa busca por uma solução ótima de planejamento pode ser muito difícil dependendo do sistema envolvido. São diversos os tipos de dificuldades do ponto de vista de implementação, que dependem da precisão do modelo usado na análise do problema real, bem como das consistências dos dados de entrada que são necessários. Esse tipo de problema é conhecido por *shop scheduling*, consistindo de uma grande variedade de modelos e vínculos diversos, e é abordado especialmente na ciência da computação.

Nesse trabalho olhamos o problema do *permutation flow shop* de um outro ponto de vista, isto é, de um ponto de vista entrópico, como explicado na próxima seção.

## 1.4 Justificativa

Como mencionado anteriormente, alguns fenômenos e propriedades relacionadas a sistemas magnéticos vêm sendo estudados há décadas. Entretanto, a grande maioria dos

trabalhos analíticos e teóricos do modelo de Ising, em particular, está relacionada especialmente a sistemas ferromagnéticos. Consequentemente, o modelo de Ising ferromagnético possui resultados bem estabelecidos, enquanto o modelo de Ising antiferromagnético (AF) com campo magnético externo foi pouco estudado e explorado. Ou seja, o modelo de Ising AF com campo externo, o qual estudamos, possui poucas propriedades e resultados conhecidos na literatura. Embora existam algumas propostas teóricas para a linha crítica na literatura [15, 16, 17, 18, 19] os mesmos ainda não foram confrontados com dados numéricos.

O modelo de Ising AF com campo magnético externo é, em geral, mais complexo que o ferromagnético – esse, por sua vez, é conhecido como um modelo “bem comportado”, de modo que muitas vezes é utilizado como referência de teste de qualidade e eficiência para novos algoritmos e métodos simulacionais. Os sistemas AF podem apresentar um fenômeno chamado “frustração geométrica”, cujo aspecto fundamental é a impossibilidade de satisfazer todas as interações simultaneamente. Isso leva à alta degenerescência do estado fundamental em determinadas redes, como a triangular, que não admite a decomposição em duas sub-redes [20] e faz com que tais sistemas possuam propriedades e comportamento que dependem da estrutura de rede. O modelo de Ising AF, por exemplo, não apresenta frustração na rede quadrada enquanto na rede triangular esse fenômeno ocorre.

Alguns trabalhos mostram que os resultados do modelo de Ising AF dependem fortemente do método aproximativo teórico utilizado [21], ou seja, existem resultados discordantes obtidos pelos diferentes métodos teóricos, além de discrepâncias entre os métodos simulacionais e os numéricos no que diz respeito à análise de escala de tamanho finito [22].

No que diz respeito ao *flow shop scheduling*, métodos heurísticos de busca por soluções de mínimo custo vêm sendo propostos desde a década de 1950 [23], porém, mesmo com os avanços realizados nos últimos anos [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32] muitos sistemas ainda encontram-se sem soluções.

Do ponto de vista da física estatística, o tempo total de execução pode ser tratado como uma energia,  $\mathcal{H}(P)$  (onde  $P$  é a permutação entre os jobs), que queremos minimizar. As “interações” são aleatórias como no problema de *spin glass*, por exemplo, tal que a busca do mínimo é um problema computacionalmente difícil. No presente trabalho, porém, estudamos a “entropia” do sistema,  $S(\Gamma) = \ln \Omega(\Gamma)$  (onde  $\Omega(\Gamma)$  é o número de



permutações com custo  $\Gamma$ ), e analisamos a topografia dessa distribuição.

## 1.5 Objetivos

Nossos objetivos nesse trabalho são implementar uma melhora no algoritmo de amostragem entrópica tomográfica (TES) [33], utilizando novas técnicas que possam contribuir de maneira significativa à melhoria da convergência das simulações, e conseqüentemente irá refletir na qualidade dos resultados obtidos.

Tal convergência diz respeito a  $\Omega(\Gamma)$  (número de configurações de uma determinada classe de configurações,  $\Gamma$ ) tender a um valor constante à medida que o tempo de simulação aumenta. Essa técnica de refinamento na estimativa na densidade de estados é baseada nos ótimos resultados obtidos com o algoritmo  $1/t$  [34, 35, 36], que mostra uma clara convergência das estimativas aumentando o número de iterações.

Essas modificações no TES serão aplicadas ao modelo de Ising AF com campo externo, na rede quadrada. Com isso objetivamos conseguir bons resultados no que diz respeito à análise do diagrama de fase do modelo de Ising AF, bem como nas estimativas dos expoentes críticos.

Em relação ao *flow shop scheduling*, nosso objetivo é fornecer à comunidade científica que se dedica a essa classe de problemas, uma nova visão da distribuição do número de permutações em relação a função objetivo. Até o momento não encontramos nenhum trabalho que faça essa abordagem. Temos a perspectiva de que esse ponto de vista pode contribuir na elaboração de métodos heurísticos de busca de soluções ótimas, bem como na compreensão de peculiaridades de cada sistema.

## 1.6 Organização do Trabalho

Apresentamos uma revisão da literatura no Capítulo 2, contemplando sistemas magnéticos e o modelo de Ising bem como uma discussão sobre o *flow shop scheduling*. No Capítulo 3 apresentamos uma revisão de termodinâmica, transições de fases, e métodos de Monte Carlo (algoritmos de Metrópolis, Wang-Landau,  $1/t$ , e amostragem entrópica tomográfica),

No Capítulo 4 apresentamos a metodologia utilizada na modificação do algoritmo TES, e como foram implementadas as simulações para estudo do *permutation flow shop*

*scheduling* e do modelo de Ising AF.

Os resultados obtidos relativos ao modelo de Ising AF e *permutation flow shop* são apresentados nos Capítulos 5 e 6, respectivamente. As considerações finais estão no Capítulo 7.

# Capítulo 2

## Revisão da Literatura

### 2.1 Sistemas Magnéticos

Os materiais magnéticos são classificados de acordo com o estado físico em que se apresentam, dentre os quais os mais comuns são os estados ferromagnético (FM), anti-ferromagnético (AF), ferrimagnético, paramagnético e diamagnético. As fases ou estados magnéticos dependem, dentre outras variáveis, da temperatura e do campo magnético aplicado. O ordenamento magnético dos materiais tem origem quântica e se deve principalmente à interação de troca entre os momentos magnéticos de spin dos elétrons do sistema [7].

Os comportamentos dos materiais magnéticos são bastante peculiares ao estado em que se apresentam. Vejamos a seguir as principais características de alguns desses estados ou fases magnéticas. A discussão a seguir é baseada em [1, 7, 8, 37].

#### 2.1.1 Paramagnetismo

Os materiais paramagnéticos se caracterizam pelo fato de suas magnetizações,  $M$ , apresentarem resposta linear a um campo magnético,  $h$ , de baixa intensidade aplicado, ou seja,

$$m = \chi h, \tag{2.1}$$

onde  $\chi$  ( $\chi > 0$ ) é a susceptibilidade magnética do material e  $h$  é o campo magnético aplicado. Os sistemas paramagnéticos mantêm uma magnetização não nula somente enquanto houver um campo externo aplicado, o que faz com que parte dos momentos magnéticos

dos spins do sistema se alinhem paralelamente ao campo. Quando um sistema paramagnético *não* está sob influência de um campo externo, seus spins se orientam em direções aleatórias, fazendo com que o sistema possua magnetização total nula.

Como altas temperaturas favorecem a orientação aleatória dos spins enquanto o campo magnético aplicado tende a orientá-los em sua direção, a susceptibilidade magnética é função da temperatura,  $\chi = \chi(T)$ . Observa-se que para materiais paramagnéticos ideais

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad (2.2)$$

onde  $C$  é a constante de Curie, específica para cada material; a equação (2.2) é conhecida como lei de Curie.

Os sistemas paramagnéticos ideais são definidos como aqueles constituídos por momentos magnéticos sem interação entre si. Já materiais magnéticos que simplesmente podem sofrer uma transição para a fase paramagnética a lei de Curie, para temperaturas suficientemente altas, toma a forma:

$$\chi = \frac{C}{T - \Delta}, \quad (2.3)$$

onde  $\Delta$  é uma constante tal que  $\Delta > 0$  para sistemas que sofrem transição do estado paramagnético para o ferromagnético (Seção 2.1.2), e  $\Delta < 0$  para sistemas que sofrem transição do estado paramagnético para o antiferromagnético (Seção 2.1.3).

## 2.1.2 Ferromagnetismo

Em materiais ferromagnéticos os átomos possuem elétrons desemparelhados e portanto um spin total não-nulo mesmo na ausência de um campo magnético externo,  $h = 0$ , à baixas temperaturas. Para  $h = 0$ , os materiais FM apresentam magnetização espontânea,  $m \neq 0$ , a baixas temperaturas. Mas a uma determinada temperatura crítica ou temperatura de Curie,  $T_c$ , sofrem uma transição para a fase paramagnética e passam a ter magnetização por spin nula, ou seja,

$$m(T \geq T_c, h = 0) = 0$$

$$m(T < T_c, h = 0) \neq 0.$$

Em geral, à temperatura constante,  $T > T_c$ , e campo magnético externo de baixa intensidade, pode-se observar que  $m = \chi h$ , o que realmente caracteriza que o sistema está no estado paramagnético, como vimos na Seção 2.1.1. Já no caso em que  $T < T_c$  a magnetização por spin,  $m$ , é não nula mesmo para campo externo nulo; e para campo externo de baixa intensidade

$$m(T, h) = m_e(T) + \chi(T)h, \quad (2.4)$$

onde  $m_e(T)$  é a magnetização espontânea do sistema, que é função somente da temperatura,  $h$  está em unidades tais que  $h \rightarrow h/J$  (onde  $J$ ) é a constante de interação entre os spins. Pela equação (2.4) e pelas propriedades dos sistemas FM discutidas acima, podemos perceber que

$$m_e = \begin{cases} f(T) & \text{se } T < T_c \\ 0 & \text{se } T \geq T_c \end{cases}$$

onde  $f(T)$  é uma função crescente de  $\beta = 1/(k_B T)$  tal que  $f(T = T_c) = 0$ . Uma vez que a magnetização do sistema tem um valor finito no estado ferromagnético e é nula no paramagnético, ela é comumente chamada de *parâmetro de ordem* do sistema.

Na presença de um campo magnético, os materiais FM apresentam uma magnetização induzida que aumenta de intensidade de acordo com a intensidade do campo aplicado. Porém, os sistemas magnéticos têm uma propriedade intrínseca chamada magnetização de saturação. A magnetização de saturação é o valor máximo da magnetização que pode ser induzida no sistema; ela independe do tamanho do mesmo, ocorrendo a partir de um valor específico da intensidade do campo magnético externo, chamado de campo de saturação, o qual independe da temperatura. Exemplos de elementos ferromagnéticos à temperatura ambiente ( $273K$ ) são ferro (Fe), cobalto (Co) e níquel (Ni), os quais sofrem transição para a fase paramagnética à  $1.044K$ ,  $1.390K$  e  $630K$ , respectivamente.

### 2.1.3 Antiferromagnetismo

O estado antiferromagnético (AF) tem magnetização nula na ausência de campo magnético externo,  $h = 0$ . Mas diferentemente do estado paramagnético, os momentos magnéticos dos materiais AF não se orientam em direções aleatórias no estado fundamental. Os materiais AF possuem redes cristalinas bem ordenadas, que podem ser divididas em duas

ou mais subredes interpenetrantes. Na Figura 2.1 mostramos um diagrama das subredes interpenetrantes de uma rede quadrada. Os momentos magnéticos dos átomos em cada uma dessas subredes apontam em direções opostas; por exemplo, se a rede cristalina de um material é dividida em duas subredes  $A$  e  $B$ , então, no estado fundamental, todos os momentos magnéticos dos átomos da subrede  $A$  apontam em uma determinada direção que é oposta aos da subrede  $B$  – o que proporciona uma magnetização total nula.

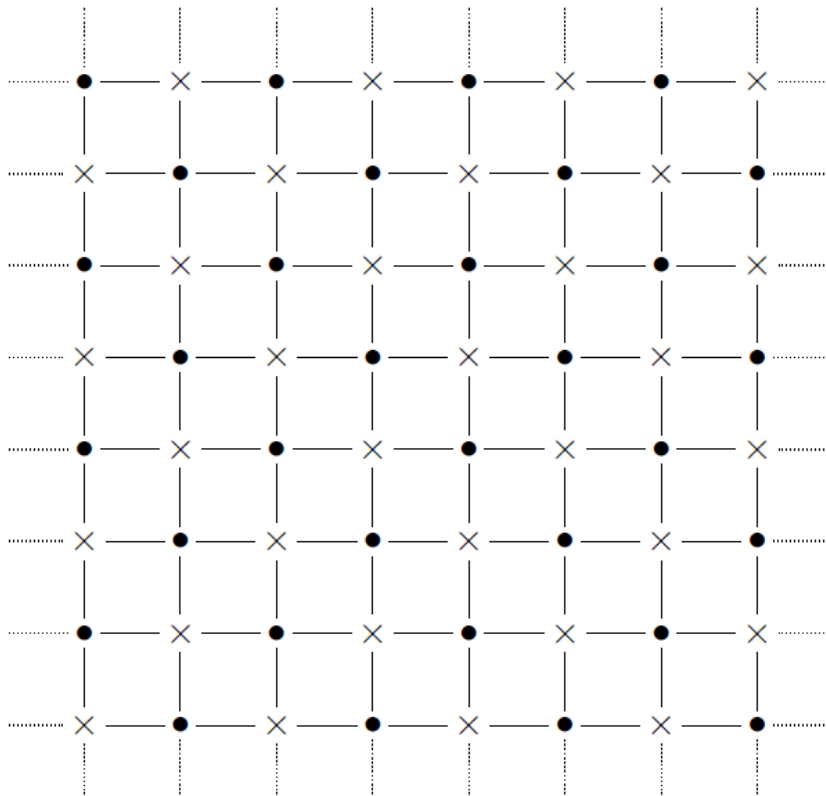


Figura 2.1: Subredes interpenetrantes da rede quadrada. Os elementos “x” e “•” pertencem a diferentes subredes.

Os sistemas AF perdem esse ordenamento das subredes a partir de uma determinada temperatura crítica, denominada temperatura de Néel,  $T_N$ . Para  $T \geq T_N$  e  $h = 0$  os momentos magnéticos dos átomos apontam em direções aleatórias, caracterizando uma transição de fase para o estado paramagnético ( $m = 0$ ). À campo externo nulo  $m = 0$  tanto na fase AF quanto paramagnética, então  $m$  não é um parâmetro de ordem para esses sistemas. A seguir vamos definir uma quantidade, associada à magnetização das subredes, que será o parâmetro de ordem dos sistemas AFs.

Seja um material AF com uma rede cristalina que se divide em duas subredes equivalentes e interpenetrantes, denotadas por  $A$  e  $B$ , com magnetizações por sítio  $m_A$  e  $m_B$ ,

respectivamente. Definimos a magnetização total por sítio de um sistema de Ising como

$$m = \frac{1}{2}(m_A + m_B), \quad (2.5)$$

onde  $m_j \in [-1, 1]$  e  $j = A, B$ . De acordo com o que foi discutido acima, se  $h = 0$  e  $T < T_N$ , então  $m_A = -m_B$  e conseqüentemente  $m = 0$ . Mas se  $T > T_N$ , então  $m_A = m_B$  independentemente se o campo externo é nulo ou não; se  $h \neq 0$  então  $m_A = m_B \neq 0$  e se  $h = 0$  então  $m_A = m_B = 0$ . Portanto, é conveniente definirmos o parâmetro de ordem por sítio (também conhecido por *staggered magnetization* ou magnetização alternada),  $\phi$ , de um sistema AF como

$$\phi = \frac{1}{2}(m_A - m_B). \quad (2.6)$$

Daí podemos ver que  $\phi = 0$  na fase paramagnética (desordenada) e  $\phi \neq 0$  na fase AF (ordenada), *a qual se define justamente pelo fato de as magnetizações de todas subredes do material possuírem valores distintos*. A Figura 2.2 mostra uma representação dos estados de um sistema abaixo, no ponto e acima do ponto crítico em uma simulação de Monte Carlo para um sistema de tamanho  $40 \times 40$ ; é importante destacar que os valores de magnetização e parâmetro de ordem sofrem influência do tamanho finito da rede.

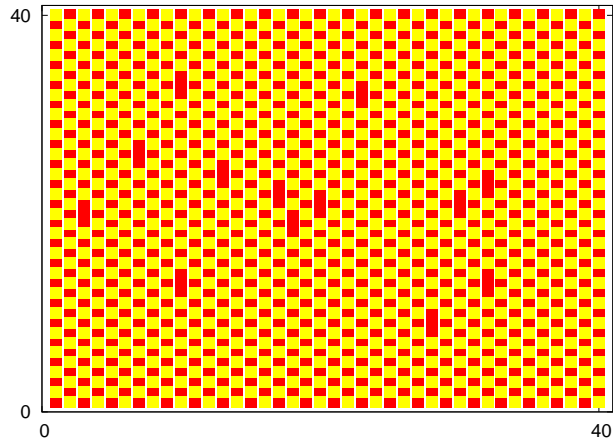
A rede cristalina de um determinado material AF tem importância fundamental nas características e propriedades do sistema. Um fenômeno peculiar a algumas estruturas cristalinas é a *frustração geométrica*, que é a impossibilidade de minimizar simultaneamente todas as energias de interação entre pares, o que leva à alta degenerescência do estado fundamental do sistema. Vejamos a seguir um exemplo de rede na qual ocorre esse fenômeno.

Seja uma rede triangular com interação de primeiros vizinhos entre os spins em cada vértice [20], tal que a energia de interação,  $E_{int}$ , seja dada por

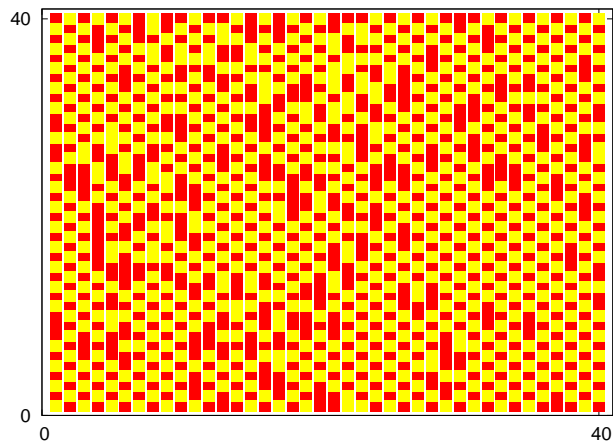
$$E_{int} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.7)$$

onde  $J < 0$  é uma constante associada à interação de troca entre os spins do sistema AF;  $\sigma_i = \pm 1$  e  $\sigma_j = \pm 1$  são os momentos magnéticos dos spins nos sítios  $i$  e  $j$ , respectivamente; e  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  representa a soma sobre os pares de primeiros vizinhos da rede.

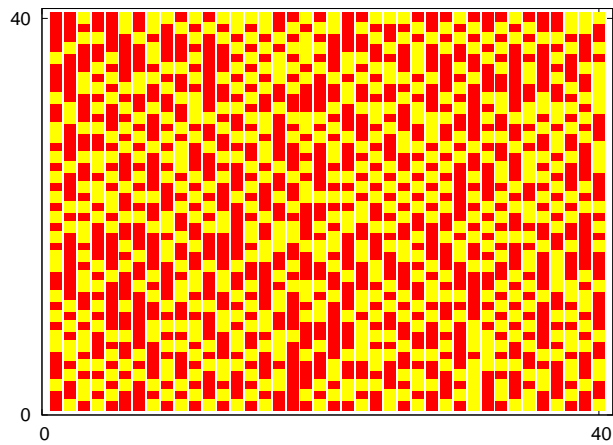
Analisando somente um triângulo dessa rede, podemos perceber que existem  $2^3 = 8$



(a)  $T < T_c$ .



(b)  $T = T_c$ .



(c)  $T > T_c$ .

Figura 2.2: Representação dos estados de um sistema de Ising com interações AF de tamanho  $40 \times 40$  com  $h = h_c$  e temperatura (a) abaixo do ponto crítico: estado antiferromagnético com  $m \approx 0$  e  $\phi \approx 1$ ; (b) no ponto crítico: transição de fase com  $m \approx 0.1$  e  $\phi \approx 0.5$ ; (c) acima do ponto crítico: estado paramagnético  $m \approx 0.2$  e  $\phi \approx 0$ . As diferentes cores representam spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$ .



estados possíveis. Dois desses estados têm todos spins paralelos ( $\uparrow\uparrow\uparrow$  ou  $\downarrow\downarrow\downarrow$ ); já os outros seis estados têm um arranjo do tipo  $\uparrow\downarrow\uparrow$  (os três spins são primeiros vizinhos), que são justamente as configurações com energia mínima. Sendo dois spins antiparalelos ( $\uparrow\downarrow$  ou  $\downarrow\uparrow$ ), o sistema estará no estado fundamental independentemente da orientação  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  do outro spin. Ou seja, o estado fundamental é degenerado pois o terceiro spin tem uma configuração “frustrada”, que não altera o valor da energia. É justamente esse tipo de fenômeno que caracteriza a *frustração geométrica*.

O cromo (Cr) é o único elemento antiferromagnético à temperatura ambiente, e sofre transição para a fase paramagnética à  $311K$ ; algumas ligas de Cr e de manganês (Mn) são antiferromagnéticas. À temperatura na ordem de  $13K$  alguns elementos da família dos lantanídeos, como cério (Ce) e samário (Sm), apresentam-se no estado antiferromagnético, enquanto passam para o paramagnético a maiores temperaturas. Alguns outros elementos da família dos lantanídeos podem se apresentar nas fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética, dependendo da temperatura em que se encontram; exemplos são hólmio (Ho), érbio (Er) e túlio (Tm).

## 2.2 Interação de troca e o modelo de Heisenberg

O ferromagnetismo exige que a energia de interação entre spins seja maior que a energia térmica para criar momentos magnéticos e estabilizar as orientações paralelas de momentos vizinhos. Essa força de momento e magnetização se deve à *interação de troca*. A competição entre a interação de troca interatômica e a desordem térmica, devido ao aumento de temperatura, leva ao fim da magnetização espontânea quando o sistema atinge uma temperatura bem definida, chamada temperatura de Curie,  $T_C$ .

