

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ CENTRO DE CIÊNCIAS DEPARTAMENTO DE FÍSICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

FERNANDO JOSÉ DE ALMEIDA

INFERÊNCIA ESTATÍSTICA E ESCOLHA DE MODELOS APLICADOS À DINÂMICA DE SISTEMAS SUPERAMORTECIDOS

FORTALEZA

FERNANDO JOSÉ DE ALMEIDA

INFERÊNCIA ESTATÍSTICA E ESCOLHA DE MODELOS APLICADOS À DINÂMICA DE SISTEMAS SUPERAMORTECIDOS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Matéria Condensada

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

FORTALEZA

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

A446i Almeida, Fernando José de.

Inferência estatística e escolha de modelos aplicados à dinâmica de sistemas superamortecidos / Fernando José de Almeida. – 2018.

47 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Bioquímica, Fortaleza, 2018.

Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.

1. Modelo estatístico. 2. Estimativa de parâmetros. I. Título.

CDD 572

FERNANDO JOSÉ DE ALMEIDA

INFERÊNCIA ESTATÍSTICA E ESCOLHA DE MODELOS APLICADOS À DINÂMICA DE SISTEMAS SUPERAMORTECIDOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: <u>31/07/2018</u>

BANCA EXAMINADORA

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

Dr. Saulo Davi Soares e Reis Universidade Federal do Ceará (UFC)

Dr. César Menezes Vieira Instituto federal de educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE)

À minha família, pelo apoio contínuo, por sempre acreditarem nas minhas escolhas.

AGRADECIMENTOS

Aos Meus Pais, pelo apoio e compreensão irestritos.

Ao professor José Soares de Andrade Junior, pelas orientações, e por me dar a oportunidade de iniciar na pesquisa científica.

Ao professor André Auto Moreira, pela orientação, paciência e incentivo ao longo desse trabalho, que tornaram possível a realização do mesmo.

A esta universidade, por todos os recursos empregados e o acompanhamento durante toda a formação de seus alunos, em sua rotina no campus.

Aos amigos e colegas presentes no dia dia a longo da pós graduação, em especial, Emanuel Fontelles, Aurélio Wildson Teixeira de Noronha, Felipe Gioachino Operti, Franscico Israel Alves Nascimento João Paulo da Costa Nogueira, Jonathan Marcio Amâncio Sales, Marciel Carvalho Gomes, Rilder de Sousa Pires, Samuel Morais da Silva e Wagner Rodrigues de Sena, que dispuseram de seu tempo para discussões e que foram de grande ajuda para realização deste trabalho, mesmo nos momentos em que os assuntos não fossem relacionados específicamente a este trabalho.

À CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo apoio financeiro ao longo do período do Programa de Pós Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará.

RESUMO

A maximização da *likelihood* é um método para estimar parâmetros de um modelo estatístico. Nessa abordagem, posto um conjunto de dados empiricos e um dado modelo estatístico, os diferentes parâmetros deste modelo são ajustados de forma a maximizar a probabilidade dos resultados empíricos serem observados dentro daquele modelo. Nesta dissertação vamos usar essa abordagem na investigação da estrutura de equilíbrio de um sistema de partículas repulsivas em um meio dissipativo. Vamos comparar duas abordagens distintas desse modelo. Em uma abordagem microscópica resolvemos a dinâmica ao nível das partículas, integrando as equações de movimento até chegar ao equilíbrio mecânico. Numa outra abordagem em mais larga escala descrevemos o estado de equilíbrio pela densidade de probabilidade de encontrar uma partícula em um determinado ponto. O modelo de sistema que investigamos é uma idealização unidimensional da forma da interação entre vórtices supercondutores. Apesar de idealizado, este modelo pode ser usado adequadamente para situações onde, devido as simetrias dos sistema, apenas uma direção torna-se relevante. Os resultados obtidos da solução das equações de movimento são contrastados com duas possíveis abordagens contínuas. Em uma abordagem mais simplificada modelamos a distribuição como o corte de uma parábola de curvatura negativa tomando apenas a região positiva da curva. Nessa abordagem é nescessario apenas um parâmetro relativo a curvatura. A segunda descrição também prevê a forma de uma parabola de curvatura negativa, mas um segundo parametro é incluído para descrever uma possível descontinuidade no extremo da curva de distribuição. Descrevemos métodos de escolha de modelos para determinar em que condições cada uma das diferentes abordagens é mais apropriada em diferentes condições do sistema.

Palavras-chave: Modelo estatístico. Estimativa de parâmetros . Maximização da função *likelihood*.

ABSTRACT

Maximum-likelihood is a method for estimating parameters of a statistical models. In this approach, given a set of empirical data and a statistical model, the different model parameters are adjusted in order to maximize the probability for the empirical results being observed within that model. In this dissertation we will use this approach in the investigation of the equilibrium structure of a system of repulsive particles in a dissipative medium. We compare two distinct approaches to this model. In a microscopic approach we solve the dynamics at the level of the particles, integrating the equations of movement until arriving at the mechanical equilibrium. In another, larger-scale approach, we describe the equilibrium state by the density of probability of finding a particle at a given point. The system model that we investigate is a one-dimensional idealization of the form of the interaction between superconducting vortices. Although idealized, this model can be used adequately for situations where, due to the symmetries of the system, only one direction becomes relevant. The results obtained from the solution of the equations of motion are contrasted with two possible continuous approaches. In a more simplified approach we model the distribution as the cut of a parabola of negative curvature taking only the positive region of the curve. In this approach only one parameter relative to curvature is required. The second description also assumes the shape of a parabola of negative curvature, but a second parameter is included to describe a possible discontinuity at the end of the distribution curve. We describe methods of choosing models to determine under which conditions each different approaches is more appropriate under different system conditions.

Keywords: statistical model. Paramater estimation . Maximum-likelihood function.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Resistividade em função da temperatura nos metais normais e superconduto-	
res	12
Figura 2 – Comportamento magnético de um condutor perfeito hipotético	14
Figura 3 – Comportamento magnético do supercondutor	16
Figura 4 – Magnetização em função de H para os dois tipos de supercondutores	19
Figura 5 – O campo aplicado em função da temperatura para os dois tipos de supercon-	
dutores	20
Figura 6 – Campo magnético em um supercondutor tipo-II no estado intermediário	21
Figura 7 – Rede de vórtices no $NbSe_2$	22
Figura 8 – Gráfico da função K_0	23
Figura 9 – Comparação da densidade obtida da simulação, e a obtida dos modelos de 1	
e de 2 parâmetros, sem ajuste	32
Figura 10 – Gráfico do logaritmo natural da função <i>likelihood</i> no modelo 1 versus x_m .	34
Figura 11 – Gráfico do logaritmo natural da função <i>likelihood</i> no modelo 2 versus x_m .	36
Figura 12 – Gráfico do logaritmo natural da função <i>likelihood</i> no modelo 2 versus x_0 .	36
Figura 13 – Comportamento de $b(x_0, x_m)$ em função de N	37
Figura 14 – Comparação da densidade obtida da simulação, e a obtida dos modelos de 1	
e de 2 parâmetros, após o ajuste.	38
Figura 15 – Comportamento do AIC em função de k	39
Figura 16 – Comportamento do AIC em função de N	40
Figura 17 – Comportamento do BIC em função de k	41
Figura 18 – Comportamento do BIC em função de N	41
Figura 19 – Comportamento do BIC em função de N	42

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	SUPERCONDUTIVIDADE	11
2.1	O condutor perfeito	12
2.2	Efeito Meissner	14
2.3	Equações de London	16
2.4	O Campo crítico	17
2.5	Supercondutores tipo-II	18
2.5.1	Rede de vórtices	20
2.5.2	Campo magnético de um único vórtice	21
3	DINÂMICA DA INTERAÇÃO ENTRE PARTÍCULAS NO REGIME	
	SUPERAMORTECIDO	24
3.1	Equação de Langevin	24
3.2	Equação de Langevin no limite superamortecido	25
3.2.1	Equação de Langevin aplicada em vórtices de supercondutores tipo II	26
4	RESULTADOS	28
4.1	Método discreto	28
4.2	Modelos contínuos para partículas no regime superamortecido	29
4.2.1	Modelagem estatística e função likelihood	29
4.2.2	Abordagem 1: modelo com um parâmetro	30
4.2.3	Abordagem 2: modelo com dois parâmetros	31
4.2.4	Função likelihood para as duas abordagens	33
4.2.4.1	Estimativa para a primeira abordagem (1 parâmetro)	33
4.2.4.2	Estimativa para a segunda abordagem (2 parâmetros)	33
4.2.5	Critérios para decisão da melhor abordagem	38
4.2.5.1	Critério de Akaike	39
4.2.5.2	Critério Bayesiano	40
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	43
	REFERÊNCIAS	45

