



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

LUAN LUIZ MESQUITA SOBRINHO

APLICAÇÃO DO ALGORITMO DE METROPOLIS A DISCOS RÍGIDOS

FORTALEZA

2025

LUAN LUIZ MESQUITA SOBRINHO

APLICAÇÃO DO ALGORITMO DE METROPOLIS A DISCOS RÍGIDOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

FORTALEZA

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M544a Mesquita Sobrinho, Luan Luiz.
Aplicação do algoritmo de Metropolis a discos rígidos / Luan Luiz Mesquita Sobrinho. – 2025.
27 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,
Curso de Física, Fortaleza, 2025.
Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.

1. Cadeias de Markov. 2. Metropolis-Hastings. 3. Discos rígidos. I. Título.

CDD 530

LUAN LUIZ MESQUITA SOBRINHO

APLICAÇÃO DO ALGORITMO DE METROPOLIS A DISCOS RÍGIDOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Aprovada em: 25 de Julho de 2025

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. André Auto Moreira (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Cesar Ivan Nunes Sampaio Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Ms. Antonio Edinaldo de Oliveira Ferreira

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à minha família, que, ao longo de todos os meus anos de vida, sempre me apoiou e lutou pelo meu bem-estar — em especial à minha mãe, Sílvia, por seu amor incondicional e por estar ao meu lado mesmo nas situações mais difíceis.

Sou grato, também, a todos os meus amigos que me incentivaram durante a trajetória acadêmica, sobretudo nos momentos finais de maior desafio.

Registro minha sincera gratidão ao meu orientador, Professor Doutor André Auto Moreira, por toda a ajuda, orientação e compreensão ao longo deste projeto, bem como à banca examinadora, pela disponibilidade e pelas valiosas correções que contribuíram para aprimorar o resultado final deste trabalho.

Por fim, agradeço às instituições e aos professores que, direta ou indiretamente, contribuíram para a minha formação e para a realização deste TCC. A todos, o meu muito obrigado.

RESUMO

Este trabalho aplica o algoritmo de Metropolis-Hastings à simulação de um sistema bidimensional de discos rígidos, avaliando a precisão do método na estimativa de grandezas termodinâmicas. O sistema modelado contém 224 partículas maciças idênticas, de raio σ , confinadas em um recipiente quadrado de lado unitário com condições de contorno periódicas. Estima-se a função de distribuição radial $g(r)$ utilizando-se de amostras do sistema obtidas com uma cadeia de Markov em que efetuam-se deslocamentos sucessivos individualmente em cada partícula. Extrapolam-se $g(r)$ para o raio de contato d_0 , valor necessário para calcular a equação de estado do sistema, que demonstrou concordância com resultados obtidos por teoria de volume livre para altas densidades; o método possui um maior erro para baixas densidades. Posteriormente, o comportamento de $g(r)$ é analisado para $r \gg \sigma$, mostrando caráter oscilatório em torno de um com amortecimento conforme se distancia da partícula referência. Sistemas de baixas densidades possuem um amortecimento mais intenso; enquanto altas densidades mostram oscilações de maior amplitude, mostrando mais ordem. O comportamento em baixas densidades se aproxima de um gás ideal, explicando a redução de precisão devido à baixa ocorrência de colisões entre partículas.

Palavras-chave: cadeias de Markov; Metropolis-Hastings; discos rígidos.

ABSTRACT

This work applies the Metropolis–Hastings algorithm to the simulation of a two-dimensional hard-disk system, assessing the method’s accuracy in estimating thermodynamic quantities. The model consists of 224 identical rigid disks of radius σ confined in a unit-square box with periodic boundary conditions. The radial distribution function $g(r)$ is estimated from samples generated by a Markov chain in which successive random displacements are applied individually to each particle. By extrapolating $g(r)$ to the contact distance d_0 , one obtains $g(d_0)$, which is required to compute the equation of state. The resulting values agree with free-volume theory at high densities, whereas the error increases at low densities. The behavior of $g(r)$ is further examined for $r \gg \sigma$: it exhibits oscillations about unity that decay with distance from the reference particle. Low-density systems display stronger damping, while high densities retain oscillations of larger amplitude, indicating greater short-range order. The near-ideal-gas behavior at low densities explains the reduced accuracy, owing to the lower collision frequency between particles.

Palavras-chave: Markov chain; Metropolis-Hastings; rigid disks.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – dois movimentos distintos da cadeia de Markov. O primeiro é aceito, fazendo com que a partícula se mova. O segundo movimento geraria uma configuração inválida	18
Figura 2 – Estrutura hexagonal compacta (à esquerda) com $2\sigma = d$ e caixa de dimensões $L_x \times \frac{\sqrt{3}}{2}L_x$; à direita, a mesma estrutura relaxada ($\sigma = \frac{d}{2} - \epsilon$).	19
Figura 3 – Evolução de dois sistemas com diferentes níveis de relaxamento. Notamos o confinamento da partícula destacada na configuração inferior, mais densa ($\nu = 5$), em relação a configuração superior, menos densa ($\nu = 6.5$)	21
Figura 4 – Densidade radial para $\nu = 5$ nos primeiros 60 intervalos. Cada ponto corresponde ao valor estimado $\langle g(r_l) \rangle$. As formas diferenciam entre amostras de 16 ciclos.	23
Figura 5 – Diferentes distribuições de densidade radial em diferentes fatores de relaxamento.	25

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação entre os resultados de $g(d_0)$ para $\nu = 5$, $K = 1.5$, $n_{bins} = 64$. . . 24

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
2.1	Cadeias de markov e o método de Monte Carlo	11
2.2	Definindo uma cadeia de markov	11
2.2.1	<i>Balço detalhado e convergencia de uma cadeia de Markov</i>	12
2.3	Algoritmo de Metropolis	14
2.4	Sistema de discos rígidos	15
2.4.1	<i>Algoritmo de Metropolis local</i>	16
3	METODOLOGIA	19
3.1	Construindo o sistema	19
3.2	Equação de estado	20
4	RESULTADOS	23
4.1	Estimando a equação de estado	23
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	26
	REFERÊNCIAS	27

1 INTRODUÇÃO

Métodos de Monte Carlo englobam um conjunto de técnicas estocásticas para a obtenção da expectativa de grandezas utilizando-se da lei dos grandes números. No início do século XX, Andrei Markov demonstrou que amostras dependentes ainda podem seguir a lei dos grandes números, desde que sigam uma sequência de eventos (Markov, 2006), originando o que hoje leva seu nome, uma cadeia de Markov.