Consideremos um sistema de dois elétrons. Pelo princípio de Pauli, sabe-se que dois férmions (partículas de spin não-inteiro, como elétrons e prótons) não podem ocupar o mesmo estado quântico. Sendo assim, um orbital pode ser ocupado por dois spins antiparalelos ( $\uparrow\downarrow$ ) mas não por dois paralelos ( $\uparrow\uparrow$  ou  $\downarrow\downarrow$ ). Como elétrons são indistinguíveis, então a troca entre dois elétrons deve fornecer a mesma densidade de elétrons,  $|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2$ . Logo, a única solução para função de onda total deve ser anti-simétrica:  $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$ . Assim, as duas funções de ondas globalmente anti-

simétricas associadas aos dois elétrons são:

$$\Psi_1 = \phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_A(s_1, s_2) \quad (2.8)$$

e

$$\Psi_2 = \phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_S(s_1, s_2), \quad (2.9)$$

onde  $\phi_S = (1/\sqrt{2})(\psi_1 + \psi_2)$  e  $\phi_A = (1/\sqrt{2})(\psi_1 - \psi_2)$  são as partes posicionais simétrica e anti-simétrica, respectivamente, e  $\chi_S$  e  $\chi_A$  são as partes de spin simétrica e anti-simétrica, respectivamente, tais que:

$$\chi_S = \begin{cases} |S = 1, M = 1\rangle & = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |S = 1, M = 0\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |S = 1, M = -1\rangle & = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.10)$$

para o número quântico de spin,  $S = s_1 + s_2 = 1$  e seus respectivos valores do número quântico magnético  $M$ , chamado de tripleto; e o singleto:

$$\chi_A \equiv |S = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (2.11)$$

Pode-se mostrar que o hamiltoniano da forma

$$\hat{\mathcal{H}} = C\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + D, \quad (2.12)$$

onde  $C$  e  $D$  são constantes, é capaz de representar a separação dos elétrons em dois níveis distintos de energia [1, 7, 38, 39]. A constante  $C = \langle \chi_S | \hat{\mathcal{H}} | \chi_S \rangle - \langle \chi_A | \hat{\mathcal{H}} | \chi_A \rangle$ , a diferença dos níveis energéticos entre os estados de tripleto e singleto, está associada à interação de troca entre os spins, de origem coulombiana. Assim, o hamiltoniano do modelo de Heisenberg para a interação spin-spin em uma rede com  $N$  spins pode ser expresso como

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i < j=1}^N J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - h \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z, \quad (2.13)$$

onde os operadores de spin são adimensionais, de modo que os fatores  $\hbar$  foram absorvidos dentro da constante de interação de troca  $J_{ij}$ , que possui unidades de energia, bem como  $h$  que está associado ao campo externo na direção  $z$ . Quando  $J_{ij} > 0$  ou  $J_{ij} < 0$  a interação

é ferromagnética ou antiferromagnética, respectivamente.

## 2.3 Modelo de Ising

Um dos modelos mais conhecidos e explorados na física estatística é o modelo de Ising. Esse modelo foi na realidade proposto por Wilhelm Lenz (por isso também é conhecido como modelo de Lenz-Ising) ao seu então aluno de doutorado Ernst Ising para que ele estudasse transições de fase em sistemas magnéticos. O modelo de Ising foi resolvido analiticamente em uma dimensão pelo próprio Ising em 1925. Em 1944 o físico Lars Onsager encontrou sua solução analítica na rede quadrada com interação de primeiros vizinhos e na ausência de campo externo [14]. Porém sua solução analítica ainda não foi encontrada para dimensão  $d = 3$ .

Para a análise de um sistema magnético, o modelo de Ising assume que o sistema seja formado por uma rede (quadrada, triangular, hexagonal, cúbica simples ou cúbica de face centrada, por exemplo). Cada um dos  $N$  sítios (vértices) da rede possui um momento magnético ou spin,  $\mu_i$ , ao longo do eixo  $z$  dado por

$$\mu_i = \gamma \sigma_i, \quad (2.14)$$

onde o índice  $i$  representa um sítio da rede,  $\gamma$  é uma constante e

$$\sigma_i = \pm 1 \quad (2.15)$$

é uma variável associada à orientação  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  do spin na direção  $z$  (passaremos a nos referir a  $\sigma_i$  como momento magnético). Esse modelo assume que a interação entre os spins se dá através da interação de troca, de origem quântica [7].

Um dos casos mais simples do modelo de Ising consiste em assumir que a interação entre os spins seja apenas entre primeiros vizinhos e com um campo magnético externo,  $H$ , ao longo da direção  $z$ , de modo que o hamiltoniano do sistema seja

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.16)$$

onde  $J$  é uma constante associada à interação de troca entre os spins ( $J > 0$  para sistemas

ferromagnéticos e  $J < 0$  para antiferromagnéticos);  $\langle i, j \rangle$  representa a soma sobre todos os pares de primeiros vizinhos e  $h$  é proporcional ao campo externo  $H$  (de agora em diante iremos nos referir a  $h$  simplesmente como campo magnético externo).

Destacamos que como o modelo de Ising contém componentes de spin apenas na direção do campo magnético, o comutador de spin com o hamiltoniano é nulo, e portanto, podemos tratar os spins do modelo de Ising como se fossem clássicos.

### 2.3.1 Modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada

Uma característica peculiar do modelo de Ising AF com campo externo na rede quadrada é a existência de uma linha crítica em seu diagrama de fase no plano  $h$ - $T$ . Embora não haja solução exata para esse modelo, vários métodos aproximativos foram desenvolvidos com o intuito de descrever essa linha crítica [15, 19, 40].

Através de um método aproximativo de cálculo de propriedades de interface, Müller-Hartmann & Zittartz [15] deduziram a seguinte expressão analítica para essa linha crítica para a rede quadrada:

$$\cosh\left(\frac{h}{T_c}\right) = \sinh^2\left(\frac{2}{T_c}\right), \quad (2.17)$$

onde  $h$  e  $T$  estão em unidades tais que  $h \rightarrow h/J$  (onde  $J$  é a constante de interação entre primeiros vizinhos) e  $T \rightarrow k_B T/J$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann). Na Figura 2.3 mostramos essa linha crítica para  $h > 0$ , uma vez que essa curva é simétrica em torno do eixo  $T$ . Abaixo dessa linha o sistema se encontra no estado antiferromagnético enquanto acima se encontra no paramagnético.

A partir dessa equação da linha crítica obtiveram uma aproximação para  $T_c(h)$  com  $h \rightarrow 0$ :

$$T_c(h) \approx T_c^0(1 - \alpha h^2), \quad (2.18)$$

onde  $T_c^0 \equiv T_c(h = 0) = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$ , que é justamente o ponto crítico do modelo de Ising ferromagnético e  $\alpha \equiv \ln(1 + \sqrt{2})/(16\sqrt{2})$ ; e também a aproximação para  $h_c(T)$  com  $T \rightarrow 0$ :

$$h_c(T) \approx h_c^0 - T \ln 2, \quad (2.19)$$

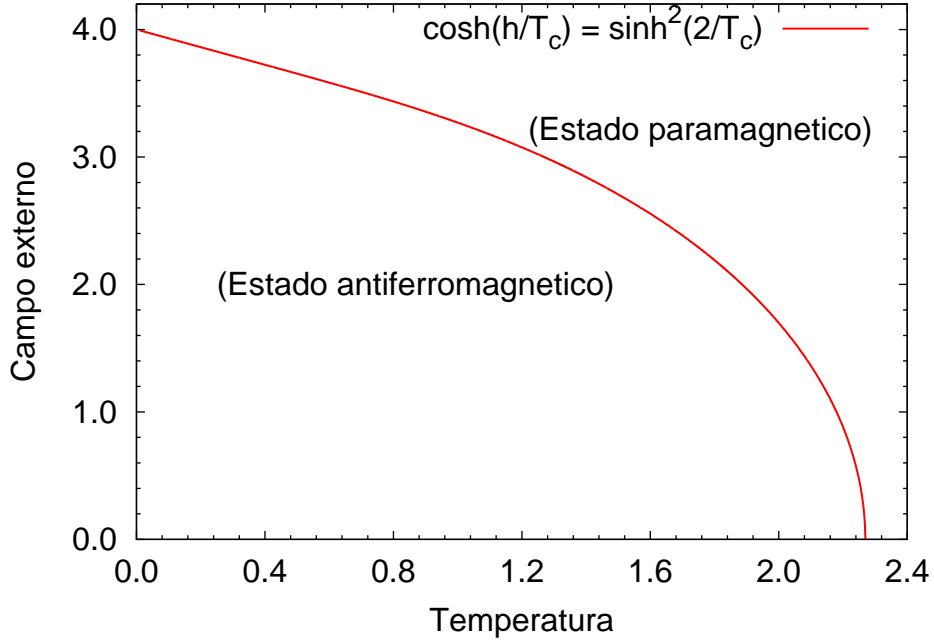


Figura 2.3: Linha crítica do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo obtida por Müller-Hartmann e Zittartz [15]. Abaixo da curva o estado é AF e acima é paramagnético.

onde  $h_c^0 \equiv h_c(T = 0) = 4$ . Esse valor de  $h_c$  à temperatura nula tem uma explicação baseada no estado fundamental do sistema, o que apresentamos a seguir.

Seja uma configuração  $\mathcal{C}_n$  do sistema com energia total  $E_n$  dada por

$$E_n = E - hM, \quad (2.20)$$

onde usamos unidades tais que  $J = -1$  na equação 2.16, definimos a energia de interação entre os spins,  $E$ , por

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

e a magnetização total,  $M$ , por

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

À temperatura nula o sistema se encontra no estado fundamental. Nesse estado, para pequenos valores de  $h$ , definimos uma configuração  $\mathcal{C}_1$  em que todos os spins da subrede  $A$ , por exemplo, estão paralelos ao campo  $h$  ( $\sigma_i^A = +1$ ) enquanto os da subrede  $B$  estão no sentido oposto ( $\sigma_i^B = -1$ ). A magnetização total dessa configuração é nula e então a energia total é  $E_1 = -2L^2$ , enquanto o parâmetro de ordem nesse estado, dado pela equação (2.6), é  $\phi = 1$ . Consideremos outra configuração  $\mathcal{C}_2$  em que todos os spins

estão paralelos ao campo magnético, cuja energia total é  $E_2 = 2L^2 - hL^2$  e  $\phi = 0$ . Podemos ver pela Figura 2.4 que as energias dessas duas configurações são iguais para  $h(T = 0) \equiv h_c^0 = 4$ . Ou seja, nesse ponto de transição de primeira ordem ( $T_c = 0, h_c = 4$ ) há uma descontinuidade na primeira derivada da energia do estado fundamental.

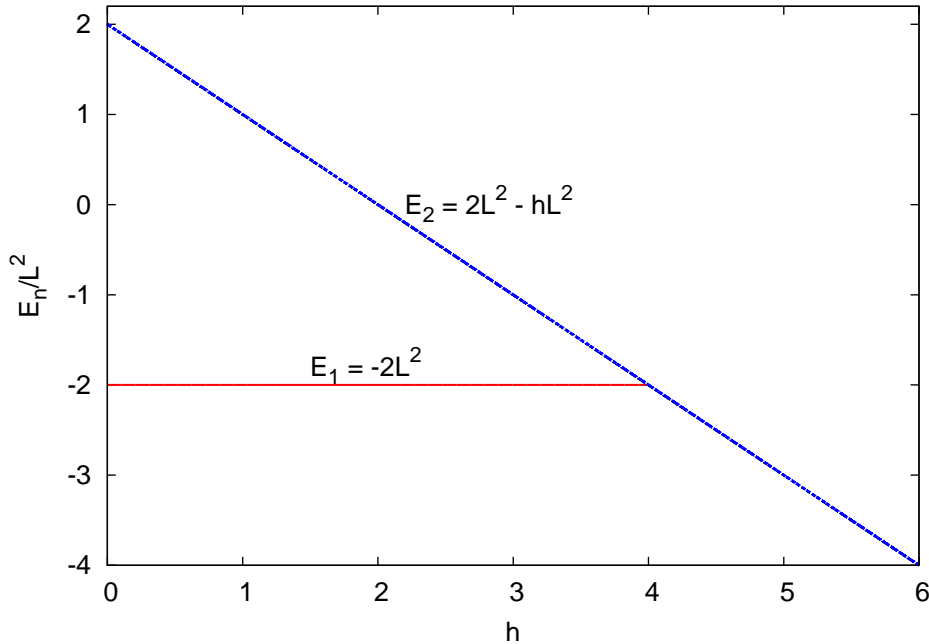


Figura 2.4: Energias das diferentes configurações  $\mathcal{C}_1$  e  $\mathcal{C}_2$  em função de  $h$  para  $T = 0$ .

## 2.4 Trabalhos correlatos – Ising AF na rede quadrada

Nessa seção destacamos alguns trabalhos relacionados ao estudo do modelo de Ising antiferromagnético na rede quadrada com interação de primeiros vizinhos.

Em 1971 Rapaport & Domb [41] estudaram o modelo de Ising AF nas redes quadrada e cúbica simples, usando o método de expansão a altas temperaturas para investigar o comportamento da susceptibilidade alternada e o calor específico. Além disso deduzem a relação funcional de  $T_c(H)$  para pequenos valores de campo,  $H$ :

$$T_c(H) = T_c(1 - 0.037(m/J)^2 H^2) + \mathcal{O}(H^4), \quad (2.21)$$

onde  $m$  e  $J$  são o momento magnético de spin e constante de interação de troca, respec-

tivamente e  $T_c$  é a temperatura crítica à campo nulo, dada por

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} J/k_B \approx 2,269 J/k_B. \quad (2.22)$$

Müller-Hartmann & Zittartz (MHZ) [15], em 1977, usaram o “método de interface” para estimar a curva crítica do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo, Eq. 5.1; essa equação reproduz todos resultados conhecidos nos limites  $H \rightarrow 0$  e  $T \rightarrow 0$ . Alguns trabalhos obtiveram resultados com boa concordância com as estimativas de MHZ, como Sneddon [42], que utilizaram um método de escala fenomenológica, e Binder & Landau [43] (1980), que foram os únicos autores a estudarem o modelo de Ising AF via simulações.

Devido a importante concordância com os resultados de MHZ ao descreverem a linha crítica, Binder & Landau [43] até levantaram a hipótese de que a expressão de MHZ (Eq. 5.1) seria uma solução exata do modelo de Ising AF na rede quadrada. Entretanto, trabalhos como de Kinzel [44] e Kauffman [45], por exemplo, apresentam resultados discrepantes em relação a MHZ; Baxter *et al.* [46] e Wu & Wu [16] rechaçam a hipótese de que o resultado de MHZ é a solução exata do modelo.

Outros estudos aproximativos da linha crítica foram realizados Blöte & Wu [17] (via matriz de transferência), Wang & Kim [18] (os quais abordaram o modelo via zeros da função partição) e Monroe [19] (cuja análise envolve um parâmetro livre  $\omega$  através de expansões em séries).

## 2.5 Permutation flow shop scheduling

*Shop scheduling* consiste de uma classe de problemas que envolvem  $n$  tarefas a serem realizadas em  $m$  etapas, as quais possuem tempos de execução específicos conhecidos previamente [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]. Sendo  $C_{ij}$  o tempo de execução do job  $j$  na máquina  $i$ , então  $C_j = \sum_i C_{ij}$  é o tempo total de execução do job  $j$  no sistema. O objetivo dessa classe de problemas é sempre *minimizar* uma função associada ao tempo total de execução.

Um exemplo de função objetivo é o *makespan* ( $C_{max}$ ), ou custo, definido como  $\max(C_1, \dots, C_n)$ ; equivale ao tempo que o último job leva para sair do sistema. Um mínimo makespan implica numa utilização eficiente das máquinas, por exemplo, numa rede de computadores

que executa uma série de processos.

O *permutation flow shop* é um problema que envolve  $n$  jobs ( $j = 1, \dots, n$ ) a serem executados em  $m$  ( $i = 1, \dots, m$ ) máquinas em série (denotado por  $n \times m$ ), obedecendo as seguintes regras ou vínculos:

- Cada job consiste de  $m$  operações. A  $k$ -ésima operação de cada job tem que ser processada na  $k$ -ésima máquina.
- Cada operação  $k$  de um job  $j$  possui um tempo específico de execução/processamento na máquina  $i$ ,  $p_{ij}$ ; na literatura, em geral  $p_{ij}$  é um número inteiro uniformemente distribuído no conjunto  $\{0, 1, 2, \dots, 100\}$ .
- Todos os jobs têm que ser processados em cada uma das máquinas seguindo sempre a mesma ordem; ao terminar de ser executado em uma máquina, o job entra na fila da máquina seguinte, ou seja, o primeiro processo que entra é também o primeiro processo que sai da máquina.
- Um job  $j$  só pode ser executado na máquina  $i$  se sua operação foi finalizada na máquina  $i - 1$ .

Consideremos um exemplo de um sistema contendo 5 jobs em 4 máquinas ( $5 \times 4$ ) com os tempos de processamentos apresentados na Tabela 2.1. Como podemos ver, o job  $j_1$  possui tempos de execução  $p_{1,j_1} = 5$  na máquina 1,  $p_{2,j_1} = 4$  na máquina 2,  $p_{3,j_1} = 4$  na máquina 3, e  $p_{4,j_1} = 3$  na máquina 4; e assim por diante.

Tabela 2.1: Tempo de processamento de 5 jobs em 4 máquinas.

<i>jobs</i>	$j_1$	$j_2$	$j_3$	$j_4$	$j_5$
$p_{1,j_k}$	5	5	3	6	3
$p_{2,j_k}$	4	4	2	4	4
$p_{3,j_k}$	4	4	3	4	1
$p_{4,j_k}$	3	6	3	2	5

Se os jobs são processados na ordem  $j_k$ , com  $k = 1, 2, 3, 4, 5$ , então o tempo total de execução dos processos (makespan) é de 34, como podemos verificar pelo diagrama de Gantt na Figura 2.5. É notável que o valor de makespan muda ao trocar a ordem de entrada dos jobs nas máquinas. Portanto seria conveniente procurar qual(is) das  $5! = 120$  permutações fornece(m) menor valor de makespan.



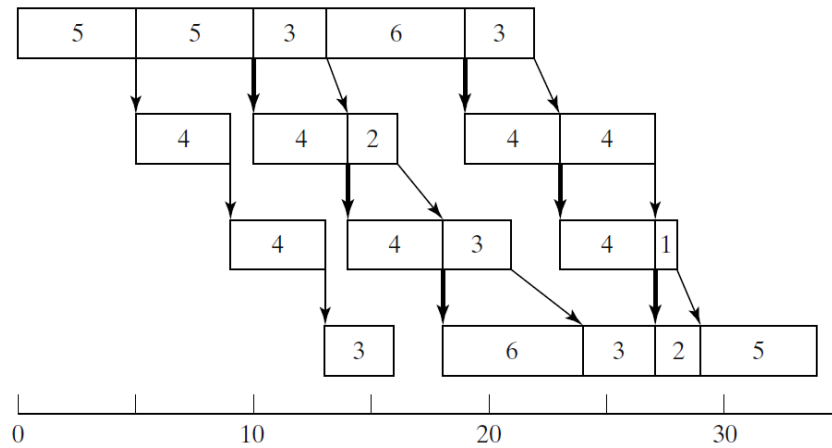


Figura 2.5: Diagrama de Gantt para um flow shop de  $j = 5$  jobs em  $m = 5$  máquinas. Cada barra horizontal representa um job e seu respectivo tempo de execução nas máquinas, as quais são ordenadas nas colunas verticais de cima para baixo. A última linha horizontal escalada de 5 em 5 representa o tempo de execução. Fonte: Pinedo [24].

Esse é um sistema relativamente pequeno, e não seria difícil enumerar todas as permutações e seus respectivos valores de makespan. Para sistemas grandes, porém, é impraticável realizar essa busca através da enumeração de todas as permutações. Um sistema contendo 20 jobs, por exemplo, possui na ordem de  $10^{18}$  permutações! Portanto é necessário um bom algoritmo de busca, que tenha condições de percorrer uma porção do espaço de configurações/permutações.

Estudos sistemáticos de *shop scheduling* começaram a ser realizados a partir da década de 1950, e desde então vários métodos heurísticos de busca vêm sendo propostos [24, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32] com o intuito de encontrar soluções de permutações que forneçam mínimo makespan, comumente chamados de “soluções mínimas ou ótimas”.

Entretanto, uma das dificuldades para realizar esse tipo de busca de mínimos é que os métodos em geral se limitam a fazer buscas restritas em certas regiões, o que fornece apenas mínimos *locais*. Ao encontrar um mínimo local, porém, não é garantido que esse seja o mínimo *global*. E mesmo tentando manter buscas após encontrar um mínimo local, pode ser que a busca não saia desse “poço” de mínimo local para verificar outros possíveis mínimos locais em regiões próximas. Além disso não se sabe a princípio quantos mínimos locais existem.

Taillard propôs, como exemplos para testar algoritmos de otimização, um grande conjunto de instâncias [47, 48] nas quais os tempos são distribuídos de maneira uniforme e aleatória no conjunto  $[0, 100]$ . Essas instâncias passaram a ser bastante utilizadas como referências pela grande maioria da comunidade científica de otimização em testes de novos

algoritmos e métodos de buscas.

Dois problemas comumente estudados na física estatística, que são semelhantes ao problema de otimização do *permutation flow shop scheduling*, são a busca do estado fundamental de um vidro de spin [49], no qual as interações de troca,  $J_{ij}$  (ver Eq. 2.13), entre os spins possuem sinais aleatórios; e o problema do caixeiro viajante [50], no qual o objetivo é encontrar o menor caminho entre as cidades que o caixeiro tem que percorrer, retornando à cidade de origem.

# Capítulo 3

## Termodinâmica, transições de fase e métodos de Monte Carlo

### 3.1 Médias Termodinâmicas

Lançando-se mão da mecânica estatística de equilíbrio [8], à temperatura  $T$ , a função partição canônica de um sistema é

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}, \quad (3.1)$$

onde  $\{\sigma\}$  representa a soma sobre todos os estados possíveis do sistema, e usamos a definição

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \quad (3.2)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. A probabilidade,  $P_c(\sigma)$ , do sistema se encontrar no estado  $\sigma$  é

$$P_c(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}. \quad (3.3)$$

Daí, a média canônica de um observável  $A$  é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} A(\sigma) e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}. \quad (3.4)$$

Uma vez que a conexão entre o ensemble canônico e a termodinâmica se dá por

$$F(T) = -k_B T \ln(Z), \quad (3.5)$$

onde  $F$  é a energia livre de Helmholtz, é possível mostrar que o calor específico por spin à campo constante,  $c_h$ , está associado à flutuação térmica da energia,  $E$ , da seguinte forma:

$$c_h = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_h = \frac{1}{N k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (3.6)$$

Analogamente, a susceptibilidade magnética à temperatura constante,  $\chi_T$ , está associada à flutuação na magnetização por

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \frac{1}{N k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (3.7)$$

## 3.2 Transições de Fase e Criticalidade

Desde o final do século XIX as transições de fase e fenômenos críticos vêm sendo objetos de estudos de uma grande variedade de sistemas, os quais vão desde fluidos simples, passando por sistemas magnéticos, até superfluidos. Várias grandezas termodinâmicas apresentam singularidades, tendo um comportamento peculiar nas proximidades do ponto crítico. Porém, foi somente a partir de aproximadamente da segunda metade do século XX que foram desenvolvidos modelos e teorias que possibilitaram um melhor entendimento do comportamento de sistemas durante as transições de fase, como a teoria de escala e o grupo de renormalização [8].