1 INTRODUÇÃO

A teoria da informação é uma descrição matemática que busca quantificar as condições e os parâmetros que envolvem a comunicação. É de consenso geral na área que sua origem como um campo de estudo independente se deve ao artigo publicado por Claude Shannon em 1948 (SHANNON, 2001). A palavra informação nesse campo é uma medida sobre a quantidade de escolhas disponíveis ao transmitir uma mensagem. Essas mensagens podem ser conjunto de símbolos escritos ou falados, imagens, sons. A abrangência desse campo de estudo é ampla. Uma medida de quantificação de informação denominada entropia de Shanon (H) é dada por

$$H = -\sum_{i=1}^{N} p_i log p_i, \tag{1.1}$$

onde p_i representa a probabilidade de escolha da mensagem *i*, e N o número total de mensagens disponíveis. Numericamente H representa o negativo do valor esperado do logaritmo das probabilidades. H é mínimo e igual a zero quando uma das probabilidades de escolha, por exemplo p_j , seja tal que $p_j = 1$, o que implica que todas as outra escolhas tem probabilidade zero. Isso é consistente pois nesse caso o sistema está determinado, não há informação disponível, nem liberdade de escolha na mensagem transmitida. H é máximo quando todas as probabilidades são iguais, implicando na maior liberdade de escolha possível de uma mensagem sem que influencie na liberdade de escolha de alguma outra do universo de opções.

A interpretação da entropia H como o número de escolhas disponíveis sobre um sistema, e a forma da Eq. (1.1) nos remete a entropia conhecida em física estatística,

$$S = k_B \sum_{i=1}^{N} p_i log p_i, \tag{1.2}$$

onde p_i é a probabilidade do sistema físico transitar para o microestado *i*, e k_B a constante de Boltzmann. Inclusive em (SHANNON, 2001) é dito que Boltzmann relacionava entropia com "informação perdida" em alguns de seus trabalhos em física estatística, na medida em que S é diretamente relacionada ao número de alternativas que permanecem possíveis ao sistema físico, subtraida de toda a informação já conhecida pela observação macroscópica da evolução do sistema. S representaria o que "ainda não sabemos" sobre o sistema.

A relação íntima entre a entropia de informação H e a entropia da termodinâmica sugere que muitos resultados obtidos em teoria da informação podem ser aplicados na solução de problemas físicos. A maximização de H também é natural em um modelo estatístico. Neste trabalho usaremos uma técnica de inferência estatística conhecida como MLE (*maximum li-kelihood estimation*), que na prática funciona como uma maximização de entropia, para obter parâmetros de um modelo estatístico. Usamos como problema físico o movimento de partículas no regime superamortecido. Mais específicamente a dinâmica de vórtices em supercondutores do tipo-II como objeto de análise. Apresentamos a simulação em dinâmica molecular dos vórtices, e comparamos com dois modelos que descrevem esse mesmo problema, mas de um ponto de vista probabilístico. Usamos inferência estatística para estimar os parâmetros desses modelos, e compará-los na tentativa de encontrar o modelo que descreve melhor o problema físico, ou seja, que perde menos informação. Para isso usamos alguns critérios provenientes do campo da teoria da informação: o AIC (*Akaike Information Criterion*) e o BIC (*Bayesian Information Criterion*).

A parte central deste trabalho é dividida em 3 capítulos: no primeiro explicamos o fenômeno da supercondutividade e introduzimos a dinâmica de vórtices em supercondutores. No segundo capítulo abordamos as equações de Langevin e seu uso na descrição do movimento de vórtices em supercondutores. Esse capítulo é a base do método discreto utilizado no trabalho para simulação computacional utilizando dinâmica molecular. Por fim, no último capítulo apresentamos os resultados, onde estimamos os parâmetros dos modelos estatísticos e comparamos para identificar qual dos modelos é a melhor opção para descrever o modelo real.

2 SUPERCONDUTIVIDADE

O fenômeno da supercondutividade foi primeiramente observado por Kamerlingh Onnes em 1911 (ONNES, 1911) apenas 3 anos depois de ter obtido êxito no processo de liquefação do hélio em seu laboratório em Leiden, Holanda. O que foi observado é que certos materiais passam por uma transição de fase quando submetidos a temperaturas suficientemente baixas, verificando-se a ausência de resistência a corrente elétrica, abaixo dessa temperatura de trânsição.

Onnes utilizou o mercúrio, que era o metal que melhor poderia ser purificado naquela época. Notou-se que a uma temperatura em torno de 4K o material sofria uma transição abrupta: abaixo dessa temperatura crítica o mercúrio parecia não ter nenhuma resistência elétrica (Fig. (1)). Notou-se também que essa transição ocorria mesmo em algumas ligas, não somente amostras puras. Abaixo da temperatura de transição, concluiu-se que o mercúrio passava a ter propriedades elétricas únicas, e esse estado foi denominado supercondutor.

Após essa descoberta de Onnes, muitos outros materiais foram estudados, notando-se que os metais e ligas metálicas sempre apresentavam temperatura de trânsição abaixo de 25K. Posteriormente (BEDNORZ; MÜLLER, 1986), foram descobertos certos óxidos metálicos cerâmicos apresentavam supercondutividade a temperaturas bem mais elevadas (o óxido apresentado no estudo tinha uma transição em 35K), o que abriu perspectivas na descoberta dos denominados supercondutores de altas-temperaturas.

A supercondutividade é destruída, se o material é submetido a campos magnéticos acima de um certo limite ($H_c(T)$), cujo valor depende da temperatura do material observado. Na temperatura crítica, temos $H_c(T) = 0$. No estado supercondutor, o material apresenta propriedades magnéticas peculiares, e esses materiais podem ser divididos em supercondutores do tipo-I (que são a maioria dos supercondutores já descobertos) e os do tipo-II (em geral ligas), de acordo com sua resposta ao campo magnético. A diferença entre eles será melhor estabelecida com a explicação do efeito Meissner logo abaixo.



Figura 1 – Resistividade em função da temperatura nos metais normais e supercondutores.

Fonte: (ANNETT, 2004). A imagem mostra o comportamento típico dos metais em função da temperatura. Para metais normais, a resistividade cai continuamente para um valor finito enquanto é resfriado até o zero absoluto. Já para o supercondutor, a resistividade vai abruptamente à zero abaixo de T_c .

2.1 O condutor perfeito

Nesta seção estudaremos o caso de um condutor com resistividade zero, de modo que possamos entender as diferenças para um material supercondutor, abordadas posteriormente.

A resistividade zero só pode ser aceita como uma suposição, pois não há experimento que possa alcançar essa precisão. A resistência de um supercondutor é considerada nula apenas para fins práticos, casos onde essa resistência é tão baixa que uma corrente poderia passar anos circulando por esse material sem perda de intensidade. No caso ideal $\rho = 0$, essa corrente permaneceria no circuito por tempo indeterminado.

Podemos começar a analisar as implicações de um condutor com resistividade nula a partir da lei de Ohm,

$$\mathbf{E} = \boldsymbol{\rho} \mathbf{J},\tag{2.1}$$

Onde **J** é a densidade de corrente. Para o caso de interesse ($\rho = 0$)

$$\mathbf{E} = \mathbf{0}.\tag{2.2}$$

Além disso, a Eq. (2.2) implica que

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0},\tag{2.3}$$

e como a lei de Faraday da indução na forma diferencial é tal que

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},\tag{2.4}$$

podemos então afirmar

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0. \tag{2.5}$$

Assim, o campo magnético passando sob o condutor perfeito no momento de sua origem, permanece o mesmo indefinidamente com o decorrer do tempo. Podemos ainda relacionar esse resultado com a corrente presente no circuito,

$$-A\frac{dB_a}{dt} = Ri + L\frac{di}{dt},\tag{2.6}$$

Onde A é a área delimitada pelo circuito, B_a o campo aplicado sobre o mesmo, R a resistência do circuito e L a constante conhecida como autoindutância, gerada pela variação do fluxo magnético no material. No caso do condutor perfeito temos R = 0, tal que podemos simplificar a Eq. (2.1),

$$AB_a + Li = const. (2.7)$$

Como $AB_a + Li$ é o fluxo magnético total que passa pelo material, o fato de ser uma constante torna o circuito autossuficiente: qualquer variação do campo é compensada pela indução de correntes que garantem a conservação do fluxo magnético.