Com o advento de máquinas de computação rápida, a utilização de cadeias de Markov em métodos de Monte Carlo popularizou-se, sendo aplicada em diversos problemas estatísticos. Sistemas de discos rígidos bidimensionais são uma base teórica sólida, podendo ser diretamente estendidos para a modelagem de diversos sistemas físicos. Utilizando-se de teorias estatísticas e termodinâmicas, pode-se obter boas aproximações do comportamento de sistemas complexos que não podem ser obtidas de outra forma.

Em seu trabalho (Metropolis *et al.*, 1953) estuda tais sistemas de discos rígidos, em sua variante mais simples, sem interação a distância, obtendo valores para equação de estado utilizando-se da densidade superficial de outras partículas na proximidade de uma partícula. Utilizando-se de uma cadeia de Markov calcula-se o valor esperado da densidade radial $g(r)$ nas proximidades das partículas. Extrapolando-se $g(r)$ para o raio de contato entre partículas obtém-se a grandeza desejada. Também é possível estudar um comportamento oscilatório em distâncias muito maiores que o raio das partículas, observando-se uma transição para um comportamento mais fluido em baixas densidades. Esse trabalho reproduz essas simulações.

mente falando, uma cadeia de Markov é um processo estocástico onde novos estados são obtidos a partir de uma probabilidade de transição, que depende apenas do estado anterior. Ao definir-se uma boa regra para as probabilidades de transição é possível construir um algoritmo que obtém amostras que respeitam a distribuição desejada.

Dado um sistema com N estados possíveis, uma densidade de probabilidade $\pi = \{\pi(\mathbf{x}_1), \pi(\mathbf{x}_2), \dots, \pi(\mathbf{x}_N)\}$, $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, sendo $\pi(x_i)$ a probabilidade de encontrar o estado x_i . Definimos $p(x_i \rightarrow x_j)$ como a probabilidade de uma amostra ir de x_i para x_j em um passo da cadeia, deve depender apenas do estado atual e ser invariante no tempo.

É importante notar algumas propriedades básicas:

$$\sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}} \pi(\mathbf{x}_i) = 1, \quad (2.3)$$

$$\sum_{j \in \mathcal{X}} p(x_i \rightarrow x_j) = 1, \quad \forall x_i \in \mathcal{X}. \quad (2.4)$$

A equação 2.3 é a normalização para a distribuição de probabilidades, em 2.4 a transição é normalizada para cada estado. Importante notar que $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$ é possível, correspondendo a uma rejeição.

2.2.1 Balanço detalhado e convergência de uma cadeia de Markov

Cadeias onde o conjunto de transições $p(x_i \rightarrow x_j)$ e $\pi(x_i)$ permanecem invariantes com o tempo é de interesse particular nesse projeto. Nessas condições, temos o balanço global para o sistema:

$$\sum_{x_i \in \mathcal{X}} \pi(x_i) p(x_i \rightarrow x_j) = \pi(x_j), \quad \forall x_j \in \mathcal{X}, \quad (2.5)$$

ou em notação matricial, com $P = \{p(x_i \rightarrow x_j)\}$ e $\pi = \{\pi(x_i)\}$;

$$P\pi = \pi. \quad (2.6)$$

É importante tomar o devido cuidado para que nossa matriz de transição P respeite 2.6 a partir de algum momento da simulação. Para garantir que essa densidade de probabilidade

exista, pode-se checar pelo balanço detalhado de nossa cadeia. Utilizando-se de 2.4 pode-se reescrever 2.6 na forma:

$$\sum_{x_j \neq x_i} \pi(x_i) p(x_i \rightarrow x_j) = \sum_{x_j \neq x_i} \pi(x_k) p(x_k \rightarrow x_i), \quad (2.7)$$

ou seja, o fluxo de probabilidade em um estado tem de ser igual ao fluxo de saída.

Uma condição para que essa regra seja respeitada é comumente referenciada como balanço detalhado:

$$\pi(x_i) p(x_i \rightarrow x_j) = \pi(x_j) p(x_j \rightarrow x_i) \quad \forall x_i, x_j \in \mathcal{X}. \quad (2.8)$$

A condição é suficiente, mas não necessária, para P satisfazer o balanço global. Contudo é uma importante condição para derivar um algoritmo posteriormente.

Mesmo que a matriz de transição P seja invariante e respeite o balanço detalhado, possuindo assim uma densidade de probabilidade estacionária, nada garante que aplicações sucessivas de P em um estado inicial nos leve ao equilíbrio. Para garantir que uma distribuição de probabilidades inicial π^0 convirja para a distribuição invariante desejada π em um tempo arbitrário t . Utilizando-se do método apresentado por (Krauth, 2006)

$$P^t \pi^0 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi. \quad (2.9)$$

Sendo λ_k autovalores de P e u_k seus autovetores.

$$P \mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{u}_k. \quad (2.10)$$

Assumindo que P respeita o balanço detalhado, P é simétrica, então forma uma base. Pode-se assim escrever qualquer vetor de distribuições inicial como

$$\pi^0 = \sum_{k=1}^N \alpha_k \mathbf{u}_k. \quad (2.11)$$

Aplicando P a esse vetor i vezes e usando 2.10.

$$P^i \pi^0 = \sum_{k=1}^N \alpha_k (\lambda_k)^i \mathbf{u}_k \quad (2.12)$$

Pelo teorema de Perron–Frobenius assegura que, para matrizes primitivas:

- a) existe um autovalor λ_{pf} real positivo maior que zero;
- b) $\lambda_{pf} > |\lambda_k|$ para todo $\lambda_k \neq \lambda_{pf}$;
- c) Autovetor associado a λ_{pf} é estritamente positivo.

