



Revista Eletrônica  
Paulista de Matemática

ISSN 2316-9664  
Volume 10, dez. 2017  
Edição Ermac

**Daví Filenga**

UNESP - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"  
davifilenga@fc.unesp.br

## Minimização da energia do arranjo de vórtices em um sistema supercondutor com centros de aprisionamento

Minimizing the energy of the vortices array in a superconducting system with pinning centers

### Resumo

O propósito do presente trabalho foi utilizar o algoritmo de otimização conhecido como *GSA* (*Generalized Simulated Annealing*) para calcular os arranjos de menor energia dos vórtices magnéticos em um filme supercondutor, na presença de centros de aprisionamento. Através de simulações numéricas, foi possível simular sistemas com diferentes quantidades de vórtices, arranjos de centros de aprisionamento e potenciais de interação, sendo um destes proposto no presente estudo e não reportado na literatura. Os resultados obtidos foram consistentes com o que há disponível na literatura e com o que seria teoricamente esperado, com vórtices ocupando preferencialmente conformações de menor energia. Pôde-se concluir, dessa forma, que houve alta eficiência no algoritmo do *GSA* para a otimização deste tipo de sistema.

**Palavras-chave:** Matemática Aplicada à Física. Otimização. Métodos Estocásticos e Estatísticos. Supercondutividade.

### Abstract

The purpose of this work was to use the optimization algorithm known as *GSA* (*Generalized Simulated Annealing*) to calculate the lower energy arrays of the magnetic vortices in a superconducting film in the presence of pinning centers. By means of numerical simulations, it was possible to simulate systems with different amounts of vortices, pinning arrays and potentials of interaction, being one of these proposed in the present study and not reported in the literature. The results obtained were consistent with what is available in the literature and with what would be theoretically expected, with vortices preferentially occupying less energy conformations. In this way, it was possible to conclude that there was a high efficiency in the *GSA* algorithm for the optimization of this kind of system.

**Keywords:** Mathematics Applied to Physics. Optimization. Stochastic and Statistical Methods. Superconductivity.

## 1 Introdução

Um dos grandes desafios encontrados em diversas áreas de conhecimento tais como Matemática, Física, Engenharia, Economia, Biologia, entre muitas outras, é a minimização de uma função apropriada de energia/custo. Para funções com alto grau de complexidade, com muitas variáveis e mínimos locais, a solução requer métodos sofisticados para se chegar a um mínimo global com um tempo de simulação computacional eficiente. Dentro desse contexto, métodos estocásticos como o *GSA* (*Generalized Simulated Annealing*) podem ser uma eficaz alternativa, sendo este um dos algoritmos mais poderosos conhecidos e com vasta abrangência de aplicabilidades. Resultados superiores para o *GSA* em relação a outros métodos de otimização já foram reportados na literatura por diferentes autores, tais como Xiang e Gong (2000), Andricioaei e Straub (1996) e Lemes, Zacharias e Dal Pino Jr. (1997).

Problemas de otimização são muito comuns em diversas áreas da Física. Em particular, para sistemas supercondutores, a obtenção das configurações de menor energia de vórtices é uma das tarefas mais importantes para o cálculo das temperaturas e correntes críticas, visto que tais grandezas permitem dizer quais são os valores de temperatura e corrente elétrica, respectivamente, que o material supercondutor pode suportar sem perder suas propriedades supercondutoras. A utilização do *GSA* para determinar a conformação de menor energia de sistemas de vórtices já foi empregada com sucesso em simulações numéricas de sistemas supercondutores (FILENGA, 2016), entretanto a obtenção de tais configurações não é uma tarefa fácil, visto que há uma grande quantidade de elementos interagindo entre si e diferentes tipos de interações envolvidas, podendo os vórtices ocuparem inúmeras configurações.

O presente artigo é um aprofundamento do trabalho apresentado e publicado nos anais do ERMAC 2017 (FILENGA, 2017). As atualizações e incrementos realizados foram: a melhora do texto, com maior conteúdo, riqueza de detalhes e solidez de argumentos; maior riqueza de resultados, exibindo os cálculos atualizados e realizados para sistemas com 9 vórtices; inserção de novas figuras, que mostram o método das imagens, as funções dos potenciais utilizados e as posições de menor energia obtidas para sistemas com 9 vórtices; atualização das figuras que mostram os resultados, refeitas com maior qualidade, mostrando o gradiente de potencial dos centros de aprisionamento e inserção das tabelas com os valores de energia total obtidos para cada sistema estudado. Mudanças em algumas referências e inclusão de novas também foram realizadas.