Nas proximidades do ponto crítico várias quantidades termodinâmicas obedecem leis de potência, cujos expoentes (críticos) dependem de poucos fatores associados ao sistema. Tais fatores são a dimensionalidade do sistema, o alcance das interações microscópicas (curto ou longo alcance) e do grupo de simetria do parâmetro de ordem. Em sistemas

magnéticos observa-se que nas proximidades da região crítica [8, 37]

$$c_H(T, 0) \sim |T - T_c|^{-\alpha}, \quad (3.8)$$

$$\chi_T(T, 0) \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (3.9)$$

$$|m(T, 0)| \sim (T_c - T)^\beta, \quad (3.10)$$

$$|m(T_c, H)| \sim |H|^{1/\delta}, \quad (3.11)$$

onde  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$  e  $\delta$  são os expoentes críticos.

Suponhamos que a energia livre de Gibbs molar de um sistema magnético seja

$$g = g(T, H),$$

tal que

$$dg = -s dT - m dH, \quad (3.12)$$

onde  $s$  e  $m$  são a entropia e magnetização por spin, respectivamente. Daí temos

$$s(T, H) = - \left( \frac{\partial g}{\partial T} \right)_H, \quad (3.13)$$

$$m(T, H) = - \left( \frac{\partial g}{\partial H} \right)_T. \quad (3.14)$$

Como

$$\frac{c_H(T, H)}{T} = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_H, \quad (3.15)$$

$$\chi_T(T, H) = \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right)_T, \quad (3.16)$$

então

$$\frac{c_H(T, H)}{T} = - \left( \frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H, \quad (3.17)$$

$$\chi(T, H) = - \left( \frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T. \quad (3.18)$$

Tendo em vista a teoria de escala de Widom ou hipótese de escala estática [37, 51] é

conveniente reescalar as variáveis  $T$  e  $H$  em relação ao ponto crítico  $(T_c, H_c)$ , definindo

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (3.19)$$

$$h \equiv H - H_c, \quad (3.20)$$

onde  $t$  é a temperatura reduzida e  $h$  o campo magnético relativo à  $H_c$ . Dessa maneira as equações (3.14), (3.17) e (3.18) podem ser reescritas com as substituições  $T \rightarrow t$  e  $H \rightarrow h$ :

$$m(t, h) = - \left( \frac{\partial g(t, h)}{\partial h} \right)_t, \quad (3.21)$$

$$c_h(t, h) = -t \left( \frac{\partial^2 g(t, h)}{\partial t^2} \right)_h, \quad (3.22)$$

$$\chi(t, h) = - \left( \frac{\partial^2 g(t, h)}{\partial h^2} \right)_t. \quad (3.23)$$

A teoria de escala de Widom assume que a parte singular de  $g(t, h)$ ,  $g_s(t, h)$ , próxima do ponto crítico é uma função homogênea generalizada, ou seja,

$$g_s(t, h) = \lambda^{-a} g_s(\lambda t, \lambda^b h), \quad (3.24)$$

onde  $\lambda$  ( $\lambda > 0$ ),  $a$  e  $b$  são constantes.

Substituindo a equação (3.24) nas equações (3.21), (3.22) e (3.23) e em seguida avaliando para ( $h = 0$ ,  $\lambda = |t|^{-1}$ ) e também para ( $t = 0$ ,  $\lambda = |h|^{-1/b}$ ), obtemos as seguintes relações entre os expoentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $a$  e  $b$ :

$$\alpha = -a + 2 \quad (3.25)$$

$$\gamma = -a + 2b \quad (3.26)$$

$$\beta = a - b \quad (3.27)$$

$$\delta = \frac{b}{a - b}. \quad (3.28)$$

Daí obtemos a relação de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (3.29)$$

a relação de Griffiths

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (3.30)$$

e também a relação de Widom

$$\gamma = \beta(\delta - 1). \quad (3.31)$$

### 3.3 Método de Monte Carlo

Ao longo dos últimos anos vários artigos e livros envolvendo o método de Monte Carlo vêm sendo publicados em diversas áreas do conhecimento. Especialmente na área da física existem várias aplicações que vão desde cadeias de polímeros à sistemas magnéticos [3, 4, 52, 53, 54]. Do ponto de vista da física estatística de equilíbrio, o método de Monte Carlo consiste em uma classe de algoritmos que geram, através de sorteios, uma grande coleção de estados, que irão representar o sistema como um todo.

Tendo em vista um sistema termodinâmico, por exemplo, o método de Monte Carlo consiste em gerar um grande número,  $n$ , de estados  $\{\sigma = \sigma_1, \dots, \sigma_n\}$  para então calcular a média canônica do observável  $A$  (equação (3.4))

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\sigma=\sigma_1}^{\sigma_n} A e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}}{\sum_{\sigma=\sigma_1}^{\sigma_n} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma\})}}, \quad (3.32)$$

onde a soma se estende somente sobre os  $n$  estados gerados. Entretanto, vê-se que é necessário um bom método para gerar tal conjunto de  $n$  estados, uma vez que para alguns estados o fator exponencial pode fornecer uma contribuição sem importância significativa ao somatório no cálculo da média.

#### 3.3.1 Algoritmo de Metropolis

Um dos algoritmos mais conhecidos e antigos, capaz de gerar estados que contribuam de maneira significativa ao cálculo da média, é o algoritmo de Metropolis [9]. Ele consiste na realização de um processo estocástico no espaço de configurações, partindo de uma configuração inicial aleatória ou não, usando uma probabilidade de transição de um estado para outro que depende da diferença de energia entre tais estados. Esse algoritmo pode ser resumido como se segue:

1. A uma determinada temperatura fixa,  $T$ , escolha aleatoriamente um estado inicial

- $\sigma'$ , com energia  $E' = E(\sigma')$ ;
2. Sorteie um estado  $\sigma''$ , com energia  $E'' = E(\sigma'')$  [de maneira apropriada ao modelo em questão (para o modelo de Ising, por exemplo, podemos sortear um sítio da rede e inverter o spin)];
  3. Calcule  $\delta E = E'' - E'$ ;
  4. Se  $\delta E \leq 0$ , o novo estado é aceito ( $\sigma' \rightarrow \sigma''$ ): vá para o passo (6);
  5. Se  $\delta E > 0$ , sorteie um número aleatório  $r$  com distribuição uniforme no intervalo  $[0, 1]$  e verifique
    - se  $r \leq w \equiv e^{-\beta\delta E}$  aceita-se a transição ( $\sigma' \rightarrow \sigma''$ ): vá para o passo (6);
    - se  $r > w$  rejeita-se a transição: vá para o passo (2);
  6. Repita os passos (2) a (5);
  7. A cada  $N$  iterações do passo (2), independentemente do número de novas configurações aceitas ou não, calcule as médias termodinâmicas das quantidades de interesse.

Podemos ver que o algoritmo de Metropolis se baseia no fato de que a probabilidade de transição do estado  $\sigma'$  para o  $\sigma''$  é proporcional a

$$w(\sigma' \rightarrow \sigma'') \equiv T(\sigma'', \sigma') = \min(1, e^{-\beta\delta E}). \quad (3.33)$$

Esse processo estocástico realizado no espaço de configurações possui a seguinte distribuição estacionária de probabilidades dos estados:

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma)}, \quad (3.34)$$

onde  $Z$  é a função partição. O princípio do balanço detalhado (BD)[55]

$$T(\sigma'', \sigma')P(\sigma') = T(\sigma', \sigma'')P(\sigma''), \quad (3.35)$$

garante que a distribuição de probabilidades dada pela equação (3.34) corresponde à distribuição estacionária. Para verificarmos que a probabilidade de transição, dada pela



equação (3.33), satisfaz o princípio do BD consideremos os estados  $\sigma'$  e  $\sigma''$  tais que  $E(\sigma'') > E(\sigma')$ . Assim, pelas equações (3.33) e (3.34), temos que

$$T(\sigma'', \sigma') = \frac{1}{N} e^{-\beta[E(\sigma'') - E(\sigma')]},$$

$$P(\sigma') = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma')},$$

$$T(\sigma', \sigma'') = \frac{1}{N},$$

e

$$P(\sigma'') = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma'')},$$

onde  $N$  é o número de sítios do sistema. Levando as duas primeiras equações no lado esquerdo da equação (3.35) e tendo em vista as duas últimas, vemos que o princípio do BD é satisfeito.

### 3.3.2 Algoritmo de Wang-Landau

Claramente uma grande desvantagem na aplicação do algoritmo de Metropolis na análise de transições de fase, por exemplo, é o fato de ser necessário realizar uma simulação para cada valor de temperatura. Assim, teriam que ser realizadas várias simulações com pequenos incrementos em  $T$  para analisar o comportamento de algumas variáveis termodinâmicas de interesse nas proximidades de  $T_c$ , o que consumiria um grande tempo computacional.

Seria, então, conveniente a utilização de um algoritmo que determinasse o número de estados com energia  $E$ ,  $\Omega(E)$ , uma vez que

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E} \quad (3.36)$$

e

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E \langle A \rangle_E \Omega(E) e^{-\beta E}, \quad (3.37)$$

onde  $\langle A \rangle_E$  é a média microcanônica de  $A$  para cada valor de  $E$  e as somas são realizadas sobre todos os valores possíveis da energia.

Dentre os algoritmos que fazem o cálculo de  $\Omega(E)$ , o de Wang-Landau [12, 13] é um

dos mais explorados nos últimos anos. O algoritmo de Wang-Landau consiste num passeio aleatório no espaço de energia do sistema, o que proporciona o cálculo de  $\Omega(E)$ . Os valores de  $\Omega(E)$  são desconhecidos inicialmente, de modo que define-se  $\Omega(E) \equiv 1 \forall E$  no início da simulação.

Como esse tipo de algoritmo visa realizar uma amostragem uniforme no espaço de energias  $E$ , tal que o número esperado de visitas é o mesmo para cada energia  $E$ , então utiliza-se a seguinte distribuição de probabilidades:

$$P(\sigma) \propto \frac{1}{\Omega[E(\sigma)]}. \quad (3.38)$$

Assim a probabilidade de transição de um estado inicial  $\sigma'$ , com energia  $E'$  e  $\Omega(E')$ , para um  $\sigma''$ , escolhido aleatoriamente, com energia  $E''$  e  $\Omega(E'')$  é

$$w(\sigma' \rightarrow \sigma'') = \min \left( 1, \frac{\Omega(E')}{\Omega(E'')} \right). \quad (3.39)$$

Cada vez que um estado é visitado o valor de  $\Omega(E)$  é atualizado através de um fator modificador  $f > 1$ , de modo que  $\Omega(E) \rightarrow \Omega(E) f$ ; o valor inicial usual é  $f_0 = e^1$ . Esse passeio aleatório é feito até que o histograma  $H(E)$  esteja “plano” (na prática é impossível que o histograma seja exatamente plano, então, usualmente, o histograma é dito plano quando  $H(E)/\langle H(E) \rangle \geq 80\% \forall E$ ). Assim que isso ocorre, o fator modificador,  $f$ , é reescalado de modo que na  $t$ -ésima iteração  $f \equiv f_{t+1} = \sqrt{f_t}$  e o histograma é novamente inicializado,  $H(E) = 0$ . A simulação só é encerrada quando  $f < f_{final}$  (por exemplo,  $f_{final} \equiv 1 + 10^{-8}$ ).

### 3.3.3 Algoritmo $1/t$

Embora o algoritmo de Wang-Landau venha sendo amplamente usado, ele apresenta um importante problema: saturação do erro entre a densidade de estado estimada  $\Omega$  e seu valor exato para um grande número de iterações. Essa falha foi primeiramente reportada por Yan e de Pablo [56] em 2003.

Tendo isso em vista, Belardinelli e colaboradores [34, 35, 36] propuseram em 2007 uma modificação simples e importante no algoritmo de Wang-Landau, de modo que o fator de refinamento fosse reescalado como  $1/t$  (onde  $t$  é o número da iteração). Com isso evita-se o problema de saturação para simulações com muitas iterações. Portanto o

algoritmo  $1/t$  segue os mesmos passos que o algoritmo de Wang-Landau, exceto pelo fator de refinamento,  $f$ , que é reescalado como  $f = 1/t$ .

### 3.3.4 Amostragem entrópica tomográfica

É importante ressaltar também que além do problema de convergência do algoritmo de Wang-Landau, como mencionado acima, ele apresenta limitações no que diz respeito ao uso em simulações de sistemas grandes, e usualmente se faz necessário uma subdivisão do espaço de configurações através de “janelas”, o que gera algumas distorções em  $\Omega$  [57, 58, 33].

O algoritmo de amostragem entrópica tomográfica (TES – *tomographic entropic sampling*) foi proposto e utilizado por Dickman & Cunha-Neto [33] em 2011 no estudo do comportamento crítico do modelo de Ising em duas e três dimensões, fornecendo bons resultados para os expoentes críticos. Uma das grandes vantagens do TES é a realização da amostragem entrópica fazendo passeios aleatórios por *todo* espaço de configurações, sem a necessidade de utilizar janelas, de modo a obter uma estimativa suave de  $\Omega$ .

O modelo de Ising AF em uma rede quadrada na presença de um campo externo foi estudado por Lourenço & Dickman [59, 60] utilizando o TES, tendo em vista uma análise do diagrama de fase no plano *campo externo – temperatura*, uma vez que esse problema não tem solução exata.

O algoritmo TES é descrito como se segue. Considere um sistema de tamanho  $L$  representado por um modelo estatístico, com espaço de configurações discreto, cujo número exato (desconhecido) de configurações pertencentes a uma classe de configurações,  $\Gamma$ , é  $\tilde{\Omega}(\Gamma)$ . A distribuição de probabilidades utilizada para gerar as configurações é dada por

$$P(\mathcal{C}) \propto \frac{1}{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C})]}, \quad (3.40)$$

onde  $\Gamma(\mathcal{C})$  é uma classe de configuração (CC) que contém a configuração  $\mathcal{C}$ . A probabilidade de aceitar de uma nova configuração,  $\mathcal{C}'$ , é então

$$p(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \min \left( \frac{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C})]}{\tilde{\Omega}[\Gamma(\mathcal{C}')]}, 1 \right). \quad (3.41)$$

Uma simulação que segue a distribuição de probabilidades acima deve fornecer um

histograma,  $H(\Gamma)$ , constante para todas as classes de configurações. Então, se usamos uma estimativa inicial  $\Omega_0(\Gamma)$  para a distribuição de probabilidades, e simulamos por um tempo longo suficiente, podemos atualizar nossa estimativa de tal modo que

$$\Omega_1(\Gamma) = \frac{H_1(\Gamma)}{\bar{H}_1(\Gamma)} \Omega_0(\Gamma), \quad (3.42)$$

onde  $\Omega_1(\Gamma)$  é a nova estimativa obtida ao final dessa primeira simulação;  $H_1(\Gamma)$  é o número de vezes em que  $\Gamma$  foi gerada durante a simulação e  $\bar{H}_1(\Gamma)$  é a média de  $H_1(\Gamma)$  sobre todos as CCs acessíveis ao sistema.

Iteramos então o procedimento acima  $N$  vezes de modo a obtermos um histograma “plano” e conseqüentemente uma boa aproximação de  $\Omega$  em relação ao valor exato. Cada uma das  $N$  iterações possuem  $N_{sim}$  simulações que iniciam com configurações iniciais em distintas regiões do espaço de configurações. Dessa forma aumenta-se a possibilidade de a simulação abranger todo o espaço de configurações.

A seguir apresentamos um exemplo de pseudo-código da implementação do algoritmo TES para o modelo de Ising AF, onde definimos as classes de configurações como  $\Gamma = (n, m)$ :

- (1) Estime  $\Omega_0(n, m)$ ;
- (2) Faça  $H(n, m) = 0$ ;
- (3) Repita  $N_{sim} = 10$  vezes:
  - Escolha uma configuração inicial;
  - Repita  $N_U = 10^7$  vezes:
    - \* Repita  $L^2$  vezes:
      - Inverta aleatoriamente um spin;
      - aceite a nova configuração  $C'$  com probabilidade:

$$p(C \rightarrow C') = \min \left( \frac{\Omega_i(n, m)}{\Omega_i(n', m')}, 1 \right); \quad (3.43)$$

- $H(n', m') = H(n, m) + 1$ ;
- acumule  $\phi(n, m)$ ,  $|\phi|$ ,  $\phi^2$  e  $\phi^4$ ;

- (4) Normalize o histograma e atualize  $\Omega_i(n', m')$ ;
- (5) Calcule as médias microcanônicas;
- (6) Volte ao passo (2) por  $N = 15$  vezes.

# Capítulo 4

## Metodologia

Nesse capítulo vamos descrever como o algoritmo de amostragem entrópica tomográfica (TES) foi modificado tendo em vista uma melhor convergência da estimativa de  $\Omega$  com base na idéia do algoritmo  $1/t$  [34, 35, 36]; detalhamos as implementações aplicadas ao modelo de Ising AF e ao *flow shop scheduling*. Apresentamos os parâmetros utilizados nas simulações do modelo de Ising AF, bem como os métodos utilizados para obtenção da linha crítica e do comportamento crítico.

### 4.1 Amostragem Entrópica Tomográfica “ $t^{-\alpha}$ ”

Devido aos altíssimos valores que  $\Omega$  assume eles são convenientemente representados através de seu logaritmo natural durante as simulações. Nessa abordagem, em vez de atualizarmos a estimativa de  $\Omega$  através da abordagem tradicional [equação (3.42)], usaremos a seguinte equação recursiva para atualizar  $\Omega$  após a  $t$ -ésima iteração:

$$\ln[\Omega_{t+1}(\Gamma)] = \frac{1}{t^\alpha} \ln[H_t(\Gamma)] + \ln[\Omega_t(\Gamma)] \quad (4.1)$$

onde  $\Gamma$  designa as classes de configurações do sistema,  $\alpha$  é um parâmetro (número real) fixo durante as simulações,  $\Omega_t(\Gamma)$  é a estimativa do número de configurações pertencentes à classe  $\Gamma$  ao final da  $t$ -ésima iteração, e  $H_t(\Gamma)$  é o histograma normalizado para cada  $\Gamma$  ao final da  $t$ -ésima iteração.

Nos estudos realizados a seguir usamos os seguintes valores:  $\alpha = 0, 1/2, 1$  e  $2$ , com o objetivo de verificar para qual valor de  $\alpha$  a convergência ocorrerá mais rapidamente, quando for o caso.

### 4.1.1 Implementação: modelo de Ising AF

Estudamos o modelo de Ising AF com interação de primeiros vizinhos, em uma rede quadrada na presença de um campo magnético externo. Definimos uma rede de dimensões  $L \times L$  com condições periódicas de fronteira. As classes de configurações (CCs) desse sistema são definidas no espaço bidimensional  $(n, m)$ , onde  $n$  é o número de pares de primeiros vizinhos com spins tendo a mesma orientação [ $n$  está relacionado à energia de interação entre os spins por  $E = -2(L^2 - n)$ ] e  $m$  é a magnetização do sistema. Na rede quadrada os valores permitidos de  $n$  são  $n = 0, 4, 6, \dots, n_{max} - 4, n_{max}$ , onde  $n_{max} = 2L^2$ ; e os valores permitidos de  $m$  são  $m = -L^2, -L^2 + 2, \dots, L^2 - 2, L^2$ . Na Figura 4.1 temos o espaço de CCs para  $L = 10$ .

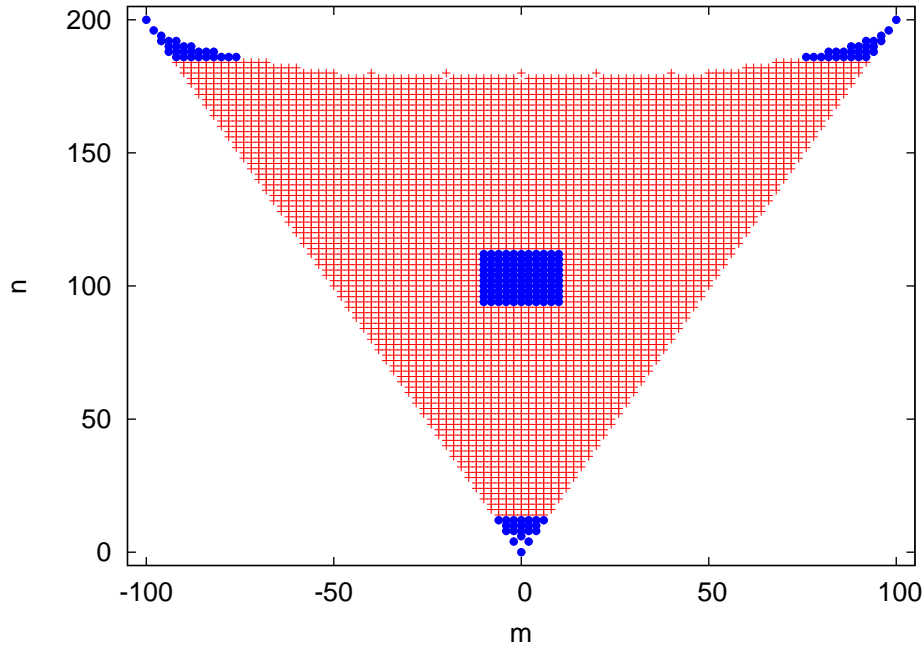


Figura 4.1: Espaço de classes de configurações de uma rede quadrada de tamanho  $L = 10$ .  $n$  e  $m$  são o número de pares de primeiros vizinhos com spins paralelos e a magnetização do sistema, respectivamente. Em azul estão as regiões em que selecionamos diferentes configurações iniciais para cada uma das  $N_{sim}$  simulações de cada iteração.