Utilizando a equação 2.4 sabemos que o maior autovalor $\lambda_{pf} = 1$. Obtem-se:

$$P^i \pi^0 = \alpha_1 \mathbf{u}_1 + \sum_{k \neq 1} \alpha_k (\lambda_k)^i \mathbf{u}_k \xrightarrow{i \rightarrow \infty} \alpha_1 \mathbf{u}_1 \quad (2.13)$$

Dessa forma, a matriz de transição respeita o balanço detalhado e é ergódica, a cadeia de markov converge para uma densidade de probabilidade estática π .

2.3 Algoritmo de Metropolis

Agora temos as ferramentas teóricas necessárias para derivar uma alternativa ao algoritmo 1 utilizando cadeias de Markov. Definindo a probabilidade de transição

$$P(x_i \rightarrow x_j) = A(x_i \rightarrow x_j) p(x_i \rightarrow x_j), \quad (2.14)$$

onde $A(x_i \rightarrow x_j)$ é a probabilidade de se considerar o movimento e $p(x_i \rightarrow x_j)$ a probabilidade de aceitar o movimento.

Deseja-se construir 2.14 de forma que a simulação forneça amostras com uma densidade de probabilidade estacionária desejada π . Aplicando-se a equação 2.14 no balanço detalhado 2.8:

$$\frac{p(x_i \rightarrow x_j)}{p(x_j \rightarrow x_i)} = \frac{\pi(x_j) A(x_j \rightarrow x_i)}{\pi(x_i) A(x_i \rightarrow x_j)} \quad (2.15)$$

Definindo $p(x_i \rightarrow x_j)$ de forma semelhante ao proposto por (Metropolis *et al.*, 1953):

$$p(x_i \rightarrow x_j) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(x_j) A(x_j \rightarrow x_i)}{\pi(x_i) A(x_i \rightarrow x_j)} \right\}. \quad (2.16)$$

Assim, se considerarmos um estado onde $\pi(x_j) A(x_j \rightarrow x_i) < \pi(x_i) A(x_i \rightarrow x_j)$ temos:

$$p(x_i \rightarrow x_j) = \frac{\pi(x_j) A(x_j \rightarrow x_i)}{\pi(x_i) A(x_i \rightarrow x_j)} < 1, \quad (2.17)$$

$$p(x_j \rightarrow x_i) = 1.$$

Onde podemos ver que 2.15 é respeitada. O mesmo é válido para $\pi(x_j) < \pi(x_i)$ e trivialmente $\pi(x_j) = \pi(x_i)$. Tendo assim o balanço detalhado respeitado ao se escolher 2.16.

Por fim so nos resta provar que nossa simulação vai convergir para a densidade de probabilidade desejada. Como permitimos uma probabilidade de rejeição não nula basta que $A(x_i \rightarrow x_j)$ proposto seja irreduzível, garantindo assim a ergodicidade e a convergencia da simulação. Contudo isso deve ser estudado para cada problema estudado.

Agora vamos utilizar a probabilidade de transição proposta para construir nosso algoritmo alternativo a 1. Por questão de simplicidade vamos consicderar o caso especial, porem anida de interesse, onde $A(x_i \rightarrow x_j) = A(x_j \rightarrow x_i)$. Assim podemos construir nosso algoritmo para cada movimento como:

Algoritmo 2: Algoritmo de Metropolis–Hastings

Entrada: x : estado atual, $\pi(x)$: densidade de probabilidade desejada

início

```

 $x_{next} \sim A(x, \cdot)$ ; // Escolhe próximo estado
if  $\pi(x_{next}) > \pi(x)$  then
  | return  $x_{next}$ 
end
 $r \sim rand(0, 1)$ ;
if  $r < \frac{\pi(x_{next})}{\pi(x)}$  then
  | return  $x_{next}$ ; // Movimento aceito
end
return  $x$ 

```

fim

Com o algoritmo 2 temos uma alternativa a amostragem direta aplicada na terceira linha de 1. Assim, tendo uma proposta de $A(x_i \rightarrow x_j)$ aplicamos nosso novo algoritmo para a amostragem e calculamos nosso observável como proposto em 1

2.4 Sistema de discos rígidos

O sistema composto de discos rígidos foi o alvo das investigações de métropolis no seu famoso artigo aqui já citado. A aplicação do algoritmo em discos rígidos sem interação à distância é simples, mas poderosa.

Definimos nosso sistema como composto de N partículas idênticas com coordenadas,

em duas dimensões, dada por $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$, velocidades $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ e raio σ . Essas partículas se movem livremente em recipiente retangular de dimensões L_x e L_y e só interagem pelo seu núcleo rígido, colidindo elásticamente. Temos que, para cada partícula, a energia é dada por:

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m \mathbf{v}_i^2 + \sum_{i < j} V(d_{ij}) \quad (2.18)$$

Onde d_{ij} é a distância entre as partículas $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$. E $V(d_{ij})$ um potencial que so depende das distâncias entre as partículas e assume apenas dois valores, nulo para $d_{ij} > 2\sigma$ e infinito para $d_{ij} < 2\sigma$

$$E_{pot} \equiv V(d_{ij}) = \begin{cases} \infty, & \text{se } d_{ij} < 2\sigma, \\ 0, & \text{se } d_{ij} \geq 2\sigma. \end{cases} \quad (2.19)$$

Assumindo para nosso sistema temperatura, volume e número de partículas constantes, temos para o ensemble canônico que uma propriedade desejada do sistema pode ser estimada com:

$$\langle F \rangle = \frac{\int F \exp(-\beta E) d^{2N} \mathbf{x} d^{2N} \mathbf{v}}{\int \exp(-\beta E) d^{2N} \mathbf{x} d^{2N} \mathbf{v}} \quad (2.20)$$

Como a $V(d_{ij})$ depende apenas da configuração de nosso sistema a energia dentro da distribuição se fatora e obtemos, para F independente de \mathbf{v} .

$$\langle F \rangle = \frac{\int F \exp(-\beta E_{pot}) d^{2N} \mathbf{x}}{\int \exp(-\beta E_{pot}) d^{2N} \mathbf{x}} \quad (2.21)$$

Equação 2.21 possui mesma forma de 2.2 com $\pi(x) = \exp(-\beta E_{pot})$.