Podemos ilustrar os resultados anteriores por meio de um exemplo (Fig. (2)) de resfriamento de um material para o estado hipotético de condutor perfeito. Quando o material transita para esse estado sem um campo magnético aplicado, de acordo com o que foi visto, o campo **B** interno ao material deverá se manter nulo. Assim, quando se aplica um campo H_a sobre o material, serão induzidas correntes superfíciais que geram um campo que vai contrabalancear o efeito de H_a , gerando um campo resultante que é nulo dentro do material. No segundo caso, o material se torna condutor perfeito com o campo aplicado, e da mesma forma ao desligar H_a correntes superficiais serão criadas gerando um campo igual a H_a , e mantendo o fluxo magnético igual ao que existia no momento da transição para o hipotético estado de condutor perfeito.



Figura 2 – Comportamento magnético de um condutor perfeito hipotético.

Fonte: O autor. À esquerda, o material é resfriado sem um campo aplicado. Após a transição,aplica-se um campo H_a , e as linhas são desviadas para manter o fluxo magnético nulo no interior do material. À direita, o material transita para o estado condutor já com o H_a . Quando o campo é retirado, correntes na superfície são induzidas de modo a manter o fluxo magnético constante no material.

2.2 Efeito Meissner

Em 1933, Meissner e Ochsenfeld mediram o fluxo magnético de um supercondutor resfriado na presença de um campo magnético (MEISSNER; OCHSENFELD, 1933). Foi notado que na temperatura de transição para o estado supercondutor, o campo magnético era completamente expulso do interior da amostra. Tal comportamento vai de encontro a ideia de que supercondutores eram condutores normais com resistividade nula, pois essa situação é completamente diferente da observada na Fig. (2). Uma ilustração do comportamento magnético observado no experimento de Meissner e Ochsenfeld é mostrada na Fig. (3), como fizemos no caso de um condutor perfeito.

Podemos relacionar a magnetização M por unidade de volume, o campo aplicado H_a e a densidade de fluxo B interno ao material por

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\mu}_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}_{\mathbf{a}}). \tag{2.8}$$

Sabemos que pelo efeito Meissner $\mathbf{B} = 0$, portanto

$$\mathbf{M} = -\mathbf{H}_{\mathbf{a}}.\tag{2.9}$$

E a suscetibilidade magnética é definida por

$$\chi = -\frac{dM}{dH}|_{H=0}.$$
(2.10)

Portanto, temos $\chi = -1$ para supercondutores, o que o caracteriza como um diamagneto perfeito.



Fonte: O autor. À esquerda, o processo é o mesmo explicado na Fig. (2). À direita, o material transita para o estado condutor já com o campo H_a . Quando retira-se H_a , correntes na superfície são induzidas de modo a manter o fluxo magnético nulo dentro do material.

2.3 Equações de London

Podemos descrever o comportamento de um condutor com resistividade zero fazendo a seguinte suposição: há um certo número de elétrons (n_s) nesse estado que se comporta como superelétrons, no sentido de que se movem sem qualquer dissipação de energia. Sob ação de uma força elétrica, os superelétrons são acelerados continuamente,

$$m_e \frac{d\mathbf{v_s}}{dt} = e\mathbf{E},\tag{2.11}$$

onde m_e , v_s e *e* são respectivamente a massa, a velocidade e a carga do superelétron. A densidade de corrente referente aos superelétrons é dada por $\mathbf{J_s} = n_s e v_s$, de modo que podemos substituir na Eq. (2.11) para obter

$$\frac{d\mathbf{J}_{\mathbf{s}}}{dt} = \Lambda \mathbf{E},\tag{2.12}$$

$$\nabla \times \mathbf{J}_{\mathbf{s}} = -\mathbf{A}\mathbf{B}.$$

Essas são conhecidas como as equações de London. Essa segunda equação inclui o efeito Meissner, visto que aplicando o produto vetorial nos dois os lados da Eq. (2.12) e usando a lei de indução de Faraday $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B}/\partial t$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{J}_{\mathbf{s}} + \Lambda \mathbf{B}) = 0.$$
(2.14)

A Eq. (2.13) é um caso particular da Eq. (2.14), no qual **B** é nulo na transição para o estado supercondutor, quando o campo magnético é expulso do interior do material.

No estado supercondutor podemos aproximar a densidade de corrente por $J \approx J_s$, assim aplicar a lei de Ampere (desprezando a correção de Maxwell)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}_{\mathbf{s}}.\tag{2.15}$$

Aplicando o produto vetorial dos dois lados da Eq. (2.15) e usando a Eq. (2.13)

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = -\mu_0 \Lambda \mathbf{B}. \tag{2.16}$$

Como $\nabla \times \nabla \times = \nabla \nabla \cdot - \nabla^2$ e a lei de Gauss para o magnetismo nos dá $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, obtemos finalmente a equação

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B},\tag{2.17}$$

onde $\lambda = 1/\sqrt{\Lambda \mu_0} = \sqrt{m_e/\mu_0 n_e e^2}$ é chamado de comprimento de penetração de London.

Nota-se que o modelo proposto pelos irmão London não explica o fenômeno da supercondutividade, apenas impõe restrições que selecionam das soluções das equações de Maxwell apenas às que se adequem ao fenômeno observado nos supercondutores. A Eq. (2.12) impõe resistividade nula; já a Eq. (2.13) restringe das soluções com resistividade nula apenas as que são compatíveis com o feito Meissner.

2.4 O Campo crítico

Para entender as implicações da Eq. (2.17) no estado supercondutor, podemos supor um campo uniforme **B**_a aplicado paralelamente a superfície condutora, da forma **B**_a = $B_0 \hat{z}$. Seja a distância para o condutor no eixo x, de modo que x < 0 fora do supercondutor, e x > 0 dentro dele. A eq. (2.17) resolvida para esse caso particular fica

$$B(x) = B_0 e^{-x/\lambda}.$$
(2.18)

Usualmente λ^2 é da ordem de $10^{-11}cm^2$, logo a densidade do fluxo magnético cai exponencialmente à medida que entra no supercondutor, se anulando rapidamente após uma profundidade característica de cerca de $10^{-5}cm$. Na prática pode se considerar que um material no estado supercondutor torna-se um diamagneto perfeito, em sua resposta a perturbações magnéticas, dado o baixo valor de λ .

Existe, no entanto, um limite superior J_0 para a densidade de corrente que um supercondutor possa suportar se mantendo nesse estado. Essa corrente crítica é chamada corrente de desemparelhamento, e está relacionada a física microscópica do fenômeno da supercondutividade. Como vimos na Eq. (2.18), o campo não é nulo até uma certa profundidade do material, e pela segunda equação de London serão induzidas correntes nessa região (mesmo que em escala microscópica). Enquanto essas correntes induzidas não atingem J_0 , o material se mantém supercondutor e nenhum fluxo magnético atravessa muito além de λ . Porém, quando o campo magnético aplicado atingir um valor crítico H_c , as correntes induzidas já terão se tornado grandes o suficiente para superar a corrente crítica e o estado supercondutor será destruído.

O campo crítico depende da temperatura. Chama-se T_c a maior temperatura no qual determinado material se mantém no estado supercondutor. Nessa temperatura T_c , qualquer Haplicado é suficiente para destruir o estado supercondutor. Observações experimentais indicam a seguinte relação entre H_c e a temperatura T

$$H_c \approx H_0[1 - (\frac{T}{T_c})^2],$$
 (2.19)

onde H_0 é o maior valor possível para o campo crítico, sendo medido a baixas temperaturas (idealmente seria o zero absoluto, impossível de se obter experimentalmente, contudo).

2.5 Supercondutores tipo-II

Foi observado que sob ação de campos magnéticos fortes, há dois tipos de materiais supercondutores, de acordo com sua resposta magnética. O primeiro caso são os supercondutores tipo-I, onde o campo **B** dentro do material permanece nulo até que o campo aplicado atinja um valor crítico, H_c . Se o campo aplicado for maior ou igual a H_c , a o estado supercondutor é

imediatamente destruído. Sua curva de magnetização é portanto M = -H para $H < H_c$, e cai a zero ou muito próximo disso para $H \ge H_c$, como é visto no lado esquerdo da Fig. (4).