Chamamos atenção para as lacunas existente no espaço de configurações nas proximidades de  $n = n_{max}$  e  $m = 0$  (ver Figura 4.1). Tais lacunas são, de fato, CCs inexistentes; por exemplo, é impossível que o sistema esteja em uma configuração tal que  $n = 0$  e  $m \neq 0$ . Essas lacunas e a enumeração exata das CCs do modelo de Ising na rede quadrada foram estudadas em detalhe na dissertação de mestrado intitulada “Modelo de Ising antiferromagnético em um campo externo: simulação por amostragem entrópica” [59] e no artigo “*Systematic Enumeration of Configuration Classes for Entropic Sampling of Ising*”

*Models*”[60]. Com base nesse estudo de enumeração exata das CCs temos a garantia que nossas simulações amostraram *todo* espaço de configurações.

A dinâmica da simulação é de inversão simples de spin, bem como inversão de *cluster* com probabilidade de 5% <sup>1</sup>; tais *clusters* são definidos como se segue: escolhemos aleatoriamente um sítio que definirá a posição do vértice inferior esquerdo de um retângulo, cujas dimensões são escolhidas aleatoriamente no intervalo  $[1, L]$ . Na inversão simples de spin, as probabilidades de aceite de transição de uma configuração  $\Gamma \equiv (n, m)$  para outra  $\Gamma' \equiv (n' = n + \Delta n, m' = m + \Delta m)$  na  $t$ -ésima iteração, dada por

$$p_t(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \min \left[ \frac{\Omega_{t-1}(\Gamma)}{\Omega_{t-1}(\Gamma')}, 1 \right], \quad (4.2)$$

é armazenada em uma tabela; as possíveis variações de  $n$  são  $\Delta n = 0, \pm 2, \pm 4$  e de  $m$  são  $\Delta m = \pm 2$ . Para cada configuração gerada, seja uma nova ou a mesma (caso a nova seja rejeitada), atualizamos a soma das quantidades de interesse que serão utilizadas posteriormente para os cálculos das médias canônicas. Destacamos que para cada tamanho de sistema, utilizamos as estimativas de  $\Omega_0(n, m)$  baseadas nas técnicas de interpolação e extrapolação, em relação às respectivas redes menores, descritas por Lourenço & Dickman [60]; por exemplo, a estimativa inicial de  $\Omega$  para  $L = 12$ ,  $\Omega_0$ , é obtida a partir da estimativa final da  $N$ -ésima iteração de  $\Omega$  para  $L = 10$ ,  $\Omega_N$ .

Para esse sistema as quantidades de interesse estão associadas ao parâmetro de ordem,  $\phi$  ( $|\phi|$ ,  $\phi^2$  e  $\phi^4$ ), o qual é definido por

$$\phi \equiv m_A - m_B, \quad (4.3)$$

onde  $m_A$  e  $m_B$  são as magnetizações das subredes  $A$  e  $B$ , respectivamente (em alguns textos o parâmetro de ordem,  $\phi$ , é chamado de *staggered magnetization* ou magnetização alternada); as médias microcanônicas dessas grandezas são calculadas ao longo da simulação. Ao término de cada iteração  $t$  a estimativa de  $\Omega_t(n, m)$  é atualizada [de acordo com a equação (4.1)], o histograma  $H_t(n, m)$  é zerado e a tabela das probabilidades de aceite de transição também é atualizada utilizando essa nova estimativa de  $\Omega_t(n, m)$ .

Para estudar a convergência das simulações do modelo de Ising AF com campo externo

---

<sup>1</sup>Diferentes valores de probabilidade foram testados. Valores maiores que 5%, entretanto, não forneceram melhorias notáveis embora consumissem grande tempo computacional.



na rede quadrada usamos uma rede de tamanho  $L = 20$ , e para cada valor do parâmetro  $\alpha = 0, 1/2, 1$  e  $2$ , realizamos 30 ensaios independentes contendo 50 iterações, cada uma das quais consistem de 10 configurações iniciais em regiões distintas no espaço de configurações e um total de  $10^7$  atualizações de rede.

Ao identificarmos os valores de  $\alpha$  que otimizam a convergência da amostragem, aplicamos o TES- $1/t^\alpha$  em redes de tamanho  $L = 10$  a  $30$ , com  $\Delta L = 2$ , usando a técnica de enumeração de classes de configurações [60]. Para cada tamanho de sistema realizamos 30 simulações independentes, cada uma com 15 iterações, as quais incluem 10 configurações iniciais (de valores de energia alto, baixo e intermediário, e ambos sinais de magnetização); cada estudo consiste de  $10^7$  passos de Monte Carlo (um passo de Monte Carlo corresponde a  $L^2$  tentativas de mudança de configurações).

Para mapear a fronteira entre as fases antiferromagnética e paramagnética no plano campo externo – temperatura, determinamos um total de 31 pontos  $(T_c, h_c)$  usando análise de escala de tamanho finito [61]

$$T_c(c_{max}, h, L) = T_c(c_{max}, h) + \frac{a_1}{L} + \frac{a_2}{L^2} \quad (4.4)$$

e

$$T_c(\chi_\phi^{max}, h, L) = T_c(\chi_\phi^{max}, h) + \frac{b_1}{L} + \frac{b_2}{L^2}, \quad (4.5)$$

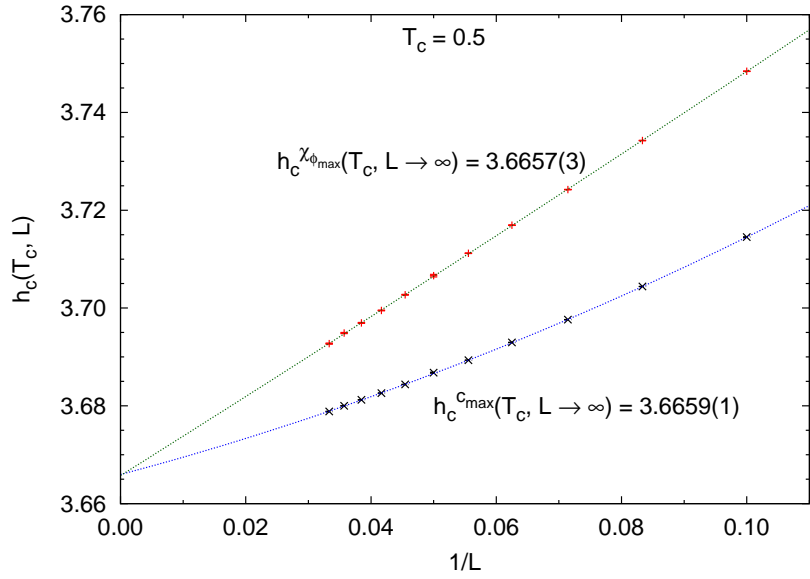
onde  $T_c(c_{max}, h, L)$  e  $T_c(\chi_\phi^{max}, h, L)$  são os valores da temperatura onde ocorrem os máximos (picos) de  $c$  e  $\chi_\phi$ , respectivamente, a um determinado valor de  $h_c$  para cada tamanho  $L$  dos sistemas simulados, ao passo que  $T_c(c_{max}, h)$  e  $T_c(\chi_\phi^{max}, h)$  são as estimativas das temperaturas críticas obtidas através dos máximos de  $c$  e  $\chi_\phi$ , respectivamente, para um valor de  $h$ . Essa análise está ilustrada na Figura 4.2a para  $T = 0.5$ .

Cinco pontos ao longo da linha crítica foram selecionados para um estudo detalhado de transição de fase, novamente usando análise de escala de tamanho finito através de um ajuste linear (ver Figura 4.2b), como por exemplo para  $\beta/\nu$ :

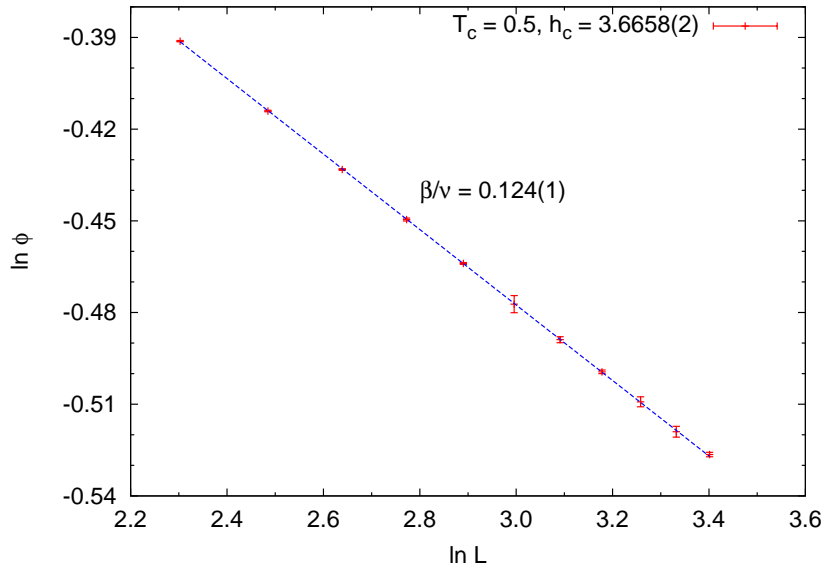
$$\ln\langle |\phi| \rangle = \frac{\beta}{\nu} \ln L + const. \quad (4.6)$$

Destacamos que através de uma análise de resíduos [62] verificamos não ser necessário realizar correções de maior ordem nas estimativas de  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ .

Além disso, tendo em vista refinar as estimativas dos pontos e expoentes críticos,



(a)



(b)

Figura 4.2: Análise de escala de tamanho finito dos dados obtidos via  $TES-1/t^\alpha$  com  $\alpha = 1$ , para  $T = 0.5$ . (a) Estimativa do campo externo crítico,  $h_c$ . Para cada tamanho de sistema, os pontos denotam o valor de  $h$  que maximiza a susceptibilidade antiferromagnética (curva superior) e o calor específico (curva inferior). As linhas tracejadas são ajustes quadráticos aos dados, levando à estimativa  $h_c = 3.6658(2)$  para essa temperatura. (b) Parâmetro de ordem em função do tamanho do sistema no ponto crítico. O ajuste linear (linha tracejada) fornece  $\beta/\nu = 0.124(1)$ .

realizamos simulações de Metropolis em torno desses cinco pontos críticos para tamanhos  $L = 20, 40, 80, 160$  e  $320$ , usando 20 ensaios independentes (exceto para  $L = 160$  e  $320$ , para os quais foram realizados 30 estudos independentes), de duração  $2 \times 10^7$  passos de Monte Carlo. Destacamos que lançamos mão de simulações de Metropolis para melhorar nossas estimativas dos pontos e expoentes críticos devido às limitações de tamanho que

encontramos ao realizar a simulação no espaço  $(n, m)$  via TES: não foi possível simular redes maiores que  $L = 30$ , devido ao fato que verificamos que em tais situações nem todo espaço de  $(n, m)$  era amostrado, conforme as análises detalhadas em [59].

#### 4.1.2 Implementação: flow shop scheduling

No estudo dos sistemas relacionados ao problema de *flow shop scheduling*  $n \times m$ , com  $n$  jobs em  $m$  máquinas, utilizamos as instâncias de Taillard (disponíveis em [48]) como *input* para os tempos de processamento dos jobs nas máquinas,  $p_{ij}$  (tempo de processamento do job  $j$  na máquina  $i$ ). Essas instâncias de Taillard [26, 47, 48] são conjuntos de tempos de processamento de cada job em cada máquina para cada tamanho de sistema; tais tempos de processamento foram obtidos por uma distribuição aleatória uniforme no intervalo  $[0, 100]$ , e são amplamente utilizadas pela comunidade que se dedica a esses problemas. Portanto, servem como uma das principais referências na comparação de resultados obtidos por diferentes métodos heurísticos.

Utilizamos uma estimativa inicial  $\Omega_0$  constante para todos os valores de makespan. Cada estudo envolve  $N$  iterações, que possuem 10 simulações iniciando em configurações iniciais aleatórias na primeira iteração; ao longo da primeira iteração, armazenamos uma configuração,  $\mathcal{C}$ , de cada classe de configuração (makespan),  $\Gamma$ , visitada de modo que nas seguintes iterações selecionamos 10 configurações iniciais dentre essas que foram armazenadas, em vez de serem aleatórias. Todas as modificações entre as configurações,  $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$ , se dão através de uma troca simples de posição entre dois jobs. A probabilidade de aceite de uma configuração  $\mathcal{C}$  com valor de makespan  $\Gamma$  para outra  $\mathcal{C}'$  com makespan  $\Gamma'$ , na  $t$ -ésima iteração, é dada por

$$p_t(\Gamma \rightarrow \Gamma') = \min \left[ \frac{\Omega_{t-1}(\Gamma)}{\Omega_{t-1}(\Gamma')}, 1 \right]. \quad (4.7)$$

As estimativas de  $\Omega$  para cada iteração são armazenadas para análises posteriores no que diz respeito à convergência das simulações.

Realizamos uma análise de convergência das estimativas de  $\Omega$  utilizando diferentes valores de  $\alpha$ : 0, 1/2, 1 e 2. Essa análise de convergência é feita inicialmente para um sistema pequeno ( $6 \times 5$ ), de modo que possamos realizar uma enumeração exata de  $\Omega$  a fim de compará-la com nossas estimativas ao longo de 50 iterações. Especialmente para

essas análises de convergência para sistemas pequenos, utilizamos apenas  $5 \times 10^3$  passos de Monte Carlo em cada iteração, justamente para que a convergência seja “lenta” ao longo das iterações.

Para sistemas maiores ( $20 \times 5$  e  $20 \times 10$ ), embora não seja possível fazer uma enumeração exata de  $\Omega$ , também realizamos uma análise de convergência das simulações. Entretanto, o parâmetro utilizado para convergência

$$\Delta_t = \sqrt{\sum_{\Gamma} \left( \frac{\Omega_{\Gamma,t} - \Omega_{\Gamma,t-1}}{\Omega_{\Gamma,t} + \Omega_{\Gamma,t-1}} \right)^2} \quad (4.8)$$

é apenas uma condição necessária, mas não suficiente para implicar a convergência de  $\Omega$ . Devido ao fato de esses sistemas serem grandes, utilizamos  $10^6$  passos de Monte Carlo em cada uma das 50 iterações.

# Capítulo 5

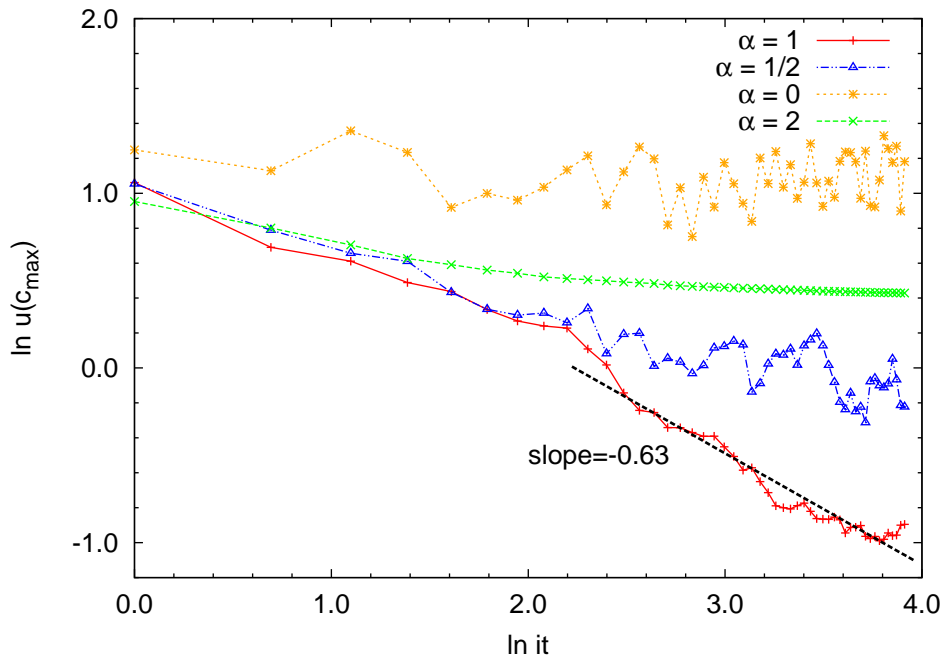
## Análise dos Resultados – Ising AF

Nesse capítulo apresentamos os resultados obtidos com a utilização do algoritmo de amostragem entrópica tomográfica “ $1/t^\alpha$ ”, analisando convergência dos resultados ao longo das iterações para  $\alpha = 0, 1/2, 1$  e  $2$ ; ver Eq. 4.1. Discutimos os resultados simulacionais obtidos via TES, o que possibilitou a obtenção e análise das superfícies do parâmetro de ordem e do calor específico no plano campo externo – temperatura e a obtenção da linha crítica. Comparamos nossos resultados dos pontos críticos com outros trabalhos teóricos, e numéricos, bem como realizamos simulações de Metropolis em torno de alguns pontos críticos tendo vista refinar nossas estimativas dos pontos e expoentes críticos, assim como do cumulante de Binder de quarta ordem, e estudamos como o calor específico nos pontos críticos escala com o tamanho da rede.

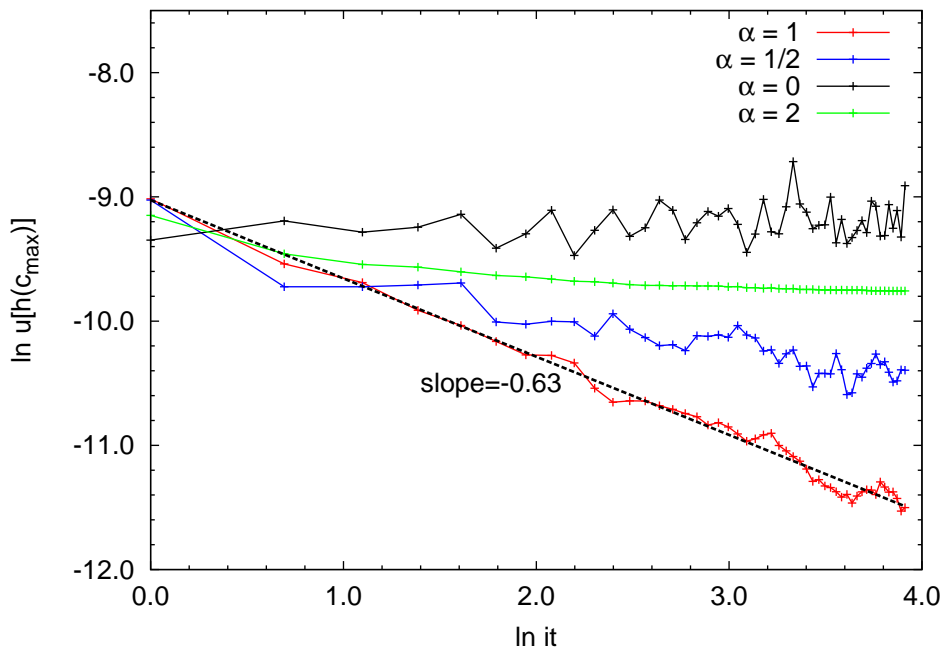
### 5.1 Análise de convergência via TES– $1/t^\alpha$

Para a temperatura fixa  $T = 0.2$ , mostramos os resultados comparativos entre  $\alpha = 0, 1/2, 1$  e  $2$  para as incertezas das estimativas do valor máximo do calor específico,  $c_{max}$ , e do valor do campo externo que maximiza  $c$ ,  $h(c_{max})$ , ao longo das iterações nas Figuras 5.1a e 5.1b, respectivamente.

Podemos observar que as incertezas de  $c_{max}$  e  $h(c_{max})$  saturam para  $\alpha = 0$  e  $2$ . Uma convergência mais rápida é observada para  $\alpha = 1$ , em relação a  $\alpha = 1/2$ . As retas tracejadas com inclinações aproximadas de  $-0.63$  foram obtidas através de uma regressões lineares para  $\alpha = 1$ , e dão uma idéia do quão rápida é a taxa de redução das respectivas incertezas. Vale ressaltar que o uso do fator  $\alpha = 1$ , em vez de  $\alpha = 0$ , fez com que houvesse



(a)



(b)

Figura 5.1: Incerteza de (a)  $c_{max}$  e (b)  $h(c_{max})$  para  $T = 0.2$  ao longo de 50 iterações do modelo de Ising AF para rede de tamanho  $L = 20$ .

uma redução da incerteza de uma ordem de magnitude ao final da 50ª iteração. Também realizamos análises similares em relação à susceptibilidade antiferromagnética (associada à magnetização alternada  $\phi$ ),  $\chi_\phi$ , porém as incertezas se mostraram independentes de  $\alpha$  até a 50ª iteração.

Tendo em vista complementar essa análise de convergência ao longo das iterações, apresentamos na Figura 5.2 os gráficos do calor específico,  $c$ , e susceptibilidade alternada,  $\chi_\phi$ , em função do campo externo a uma temperatura fixa na 50a iteração utilizando diferentes valores de  $\alpha$  para uma rede de tamanho  $L = 20$ . Chamamos atenção para os respectivos gráficos das incertezas de  $c$  e  $\chi_\phi$ : na Figura 5.2a podemos observar que a menor incerteza do calor específico sempre ocorre para  $\alpha = 1$ , seguida de  $\alpha = 1/2$ , 2 e 0; já na Figura 5.2b não conseguimos observar um comportamento da incerteza da susceptibilidade tão claro como no caso de  $c$ , tal que apenas notamos que a menor incerteza ocorre para  $\alpha = 1$  seguida de  $1/2$  na região do máximo de  $\chi_\phi$ , além de que as curvas de  $\chi_\phi$  não se sobrepõem tão bem como as de  $c$  para diferentes valores de  $\alpha$ . Esses comportamentos podem ser um indicativo de que os ruídos ao longo das simulações são, de fato, eliminados de maneira mais rápida para  $\alpha = 1$  e  $1/2$ , mas que talvez sejam necessárias mais iterações para observar um comportamento de convergência mais claro no que diz respeito a  $\chi_\phi$ .

