

Minimização do Potencial LJ

Clusters de Partículas

Breno Montanha, Lucas, Venâncio

Física Computacional

Sumário

1 Introdução

2 Metodologia

3 Algoritmos Implementados

4 Visualização

5 Resultados

6 Conclusão

O Problema

Contextualização:

- Sistemas físicos tendem naturalmente ao estado de menor energia (mínimo global).
- Estamos simulando um cluster de $N = 50$ átomos de Argônio.

O Desafio:

- A superfície de energia potencial possui muitos **mínimos locais**.
- Métodos simples de descida podem ficar presos nessas armadilhas, não encontrando a estrutura cristalina mais estável.

Referencial Teórico: O Alvo

Para validar nossa simulação, utilizamos o **Cambridge Cluster Database (CCD)**, referência mundial para mínimos globais de Lennard-Jones (Wales & Doye). Para $N = 50$, a estrutura mais estável conhecida (Northby) possui simetria C_s .

Energia Mínima Teórica

Em unidades reduzidas:

$$E_{CCD} = -244.549926 \epsilon$$

Convertendo para Argônio ($\epsilon = 0.0104$ eV):

$$E_{teorico} \approx -2.5433 \text{ eV}$$

Nosso objetivo é aproximar a energia final deste valor.

As coordenadas de N partículas são geradas de maneira aleatória dentro de uma caixa de dimensões X, Y, Z (\AA) no espaço 3D.

Critério de Exclusão (Do código):

- Para evitar sobreposição nuclear (energia infinita), verificamos a distância a cada inserção.
- Se $d^2 < r_{min}^2$, a posição é rejeitada e sorteada novamente.

Potencial de Lennard-Jones

O potencial em questão é o de Lennard-Jones que tem a seguinte estrutura matemática:

$$U(r) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

E a força gerada por ele é dada pela expressão (Gradiente negativo):

$$F_i(r) = \sum_{j=1, j \neq i}^N 24\epsilon \left[2 \left(\frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{13}} \right) - \left(\frac{\sigma^6}{r_{ij}^7} \right) \right] \quad (2)$$

No átomo de argônio: $\epsilon = 0.0104 \text{ eV}$ e $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$.

Método do Gradiente (Steepest Descent)

A minimização é feita movendo cada partícula na direção da força resultante:

$$\vec{r}_i^{(k+1)} = \vec{r}_i^{(k)} + h \vec{F}_i$$

- h controla a estabilidade do método.
- Passos grandes → instabilidade.
- Passos pequenos → convergência lenta.

Simulated Annealing: Interpretação Física

- Inspirado no resfriamento térmico de sólidos.
- Estados de maior energia podem ser aceitos com probabilidade:

$$P = e^{-\Delta E/T}$$

- Temperatura alta → exploração do espaço.
- Temperatura baixa → refinamento local.

Utilizamos dois métodos em sequência:

1. Simulated Annealing (SA):

- Fase de "aquecimento" e resfriamento lento.
- Aceita aumentos de energia (Critério de Metropolis) para escapar de mínimos locais.

2. Steepest Descent (Gradiente):

- Fase de refinamento.
- Move as partículas na direção exata da força até que $F_{max} < 0.01 \text{ eV}/\text{\AA}$.

Visualização da Estrutura Final

A visualização da trajetória e da estrutura final foi realizada utilizando o software **Jmol**.