O que vai nos permitir estimar qualquer quantidade de interesse F utilizando 1 para obter amostras do nosso espaço de configurações, não precisando das velocidades.

2.4.1 Algoritmo de Metropolis local

Poderíamos, de maneira ingênua, construir nossa simulação levando em consideração apenas a dinâmica newtoniana do nosso sistema. Tendo completo conhecimento das posições e velocidades de nossas partículas, podemos determinar exatamente quando cada colisão vai

ocorrer e assim, exatamente como nosso sistema vai evoluir. O código pode ser construído com relativa facilidade, mas não teríamos a mesma sorte em obter bons resultados, sistema com muitas partículas, junto da natureza caótica das colisões, torna tal método impraticável (Krauth, 2006).

Desenvolveu-se nos capítulos anteriores uma metodologia muito mais eficiente, vamos fazer com que nosso sistema evolua de uma configuração a outra, através de movimentos modelados a nosso favor.

Pode-se construir a transição entre estados do sistema possibilitando-se que uma partícula aleatória realize pequenos movimentos.

$$\begin{aligned}x_i^{(n+1)} &= x_i^{(n)} + \varepsilon_x \\y_i^{(n+1)} &= y_i^{(n)} + \varepsilon_y\end{aligned}\tag{2.22}$$

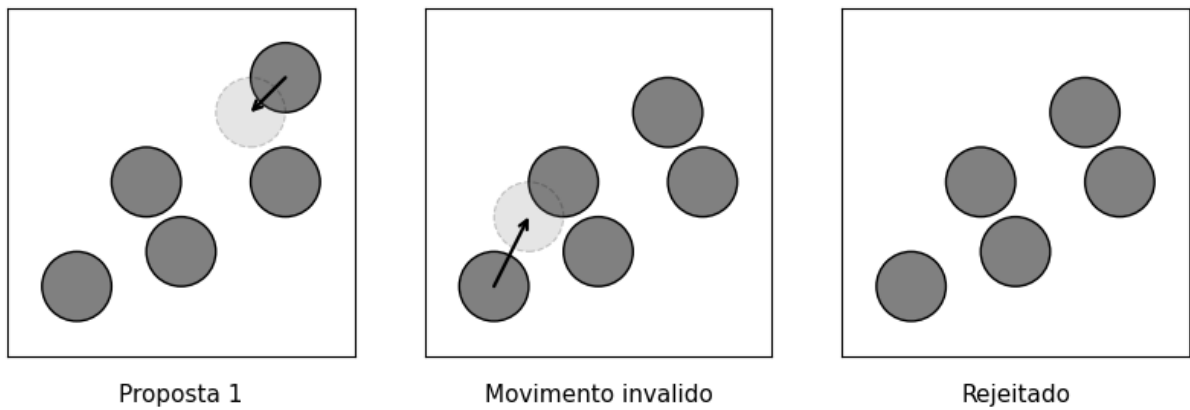
Onde ε é um número real aleatório obedecendo $-\delta \leq \varepsilon \leq \delta$ onde δ é um número real arbitrário que deve ser definido com as propriedades do sistema em mente.

Para determinar se o movimento sugerido pelo deslocamento é válido ou não, utiliza-se a regra proposta em 2.16, onde a densidade de equilíbrio $\pi(\mathbf{X}) = \exp(-\beta E(\mathbf{X}))$ e trivialmente $A(\mathbf{X}^n \rightarrow \mathbf{X}^{n+1}) = A(\mathbf{X}^{(n+1)} \rightarrow \mathbf{X}^n)$, onde $\mathbf{X}^n \equiv \{\mathbf{x}_1^{(n)}, \mathbf{x}_2^{(n)}, \dots, \mathbf{x}_N^{(n)}\}$. Utilizando-se de 2.19 e 2.21 fica evidente que todo movimento inválido deve ser rejeitado, e todos os outros permitidos.

Assumi-se também a ergodicidade do sistema como em (Metropolis *et al.*, 1953), já que é razoável admitir que dado tempo suficiente toda partícula sairá do seu local de origem visitando todas as posições possíveis. Posteriormente, será mostrado que tal premissa não é sempre válida ao considerar sistemas densos; Em algumas configurações específicas pode ocorrer um "congelamento" das partículas por longos períodos (Höllmer *et al.*, 2022).

Então, a cadeia de Markov fica definida como sucessivos deslocamentos de uma única partícula obedecendo 2.22 onde movimentos que levam a configurações com superposição de duas ou mais partículas são rejeitados (A rejeição conta como uma amostra!). A figura 1 ilustra dois movimentos, onde o primeiro é aceito e o segundo é rejeitado, obtendo-se três amostras.

Figura 1 – dois movimentos distintos da cadeia de Markov. O primeiro é aceito, fazendo com que a partícula se mova. O segundo movimento geraria uma configuração inválida