Destacamos que essas análises de convergência para o modelo de Ising AF contribuíram para o trabalho publicado “*Intrinsic convergence properties of entropic sampling algorithms*” [63]. Nesse artigo a convergência da densidade de estados, em função da energia,  $g(E)$ , é estudada sistematicamente para os algoritmos de Wang-Landau [12, 13],  $1/t$  [34, 35] ( $t$  corresponde a passos de Monte Carlo) e TES [33]: a análise da convergência intrínseca desses métodos é realizada com base em um simples sistema de tamanho  $L$ , para o qual  $g(E) = 1$  para todo espectro de energia,  $E = 1, \dots, L$ . Observa-se que o desvio padrão de  $g, \sigma_g$ , satura para os algoritmos de Wang-Landau e TES para longos tempos, enquanto para o algoritmo  $1/t$  nota-se que  $\sigma_g \propto 1/t^{1/2}$ . Nas versões modificadas dos algoritmos TES e  $1/t$ , com refinamento  $1/t^\alpha$ , observa-se convergência para  $0 < \alpha \leq 1$ . A eliminação de erros iniciais em  $g(E)$  e correção do ruído acumulado durante a amostragem são fatores essenciais para a convergência nesses tipos de métodos de amostragem. Além disso, para um simples exemplo, é demonstrado analiticamente, usando uma equação de Langevin, que ambos tipos de erros podem ser eliminados, assintoticamente, se  $0 < \alpha \leq 1$ : a convergência é ótima para  $\alpha = 1$ ; para  $\alpha \leq 0$  o ruído nunca decai; enquanto para  $\alpha > 1$  o erro inicial nunca é eliminado completamente. Ressalta-se que a convergência corresponde a  $g(E, t) \rightarrow \text{const.}$  quando  $t \rightarrow \infty$ , de modo que  $\sigma_g$  é uma medida do erro global da amostragem.

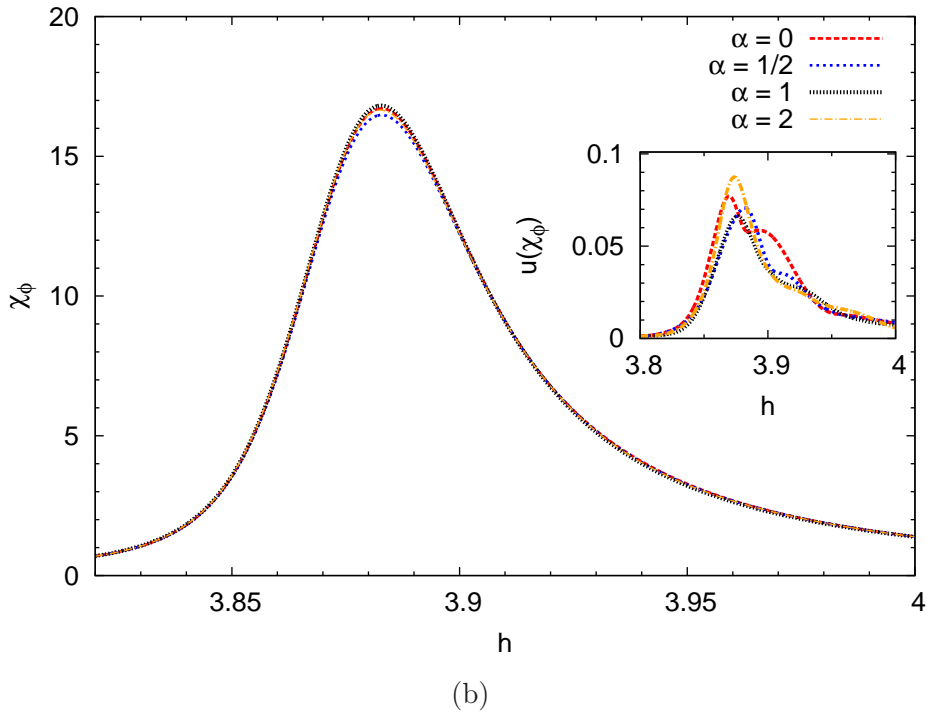
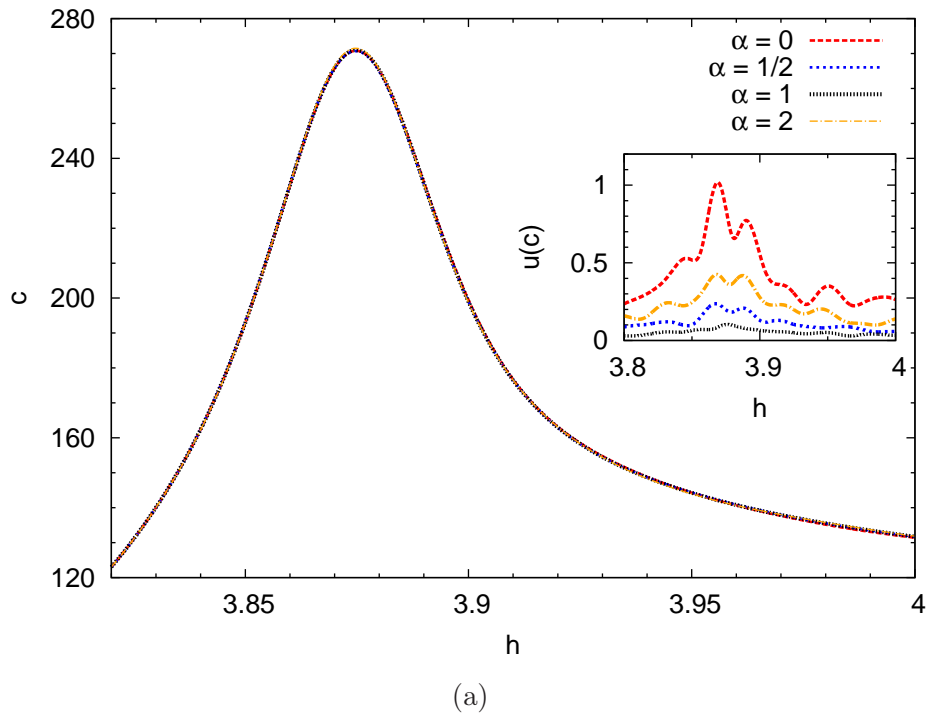


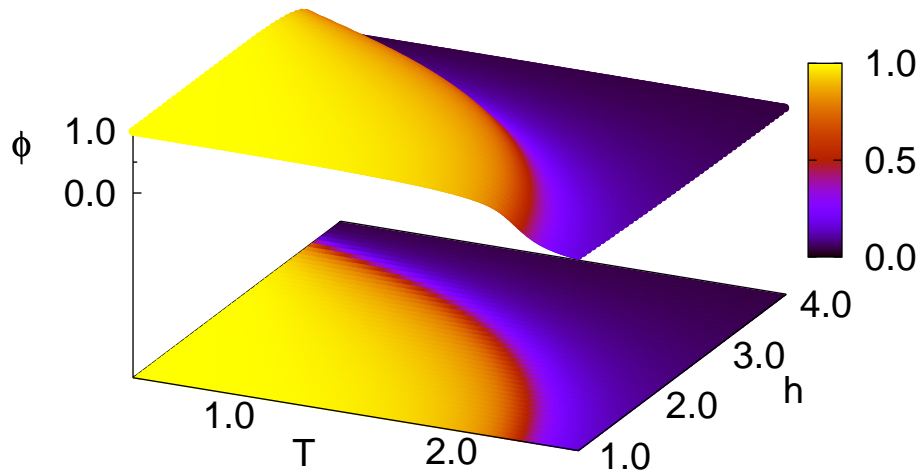
Figura 5.2: (a) Calor específico,  $c$ , e (b) susceptibilidade alternada,  $\chi_\phi$ , em função do campo externo,  $h$ , para  $T = 0.2$  na 50a iteração utilizando diferentes valores de  $\alpha$  para o modelo de Ising AF na rede quadrada de tamanho  $L = 20$ .

## 5.2 Amostragem entrópica tomográfica – $1/t^\alpha$

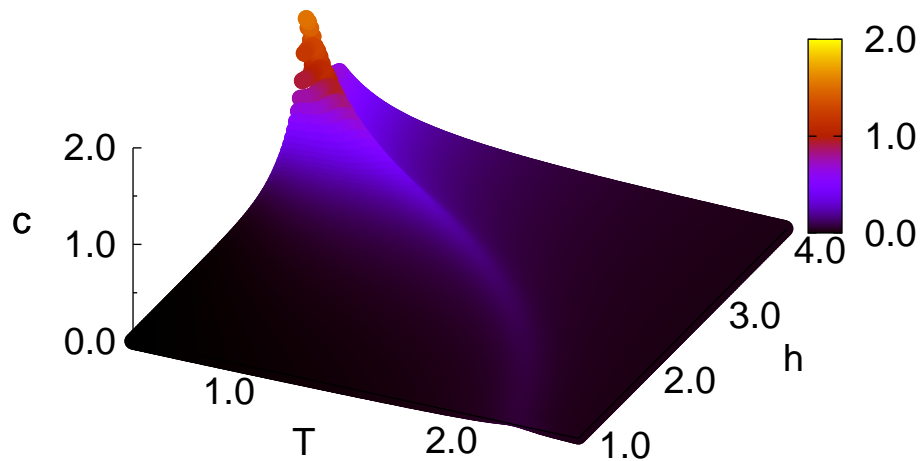
Uma das vantagens da amostragem entrópica é a possibilidade de calcular médias de qualquer quantidade para quaisquer valores de campo externo e temperatura, uma vez



obtida boa estimativa de  $\Omega$  e médias microcanônicas durante a simulação. Usando a estimativa de  $\Omega(n, m)$  obtida via TES calculamos a média canônica do parâmetro de ordem,  $\phi$ , e do calor específico,  $c$ , para  $L = 30$  sobre diversos valores de campo externo e temperatura; ver Figura 5.3.



(a)



(b)

Figura 5.3: (a) Parâmetro de ordem,  $\phi$ , and (b) calor específico,  $c$ , no plano  $h - T$  para  $L = 30$  via TES.

Na Figura 5.4 mostramos a linha crítica no plano campo externo – temperatura, cujos pontos foram obtidos via  $TES-1/t^\alpha$  com  $\alpha = 1$ . O sistema se encontra no estado antiferromagnético ou paramagnético abaixo ou acima da linha crítica, respectivamente. Esses resultados são comparados com as estimativas de Monroe [19], Wu & Wu [16], e Müller-Hartmann & Zittartz [15], cuja expressão analítica é

$$\cosh\left(\frac{h}{T_c}\right) = \sinh^2\left(\frac{2}{T_c}\right). \quad (5.1)$$

Destacamos a sobreposição entre os pontos simulacionais “\*” e “⊙” em torno de  $T = 2.2$  e  $h = 0.9$ , usando análise de escala de tamanho finito com  $T$  fixo e  $h$  fixo, respectivamente: a diferença relativa entre essas estimativas são menores que 0.3%. Chamamos atenção, também, que a linha crítica é similar àquela apresentada pela superfície de  $\phi$  no plano  $h - T$ , como esperado, apesar de efeitos de tamanho finito (ver Figura 5.3a).

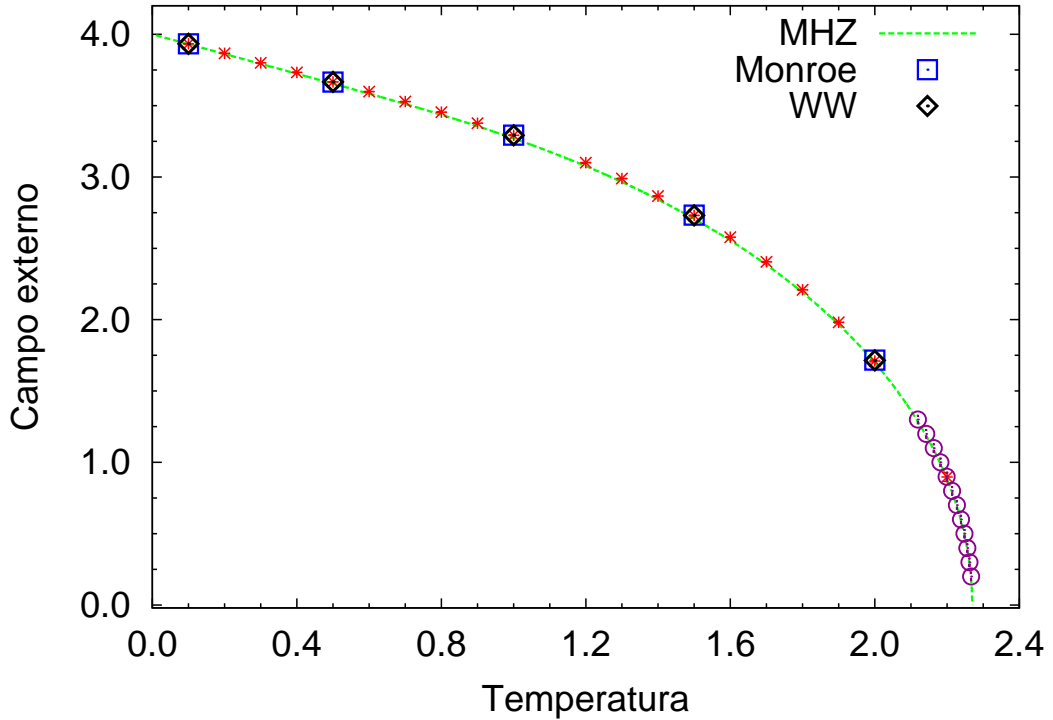


Figura 5.4: Diagrama de fase no plano campo externo – temperatura obtido via TES com  $\alpha = 1$ . Os símbolos “\*” e “⊙” representam nossos resultados simulacionais usando escala de tamanho finito com temperatura fixa e campo externo fixo, respectivamente. Incertezas são menores que os símbolos. “□” e “◇” representam as estimativas de Monroe e Wu & Wu, respectivamente; a linha tracejada é a previsão teórica obtida por Müller-Hartmann & Zittartz.

Uma vez que pela Figura 5.4 é difícil distinguir as diferenças entre resultados simulacionais e teóricos, apresentamos uma comparação detalhada na Tabela 5.1. Essa tabela

inclui resultados obtidos via modelo de dezesseis vértices por Wu & Wu [16] (denotado por WW), Monroe [19] (cuja análise via expansões em série envolve um parâmetro livre  $\omega$ ), Müller-Hartmann & Zittartz (MHZ) [15] os quais aplicaram um método de energia livre de interface para obter uma expressão fechada da linha crítica, Eq. 5.1, Blöte & Wu [17] (BW) os quais usaram cálculos de matriz de transferência e análise de escala de tamanho finito do comprimento de correlação, e Wang & Kim [18] (WK), que realizaram uma aproximação via zeros da função partição. Os valores dos pontos críticos obtidos via TES com  $\alpha = 1$  e 0 são apresentados na Tabela 5.2.

A concordância entre os pontos críticos obtidos via TES com  $\alpha = 1$  e as estimativas de WW é excelente, com diferença relativa média de ordem 0.06%. Nossas estimativas também possuem boa conformidade com as previsões de Monroe e BW, com diferenças relativas médias menores que 0.14% e 0.076%, respectivamente. As diferenças entre nossos resultados simulacionais e estimativas de MHZ e WK são em torno de 85 – 90% maiores comparadas com WW. Os pontos críticos obtidos via TES com  $\alpha = 0$  possuem ainda melhor concordância com WW, Monroe ( $\omega = 0.92484$ ) e BW, enquanto também apresentam discrepâncias em relação a MHZ e WK. Esses resultados confirmam a afirmação de Baxter *et al.* [46] de que a expressão analítica de MHZ, Eq. 5.1, *não* é uma solução exata.

Tabela 5.1: Comparação entre resultados simulacionais e previsões teóricas para  $h_c(T)$ .  $\bar{\epsilon}$  é a diferença relativa média entre teoria e simulação via TES- $1/t^\alpha$  com  $\alpha = 1$  e 0, e via simulação de Metropolis.

$T$	Monroe ( $\omega = 0.92484$ )	Monroe ( $\omega = 0.93895$ )	MHZ	WW	BW	WK
0.1	3.93307	3.93318	3.93069	3.93329	3.93330	3.93372
0.5	3.66506	3.66561	3.65309	3.66611	3.66614	3.67589
1.0	3.29303	3.29391	3.26843	3.29200	3.29261	3.31764
1.5	2.73243	2.73396	2.70401	2.73094	2.73176	2.75099
2.0	1.71629	1.71872	1.69490	1.71492	1.71499	1.71512
$\bar{\epsilon}_{\alpha=1}$ (%)	0.1	0.14	0.6	0.065	0.076	0.42
$\bar{\epsilon}_{\alpha=0}$ (%)	0.04	0.086	0.65	0.013	0.022	0.37
$\bar{\epsilon}_{Met}$ (%)	0.03	0.07	0.68	0.01	0.002	0.35

MHZ: Müller-Hartmann and Zittartz [15]

WW: Wu & Wu [16]

BW: Blöte & Wu [17]

WK: Wang & Kim [18]

Monroe: [19]

Ainda comparando as estimativas simulacionais e teóricas dos pontos críticos no diagrama de fase, pode-se observar na Figura 5.4 que nossas estimativas ficam cada vez mais

Tabela 5.2: Estimativas via TES para  $h_c(T)$ ,  $\gamma/\nu$  e  $\beta/\nu$ : comparação dos resultados entre  $\alpha = 1$  e  $\alpha = 0$ .

$T$	$h_c(T)$		$\gamma/\nu$		$\beta/\nu$	
	$\alpha = 1$	$\alpha = 0$	$\alpha = 1$	$\alpha = 0$	$\alpha = 1$	$\alpha = 0$
0.1	3.93324(5)	3.9332(2)	1.781(4)	1.75(4)	0.124(1)	0.117(11)
0.5	3.6658(2)	3.6655(6)	1.78(1)	1.77(1)	0.124(1)	0.118(6)
1.0	3.2920(25)	3.2915(8)	1.78(1)	1.77(1)	0.124(6)	0.122(2)
1.5	2.7301(13)	2.7302(8)	1.77(1)	1.76(1)	0.123(6)	0.122(1)
2.0	1.710(6)	1.715(2)	1.76(2)	1.77(1)	0.121(5)	0.124(2)

discrepantes dos resultados de MHZ na região central do digrama de fase. Tendo isso em vista, apresentamos na Figura 5.5 as diferenças entre nossas estimativas simulacionais via TES (para  $\alpha = 1$ ) com as estimativas teóricas de MHZ, Monroe, WW, BW e WK. Podemos observar que, de fato, nossas estimativas de  $h_c$  são bastante discrepantes dos resultados de MHZ e WK, especialmente na região de temperaturas intermediárias. Por outro lado, nossas estimativas possuem ótima concordância com os resultados de Monroe, BW e WW, o que corrobora com as discussões acima. Vale destacar que o mesmo comportamento é observado quando comparamos os resultados teóricos com os nossos para  $\alpha = 0$ .

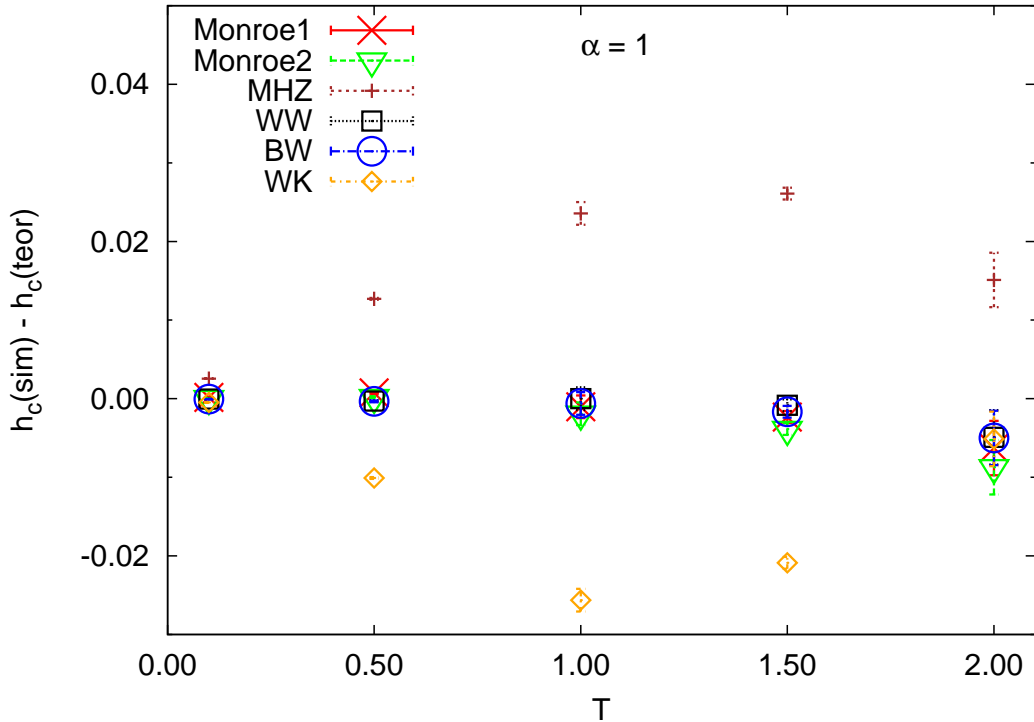


Figura 5.5: Comparação da entre as estimativas simulacionais e teóricas dos pontos críticos para  $\alpha = 1$ .

Na Tabela 5.2 apresentamos também nossas estimativas dos expoentes críticos para  $\alpha = 0$  e 1. Pode-se observar que, para  $\alpha = 1$  nossas estimativas de  $\gamma/\nu$  são entre 0.6% e 1.8% maiores que o valor exato,  $7/4$ . Já as estimativas de  $\beta/\nu$  concordam, dentro das incertezas, com o valor da literatura,  $1/8$ . Nossas melhores estimativas de  $\beta/\nu$  são para  $T < 1.0$ , enquanto de  $\gamma/\nu$  são para  $T = 2.0$ . As simulações usando  $\alpha = 0$  não forneceram resultados significativamente melhores: as estimativas para  $\gamma/\nu$  são 1.1% maiores que o valor exato, enquanto para  $\beta/\nu$  são piores que as estimativas usando  $\alpha = 1$ , exceto para  $T = 2.0$ .

Em geral, as estimativas de TES para  $\gamma/\nu$  são sistematicamente maiores que o valor exato, ao passo que  $\beta/\nu$  são menores. Isso sugere problemas sistemáticos em (1) na amostragem das configurações; (2) nas estimativas das médias microcanônicas de  $\phi$  e sua incerteza; ou (3) por efeitos de tamanho finito. Assim, tendo em vista uma melhoria nas estimativas dos pontos e expoentes críticos, realizamos simulações de Metropolis em torno dos cinco pontos críticos destacados na Tabela 5.1, como descrito na seção a seguir.