Contudo, há o segundo caso que são os supercondutores tipo-II. Materiais desse tipo apresentam duas transições para o campo magnético aplicado. A primeira ocorre em $H = H_{c1}$, onde H_{c1} é denominado campo crítico inferior; e a segunda transição ocorre em H_{c2} , o campo crítico superior. Para campos $H < H_{c1}$, o material é supercondutor e ainda vale $\mathbf{B} = 0$ e portanto M = -H. Quando o campo aplicado supera H_{c1} , no entanto, a corrente na superfície supera a corrente crítica e o fluxo magnético começa a entrar no material, e temos $\mathbf{B} \neq 0$ e portanto M > -H. Nessa situação o material se encontra em um estado chamado intermediário, onde os estados normais e supercondutores coexistem. Para campos cada vez maiores o fluxo magnético continuamente cresce, e finalmente quando $H = H_{c2}$ a supercondutividade é completamente destruída. O comportamento magnético desse supercondutor é ilustrado à direita na Fig. (4).



Figura 4 – Magnetização em função de *H* para os dois tipos de supercondutores.

Fonte: (ANNETT, 2004). À esquerda, a magnetização em supercondutores tipo-I. A amostra é um diamagneto perfeito até que $H = H_c$ e a supercondutividade é destruida. À direita, em supercondutores tipo-II a supercondutividade só é totalmente detruída em $H \ge H_{c2}$



Figura 5 – O campo aplicado em função da temperatura para os dois tipos de supercondutores.

Fonte: (ANNETT, 2004). Diagrama H versus T para os dois tipos de supercondutores, dada pela Eq. (2.19). À direita, em supercondutores tipo-II temos a região $H < H_c$ onde o material ainda é supercondutor, e a região $H_{c1} < H < H_{c2}$ onde se encontra no estado intermediário.

2.5.1 Rede de vórtices

Abrikosov (ABRIKOSOV, 1957), baseado na teoria de Ginzburg-Landau (GINZ-BURG, 1950) mostrou como o campo magnético penetrava nos supercondutores tipo-II, no estado intermediário. Nessa teoria de Ginzburg-Landau, temos uma descrição microscópica do fenômeno da supercondutividade. Na solução de Abrikosov, quando o supercondutor é submetido a um campo $H_{c1} < H < H_{c2}$, o fluxo magnético **B** penetra o material na forma de vórtices.

O vórtice é uma região envolta de supercorrentes circulando um pequeno núcleo de largura ξ (chamado de comprimento de coerência) que já transitou para o estado normal, ou seja não é mais diamagnético (Fig. (6)). O campo magnético que penetra no supercondutor tipo-II é máximo em torno desse núcleo, e decresce exponencialmente, pois fora dele vale a equação de London. Sendo assim, as supercorrentes que envolvem o núcleo blindam o campo magnético, penetrando apenas o comprimento λ de London, que é justamente a distância em que as supercorrentes se estendem. Fora dos vórtices portanto o material ainda é supercondutor.



Figura 6 - Campo magnético em um supercondutor tipo-II no estado intermediário.

Fonte: (ABRIKOSOV, 1957). Distribuição do campo e das linhas de corrente dentro do supercondutor tipo-II, mostrando a rede de vórtices dentro do material.

2.5.2 Campo magnético de um único vórtice

Para calcularmos o fluxo magnético de um vórtice isolado,

$$\Phi_0 = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A},\tag{2.20}$$

se usássemos apenas a teoria de London, da sua segunda equação teriamos

$$\nabla \times \mathbf{J}_{\mathbf{s}} = -\mathbf{\Lambda} \mathbf{B}. \tag{2.13}$$

Integrando sobre toda a superfície do vórtice,

$$\int_{S} (\nabla \times \mathbf{J}_{\mathbf{s}}) \cdot d\mathbf{A} = -\Lambda \int_{S} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}.$$
(2.21)

Usando o teorema de Stokes,

$$\oint_C \mathbf{J}_{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{ds} = -\Lambda \Phi_0, \tag{2.22}$$

portanto,

$$\Phi_0 = -\frac{1}{\Lambda} \oint_C \mathbf{J}_{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{ds}.$$
(2.23)



Figura 7 – Rede de vórtices no $NbSe_2$.

Fonte: (HESS *et al.*, 1989). Rede de vórtices no $NbSe_2$ produzida pela aplicação de um campo de 1-T a 1,8K.

A uma distância superior a λ do núcleo do vórtice, o fluxo magnético vai a zero, o que implicaria em uma integral tomada nesse contorno, e finalmente o próprio fluxo magnético total $\Phi_0 = 0$. Isso é uma contradição com o observado da penetração do campo pelo vórtice. Isso acontece pelo fato da equação de London não ser válida no entorno do núcleo, onde o material já transitou para o estado normal.

Contudo, se considerarmos as dimensões do núcleo desprezíveis em relação ao comprimento λ , podemos tratar a influência dessa região por uma função delta. Assim, o campo magnético em torno de um vórtice na direção z é determinado pela forma corrigida da equação de London,

$$-\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} + \mathbf{B} = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}.$$
 (2.24)

Podemos dizer que o problema tem simetria cilíndrica, com o campo do vórtice na direção do campo aplicado. A Eq. (2.24) pode ser então resolvida na forma escalar

$$-\lambda^2 \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dB}{d\rho}\right) + B = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}), \qquad (2.25)$$

onde ρ é a distância radial do núcleo. A solução dessa equação é na forma de Bessel modificada,

$$B(\rho) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0(\frac{\rho}{\lambda}). \tag{2.26}$$

Na figura 8 plotamos o gráfico da função K_0 , usando $\lambda = 1$. Pode-se observar que para $\rho > \lambda$ a função decresce rapidamente a zero (exponencialmente), e diverge para $\rho << \lambda$. Essa divergência vem da imposição do núcleo do vórtice como uma singularidade, de maneira a simplificar o problema, de modo que para $\rho < \xi$ a solução em (2.26) não é válida.



Figura 8 – Gráfico da função K_0 .

Fonte: O autor. Gráfico da função K_0 , onde usamos $\lambda = 1$.

3 DINÂMICA DA INTERAÇÃO ENTRE PARTÍCULAS NO REGIME SUPERA-MORTECIDO

3.1 Equação de Langevin

Em 1828 (BROWN, 1828), o botânico Robert Brown, observando o movimento de grãos de pólen suspensos em água de diversas espécies de plantas, notou que o movimento desses grãos era irregular. Apesar de microscopicamente haver inúmeras interações entre a partícula e as moléculas do líquido, a partícula parecia mover-se de maneira independente.

A visão do problema anterior como de caráter aleatório torna a descrição do movimento muito mais simples, principalmente em simulações computacionais. A quantidade de interações microscópicas entre a partículas suspensas e as moléculas do líquido necessitaria muito tempo computacional, dada a a quantidade de moléculas vizinhas à partícula, mais o fato de que as forças que atuam nestas também dependem de suas vizinhanças, em um efeito cascata.

Langevin (COFFEY; KALMYKOV, 2004) propôs tratar o movimento das partículas brownianas como um problema de dinâmica molecular, onde sua a posição x da partícula é uma variável aleatória sujeita a equação diferencial estocática

$$m\frac{d^2\mathbf{x}(t)}{dt^2} = \mathbf{F} - \gamma \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} + \zeta(t), \qquad (3.1)$$

onde **F** é a força de interação entre as partículas. O termo $\gamma d\mathbf{x}(t)/dt$ é a força de fricção a que a partícula é submetida pelo líquido, onde assume-se que é válida a lei de Stokes

$$\gamma \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = 6\pi r \eta \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt},\tag{3.2}$$

onde r é o raio da partícula (aproximada como esférica) e η é a viscosidade do meio. γ nessa aproximação é uma constante e igual a $6\pi r\eta$.

O termo $\zeta(t)$ em 3.1 representa o efeito das colisões das moléculas do líquido sob a partícula e de caráter aleatório. As seguintes propriedades são necessárias:

- 1. $\zeta(t)$ é independente de x;
- 2. $\zeta(t)$ varia muito mais rapidamente em relação a x.

Outra propriedade é

$$\overline{\zeta(t)} = 0, \tag{3.3}$$

ou seja, os incrementos de ζ com o tempo não dependem de como evoluiu ζ até esse instante. A situação ideal para a propriedade 2 é que as colisões com a partícula sejam praticamente instantâneas, o que pode ser expresso por

$$\overline{\zeta_i(t)\zeta_i(t')} = 2\gamma k_B T \delta(t-t'), \qquad (3.4)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, e $\zeta_i(t)$ é a i-ésima componente de $\zeta(t)$. Pode-se dizer, portanto, que a influência das colisões é aproximada por ruidos brancos.