Fonte: Elaborado pelo autor

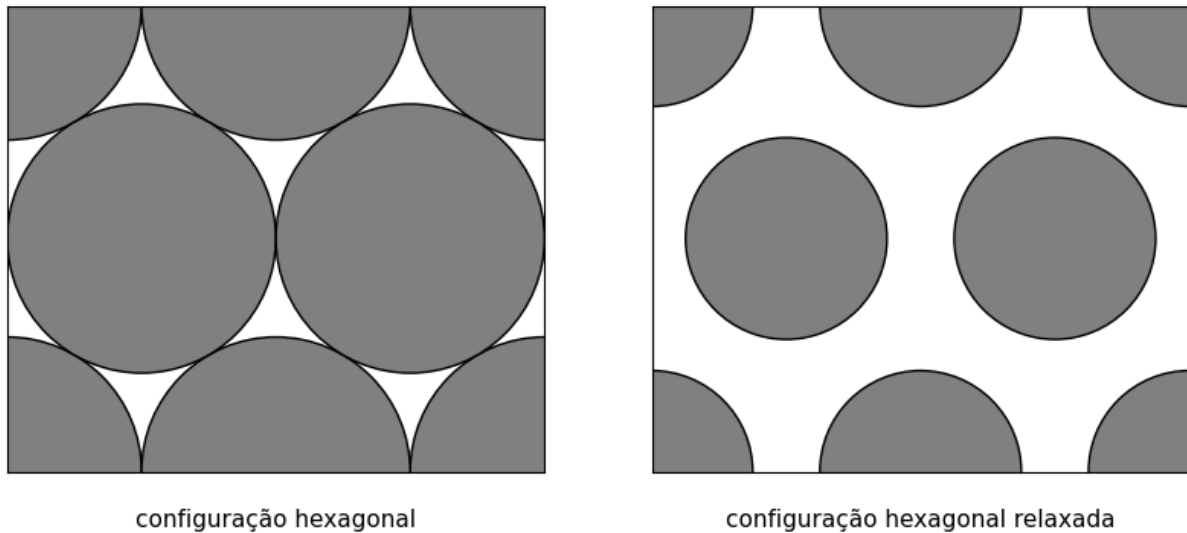
3 METODOLOGIA

Nas seções anteriores definiu-se as ferramentas necessárias para analisar analiticamente um sistema físico composto de partículas com núcleos duros. Agora tem-se a proposta de construir, de maneira clara, um procedimento para testar a utilidade do algoritmo e buscar analisar seus limites.

3.1 Construindo o sistema

Para iniciar-se a simulação, o sistema partirá de uma configuração inicial disposta em uma estrutura hexagonal. Dessa maneira cada partícula possui 6 vizinhos à uma distância d como mostrado na figura 2 com condições de contorno periódicas.

Figura 2 – Estrutura hexagonal compacta (à esquerda) com $2\sigma = d$ e caixa de dimensões $L_x \times \frac{\sqrt{3}}{2}L_x$; à direita, a mesma estrutura relaxada ($\sigma = \frac{d}{2} - \epsilon$).



Fonte: Elaborado pelo autor

definindo-se os raios dos discos como $2\sigma = d$ temos a configuração mais densa possível. Essa configuração deve ser evitada, pois todos os movimentos de nosso sistema serão rejeitados. Para que os discos tenham a possibilidade de escapar da configuração inicial inseri-se um fator de relaxamento $0 < \epsilon < \frac{d}{2}$ para os raios dos discos, de forma que $\sigma = \frac{d}{2} - \epsilon$

Inicialmente utilizou-se as mesmas condições propostas por (Metropolis *et al.*, 1953), a título de comparação.

Sendo o sistema disposto em uma configuração hexagonal e uma caixa quadrada de dimensão unitária com 224 partículas onde $d = \frac{1}{14}$ é a distancia inicial entre duas partículas

vizinhasm, ν um inteiro entre 0 e 8 que define o relaxamento do raio das esferas a partir do raio máximo $d/2$. Define-se d_0 como o raio, a partir de uma partícula, que defini a região proibida de outras partículas, onde aconteceriam colisões:

$$d_0 = d(1 - 2^{\nu-8}) \quad (3.1)$$

É importante retornar a discussão de ergodicidade nesse momento. Nosso método é teoricamente ergódico para $\varepsilon > 0$, contudo, certas configurações podem precisar de uma quantidade impraticável de movimentos para permitir que uma partícula escape de sua região inicial.

Na figura 3 mostram-se sistemas com diferentes níveis de relaxamento, na linha superior $\nu = 6.5$ enquanto na inferior $\nu = 5$. Cada coluna representa o sistema em $t = 0$, $t = 2 * 10^5$ e $t = 4 * 10^5$, onde t é o tempo decorrido da simulação. A partícula destacada é a mesma durante a simulação. Nota-se que no sistema de maior densidade a partícula destacada fica confinada nas proximidades de sua região inicial, mesmo depois de um tempo considerável da simulação. Em teoria, mesmo no sistema mais denso, essa partícula irá percorrer todo o sistema, contudo, isso demandaria um longo período de simulação.

O deslocamento máximo em uma direção sera definido por:

$$\delta = d - d_0 \quad (3.2)$$

Onde se obtém uma taxa de aceitação de aproximadamente 50%.