### 5.3 Simulações de Metropolis

Com o intuito de melhorar as estimativas dos pontos e expoentes críticos, realizamos simulações via algoritmo de Metropolis em torno dos pontos críticos apresentados na Tabela 5.1. Os tamanhos de rede estudados são  $L = 20, 40, 80, 160$  e  $320$ . Salientamos novamente que os estudos via Metropolis foram realizados devido ao fato de que as simulações via TES se limitavam a tamanhos até  $L = 30$ ; para  $L > 30$  as simulações não conseguiam amostrar todo o espaço de configurações  $(n, m)$ , como discutido detalhadamente em [59]. Acreditamos que essa restrição de amostragem via TES apenas para pequenas redes tenha sido um dos fatores primordiais às limitações nas melhorias das estimativas dos expoentes críticos (ver Tabela 5.2) via análise de escala de tamanho finito.

Para localizar o  $h_c(T)$  usando amostragem de Metropolis, procuramos uma lei de potência de  $\phi$  e  $\chi$  em relação a  $L$ . Como esperado por análise de escala de tamanho finito, devemos ter  $\ln \phi \sim (\beta/\nu) \ln L$ , por exemplo. Dessa forma, realizamos um ajuste quadrático nos dados de  $\ln \phi = ax^2 + bx + c$ , onde  $x \equiv \ln L$ , para cada valor de  $h$ ; o coeficiente  $a$  do termo quadrático deve, portanto, ser nulo para  $h = h_c$ .

As Figuras 5.6 e 5.7 mostram essa análise para  $T = 1.0$ . Pode-se observar que a curvatura,  $a$ , muda de sinal entre  $h = 3.2920$  e  $3.2932$  – ou seja,  $h_c$  deve estar entre esses valores. Assim, a estimativa de  $h_c$  é obtida ao encontrar o valor de  $h$  para o qual  $a = 0$ , via interpolação. A incerteza de  $h_c$  inclui a incerteza da interpolação bem como a incerteza propagada de cada valor de  $a$ . Uma segunda estimativa de  $h_c$  é obtida via análise similar para  $\chi_\phi$ . A estimativa final de  $h_c$ , bem como os expoentes críticos associados, são apresentados na Tabela 5.3.

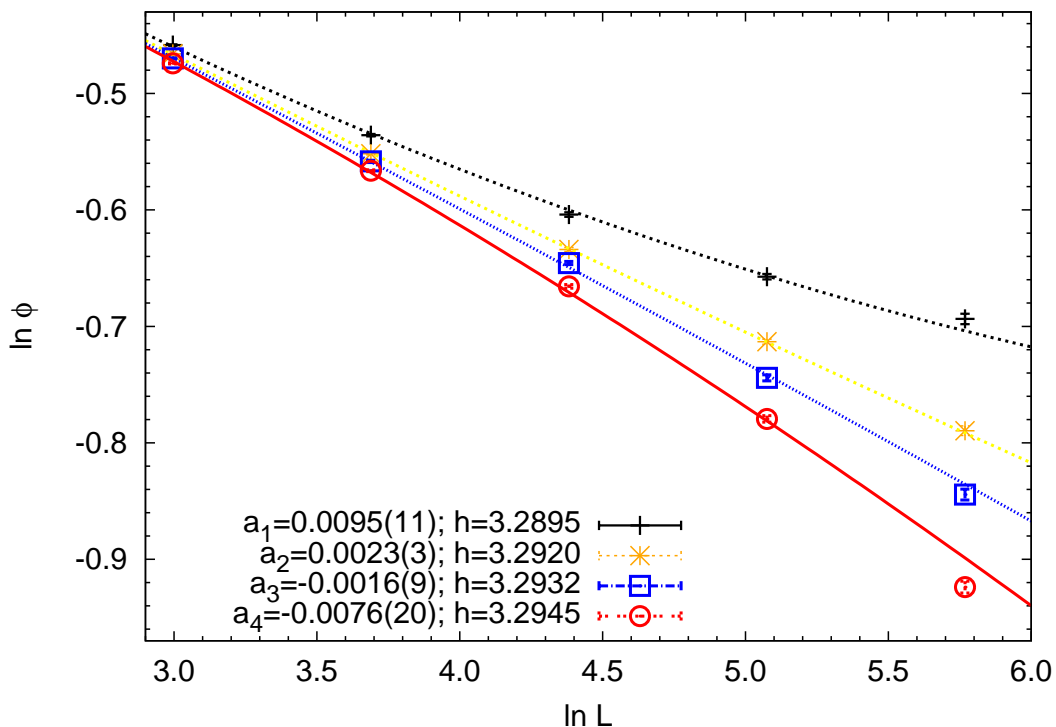


Figura 5.6: Análise de curvatura para  $T = 1.0$ .  $a_n$  ( $n = 1, \dots, 4$ ) são as curvaturas (coeficiente do termo quadrático de um ajuste polinomial) de cada conjunto de dados. Incertezas são menores que os símbolos em alguns casos.

Tabela 5.3: Estimativa via simulação de Metropolis dos pontos críticos, expoentes críticos, e cumulante de Binder de quarta ordem.

$T$	$h_c(T)$	$\gamma/\nu$	$\beta/\nu$	$U_4$
0.1	3.93331(1)	1.748(4)	0.126(2)	0.610(1)
0.5	3.6661(1)	1.75(3)	0.125(8)	0.610(1)
1.0	3.2927(1)	1.749(3)	0.126(9)	0.610(1)
1.5	2.7317(1)	1.751(2)	0.125(1)	0.611(1)
2.0	1.7149(1)	1.751(1)	0.125(1)	0.611(1)

Os expoentes críticos,  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  mostrados na Tabela 5.3 foram estimados como se segue: calculamos os expoentes críticos para cada valor de  $h$  (em torno de  $h_c$ ) e interpolamos

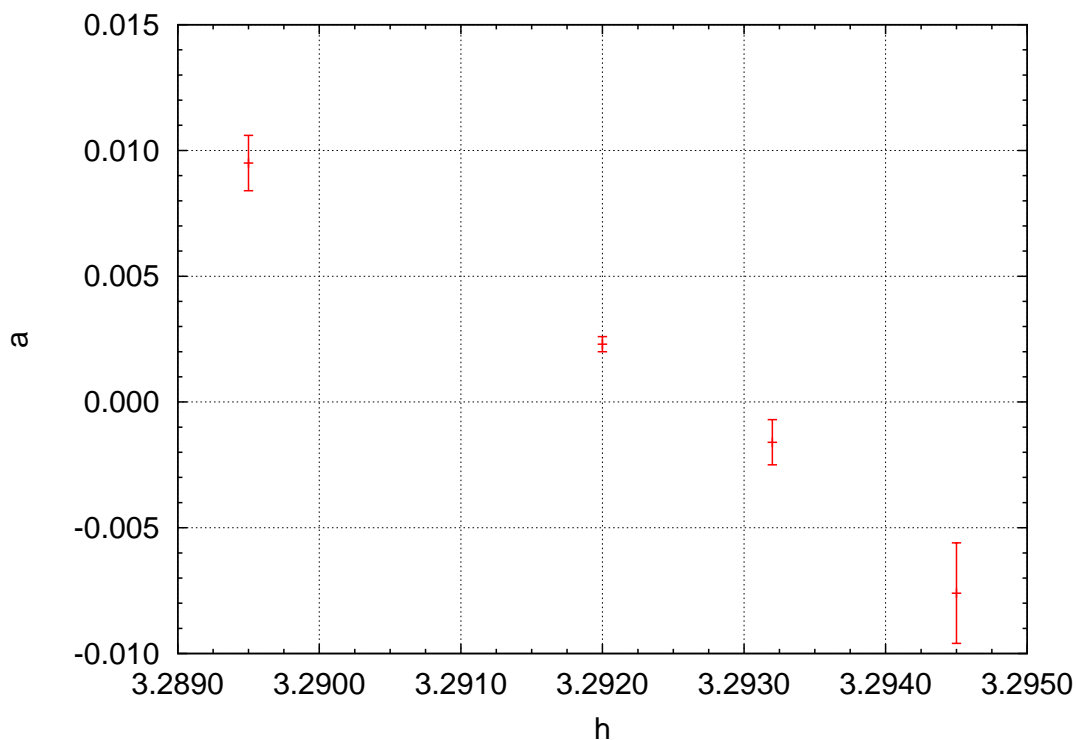


Figura 5.7: Curvatura,  $a$  (coeficiente do termo quadrático de um ajuste polinomial de segunda ordem,  $\ln \phi = ax^2 + bx + c$ , onde  $x \equiv \ln L$ ) para cada valor de campo externo  $h$  para  $T = 1.0$ .

os respectivos valores em  $h_c$ , previamente estimado. É notável que ambas estimativas dos expoentes críticos via Metropolis são mais próximas dos valores esperados para a classe de Ising bidimensional do que as estimativas via TES (ver Tabela 5.2).

Outra quantidade importante no estudo de propriedades críticas e caracterização da classe de universalidade de um modelo é o cumulante de Binder de quarta ordem [64, 65], definido por

$$U_4 = 1 - \frac{\langle \phi^4 \rangle}{3\langle \phi^2 \rangle^2}. \quad (5.2)$$

Calculamos  $U_4$  ao longo da linha crítica, nos pontos críticos apresentados na Tabela 5.3, tendo em vista que pela escala de tamanho finito  $U_4(\phi, L) \propto L^{-d}$  [64], onde  $d$  é a dimensão da rede. Nossos resultados possuem boa concordância com o valor da literatura,  $U_4 = 0.610690(1)$  [65], para o modelo de Ising isotrópico na rede quadrada, com interação de primeiros vizinhos, e condições periódicas de contorno. Enfatizamos que o valor de  $U$  não depende apenas da classe de universalidade mas também das condições de contorno, da forma da rede, e da isotropia (ou anisotropia) das interações [65, 66, 67, 68].

Finalmente, analisamos a dependência do calor específico,  $c$ , em relação ao tamanho

do sistema ao longo da linha crítica. O comportamento esperado<sup>1</sup>,  $c(T_c, h_c) \sim c_0 \ln L$  (onde  $c_0$  é uma constante [61]), é observado, como mostrado na Figura 5.8; destacamos que o resultado para  $T = 0.1$  não foi apresentado no gráfico devido a proximidade desses dados com os de  $T = 0.5$ .

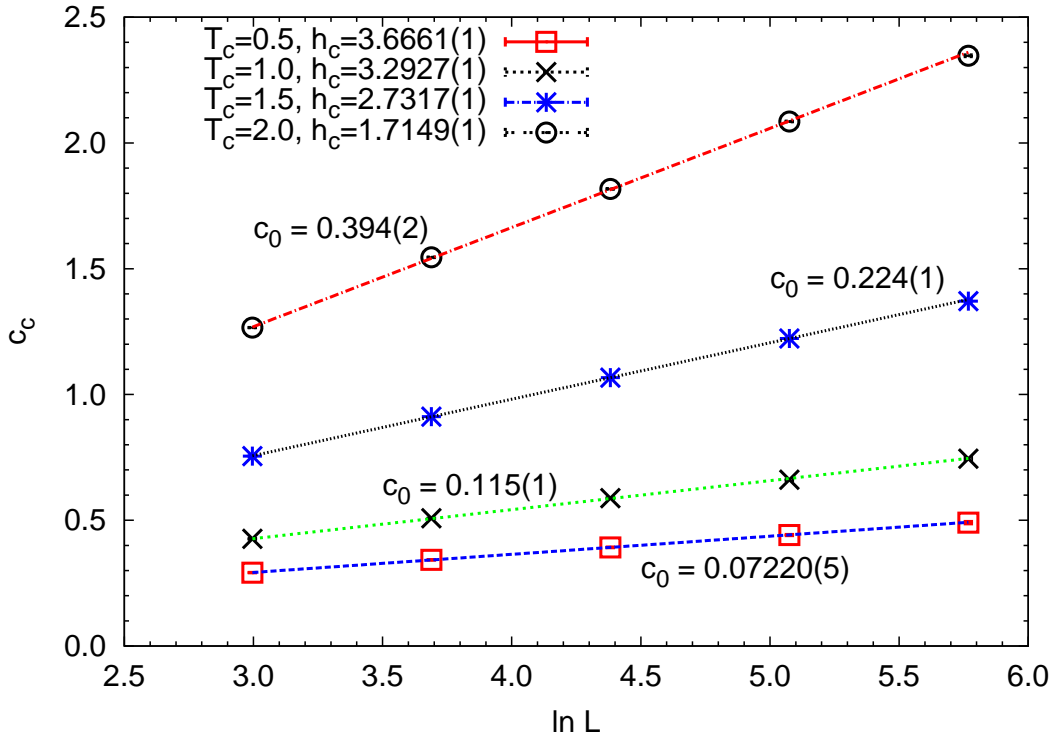


Figura 5.8: Calor específico  $c(T_c, h_c)$  versus  $\ln L$ . As inclinações das regressões linear estão indicadas.

Destacamos que esses resultados estão registrados no artigo “*Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model in an external field*” publicado nesse ano [69].

<sup>1</sup>Pois esse modelo possui as mesmas simetrias, na vizinhança da linha crítica, que o modelo de Ising (parâmetro de ordem escalar).



# Capítulo 6

## Análise dos Resultados – Flow shop scheduling

Apresentamos nesse capítulo nossos resultados referente ao problema *permutation flow shop scheduling*. Estudamos a distribuição de número de configurações,  $\Omega$ , em função do makespan (custo) para as 10 instâncias de Taillard [26, 47, 48] para  $j = 20$  jobs em  $m = 5$  e 10 máquinas. Tendo em vista comparar os resultados simulacionais com exatos, realizamos estudos detalhados de dois sistemas pequenos, que nos possibilitam uma enumeração exata das distribuição de  $\Omega$  em função do custo. Uma vez que o número total de configurações de um sistema com  $j$  jobs é  $j!$ , estudamos dois sistemas com  $j = 5$  e 6 jobs com  $m = 5$  máquinas. Realizamos uma análise de convergência da amostragem simulacional em relação aos resultados exatos para esses sistemas pequenos, bem como para as instâncias de Taillard. Finalmente investigamos uma possível transição de fase nesse problema.

### 6.1 Estimativa de $\Omega$

Usando 10 instâncias de Taillard estimamos o número de configurações,  $\Omega$ , como uma função do makespan, para  $j = 20$  jobs em  $m = 5$  máquinas ( $20 \times 5$ ). Os resultados são mostrados na Figura 6.1. Como podemos ver, existem menos configurações com custo mínimo para algumas instâncias, enquanto observa-se para outras instâncias menos configurações com custo máximo. Entretanto, para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas observamos que todas as 10 instâncias de Taillard possuem menos configurações com

mínimo custo, como podemos ver na Figura 6.2. Os respectivos valores de custos mínimos e máximos para  $j = 20$  com  $m = 5$  e 10 estão registrados na Tabela 6.1.

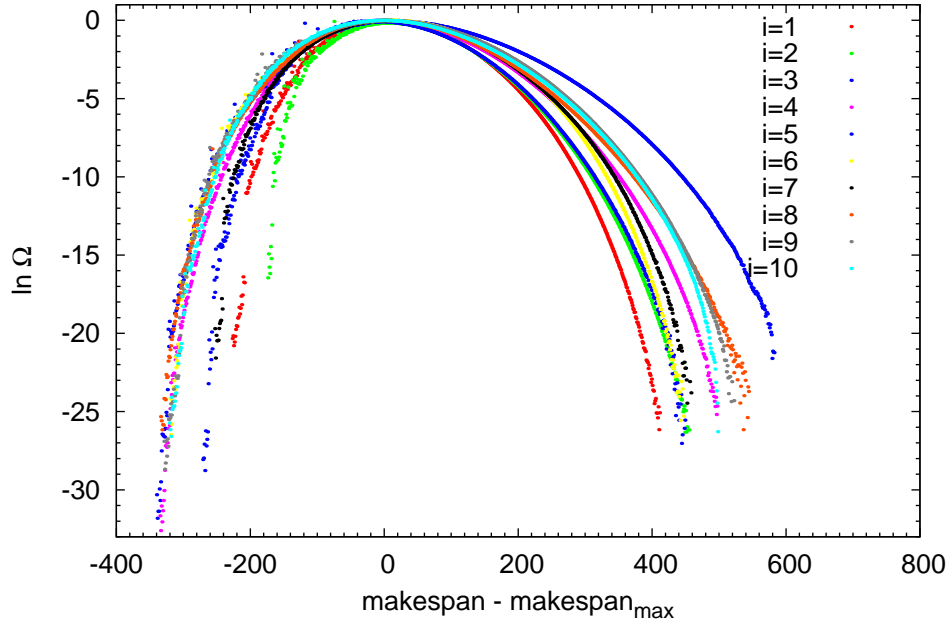


Figura 6.1: Estimativa de  $\Omega$ , para  $j = 20$  jobs em  $m = 5$  máquinas, como função do makespan menos  $\text{makespan}_{\max}$  (valor de makespan, para aquela instância, que maximiza  $\Omega$ ). Resultados para as 10 instâncias de Taillard. Foram realizadas 15 iterações, cada uma com  $10^7$  atualizações de rede.

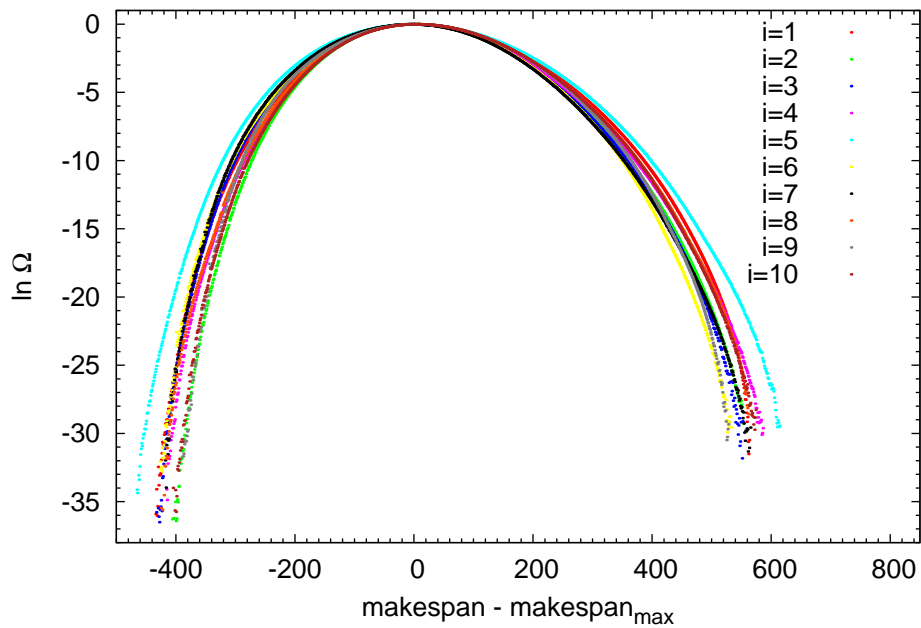


Figura 6.2: Estimativa de  $\Omega$ , para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas, como função do makespan menos  $\text{makespan}_{\max}$  (valor de makespan, para aquela instância, que maximiza  $\Omega$ ). Resultados para as 10 instâncias de Taillard. Foram realizadas 15 iterações, cada uma com  $10^7$  atualizações de rede.

Tabela 6.1: Custos mínimos e máximos para cada instância de Taillard para  $j = 20$  jobs, com  $m = 5$  e 10 máquinas.

Instâncias	$m = 5$		$m = 10$	
	makespan			
	mínimo	máximo	mínimo	máximo
1	1278	1916	1582	2579
2	1359	1988	1659	2618
3	1081	2003	1496	2481
4	1293	2125	1377	2379
5	1235	1955	1419	2499
6	1195	1962	1397	2357
7	1234	1950	1484	2467
8	1206	2084	1538	2525
9	1230	2081	1593	2509
10	1108	1927	1591	2570

Tendo em vista o fato mencionado acima, é importante destacar que ambos os sistemas  $20 \times 5$  e  $20 \times 10$  possuem o mesmo número total de configurações ( $20!$ ), uma vez que o número de configurações depende apenas do número de jobs. Entretanto, os sistemas com mais máquinas ( $20 \times 10$ ) têm em média  $\sim 3$  vezes *menos* configurações com mínimo custo em relação aos sistemas  $20 \times 5$ , como pode ser notado ao comparar os gráficos das Figuras 6.1 e 6.2. Isso pode ser um indicativo de que aumenta-se a dificuldade em encontrar configurações com custo mínimo em sistemas que possuem mais máquinas. Outros fatos notáveis são que, com 10 máquinas, as funções  $\Omega$  são mais parecidas entre as instâncias, e os saltos em energias baixas evidentes para 5 máquinas desaparecem no caso de 10.

## 6.2 Análise de convergência: resultados simulacionais e exatos

Com o intuito de verificar a eficácia e convergência da amostragem estudamos uma instância de dois sistemas pequenos,  $j = 5$  e  $j = 6$  jobs com  $m = 5$  máquinas. Esses sistemas nos possibilitam enumerar todas as possíveis permutações, bem como calcular os valores exatos de  $\Omega(\Gamma)$  (onde  $\Gamma$  representa os valores de makespan). A Figura 6.3 mostra o gráfico do número de configurações,  $\Omega$ , exato para  $j = 5$  jobs e  $m = 5$  máquinas em função do makespan.

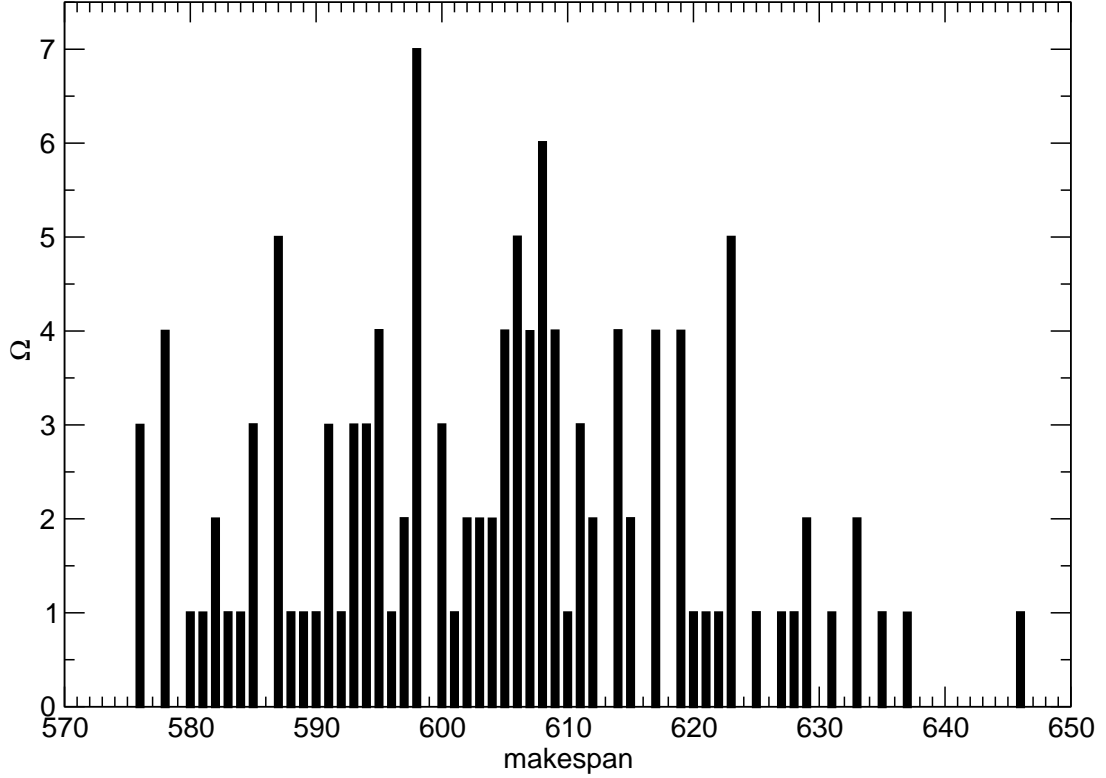


Figura 6.3:  $\Omega$  exato para  $j = 5$  jobs em  $m = 5$  máquinas em função do makespan.