3.2 Equação de Langevin no limite superamortecido

Em situações onde os efeitos inerciais do movimento das partículas são desprezíveis em relação à contribuição viscosa do fluido, podemos desprezar o termo $\frac{d^2\mathbf{x}(t)}{dt^2}$ na equação de Langevin, de modo que a partícula terá velocidade constante no intervalo de tempo considerado. Vejamos mais precisamente em que tipo de situação essa abordagem é válida (VIEIRA, 2017). Por simplicidade, e consistência com o caso de estudo neste trabalho, consideramos aqui uma partícula imersa em fluido a T=0 e em uma dimensão. Como cada dimensão adicional seguirá as mesmas equações, é suficiente provarmos apenas em uma. Aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados da equação de Langevin ($\zeta(t) = 0$ devido a T=0),

$$m \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv(t)}{dt} e^{i\kappa t} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} F e^{i\kappa t} dt - \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} v(t) e^{i\kappa t} dt, \qquad (3.5)$$

onde v(t) = dx/dt. Definamos $A(\kappa) \equiv (1/m) \int_{-\infty}^{+\infty} F e^{i\kappa t} dt$ e $V(\kappa) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} v(t) e^{i\kappa t} dt$. Usando integração por partes encontramos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv(t)}{dt} e^{i\kappa t} dt = -i\kappa \int_{-\infty}^{+\infty} v(t) e^{i\kappa t} dt = -i\kappa V(\kappa)$$
(3.6)

Portanto, obtemos a relação

$$-i\kappa V(\kappa) = A(\kappa) - \frac{\gamma}{m}V(\kappa).$$
(3.7)

Resolvendo para $V(\kappa)$ obtemos

$$V(\kappa) = \frac{A(\kappa)}{\frac{\gamma}{m} - i\kappa},\tag{3.8}$$

cujo módulo é

$$|V(\kappa)|^{2} = \frac{|A(\kappa)|^{2}}{(\frac{\gamma}{m})^{2} + \kappa^{2}}.$$
(3.9)

Como $A(\kappa)$ é a transformada de fourier da função horária da força resultante agindo sob a partícula, os valores de κ que são soluções da Eq. 3.9 são de tempos característicos do problema

físico. Para o caso de frequências pequenas o suficiente tal que $\kappa \ll \frac{\gamma}{m}$, temos

$$|V(\kappa)|^2 = \frac{|A(\kappa)|^2}{(\frac{\gamma}{m})^2 + \kappa^2} \approx \frac{|A(\kappa)|^2}{(\frac{\gamma}{m})^2},\tag{3.10}$$

E consequentemente,

$$A(\kappa) = \frac{\gamma}{m} V(\kappa). \tag{3.11}$$

Aplicando a transformada inversa, obtemos

$$F(t) = \gamma v(t), \tag{3.12}$$

que é a equação de movimento da partícula no caso super amortecido. O que esse resultado indica é que para frequências do problema físico que são desprezíveis comparadas ao termo $\frac{\gamma}{m}$, o regime é superamortecido. Outra forma de compreender esse resultado é que para $\kappa \ll \frac{\gamma}{m}$ as variações de posição provocadas nas partículas pelos efeitos inerciais levam muito mais tempo para serem realizadas do que as variações provocadas devido a viscosidade do fluido.

A equação de Langevin no caso superamortecido então resulta em

$$\gamma \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{F} + \zeta(t), \tag{3.13}$$

quando há uma força externa adiciona-se mais um termo F_e à equação.

3.2.1 Equação de Langevin aplicada em vórtices de supercondutores tipo II

Os vórtices em supercondutores do tipo II, já introduzidos no capítulo anterior, são as pequenas regiões por onde o fluxo magnético penetra um supercondutor tipo II no estado intermediário. Do ponto de vista macroscópico os vórtices podem ser aproximados por partículas, que interagem entre si dentro do material, repelindo-se. O potencial com que os vórtices se repelem é o da Eq. (2.26). Dentro do núcleo do vórtice, onde o estado supercondutor já foi destruído, apresenta resistência não-nula à corrente que passa pelo mesmo. Portanto, sua equação de movimentos tem um termo dissipativo. Além disso, os efeitos inerciais podem ser desprezados em relação a dissipação (VIEIRA, 2017), o que leva a uma equação de Langevin superamortecida para interação entre os vórtices,

$$\gamma \mathbf{v}_{\mathbf{i}} = \frac{\Phi_0^2}{2\pi\mu_0\lambda^3} \sum_j K_1(\frac{|\mathbf{r}_{\mathbf{i}} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}|}{\lambda}) + \sum_e \mathbf{F}_e^{\mathbf{i}} + \zeta(\mathbf{r}_{\mathbf{i}}, t), \qquad (3.14)$$

onde a força dada pela função de Bessel K_1 é devido a repulsão dos vórtices, obtida a partir do potencial de London cuja solução é a Eq. 2.26 (MOREIRA, 2002). O somatório em F_e^i leva em

conta todas as forças externas que agem no vórtice i do sistema. Usaremos essa equação para obter uma simulação através de Dinâmica Molecular.

4 RESULTADOS

4.1 Método discreto

Introduzimos nesta seção um modelo unidimensional para a dinâmica de vórtices supercondutores. Neste modelo consideramos que o vórtice toma toda a seção transversal da amostra do supercondutor. Neste caso, da mesma forma que na Eq. (2.24), o campo deve obedecer as equações de London na forma corrigida, mas com dependência apenas em x. A equação para o campo produzido por um vórtice em x_1 se torna

$$-\lambda^2 \frac{d^2 B(x, x_1)}{dt^2} + B(x, x_1) = \Phi_0 \delta(x - x_1),$$
(4.1)

que pode ser resolvida usando o método das funções de Green (BUTKOV, 1988), obtendo a solução

$$B(x,x_1) = \frac{\Phi_0}{2\lambda} e^{\frac{-|x_1-x|}{\lambda}},\tag{4.2}$$

e para a força temos

$$F(x,x_1) = sgn(x-x_1)\frac{\Phi_0^2}{2\mu_0\lambda^2}e^{\frac{-|x_1-x|}{\lambda}},$$
(4.3)

onde $sgn(x - x_1)$ é a função que dá o sinal da diferença $(x - x_1)$. O sinal negativo do fluxo Φ_0 do vórtice indica uma força de interação repulsiva. O potencial em 4.2 em relação ao núcleo (supondo o núcleo em $x_1 = 0$) é semelhante ao caso bidimensional, divergindo para x muito próximo do núcleo e decaindo exponencialmente fora dele. Esse modelo unidimensional idealizado pode ser fisicamente realizado com amostras de dimensão da ordem de λ . Além disso, foi mostrado que esse modelo é uma boa aproximação para a densidade de vórtices em situações onde existe simetria na direção y (LEVIN; PAKTER, 2011).

Na simulação, uma força externa do tipo $F_e = -kx$ age nas partículas. O programa termina quando o estado estácionário é atingido($\overline{|v_i|}=0$). Assume-se que a solução tem periodicidade L_y na direção y. A equação de Langevin da partícula i para o caso unidimensional é então dada por

$$\gamma \frac{d\mathbf{x}_{\mathbf{i}}(t)}{dt} = \sum_{j} sgn(x_j - x_i) \frac{\Phi_0^2}{2\mu_0 \lambda^2} e^{\frac{-|x_i - x_j|}{\lambda}} - kx_i.$$

$$(4.4)$$

Essa equação foi utilizada para a simulação da interação entre os vórtices utilizando o método de dinâmica molecular.

4.2 Modelos contínuos para partículas no regime superamortecido

Uma outra forma de descrever o comportamento de sistemas de partículas como o caso dos vórtices supercondutores tipo II, é possível através de um método conhecido como *coarse-graining* (CG)(MOREIRA *et al.*, 2002). Nesse método o mesmo movimento de partículas é interpretado em uma escala maior: os agrupamentos de partículas são divididos em sítios, que comportam-se como uma grande pseudopartícula. Diferente do caso discreto onde buscamos descobrir as posições de todas as partículas do sistema com o tempo, na aproximação por CG nos interessa a concentração de partículas $\rho(\mathbf{r},t)$ em cada ponto do sistema, de caráter contínuo. Isso diminui significativamente os graus de liberdade, o que torna as simulações feitas por CG computacionalmente muito mais eficientes, além de permitir soluções analíticas aproximadas em algumas situações (JR *et al.*, 2010). As interações analisadas são entre as pesudopartículas, e não mais entre as partículas reais do problema.