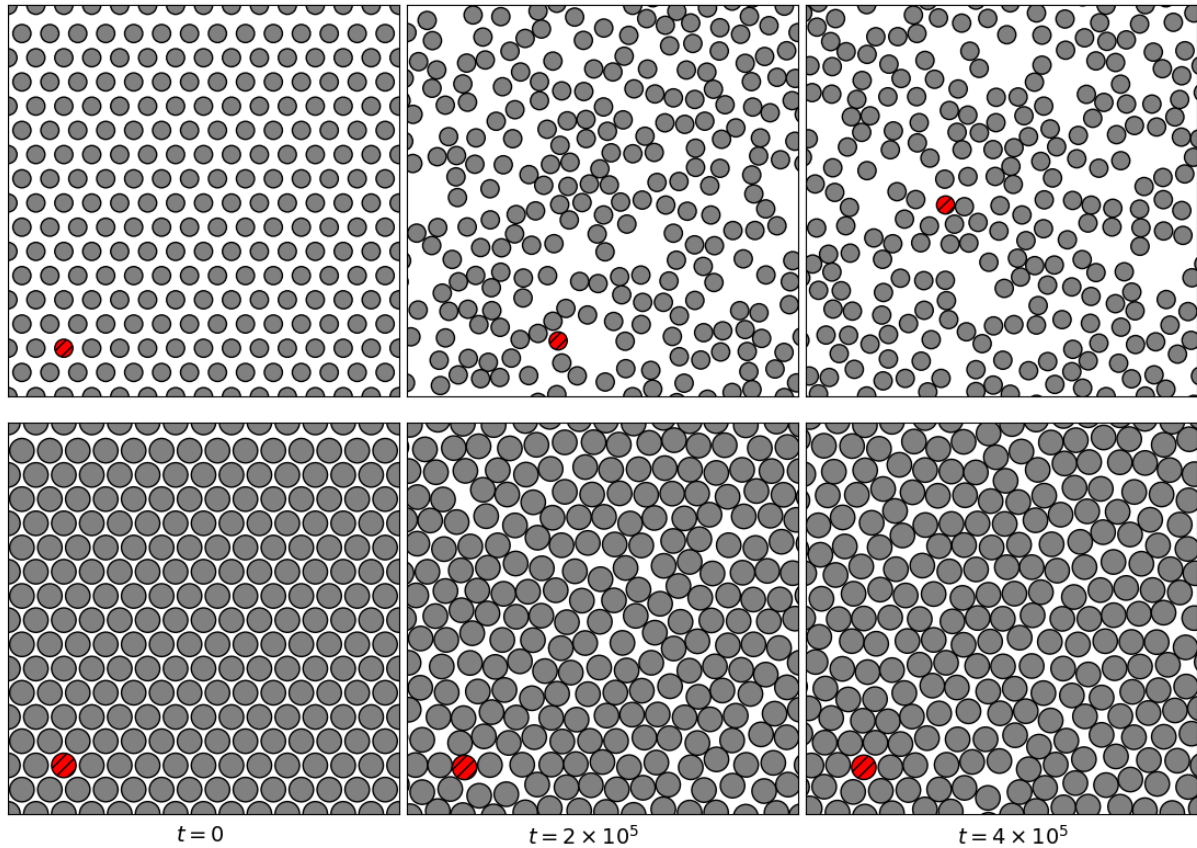
3.2 Equação de estado

O algoritmo 3 ilustra a lógica central utilizada para evoluir o sistema. Lembrando que `move_particle()` e `min_distance()` devem considerar as condições de contorno, onde um movimento para além de uma borda fará que a partícula atravesse pelo lado oposto, e a distância relativa de duas partículas não pode exceder $\{\frac{L_x}{2}, \frac{L_y}{2}\}$.

A equação de estado do sistema de discos rígidos é derivado em função de \bar{n} em (Metropolis *et al.*, 1953). Onde \bar{n} é a densidade média de outras partículas na superfície de uma partícula.

$$PA = Nk_bT(1 + 2\pi\sigma^2\bar{n}) \quad (3.3)$$

Figura 3 – Evolução de dois sistemas com diferentes níveis de relaxamento. Notamos o confinamento da partícula destacada na configuração inferior, mais densa ($v = 5$), em relação a configuração superior, menos densa ($v = 6.5$)



Fonte: Elaborado pelo autor

Algoritmo 3: Algoritmo de metrópolis local para discos rígidos

Entrada: $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$, L_x, L_y , δ , σ
 $k \leftarrow \text{rand}(1, N)$;
 $d\mathbf{x} \leftarrow (\text{rand}(-\delta, \delta), \text{rand}(-\delta, \delta))$;
 $\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \text{move_particle}(\mathbf{x}_k, d\mathbf{x})$; // movimenta de acordo com condições de contorno
 $d_{\text{min}} \leftarrow \text{min_distance}(\mathbf{x}_{\text{new}})$; // determina partícula mais próxima
if $d_{\text{min}} \geq 2\sigma$ **then**
 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}}$; // atualiza a posição da partícula k
end
return $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$; // Retorna as posições. Movimento aceito ou não

Para estimar-se o valor de \bar{n} desejado estima-se inicialmente a função de distribuição radial $g(r)$ nas proximidades de uma partícula.

Calcula-se a densidade em um anel de disco entre d_0 e Kd_0 onde K é um número real maior que um arbitrário. Dividindo-se essa região em n_b intervalos de área igual ΔA temos:

$$\Delta A = \frac{\pi d_0^2 (K^2 - 1)}{n_b} \quad (3.4)$$

Em seguida calcula-se a quantidade de pares distintos N_l cuja distância relativa r entre elas caia dentro de uma das regiões determinadas por:

$$l\Delta A + \pi d_0^2 < \pi r^2 \leq (l+1)\Delta A + \pi d_0^2 \quad (3.5)$$

Onde l é um inteiro tal que $0 \leq l < n_b$

Após T passos calcula-se o valor esperado de N_l em cada intervalo utilizando-se de

2.2. De forma que, depois de T passos:

$$\langle N_l \rangle = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^T N_l^{(i)} \quad (3.6)$$

Podemos assim obter o valor estimado da densidade de partículas em cada região l usando:

$$\langle g(r_l) \rangle = \frac{2\langle N_l \rangle}{\rho N \Delta A} = \frac{2\langle N_l \rangle}{N^2 \Delta A} \quad (3.7)$$

Onde r_l foi utilizado para denotar o raio do centro da região l , e a contagem média de discos na região foi normalizada onde $\rho = \frac{N}{A}$ é a densidade do sistema.

Podemos assim estimar \bar{n} extrapolando 3.7 para $r_l = d_0$. assim:

$$\bar{n} \equiv \rho \langle g(d_0) \rangle = \frac{2\langle N_0 \rangle}{N \Delta A} \quad (3.8)$$

$$\frac{PA}{Nk_b T} - 1 = \pi d_0^2 \frac{\langle N_0 \rangle}{N \Delta A} \quad (3.9)$$

Em seguida, a região para o cálculo de $g(r)$ é expandida próxima ao limite, com $r = 0.4$. E visualiza-se o comportamento da densidade distante das partículas.