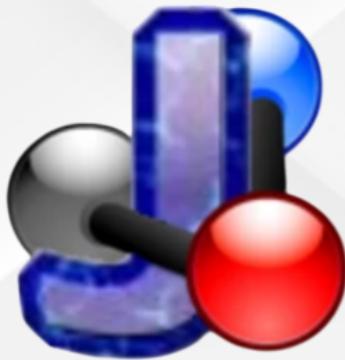


Figure: Imagem do Software Jmol



Jmol – Visualização de Estruturas Moleculares

Evolução da Minimização

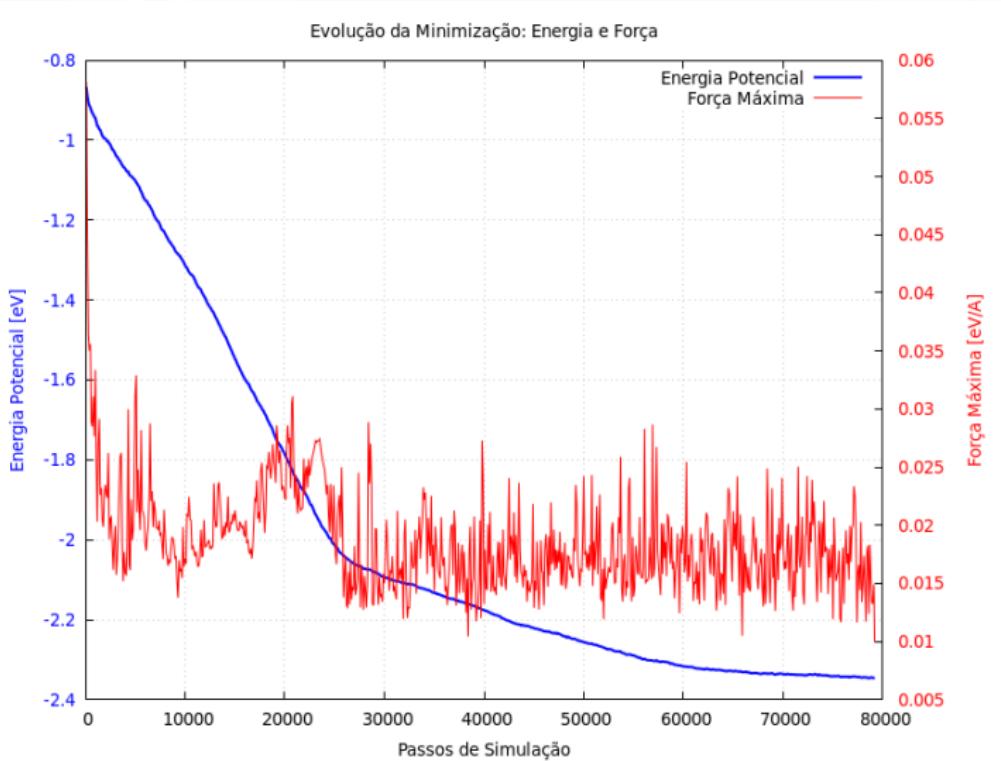


Figure: Convergência: Energia (Azul) e Força (Vermelho).

Critério de Parada

Detalhe da convergência da força em escala logarítmica:

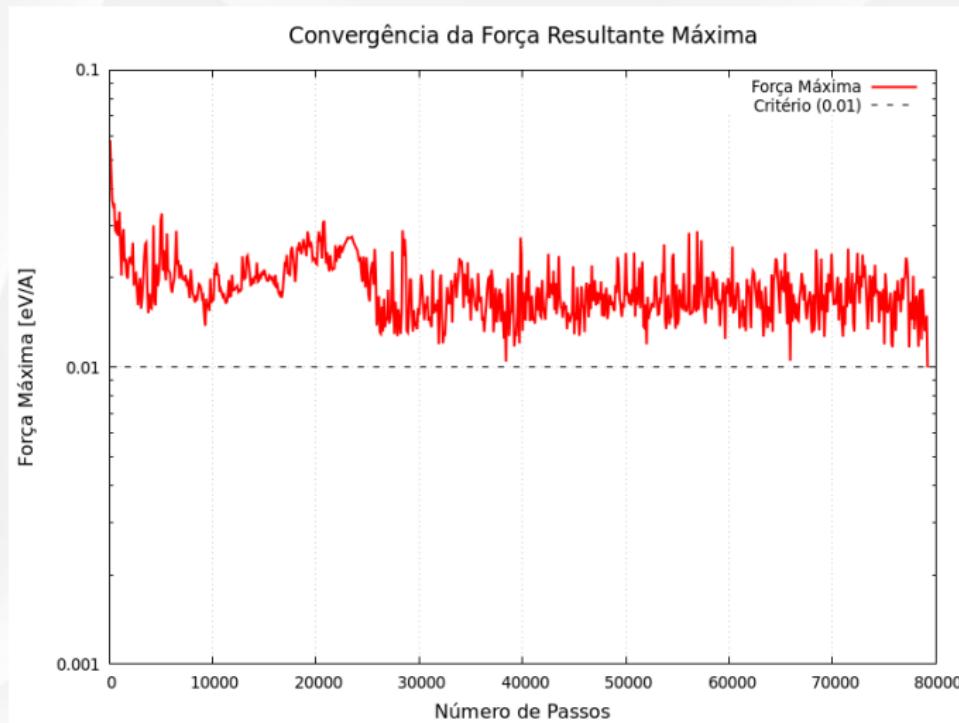


Figure: A força atinge o critério de 10^{-2} eV/Å.

Impacto do Simulated Annealing (Teste de Controle)

Para validar a abordagem híbrida, comparamos com o **Método do Gradiente puro** (sem o SA).

Table: Comparação de Eficiência: Gradiente vs. Híbrido

Método	Energia (eV)	Passos	Conclusão
Gradiente (Puro)	-1.941	39.123	Mínimo Local
Híbrido (SA + Grad.)	-2.346	79.186	Mínimo Profundo (Estável)

Análise Crítica:

- Ambos os métodos atingiram o critério de convergência mecânica ($F < 0.01$).
- Porém, o **Gradiente Puro** ficou preso em uma configuração de alta energia.
- O **SA** permitiu escapar dessa "armadilha", melhorando a energia final em $\approx 21\%$.

Conclusão

Análise Final:

- O método híbrido (SA + Gradiente) foi eficaz para minimizar o sistema sem ficar preso nos estados iniciais de alta energia.
- O critério de força $F < 0.01 \text{ eV}/\text{\AA}$ foi rigorosamente satisfeito.

Comparativo com Teoria

- Valor Teórico ($N = 50$): **-2.543 eV**
- Nosso Resultado: -2.346 eV
- Recuperação da Energia: **92.3%**

A proximidade com o valor teórico valida a implementação do modelo híbrido.

 [Link do repositório](#)

Dúvidas?



Obrigado pela atenção!

Referência Externa: Cambridge Cluster Database

Utilizamos como benchmark o **Cambridge Cluster Database (CCD)**:

- Banco de dados de mínimos globais para clusters LJ.
- Resultados obtidos por métodos avançados de otimização.
- Permite validar qualitativamente e quantitativamente o código.



Cambridge Cluster Database

Minimização do Potencial LJ

Clusters de Partículas

Breno Montanha, Lucas, Venâncio

Física Computacional