4.2.1 Modelagem estatística e função likelihood

No modelo contínuo, como foi mencionado, com o objetivo de tornar o problema de analisar a interação entre partículas mais eficiente, adiciona-se uma incerteza quanto ao posicionamento das partículas. A descrição passa a ser feita a através da função contínua $\rho(\mathbf{r},t)$ em toda a região composta pelas partículas e o meio que as envolvem. Uma modelagem estatística para a obtenção dessa densidade é necessária. As posições das partículas obtidas por simulação em dinâmica molecular tornam-se pontos amostrais dessa distribuição da densidade, e o modelo deve ser consistente com esses dados. Como veremos, diferentes abordagens fazem previsões diferentes para $\rho(x,t)$ com diferentes conjuntos de parâmetros. Mostraremos a seguir como decidir entre esses modelos.

Denomina-se função *likelihood* (PAWITAN, 2001) de um modelo estatístico com n parâmetros $\theta = {\theta_1, \theta_2, ..., \theta_n}$ como a probabilidade de um dado x ocorrer em função de θ ,

$$L(\theta) = P_{\theta}(X = x). \tag{4.5}$$

Apesar de numericamente a likelihood ser idêntica a função probabilidade, seu significado é completamente diferente. A função probabilidade nos dá a frequência que um dado deve ocorrer em um modelo com os n parâmetros fixados. Em contraste, na função likelihood variamos os parâmetros do modelo para se adequarem aos dados observados. É um tipo de função bastante utilizada no ramo de inferência estatítica. Para um conjunto de dados $\{x_1, x_2, ..., x_N\}$ obtidos da

simulação a função $L(\theta)$ fica

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{N} P_{\boldsymbol{\theta}}(X = x_i).$$
(4.6)

No contexto da função likelihood surge o método conhecido como *maximum likelihood estimate* (MLE), em que busca-se um ajuste para os parâmetros que maximizem a probabilidade dos dados ocorrerem no experimento. Esses parâmetros coincidem portanto com os que maximizam a função likelihood, o que pode ser obtido tomando as derivadas em relação a cada parâmetro na Eq. (4.6) e igualando a zero. Contudo, como essa equação envolve um produtório, na maioria das situações é mais simples derivar o logarítmo natural da função likelihood,

$$l(\theta) = ln(L(\theta)) = \sum_{i=1}^{N} ln(P_{\theta}(X = x_i)).$$
(4.7)

Como o logaritmo é uma função monotônica, maximizar $l(\theta)$ também maximiza $L(\theta)$. O problema portanto se reduz a resolver as equações

$$\frac{\partial l(\theta)}{\partial \theta} = \sum_{i=0}^{N} \frac{1}{P_{\theta}(X=x_i)} \frac{\partial P_{\theta}(X=x_i)}{\partial \theta} = 0, \tag{4.8}$$

onde cada $\theta = \theta_1, \theta_2, ..., \theta_n$.

4.2.2 Abordagem 1: modelo com um parâmetro

Na abordagem proposta em seu artigo (JR *et al.*, 2010), foi afirmado que o comportamento de partículas no regime superamortecido é compatível com a equação de difusão não-linear (a T=0 e força externa no nosso caso $F_e = -kx$)

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \{ \rho [a \frac{\partial \rho}{\partial x} + kx] \}, \tag{4.9}$$

onde, no caso unidimensional $a = \int_{-\infty}^{\infty} xF(x)/2dx$ (JR *et al.*, 2010), com F(x) sendo a força interna dada pela Eq. (4.3) no caso dos vórtices supercondutores. Resolvendo essa integral obtém-se $a = \Phi_0^2/\mu_0$. Na realidade esta predição do parâmetro a só é exata a densidades que tendem ao infinito. A densidades moderadas esse parâmetro depende de ajuste.

A Equação (4.9) acima resulta em

$$\rho(x) = \frac{k}{2a} (x_m^2 - x^2) \Theta(x_m^2 - x^2), \qquad (4.10)$$

onde $x_m = (3Na/2kL_y)^{1/3}$, e Θ é a função degrau.

Como proposto em (JR *et al.*, 2010), simulando diretamente o movimento das partículas superamortecidas, através de um método de dinâmica molecular, obtém-se um resultado compatível com a solução (4.10), com a diferença que *a* é um parâmetro obtido por ajuste a partir da densidade das partículas no estado estacionário. Essa densidade é obtida usando um método não paramétrico de estimativa de distribuições, como o *Kernel Density estimation*(KDE) que foi utilizado neste trabalho. De fato, (VIEIRA, 2017) explica que a dependência de $a(\rho)$ com a densidade torna-se cada vez menos relevantes com o aumento da densidade de partículas, e no limite de altas densidades poderíamos supor este parâmetro independente.

4.2.3 Abordagem 2: modelo com dois parâmetros

No modelo proposto por (LEVIN; PAKTER, 2011), assumindo as partículas no limite termodinâmico, resolve-se a a equação para um potencial produzido por uma partícula na posição x_1 , que segundo o artigo é (no caso unidimensional)

$$\nabla^2 G(x, x_1) - G(x, x_1) = 2\pi q \delta(x - x_1), \tag{4.11}$$

onde q é uma constante da interação entre os vórtices. Esta equação pode ser resolvida de maneira exata e tem solução

$$G(x,x_1) = -\pi q e^{-|x_1 - x|}, \tag{4.12}$$

onde podemos obter a força produzida em x_1 ,

$$F_G(x,x_1) = -\frac{dG(x,x_1)}{dx} = -\pi q sgn(x_1 - x)e^{-|x_1 - x|},$$
(4.13)

Ainda em seu artigo, (LEVIN; PAKTER, 2011) concluem que a densidade de partículas é dada pela relação

$$\rho(x) = b(x_m^2 - x^2)\Theta(x_0^2 - x^2), \qquad (4.14)$$

onde $b = k/4\pi q^2$, e diferentemente da primeira abordagem, em que a curva descrescia continuamente à zero, aqui a curva apresenta uma descontinuidade em $\pm x_0$. Pode-se obter x_0 e x_m de maneira exata aplicando a condição de normalização, obtendo $x_m = \sqrt{\frac{N}{2bx_0} + \frac{x_0^2}{3}}$. A outra relação entre x_0 e x_m é encontrada calculando o balanço de forças sob uma partícula em $x = x_0$, em que temos $kx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) qF_G(x, x_0) dx$, e que resulta na equação $4x_0 = x_m^2 - x_0^2 + 2x_0 - 2 +$ $e^{-2x_0}(-x_m^2 + x_0^2 + 2x_0 + 2)$. Com essas duas relações é possível obter de maneira exata x_0 e x_m , sem necessidade de qualquer ajuste desses parâmetros. Contudo, todo o resultado acima trabalha com a premissa de que o sistema está no limite termodinâmico, ou seja, a densidade de partículas é para fins práticos infinita, e com já vimos no primeiro modelo o valor de *b* (que com uma diferença de parametrização tem o mesmo efeito de *a* na Eq. (4.10)) é independente de ρ .

Para densidades finitas, o modelo proposto por Levin é falho, e precisaria de um ajuste de 2 parâmetros, um para a curvatura da parábola (x_m) , e outro para os pontos de descontinuidade $(\pm x_0)$. A seguir discutiremos como a função likelihood pode nos ajudar a decidir qual modelo é mais apropriado para o nosso problema. Na Fig. (9) comparamos a densidade obtida pelo KDE da simulação usando a Eq. (4.4) e a densidade obtida pelas duas abordagens descritas acima, em baixas densidades, sem a realização de um ajuste, e podemos ver como os resultados diferem do modelo real nesse caso.

Figura 9 – Comparação da densidade obtida da simulação, e a obtida dos modelos de 1 e de 2 parâmetros, sem ajuste.



Fonte: O autor.