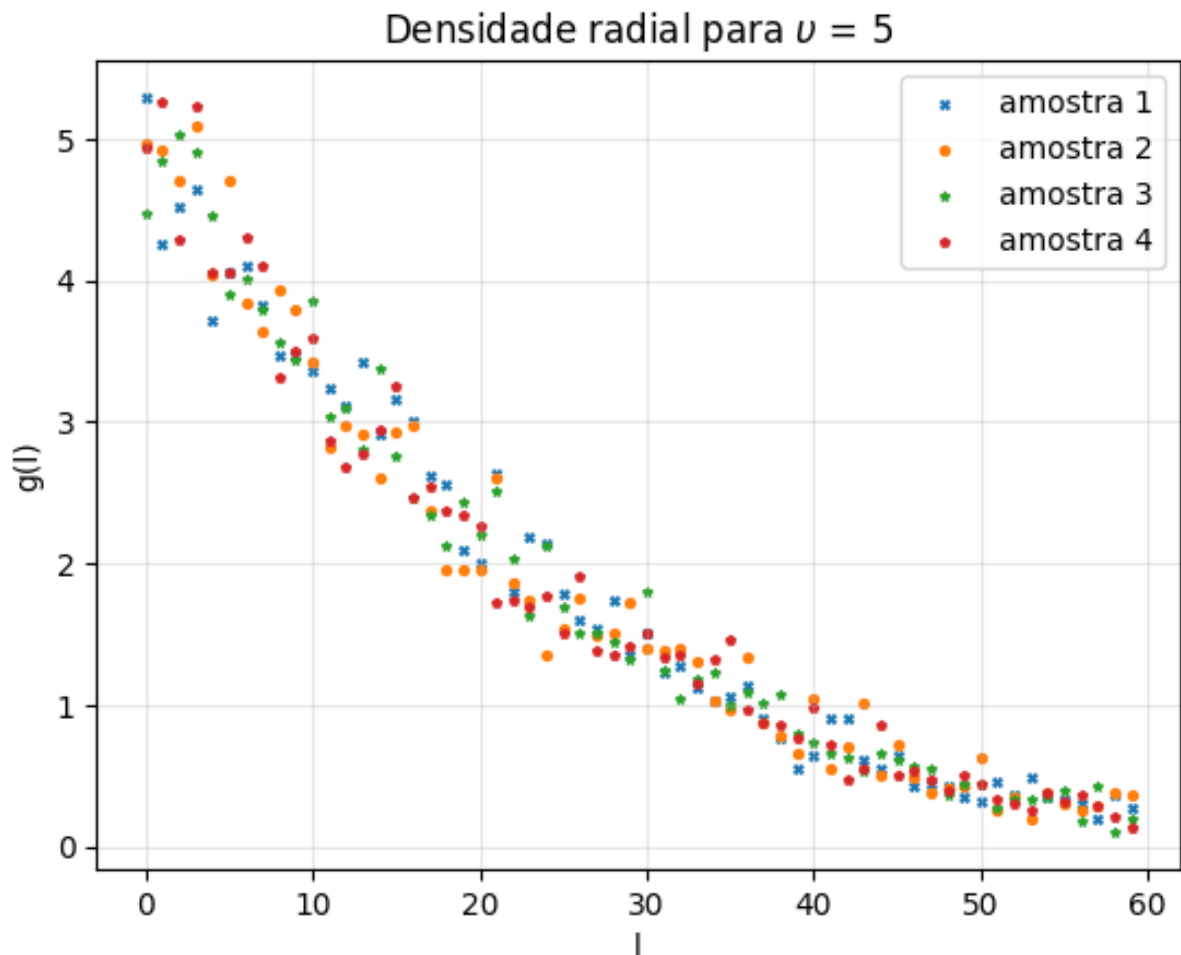
4 RESULTADOS

4.1 Estimando a equação de estado

Vamos inicialmente definir $\nu = 5$, $K = 1.5$ e $n_b = 64$. O deslocamento máximo de cada partícula foi definido como $d - d_0$. Seguiremos com o procedimento semelhante ao de metropolis, obtendo a média em 3.6 a cada 16 ciclos, onde um ciclo corresponde a $T = N$. Antes de obter qualquer resultado deixou-se o sistema evoluir por 5000 passos.

A figura 4 corresponde a 4 médias de 16 ciclos.

Figura 4 – Densidade radial para $\nu = 5$ nos primeiros 60 intervalos. Cada ponto corresponde ao valor estimado $\langle g(r_l) \rangle$. As formas diferenciam entre amostras de 16 ciclos.



Fonte: Elaborado pelo autor

Checando visualmente conseguimos notar que os dados se ajustam bem a uma reta nos primeiros intervalos. A tabela 1 mostra resultados obtidos por simulações criadas para este trabalho em comparação com resultados obtidos por metropolis et al. e os resultados esperados

com teoria de volume livre também apontado no artigo.

O valor de K foi determinado por inspeção do histograma de áreas para principalmente se garantir consistência entre diferentes intervalos. Também se observou a redução na precisão conforme aumentamos o relaxamento nos raios dos discos. O aumento no tempo de simulação não gerou grandes melhorias nos resultados para sistemas de baixa densidade.

Tabela 1 – Comparação entre os resultados de $g(d_0)$ para $v = 5$, $K = 1.5$, $n_{bins} = 64$

v	Fit Linear	Fit Quadrático	Resultados em Metrópolis	teoria de volume livre
5	6.79	6.97	6.43	6.72
6	2.93	2.94	2.929	2.939
6.5	1.35	1.46	1.486	1.802

A evolução de $g(r_l)$ também foi estudado para áreas mais distantes da partícula central. Para isso abandonamos o uso de K para limitar a área explorada e definimos intervalos dentro da região delimitada por d_0 e 0.4, um pouco antes do limite que a condição de contorno periódica nos permite. Dividimos em 400 intervalos de áreas iguais.