Primeiramente calculamos o erro relativo absoluto  $\varepsilon_{rel}$  entre resultados simulacionais e exatos através da equação:

$$\varepsilon_{rel} = \frac{|\Omega_{sim}(\Gamma) - \Omega_{ex}(\Gamma)|}{\Omega_{ex}(\Gamma)}, \quad (6.1)$$

onde  $\Omega_{sim}(\Gamma)$  e  $\Omega_{ex}(\Gamma)$  são números de configurações com makespan  $\Gamma$  para resultados simulacionais e exatos, respectivamente, como indicado nas Figuras 6.4 e 6.5. Podemos notar que os erros, para cada valor de makespan, são inferiores a 0.07% e 3% para os sistemas  $5 \times 5$  e  $6 \times 5$ , respectivamente.

Para verificar a convergência para diferentes valores de  $\alpha$ , comparamos o erro relativo entre resultados simulacionais e exatos de  $\Omega$  para cada  $t$ -ésima iteração via

$$\varepsilon'_t = \sqrt{\sum_{\Gamma} \left( \frac{\Omega_t(\Gamma) - \Omega_{ex}(\Gamma)}{\Omega_{ex}(\Gamma)} \right)^2}. \quad (6.2)$$

Para cada valor de  $\alpha$  realizamos 5 estudos independentes, cada um com  $5 \times 10^3$  atualizações de rede (esse pequeno valor foi utilizado justamente para garantir uma melhoria na amostragem entre cada iteração, uma vez que o sistema é pequeno), e 50 iterações.

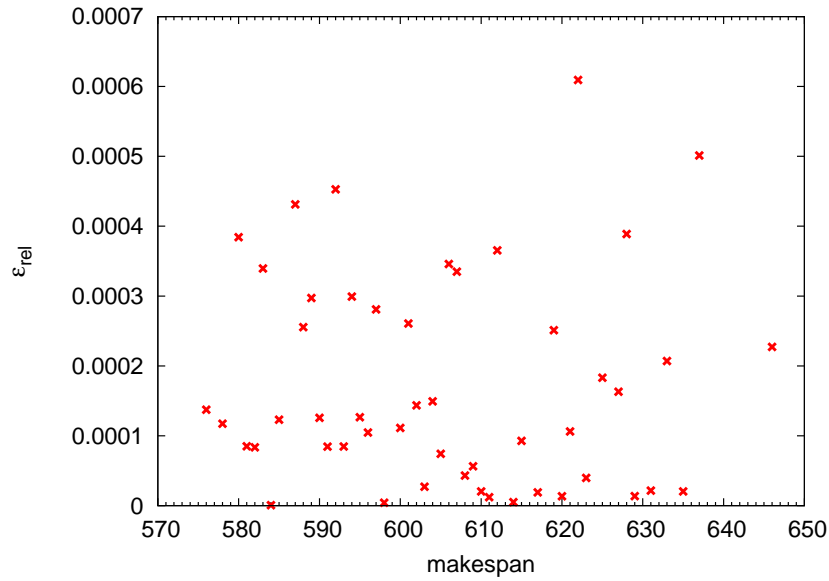


Figura 6.4: Erro relativo de  $\Omega$  entre resultados simulacionais e exatos para  $j = 5$  jobs em  $m = 5$  máquinas após 10 iterações, cada uma com  $10^7$  atualizações de rede.

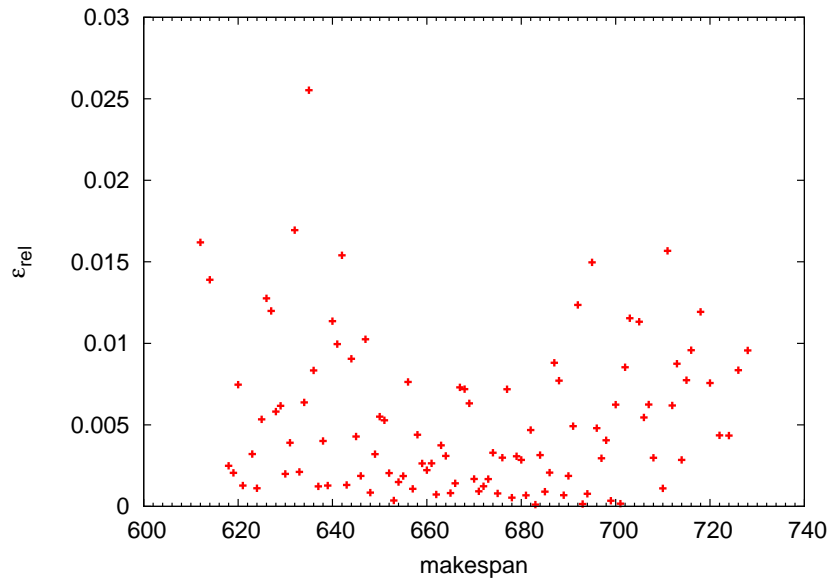


Figura 6.5: Erro relativo de  $\Omega$  entre resultados simulacionais e exatos para  $j = 6$  jobs em  $m = 5$  máquinas após 10 iterações, cada uma com  $10^7$  atualizações de rede.

Como podemos ver na Figura 6.6, não há convergência para  $\alpha = 0$  e 2. Para  $\alpha = 1/2$  podemos ver uma suave convergência começando na 4ª iteração. Entretanto, para  $\alpha = 1$  existe um notório indicio de convergência, desde o início da simulação.

Ainda para  $j = 6$  jobs em  $m = 5$  máquinas, calculamos o erro relativo médio (sobre makespan) na 50ª iteração para cada  $\alpha$ , como mostrado na Tabela 6.2. Com isso podemos verificar que além de  $\alpha = 1$  apresentar melhor taxa de convergência, como visto pela Figura 6.6, esse valor também forneceu menor erro relativo médio sobre makespan.

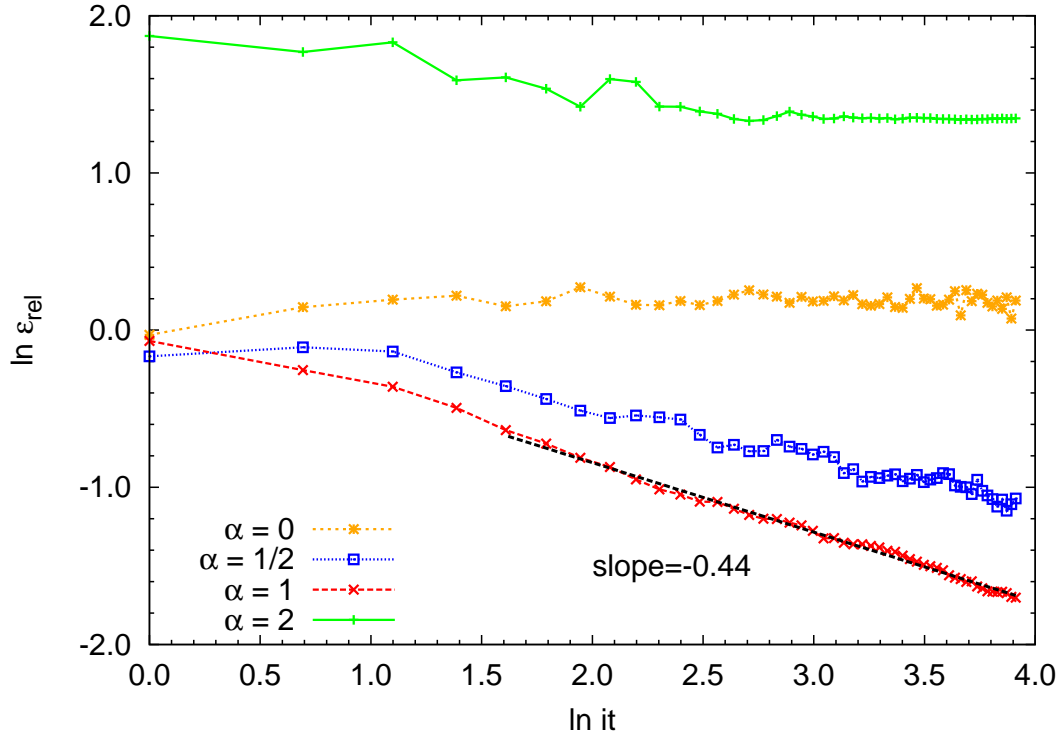


Figura 6.6: Erro relativo de  $\Omega$  entre resultados simulacionais e exatos para  $j = 6$  jobs e  $m = 5$  máquinas, ao longo de 50 iterações, para diferentes valores de  $\alpha$ .

Tabela 6.2: Comparação do erro relativo médio sobre makespan para a 50<sup>a</sup> iteração da simulação e os resultados exatos para  $6 \times 5$ .

$\alpha$	$\bar{\varepsilon}_{rel}$
0	0.21(18)
1/2	0.056(49)
1	0.037(33)
2	0.084(74)

### 6.3 Análise de convergência: instâncias de Taillard

Pudemos ver pela Figura 6.6 que para o sistema  $6 \times 5$  a simulação converge de maneira mais notória para  $\alpha = 1$ ; esse é um sistema pequeno, para o qual podemos encontrar resultados exatos e compará-los com os simulacionais através do erro relativo absoluto,  $\varepsilon_{rel}$ . Entretanto, para sistemas maiores não é possível obtermos soluções exatas para que possamos comparar com os resultados simulacionais. Sendo assim, investigamos a convergência das simulações através da seguinte quantidade:

$$\Delta_t = \sqrt{\sum_{\Gamma} \left( \frac{\Omega_{\Gamma,t} - \Omega_{\Gamma,t-1}}{\Omega_{\Gamma,t} + \Omega_{\Gamma,t-1}} \right)^2}. \quad (6.3)$$

Vale ressaltar, porém, que a convergência de  $\Delta$  é apenas uma condição necessária, mas não suficiente para implicar a convergência de  $\Omega$ . Para o sistema  $20 \times 5$  observamos que há um indício de convergência tanto para  $\alpha = 1$  quanto para  $\alpha = 2$ , como é mostrado na Figura 6.7.

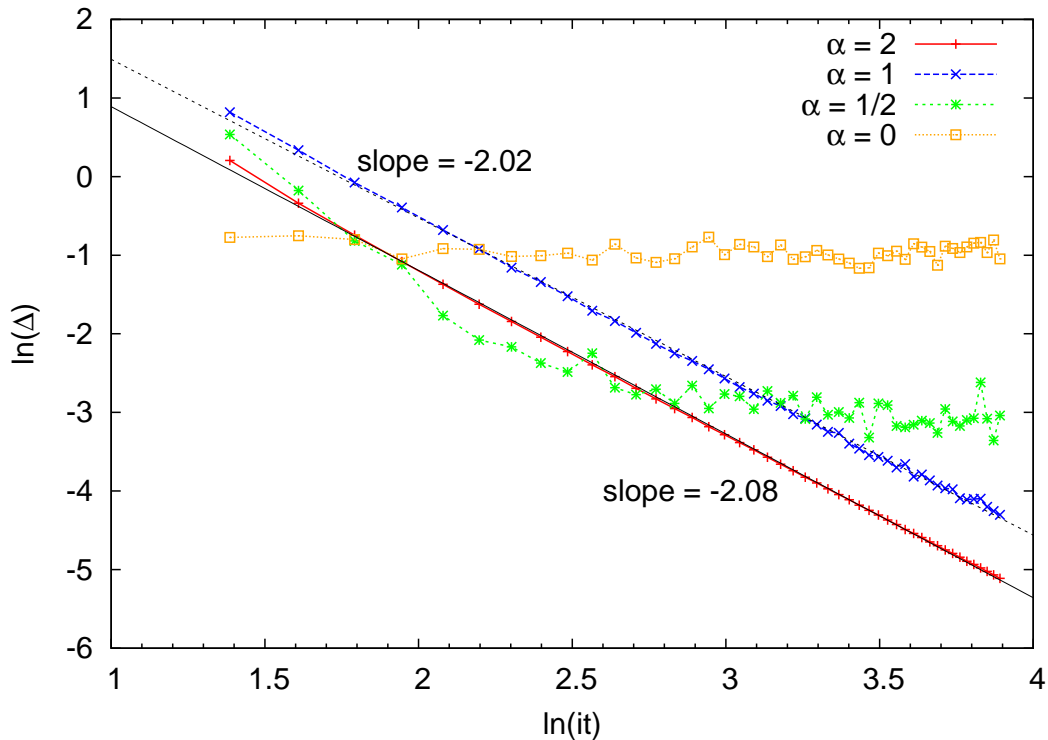


Figura 6.7: Análise de convergência para  $j = 20$  jobs em  $m = 5$  máquinas para diferentes valores de  $\alpha$ .

Com o intuito de verificar se de fato a quantidade  $\Delta$  apresenta uma tendência de convergência para  $\alpha = 1$  e  $2$  (como é o caso do sistema  $20 \times 5$ ), estudamos também um sistema mais complexo, com  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas. Usando 15 estudos independentes, cada um com  $10^7$  atualizações de rede e 50 iterações, podemos ver uma convergência de  $\Delta$  para  $\alpha = 1$  com o passar das iterações (ver Figura 6.8). Para  $\alpha = 2$ , porém, as simulações não foram capazes de explorar todo o espaço de makespan, o que indica nenhuma convergência.

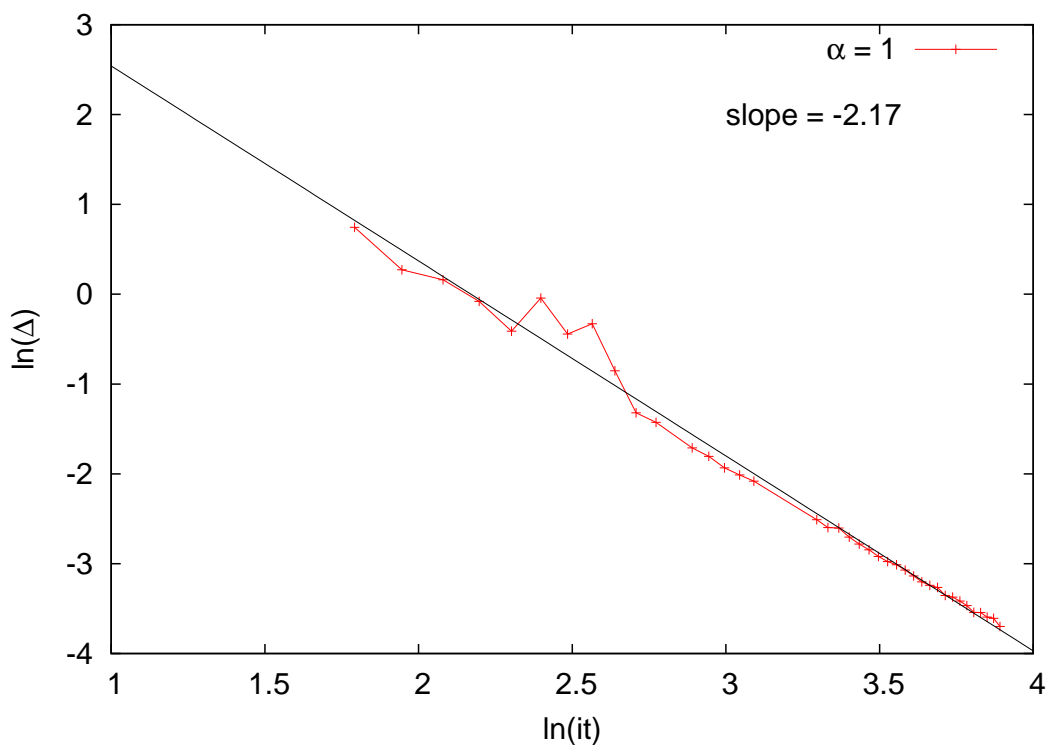


Figura 6.8: Análise de convergência para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas para  $\alpha = 1$ .

## 6.4 Uma possível transição de fase no problema flow shop

Do ponto de vista da termodinâmica, a média canônica de uma variável  $A$  é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_E \langle A \rangle_E \Omega(E) e^{-\beta E}, \quad (6.4)$$

onde

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E}, \quad (6.5)$$

é a função partição,  $\Omega(E)$  é o número de estados com energia  $E$ ,  $\beta = 1/k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann), e  $\langle A \rangle_E$  é a média microcanônica de  $A$  para cada energia  $E$ . Também, o calor específico é dado por

$$c = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (6.6)$$

Portanto, identificando o makespan como uma “energia”  $E$ , calculamos a média dessa



“energia” e seu análogo “calor específico” como função da temperatura (Figuras 6.9 e 6.10); as respectivas incertezas relativas de  $c$  e  $E$  estão representadas nas Figuras 6.11 e 6.12. Podemos notar que a incerteza relativa do calor específico é menor que 6% para todas as instâncias de Taillard, exceto para a 8ª. Enquanto que para a energia, as incertezas relativas são em geral da ordem de no máximo 0.03%.

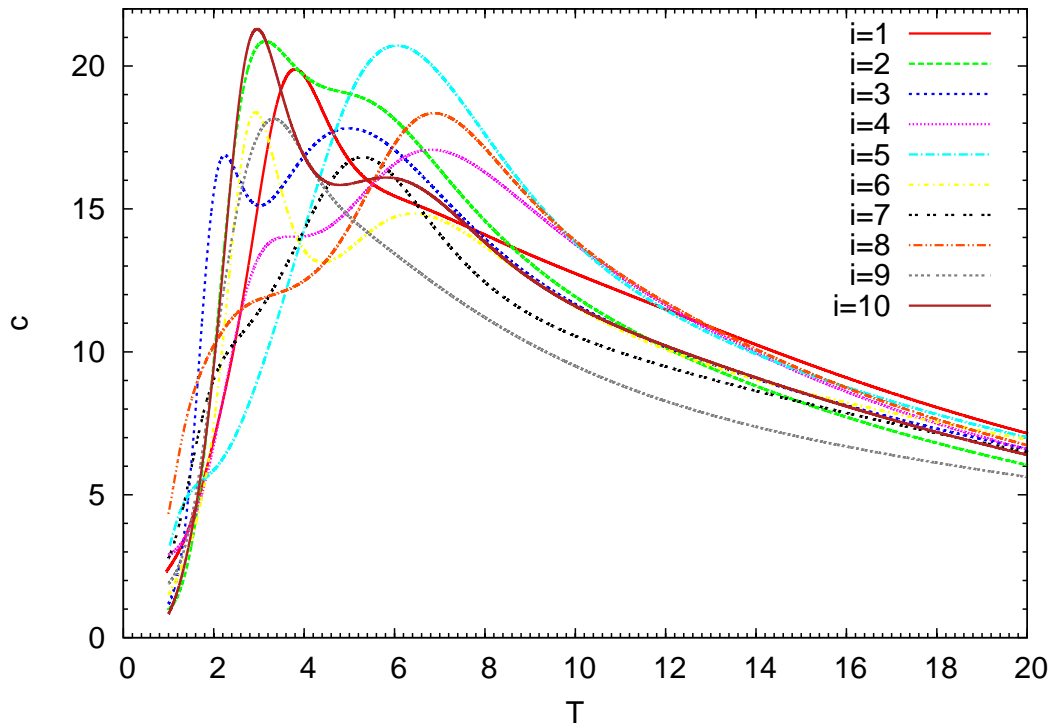


Figura 6.9: Média do calor específico em função da temperatura para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas para as instâncias de Taillard.

Uma vez que a divergência do calor específico é um indício de uma transição de fase, ao observar a Figura 6.9, somos levados a nos questionar o significado dos picos de  $c$ , que em geral ocorrem à temperaturas relativamente baixas, entre  $T = 1$  e 8.

Em nossos próximos estudos iremos investigar a possibilidade de haver uma transição de fase no problema de *flow shop*. Para isso iremos estudar a curvatura de  $\ln \Omega$  (ver Figuras 6.1 e 6.2), tendo isso em vista que

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}, \quad (6.7)$$

onde  $S = \ln \Omega$ .