4.2.4 Função likelihood para as duas abordagens

4.2.4.1 Estimativa para a primeira abordagem (1 parâmetro)

Temos para a primeira abordagem uma função densidade do tipo

$$\rho(x) = c_{\alpha}(x_m^2 - x^2)\Theta(x_m^2 - x^2).$$
(4.15)

onde aqui definimos $\alpha = 1$ para a abordagem 1, e $\alpha = 2$ para a abordagem 2. Para obtermos c_1 utilizamos o critério de normalização,

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = c_1 \int_{-x_m}^{x_m} (x_m^2 - x^2) dx.$$
(4.16)

Resolvendo a equação acima em c_1 ,

$$c_1 = \frac{3N}{4x_m^3},$$
(4.17)

e finalmente a densidade resulta em

$$\rho(x) = \frac{3N}{4x_m^3} (x_m^2 - x^2) \Theta(x_m^2 - x^2).$$
(4.18)

A função likelihood então resulta em

$$L_1(x_m) = \prod_{i=1}^N \frac{3N}{4x_m^3} (x_m^2 - x_i^2), \tag{4.19}$$

onde N é o número de dados e x_i a posição do dado de índice i. Para o MLE no parâmetro x_m aplicamos a Eq. (4.8) em L_1 , e rearrumamos os termos para obter uma relação recursiva em x_m :

$$x'_{m} = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{m}}{1 - (\frac{x_{i}}{x_{m}})^{2}}.$$
(4.20)

Essa relação é aplicada até que x'_m convirja para p valor que maximiza a função likelihood, onde a cada passo o x'_m obtido no passo anterior se torna o x_m do passo seguinte. Na fig (10) pode-se observar como $ln(L_1)$ varia com x_m , observando a existência de um ponto de máximo.

4.2.4.2 Estimativa para a segunda abordagem (2 parâmetros)

Nesse modelo temos dois parâmetros a ser encontrados. A densidade é dada pela Eq. (4.14). Podemos obter $b(x_0, x_m)$ usando o critério de normalização,

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = b \int_{-x_0}^{x_0} (x_m^2 - x^2) dx,$$
(4.21)



Figura 10 – Gráfico do logaritmo natural da função *likelihood* no modelo 1 versus x_m

Fonte: O autor. O gráfico foi construído dos dados de uma simulação com N=100 partículas, e k=0,001. A forma da curva evidencia a existência de um máximo em L_1 , que no caso foi em $x_m = 20,436$.

que resolvendo em b resulta em

$$b = \frac{3N}{2x_0} \frac{1}{3x_m^2 - x_0^2},\tag{4.22}$$

e portanto a densidade das partículas é dada por

$$\rho(x) = \frac{3N}{2x_0} \frac{(x_m^2 - x^2)}{3x_m^2 - x_0^2} \Theta(x_0^2 - x^2).$$
(4.23)

A função likelihood nesse caso é

$$L_2(x_m) = \prod_{i=1}^N \frac{3N}{2x_0} \frac{(x_m^2 - x_i^2)}{3x_m^2 - x_0^2}.$$
(4.24)

Nesse caso vamos começar supondo uma condição para x_0 ,

$$x_0 = \sup|x_i|,\tag{4.25}$$

que é o menor valor que faria sentido para x_0 , visto que se $x_0 < \sup |x_i|$ haveriam pontos da amostra após a descontinuidade, na região onde a densidade deveria ser nula, o que seria uma contradição. Portanto só é possível $x_0 \ge \sup |x_i|$. Outro fato é que $x_m > x_0$, pois caso $x_m < x_0$ teríamos densidade negativa para alguns pontos, o que vai de encontro a natureza positiva da probabilidade; e caso $x_m = x_0$ a função densidade seria nula em qualquer ponto da reta, outra contradição.

Fixamos o parâmetro x_0 com o valor suposto em (4.25) e usamos o mesmo método de maximização usado na abordagem 1, de modo que encontramos a seguinte relação,

$$x'_{m} = \frac{x_{m}}{3N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\frac{x_{0}}{x_{m}}\right)^{2} - 3}{\left(\frac{x_{i}}{x_{m}}\right)^{2} - 1}.$$
(4.26)

Na Fig. (11) apresentamos o comportamento de $ln(L_2)$ em função de x_m , mostrando a existência de um ponto de máximo. Utilizamos os dados de uma simulação com 100 partículas, e com a constante k=0,001. Sob essas condições construímos uma rotina que executa a Eq. (4.26) até a situação de $x'_m = x_m$, de modo que obtemos o valor $x_m = 22,343$, e $x_0 = 18.937$, obtido do dado pela Eq. (4.25). Para testar a veracidade da suposição feita na Eq. (4.25), plotamos na Fig. (12) o gráfico do logaritmo da função *likelihood* em função de x_0 , com x_m sendo obtido com o mesmo método acima para cada valor de x_0 . Tomamos valores de x_0 no intervalo sup $|x_i| \le x_0 < x_m$, pelas considerações já feitas sobre esse parâmetro. Nota-se que a função *likelihood* decresce suavemente nesse intervalo, e o máximo em sup $|x_i|$ nos dá a garantia que a suposição feita em (4.25) é o melhor ajuste para o parâmetro x_0 .







Figura 12 – Gráfico do logaritmo natural da função *likelihood* no modelo 2 versus x_0

Fonte: O autor. O gráfico foi construído dos dados de uma simulação com N=100 partículas, e k=0,001.

Com o auxílio do método empregado para obter os parâmetros x_0 e x_m estabelecidos, um resultado importante é mostrar que com o aumento do número de partículas, o valor $b(x_0, x_m) = \frac{3N}{2x_0} \frac{1}{3x_m^2 - x_0^2}$ aproxima-se da constante prevista por Levin em seu artigo ((LEVIN; PAKTER, 2011)). Na simulação que o mesmo usou para comparar com o modelo em análise, ele utilizou k = 0,001, no que resultou em $b = k/4\pi \approx 7,9577x10^{-5}$. Na Fig. (13) simulamos o movimento dos vórtices para diferentes quantidades de partículas (desde N=100 a N=2000 partículas). Nota-se que para valores suficientemente grandes de N o termo $b(x_0, x_m)$ se aproxima da constante que Levin previu em seu artigo.



Figura 13 – Comportamento de $b(x_0, x_m)$ em função de N

Na Fig. (14) comparamos novamente as densidades (como foi feito na Fig. (9)), mas nesse caso com os parâmetros obtidos por ajuste utilizando a abordagem do MLE descrita acima. Nesse caso os dois modelos se aproximam suficientemente bem do resultado obtido da simulação.

Figura 14 – Comparação da densidade obtida da simulação, e a obtida dos modelos de 1 e de 2 parâmetros, após o ajuste.



Fonte: O autor.

4.2.5 Critérios para decisão da melhor abordagem

A seguir testamos as duas abordagens segundo critérios que estimam a qualidade relativa entre modelos estatísticos, originados da teoria da informação. Em todo modelo há perda de informação em relação ao processo que gerou os dados do modelo. Pelos critérios mostrados a seguir estimamos a perda relativa dessa informação, e o quanto o número de parãmetros influi nessa perda. Vamos analisar o critério variando parâmetros que influem na dinâmica das partículas: o k da força externa aplicada e o número de de partículas (N) na simulação. O objetivo é testar se em baixas e altas concentrações (no caso do parâmetro N) os modelos mantém sua qualidade de descrição do modelo real, e em quais situações cada modelo se torna mais apropriado para essa descrição.

Dado um modelo estatístico, define-se como AIC (Akaike Information Criterion) a relação

$$AIC = 2p - 2ln(L_{max}), \tag{4.27}$$

onde p é o número de parâmetros do modelo, e L_{max} é o valor máximo que a função *likelihood* atinge no modelo em questão. Dado um conjunto de modelos, o que possui menor AIC é o que melhor representa o modelo real. Na Fig. (15) mostramos o resultado da comparação entre o AIC nos dois modelos, para valores de k entre 0,001 e 0,05, de maneira a obter uma ideia sobre a evolução do critério de akaike com os dados. No eixo y temos a diferença $AIC_1 - AIC_2$, onde o índice 1 se refere ao modelo com um parâmetro, e o índice 2 ao modelo de 2 parâmetros. Nesse intervalo, a abordagem com 2 parâmetros aparentemente, pelo menos no intervalo de k considerado, é a mais apropriada para o problema, pois a diferença $AIC_1 - AIC_2$ é sempre positiva, ou seja $AIC_1 > AIC_2$. Na Fig. (16) comparamos novamente $AIC_1 - AIC_2$, mas agora variando o número de partículas, fixando k = 0,001. O resultado é consistente com o N.





Fonte: O autor.