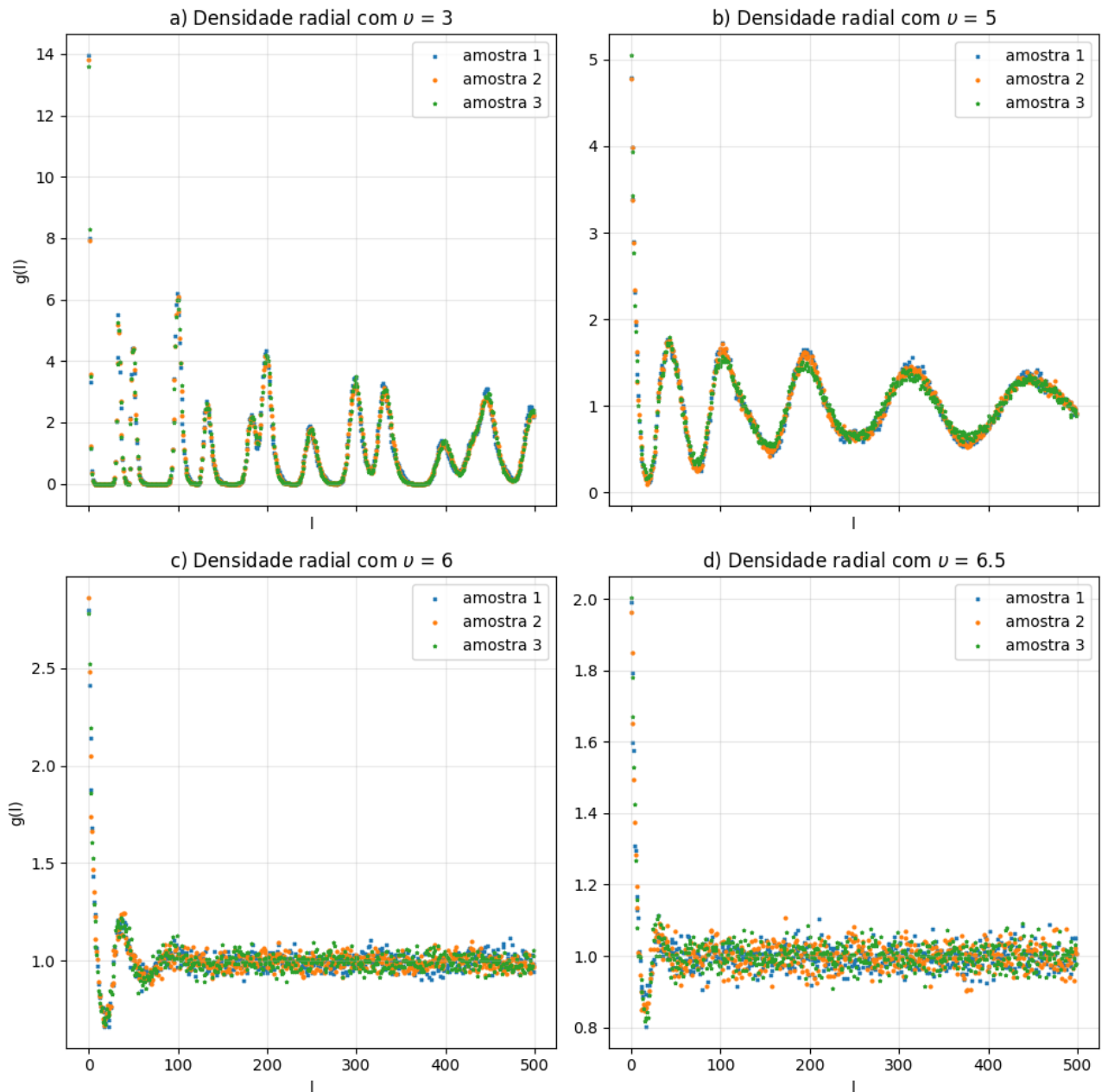
Deixamos quatro sistemas diferentes evoluírem durante 100 ciclos, e obtemos 3 amostras de cada.

Com intuito de explorar mais a região onde ocorre uma redução na precisão do método os resultados na figura 5 são para esferas com relaxamento de $v = 3$, $v = 5$, $v = 6$ e $v = 6.5$.

Nota-se que para sistemas com um relaxamento menor (gráficos a e b) temos picos e vales de densidade mais pronunciados e com certa periodicidade, que relaxa com a distância, indicando certa estrutura na configuração. Para configurações com menor densidade (figura 5.c e 5.d) a periodicidade relaxa mais rápido, indicando que partículas se desconectando mais rápido uma das outras e o sistema se aproxima de um gás ideal.

Pode-se comparar com a figura 3, onde podemos visualizar a diferença entre a coesão de altas densidades e fluidez de baixas densidades. Esse pode ser um dos fatores que contribuem para a imprecisão desse método em baixas densidades. Partículas em baixa densidade tem mais tempo de movimento livre e interação com menor frequência, reduzindo a quantidade de amostras com partículas dentro do raio de colisão d_0 . Em altas densidades prendem o sistema em configurações onde partículas estão mais próximas e possuem mais interação, que é de maior interesse para a grandez calculada.

Figura 5 – Diferentes distribuições de densidade radial em diferentes fatores de relaxamento.



Fonte: Elaborado pelo autor

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Nesse trabalho caminhamos pelos conceitos básicos de uma cadeia de markov e entendemos o funcionamento do Algoritmo de metrópolis-hasting. O artigo de Métropolis, do qual esse trabalho toma inspiração, foi um dos primeiros a demonstrar a força desse método no século passado e até hoje suas implicações são estudadas.

Construímos uma simulação para esferas rígidas utilizando um algoritmo de MCMC e observamos o comportamento em diferentes densidades. Interessante notar que foi possível obter bons resultados mesmo em configurações de altas densidades onde partículas podem ficar confinadas e a ergodicidade é difícil de ser atingida. Tais configurações ainda são alvos de estudos e podem existir até mesmo em baixas densidade como empacotamentos de Böröczky (Philipp Höllmer Sparse hard-disk packings and local Markov chains), estudos em diferentes algoritmos de monte carlo para solucionar esses problemas, como algoritmos de cadeias de markov não reversíveis, podem ainda gerar avanços substanciais na área.

O sistema e algoritmo aqui estudado, embora abrangente, possui certas limitações que impossibilitam lidar com outros tipos de sistemas de partículas. Pode-se variar o tamanhos, ou fazer com que as partículas não sejam rígidas e possam absorver certo impacto. Pode-se ver variações do sistema sendo aplicado em problemas mais modernos como em (Liu e Luijten, 2004)

REFERÊNCIAS

HÖLLMER, P.; NOIRAUT, N.; LI, B.; MAGGS, A. C.; KRAUTH, W. Sparse hard-disk packings and local markov chains. **Journal of Statistical Physics**, v. 187, n. 31, p. 1–25, abr. 2022.

KRAUTH, W. **Statistical Mechanics: Algorithms and computations**. New York: Oxford University, 2006.

LIU, J.; LUIJTEN, E. Rejection-free geometric cluster algorithm for complex fluids. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 3, jan. 2004.

MARKOV, A. An example of statistical investigation of the text *Eugene Onegin* concerning the connection of samples in chains. **Science in Context**, v. 19, n. 4, p. 591–600, 2006.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H. Equation of state calculation by fast computing machines. **The Journal of Chemical Physics**, v. 21, n. 6, jun. 1953.