Iremos procurar uma relação entre a temperatura obtida pela equação acima com os valores de  $T$  para os quais  $c$  tem valor(es) máximo(s),  $T(c_{max})$ . Outro aspecto intrigante

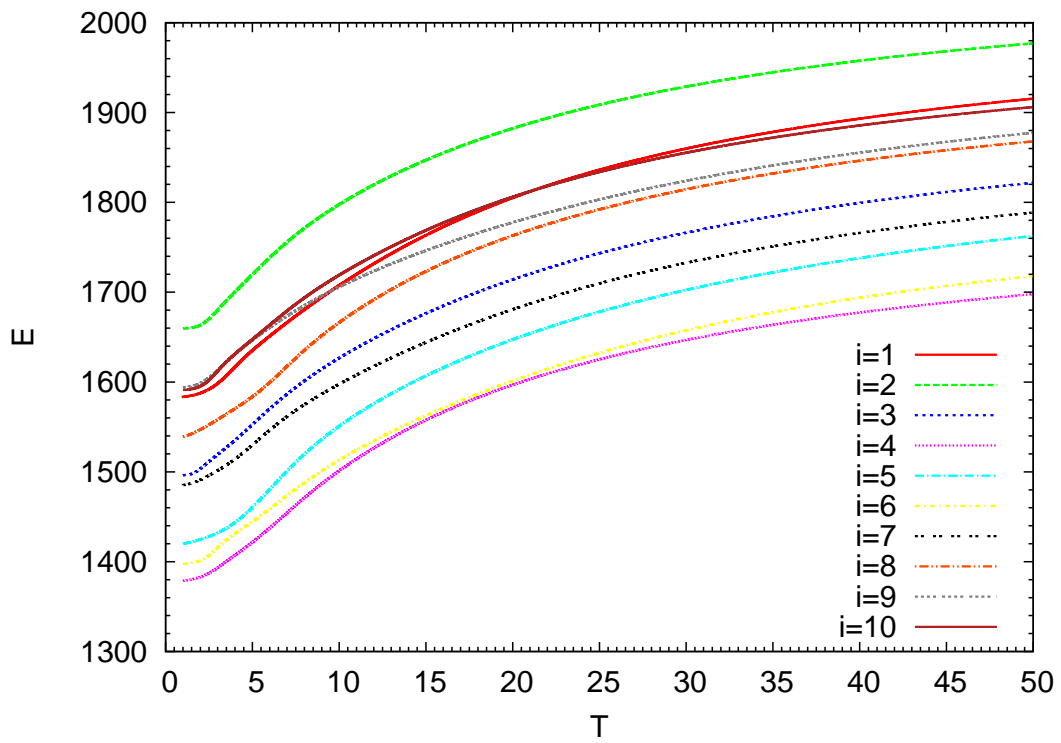


Figura 6.10: Média da energia (makespan) em função da temperatura para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas para as instâncias de Taillard.

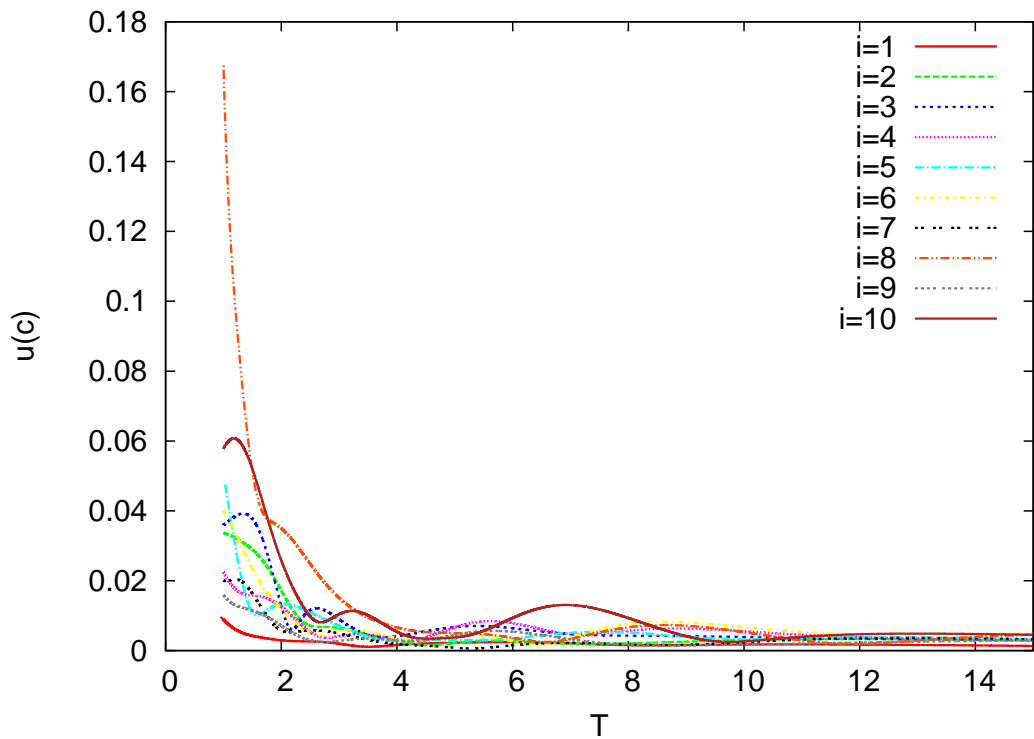


Figura 6.11: Incerteza relativa do calor específico em função da temperatura para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas para as instâncias de Taillard.

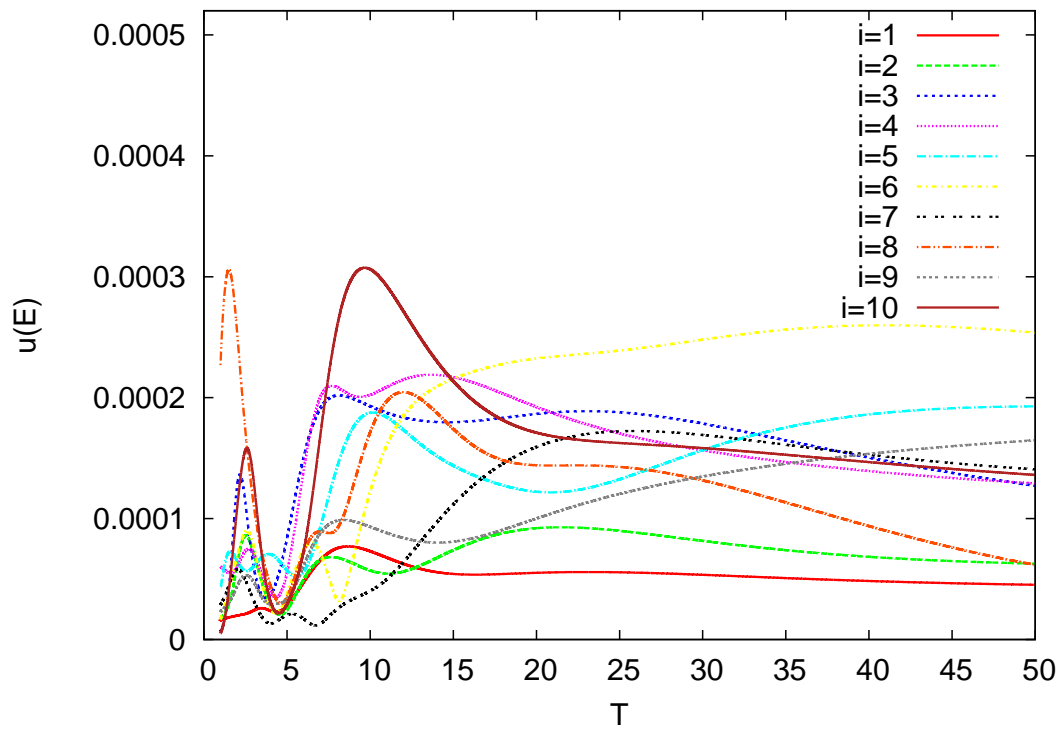


Figura 6.12: Incerteza relativa da energia em função da temperatura para  $j = 20$  jobs em  $m = 10$  máquinas para as instâncias de Taillard.

é que, para algumas instâncias de Taillard, o calor específico apresenta dois picos. Tais análises serão realizadas tanto para os sistemas  $20 \times 5$  e  $20 \times 10$ , quanto para sistemas maiores que serão simulados futuramente.

# Capítulo 7

## Considerações Finais

Nesse trabalho foram apresentados os resultados desse projeto de doutorado, onde revisamos e realizamos modificações no algoritmo de amostragem entrópica tomográfica (TES) [33], de modo a obtermos melhor convergência das estimativas de  $\Omega$ . Tais modificações, baseadas no algoritmo  $1/t$  [34, 35, 36], contribuíram de forma significativa no estudo do modelo de Ising AF, em relação às análises anteriores [59, 60], no que diz respeito à convergência.

Estimamos vários pontos ao longo da linha crítica para o modelo de Ising AF com spin-1/2 na rede quadrada na presença de campo externo, usando os algoritmos TES- $t^{-\alpha}$  e Metropolis. Nossos resultados se mostraram em ótima concordância com as estimativas teóricas de Wu & Wu [16], Blöte & Wu [17] e Monroe [19]. As estimativas de Müller-Hartmann & Zittartz, por outro lado, mostram desvios significativos de nossos resultados simulacionais; diferentemente de nossos resultados anteriores [59, 60].

Ressaltamos que embora as análises de convergência tenham mostrado uma rápida eliminação dos ruídos nas simulações via TES com  $\alpha = 1$  e  $1/2$ , nós não conseguimos obter boas estimativas dos expoentes críticos. Provavelmente isso se deve às limitações de tamanho que encontramos ao realizar a simulação no espaço  $(n, m)$  via TES: não foi possível simular redes maiores que  $L = 30$ , devido ao fato que verificamos que em tais situações nem todo espaço de  $(n, m)$  era amostrado, conforme as análises detalhadas em [59]. Por isso lançamos mão de simulações de Metropolis em torno dos pontos críticos tendo em vista refinar as estimativas dos pontos e expoentes críticos.

Dessa forma, conseguimos obter estimativas dos expoentes críticos,  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ , assim como do cumulante de Binder de quarta-ordem ao longo da linha crítica, em boa con-

cordância com os valores para o modelo de Ising bidimensional na rede quadrada. Esses resultados, juntamente com o crescimento logarítmico do calor específico em relação ao tamanho dos sistemas ao longo da linha crítica, nos leva a concluir que o comportamento do modelo de Ising AF estudado é do tipo Ising.

Aplicando o TES modificado com o fator de refinamento  $t^{-\alpha}$ , pudemos verificar também excelente convergência no estudo do *permutation flow shop* para  $20 \times 5$  (20 jobs em 5 máquinas) e  $20 \times 10$  (20 jobs em 10 máquinas); verificamos que embora ambos sistemas possuam mesmo número de permutações ( $20!$ ), existem menos configurações de mínimo makespan para o sistema com maior número de máquinas, o que pode ser um indicativo que a dificuldade na busca de soluções ótimas aumenta com o número de máquinas. Constatamos que tanto para o modelo de Ising AF, quanto para o *permutation flow shop*, a convergência é mais acentuada para  $\alpha = 1$ .

Destacamos que nossos estudos de análises de convergência para o modelo de Ising AF contribuíram para o trabalho “*Intrinsic convergence properties of entropic sampling algorithms*” [63] publicado em 2014. Ademais, nosso estudo detalhado do diagrama de fase e análises críticas do modelo de Ising AF na rede quadrada com campo externo foram publicados em 2016 no artigo intitulado “*Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model in an external field*” [69], bem como foram apresentados oralmente na conferência “*The 9th International Conference on Computational Physics*” realizada em Cingapura entre os dias 07 e 11 de janeiro de 2015 na National University of Singapore.

Ressaltamos que antes de implementarmos a alteração do refinamento da estimativa de  $\Omega$  através do fator  $t^{-\alpha}$ , o que nos forneceu bons resultados, investimos muito tempo em outras tentativas de melhoria no algoritmo TES. Procuramos verificar melhorias nos resultados através da variação do número de configurações iniciais, variações no número de atualizações de rede, e no número de iterações. Também implementamos na dinâmica da simulação, juntamente com a inversão simples de spins, uma inversão de cluster (que seria executada com probabilidades de 5% ou 10% a cada atualização de rede); acreditávamos que isso poderia ajudar na amostragem, facilitando a transição entre classes de configurações distantes no espaço  $(n, m)$ . Porém, nenhuma dessas tentativas forneceram resultados conclusivos no que diz respeito à relação de convergência; e a implementação da inversão de cluster não se mostrou vantajosa, especialmente pelo fato de aumentar consideravelmente o tempo computacional sem influência relevante na qualidade dos re-

sultados.

## Perspectivas

Em relação ao modelo de Ising AF, pretendemos expandir nossos estudos simulacionais para contemplar interações entre segundos vizinhos, à luz do trabalho realizado por Binder & Landau [43] na década de 1980, investigando os respectivos diagramas de fase para diferentes valores da razão entre as constantes de interação de troca entre primeiros e segundos vizinhos; o que seria um desafio ainda maior do que o problema investigado nesse projeto de doutorado. Com o intuito de refinar as estimativas dos pontos e expoentes críticos, pesquisaremos novas técnicas para melhorar o algoritmo TES, bem como lançar mão de algoritmos como de Swendsen–Wang [11] ou Wolff [10], por exemplo.

No que diz respeito ao *permutation flow shop*, nossos próximos passos serão estudos de sistemas maiores, como  $50 \times 20$  e  $100 \times 5$ , por exemplo, que recebem grande atenção da comunidade. Como verificamos que, aparentemente, a dificuldade em encontrar configurações com makespan mínimo de um sistema aumenta com o número de máquinas, vale a pena investigar e procurar peculiaridades entre tais sistemas, e tentar descobrir o que pode influenciar de maneira mais significativa no nível de dificuldade em encontrar uma solução de um sistema.

Além disso, vamos investigar mais a fundo para tentarmos obter maiores informações à respeito da análise “termodinâmica” do *permutation flow shop*, como o significado dos picos do “calor específico” análogo em função da “temperatura” (Figura 6.9). Será que seriam indicativos de uma “transição de fase”? Como interpretar tal fenômeno, se for o caso? E como as propriedades críticas poderiam influenciar na complexidade do sistema? Essas são questões que vamos tentar responder, lembrando que não há na literatura até o momento nenhum trabalho que aborde esse problema através desse ponto de vista. Acreditamos que possamos conseguir resultados plausíveis e que possam contribuir à comunidade que se dedica aos problemas de *shop scheduling*.

# Referências Bibliográficas

- [1] J.M.D. Coey. *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, New York, 2010.
- [2] G.L. Verschuur. *Hidden Attraction: the history and mystery of magnetism*. Oxford United Press, New York, 1996.
- [3] M.E.J Newman and G.T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, New York, 2001.
- [4] D.P Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, New York, 2005.
- [5] R.B. Potts. Some Generalized Order-Disorder Transformations. *Math. Proc. Cambridge of Phyl. Soc.*, 48(1):106–109, 1952.
- [6] F.Y. Wu. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, 54, 1982.
- [7] R. Skomski. *Simple Models of Magnetism*. Oxford University Press, New York, 2008.
- [8] M. Plischke and B. Bergersen. *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific Publishing, Singapore, 1994.
- [9] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, and A.H. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.*, 21(6), 1953.
- [10] U. Wolff. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62(4), 1989.
- [11] R.H. Swendsen and J-S. Wang. Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 58(2), 1987.

- [12] F. Wang and D.P. Landau. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10), 2001.
- [13] F. Wang and D.P. Landau. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. *Phys. Rev. E*, 63(056101), 2001.
- [14] L. Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, 1944.
- [15] E. Müller-Hartmann and J. Zittartz. Interface Free Energy and Transition Temperature of the Square-Lattice Ising Antiferromagnet at Finite Magnetic Field. *Zeitschrift für Physik B*, (27):261–266, 1977.
- [16] X.N. Wu and F.Y. Wu. Critical line of the square-lattice antiferromagnetic ising model in a magnetic field. *Phys. Lett. A*, 144(3), 1990.
- [17] H.W.J. Blöte and X.N. Wu. Accurate determination of the critical line of the square Ising antiferromagnet in a field. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23:L627–L631, 1990.
- [18] X.Z. Wang and J.S. Kim. The Critical Line of an Ising Antiferromagnet on Square and Honeycomb Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 78(413), 1997.
- [19] J.L. Monroe. Systematic approximation method for the critical properties of lattice spin systems. *Phys. Rev. E*, 64(016126), 2001.
- [20] R.P. Millane, A. Goyal, and R.C. Penney. Ground states of the antiferromagnetic Ising model on finite triangular lattices of simple shape. *Phys. Lett. A*, 311:347–352, 2003.
- [21] K. Binder. Ordering of the Face-Centered-Cubic Lattice with Nearest-Neighbor Interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 45(10):811–814, 1980.
- [22] A.D. Beath and D.H. Ryan. Thermodynamic properties of the fcc Ising antiferromagnet obtained from precision density of states calculations. *Phys. Rev. B*, 73, 2006.
- [23] S. M. Johnson. Optimal two-and three-stage production schedules with setup times included. *Nav. Res. Log. Quart.*, 1:61–68, 1954.



- [24] Michael L. Pinedo. *Scheduling: Theory, Algorithms, and Systems*. Springer, New York, 2012.
- [25] M. Nawaz, E. E. Enscore Jr., and I. Ham. A heuristic algorithm for the m-Machine, n-Job Flow-shop Sequencing Problem. *Omega*, 11(1):91–95, 1983.
- [26] E. Taillard. Some efficient heuristic methods for the flow shop sequencing problem. *Eur. J. Oper. Res.*, 47:65–74, 1990.
- [27] F. A. Ogbu and D. K. Smith. The application of the simulated annealing algorithm to the solution of the n/m/Cmax flow shop problem. *Comp. Oper. Res.*, 17(3):243–253, 1990.
- [28] A. Agarwal, S. Colak, and E. Eryarsoy. Improvement heuristic for the flow-shop scheduling problem: An adaptative-learning approach. *Eur. J. Oper. Res.*, 169(3), 2006.
- [29] M. Ben-Daya and M. Al-Fawzan. A tabu search approach for the flow shop scheduling problem. *Eur. J. Oper. Res.*, 109(1):88–95, 1998.
- [30] R. Ruiz and C. Maroto. A comprehensive review and evaluation of permutation flow shop heuristics. *Eur. J. Oper. Res.*, 165(2):479–494, 2005.
- [31] M. G. Ravetti, C. Riveros, A. Mendes, M. G. C. Resende, and P. M. Pardalos. Parallel hybrid heuristics for the permutation flow shop problem. *Ann. Oper. Res.*, 199:269–284, 2012.
- [32] K.R. Baker and D. Trietsch. *Principles of Sequencing and Scheduling*. Wiley, New Jersey, 2009.
- [33] R. Dickman and A.G. Cunha-Netto. Complete high-precision entropic sampling. *Phys. Rev. E*, 84(026701), 2011.
- [34] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra. Fast algorithm to calculate density of states. *Phys. Rev. E*, 75(046701), 2007.
- [35] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra. Wang-Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error. *The J. Chem. Phys.*, 127(184105), 2007.

- [36] R. E. Belardinelli, S. Manzi, and V. D. Pereyra. Analysis of the convergence of the  $1/t$  and Wang-Landau algorithms in the calculation of multidimensional integrals. *Phys. Rev. E*, 78(067701), 2007.
- [37] M. J. de Oliveira. *Termodinâmica*. Livraria da Física, São Paulo, 2005.
- [38] S.R.A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Edusp, São Paulo, 2008.
- [39] J.H. Van Vleck. *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*. Oxford University Press, London, 1932.
- [40] S.J. Penney, V.K. Cumyn, and D.D. Betts. A new method for the  $S = 1/2$  antiferromagnetic Ising model's properties at any temperature and any magnetic field on the infinite square lattice. *Phys. A*, 330:507–518, 2003.
- [41] D.C. Rapaport and C. Domb. The smoothness postulate and the Ising antiferromagnet. *J. Phys. C: Solid. St. Phys*, 4:2684 – 2694, 1971.
- [42] L. Sneddon. Ising antiferromagnets in a magnetic field. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 12, 1979.
- [43] K. Binder and D.P. Landau. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest-and next-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, 21(5), 1980.
- [44] W. Kinzel. New real-space renormalization techniques and their application to models of various spin and space dimensionalities. *Phys. Rev. B*, 19(9), 1979.
- [45] M. Kaufman. Square-lattice Ising model in a weak uniform magnetic field: Renormalization-group analysis. *Phys. Rev. B*, 36(5), 1987.
- [46] I.G. Enting R.J. Baxter and S.K. Tsang. Hard-square lattice gas. *J. Stat. Phys*, 22(4), 1980.
- [47] E. Taillard. Benchmarks for basic scheduling problems. *Eur. J. Oper. Res.*, 64(2):278–285, 1993.
- [48] E. Taillard. Embedded Information Systems. <http://mistic.heig-vd.ch/taillard/>, Maio 2013.

- [49] S.F. Edwards and P.W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F: Metal Phys.*, 5:965–974, 1975.
- [50] E.L. Lawler, J.K. Lenstra, A.H.G. Rinnooy Kan, and D.B. Shmoys. *The Traveling Salesman Problem*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1985.
- [51] H.E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, London, 1971.
- [52] H. Gould, J. Tobochnik, and W. Chrisitan. *An Introduction to Computer Simulation Methods*. Addison Wesley, San Francisco, 3 edition, 2007.
- [53] K. Binder and D. Heermann. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: An Introduction*. Springer, Berlin, 5 edition, 2010.
- [54] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, London, 2002.
- [55] T. Tomé and M.J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, São Paulo, 2001.
- [56] Q. Yan and J. J. de Pablo. Fast Calculation of the Density of States of a Fluid by Monte Carlo Simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 90(035701), 2003.
- [57] A. G. da Cunha-Netto. Algoritmo das janelas adaptáveis no método de Wang-Landau. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Goiás, Brasil, 2008.
- [58] A.G. Cunha-Netto, R. Dickman, and A.A. Caparica. Two-dimensional lattice polymers: Adaptive windows simulations. *Comp. Phys. Comm.*, (180):583–586, 2009.
- [59] B. J. Lourenço. Modelo de Ising Antiferromagnético em um campo externo: simulação por amostragem entrópica. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, Brasil, 2011.
- [60] B. J. Lourenço and R. Dickman. Systematic Enumeration of Configuration Classes for Entropic Sampling of Ising Models. *Int. J. Mod. Phys. C*, 23(1240007), 2012.
- [61] V. Privman. *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. World Scientific, London, 1990.

- [62] H.W.J. Blöte, E. Luijten, and J.R. Heringa. Ising universality in three dimensions: a Monte Carlo study. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 28(6289), 1995.
- [63] R. E. Belardinelli, V. D. Pereyra, R. Dickman, and B. J. Lourenço. Intrinsic convergence properties of entropic sampling algorithms. *J. Stat. Mech.*, (P07007), 2014.
- [64] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution. *Zeitschrift für Physik B*, 43(2):119–140, 1981.
- [65] G. Kamieniarz and H.W.J. Blöte. Universal ratio of magnetization moments in two-dimensional Ising models. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 26:201–212, 1993.
- [66] X.S. Chen and V. Dohm. Nonuniversal finite-size scaling in anisotropic systems. *Phys. Rev. E*, 70(056131), 2004.
- [67] W. Selke. The critical Binder cumulant for isotropic Ising models on square and triangular lattices. *J. Stat. Mech.*, (P04008), 2007.
- [68] W. Selke and L.N. Shchur. Critical Binder cumulant in a two-dimensional anisotropic Ising model with competing interaction. *Phys. Rev. E*, 80(042104), 2009.
- [69] B. J. Lourenço and R. Dickman. Phase diagram and critical behavior of the antiferromagnetic Ising model in an external field. *J. Stat. Mech.*, (P033107), 2016.