4.2.5.2 Critério Bayesiano

O modelo conhecido como BIC (*Bayesian Information Criterion*) é parecido com o modelo proposto por Akaike,

$$BIC = ln(N)p - 2ln(L_{max}), \tag{4.28}$$

onde N é o número de dados da amostra. Esse critério "pune"mais o uso de parâmetros no modelo, inserindo um termo dependente do número de pontos amostrais, ou seja quanto mais dados estiverem presentes na amostra, maior a perda informação devido ao uso de parâmetros. Na Fig (17) comparamos o BIC dois modelos, nas mesmas condições do AIC feito anteriormente. Nesse caso para pontos k < 0.025 o modelo com 1 parâmetro apresenta melhor desempenho, mas após esse valor o modelo de dois parâmetros se torna o melhor candidato. Esse resultado reflete também como a escolha de um critério de decisão de influencia na análise de qualidade dos modelos.

Na Fig. (18) comparamos $BIC_1 - BIC_2$ com o número de partículas, fixando k = 0,001. O resultado mostra que a diferença é negativa e decai com o aumento de N, e portanto o modelo de 1 parâmetro nesse critério é melhora com o aumento do número de partículas.



Fonte: O autor. Comportamento do BIC em função de k, com N=100 partículas.



Figura 18 - Comportamento do BIC em função de N.

Fonte: O autor.Comportamento do BIC em função de N, para k=0,001.

Contudo, deve-se ter um ponto de inflexão onde para densidades suficientemente altas, o modelo de 2 parâmetros se torna a melhor aproximação para qualquer k fixado, como consequência do que foi afirmado em (LEVIN; PAKTER, 2011), pois com o aumento da concentração de partículas aproxima-se o limite termodinâmico e o modelo de dois parâmetros é igual ao modelo real. Como a força externa empurra as partículas para o centro, quanto maior k maior será a concentração de partículas na configuração de equlíbrio do sistema. Deve haver portanto para cada k um valor de N no qual o modelo de 2 parâmetros passa a ser o melhor, pois a concetração terá atingido um valor suficiente para o limite termodinâmico se tornar uma boa aproximação.

De fato, na Fig. (19) comparamos $BIC_1 - BIC_2$ novamente em k = 0,001, mas para valores ainda maiores de N, e o que ocorre é que o modelo de dois parâmetros realmente se torna a melhor escolha e se torna cada vez melhor com o aumento de N. Aparentemente, a densidades altas a qualidade do ajuste do modelo de dois parâmetros é tão superior ao de 1 parâmetro que o "preço"na perda informação pela inclusão do parâmetro extra não é suficiente para tirar tal diferença, que só aumenta com o número de partículas.



Figura 19 – Comportamento do BIC em função de N.

Fonte: O autor.Comportamento do BIC em função de N, para k=0,001, para densidades altas.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Ao fim deste trabalho podemos afirmar que foi oferecido um procedimento eficiente de análise de modelos estatísticos. Para este fim nos propomos a estudar dois modelos contínuos que descrevem o movimento de partículas no regime superamortecido. Mais específicamente analisamos a dinâmica de vórtices em supercondutores tipo-II, que podem ser aproximados por partículas que se repelem e tem um termo dissipativo em seu movimento dependente da velocidade, ou seja, um caso de partículas no regime superamortecido.

Apresentamos inicialmente o fenômeno da supercondutividade e em que situações se originam os vórtices em supercondutores tipo-II, mais precisamente quando o campo magnético H aplicado sobre o material supercondutor supera o valor do campo crítico inferior, mas ainda não é forte o suficiente para superar o campo crítico superior, fazendo com que o material não destrua completamente seu estado supercondutor. Também introduzimos a equação do campo produzido por um vórtice.

Continuando o trabalho apresentamos o modelo discreto para a dinâmica de partículas no regime superamortecido, utilizando a equação de Langevin, e ensaiando todo o processo que serviu de base para a simulação computacional realizada na dissertação.

Por fim, detalhamos os dois modelos estatísticos que serviram de base para o objetivo principal da dissertação, a saber: estimar os parâmetros de um modelo usando métodos de inferência estatística, mais precisamente com a determinação da função *likelihood* nos dois modelos e o uso do MLE; e oferecer critérios que ajudem a decidir qual modelo descreve melhor o problema, ou seja, o que perde menos informação em relação ao modelo que originou os dados (modelo discreto, no nosso caso). Utilizando os critérios AIC e BIC, buscamos estimar a perda relativa de informação de cada modelo, e qual era o mais apropriado para a descrição do modelo real, que no nosso caso é o modelo discreto. os resultados mostraram que, segundo o critério de Akaike o modelo de 2 parâmetros é mais preciso que o de 1 parâmetro, em todo o intervalo de *k* observado ($10^3 \le k \le 0.05$), a N fixo (N = 100). A mesma conclusão pôde ser obtida quando Já utilizando o critério bayesiano notou-se que, para N = 100, o modelo de 1 parâmetro é mais preciso no intervalo k < 0.025, perdendo para o modelo de 2 parâmetros para $k \ge 0.025$, dentro do intervalo analisado. Contudo, suspeitamos que para N suficientemte grande, o modelo de dois parâmetros é a melhor descrição, o que ainda precisa ser comprovado, mas seria coerente ao que foi afirmado sobre comportamento desse sistema no limite termodinâmico.

O trabalho nos indica algumas perspectivas sobre o tema. Primeiramente é preciso

estender a analise para concentrações maiores de partículas, para encontrar os limites onde o modelo de 1 parâmetro é mais preciso, onde podemos também analisar como as densidades obtidas pelos modelos nesses limites são afetadas. Em seguida, é necessário estender a análise para o caso bidimensional e observar quais as diferenças sobre os resultados. Outra necessidade é usar o estudo da função *likelihood* para outros sistemas superamortecidos, com diferentes potenciais de interação. Porém, certamente os métodos utilizados nesse trabalho são aplicáveis no contexto de qualquer modelo estatístico.

REFERÊNCIAS

ABRIKOSOV, A. The magnetic properties of superconducting alloys. Journal of Physics and Chemistry of Solids, Elsevier, v. 2, n. 3, p. 199–208, 1957.

ANNETT, J. F. **Superconductivity, superfluids and condensates**. [S.l.]: Oxford University Press, 2004. v. 5.

BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible hight c superconductivity in the ba- la- cu- o system. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, Springer, v. 64, n. 2, p. 189–193, 1986.

BROWN, R. Xxvii. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. **The Philosophical Magazine**, Taylor & Francis, v. 4, n. 21, p. 161–173, 1828.

BUTKOV, E. Física matemática. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 1988.

COFFEY, W. T.; KALMYKOV, Y. P. **The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering**. [S.1.]: World Scientific, 2004.

GINZBURG, V. Vl ginzburg and ld landau, j. exptl. theoret. phys.(ussr) 20, 1064 (1950). J. Exptl. Theoret. Phys.(USSR), v. 20, p. 1064, 1950.

HESS, H. F.; ROBINSON, R. B.; DYNES, R. C.; VALLES, J. M.; WASZCZAK, J. V. Scanning-tunneling-microscope observation of the abrikosov flux lattice and the density of states near and inside a fluxoid. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 62, p. 214–216, Jan 1989. Disponível em: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.214>.

JR, J. A.; SILVA, G. D.; MOREIRA, A.; NOBRE, F.; CURADO, E. Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles. **Physical review letters**, APS, v. 105, n. 26, p. 260601, 2010.

LEVIN, Y.; PAKTER, R. Comment on "thermostatistics of overdamped motion of interacting particles". **Physical review letters**, APS, v. 107, n. 8, p. 088901, 2011.

LONDON, F.; LONDON, H. The electromagnetic equations of the supraconductor. **Proc. R. Soc. Lond. A**, The Royal Society, v. 149, n. 866, p. 71–88, 1935.

MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. Naturwissenschaften, Springer, v. 21, n. 44, p. 787–788, 1933.

MOREIRA, A. A. **Relações de Escala em Redes Complexas e na Penetração de Fluxo em Supercondutores Desordenados**. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Ceará, 2002.

MOREIRA, A. A.; JR, J. S. A.; FILHO, J. M.; ZAPPERI, S. Boundary effects on flux penetration in disordered superconductors. **Physical Review B**, APS, v. 66, n. 17, p. 174507, 2002.

ONNES, H. K. On the sudden rate at which the resistance of mercury disappears. Akad. van Wetenschappen, v. 14, n. 113, p. 818, 1911.

PAWITAN, Y. In all likelihood: statistical modelling and inference using likelihood. [S.1.]: Oxford University Press, 2001.

SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **ACM SIGMOBILE mobile computing and communications review**, ACM, v. 5, n. 1, p. 3–55, 2001.

VIEIRA, C. M. **Uma abordagem contínua para sistemas dissipativos de partículas repulsivas**. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Ceará, 2017.