## 2 Método e modelagem do sistema

O algoritmo do *GSA* parte de um conjunto inicial de parâmetros, a partir do qual uma perturbação no sistema é gerada através de uma *função de visitação*  $g_{q_V}$ , e um novo valor da função é então calculado. Caso esse novo valor seja menor que o anterior, passa a ser aceito. Do contrário, este ainda pode ser aceito dependendo da *função de probabilidade de aceitação*  $P_{q_A}$ . Em seguida, a temperatura é reduzida seguindo a *função de decaimento de temperatura*  $T_{q_V}$ . Repete-se então o processo diversas vezes até que uma condição seja satisfeita. Tais funções são expressas da seguinte maneira (TSALLIS; STARIOLO, 1996):

$$g_{q_V}(\Delta x_t) = \left(\frac{q_V - 1}{\pi}\right)^{\frac{D}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q_V - 1} + \frac{D-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q_V - 1} - \frac{1}{2}\right)} \times [T_{q_V}^V(t)]^{-\frac{D}{3-q_V}} \left\{ 1 + (q_V - 1) \frac{(\Delta x_t)^2}{[T_{q_V}^V(t)]^{\frac{2}{3-q_V}}} \right\}^{\frac{1}{q_V - 1} + \frac{D-1}{2}} \quad (1)$$

$$P_{q_A}(x_t \rightarrow x_{t+1}) = 1 / \left[ 1 + (q_A - 1) (E(x_{t+1}) - E(x_t)) / T_{q_A}^A \right]^{\frac{1}{q_A - 1}} \quad (2)$$

$$T_{q_v}^V(t) = T_{q_A}^A(t) = T_{q_v}(1) \frac{2^{q_v-1} - 1}{(1+t)^{q_v-1} - 1} \quad (3)$$

Onde  $q_A$  e  $q_v$  são parâmetros que variam entre 1 e 3,  $t$  é o tempo discretizado (correspondente às iterações computacionais),  $E(x_t)$  é a função a ser otimizada e  $D$  o número de variáveis dessa função.

No presente trabalho, utilizou-se este algoritmo de *GSA* para encontrar as posições de menor energia de um conjunto de vórtices magnéticos em um sistema supercondutor contendo centros de aprisionamento (*pinning*). Em supercondutividade, denominam-se vórtices as linhas de campo magnético que penetram em um material supercondutor do tipo II quando um campo magnético externo, superior a um determinado valor crítico  $H_{c1}$  e inferior a um valor crítico  $H_{c2}$  é aplicado, sendo portanto uma “resposta” do material supercondutor às linhas de fluxo que penetram em seu interior. Como o movimento dos vórtices faz com que o material perca suas propriedades supercondutoras, é comum a criação de centros de aprisionamento para mantê-los o mais fixo possível em suas posições. Experimentalmente, defeitos artificiais produzidos no material ou pontos magnéticos crescidos no filme podem ser utilizados como centros de aprisionamento, em posições fixas, geralmente formando arranjos. Dessa forma, tem-se então um sistema com dois tipos de interações existentes: a de cada vórtice com todos os outros vórtices existentes no sistema, e a de cada vórtice com todos os centros de aprisionamento existentes no sistema. Enquanto a primeira interação possui caráter repulsivo (as linhas de campo se repelem), a segunda possui caráter atrativo, visto que os centros de aprisionamento são capazes de atrair e aprisionar as linhas de campo.

Neste trabalho foram simulados, ao todo, 12 diferentes sistemas contendo 36 centros de aprisionamento, com arranjos do tipo quadrado (*square*) e aleatório (*random*). Para cada arranjo, foram simulados 3 diferentes tipos de potenciais de aprisionamento. Também foram consideradas duas diferentes quantidades de linhas de fluxo: 9 e 18 vórtices. A energia potencial  $U_v$  em função da distância  $r_{vv}$  para a interação entre os vórtices pôde ser descrita através da função de Bessel modificada de segunda ordem, de acordo com o modelo de London (POOLE JR; FARACH; CRESWICK, 2007):

$$U_v(r_{vv}) = K_0(r_{vv}) \quad (4)$$

Já a energia potencial  $U_p$  atrativa ao vórtice devido à interação deste com os centros de aprisionamento, pôde ser modelada utilizando três diferentes equações, sendo a Equação (7) proposta neste trabalho e ainda não reportada pela literatura para tais sistemas. Os três tipos de potenciais utilizados foram expressos pelas Equações (5), (6) e (7), respectivamente:

$$U_p(r_{vp}) = \left(-I_{p_2} / R_{p_2}\right) r_{vp} + I_{p_2}, \quad \text{se } 0 \leq r_{vp} \leq R_{p_2} \quad (5)$$

$$U_p(r_{vp}) = I_{p_2}, \quad \text{se } 0 \leq r_{vp} \leq R_{p_1} \quad \text{ou} \quad U_p(r_{vp}) = 0, \quad \text{se } r_{vp} > R_{p_1} \quad (6)$$

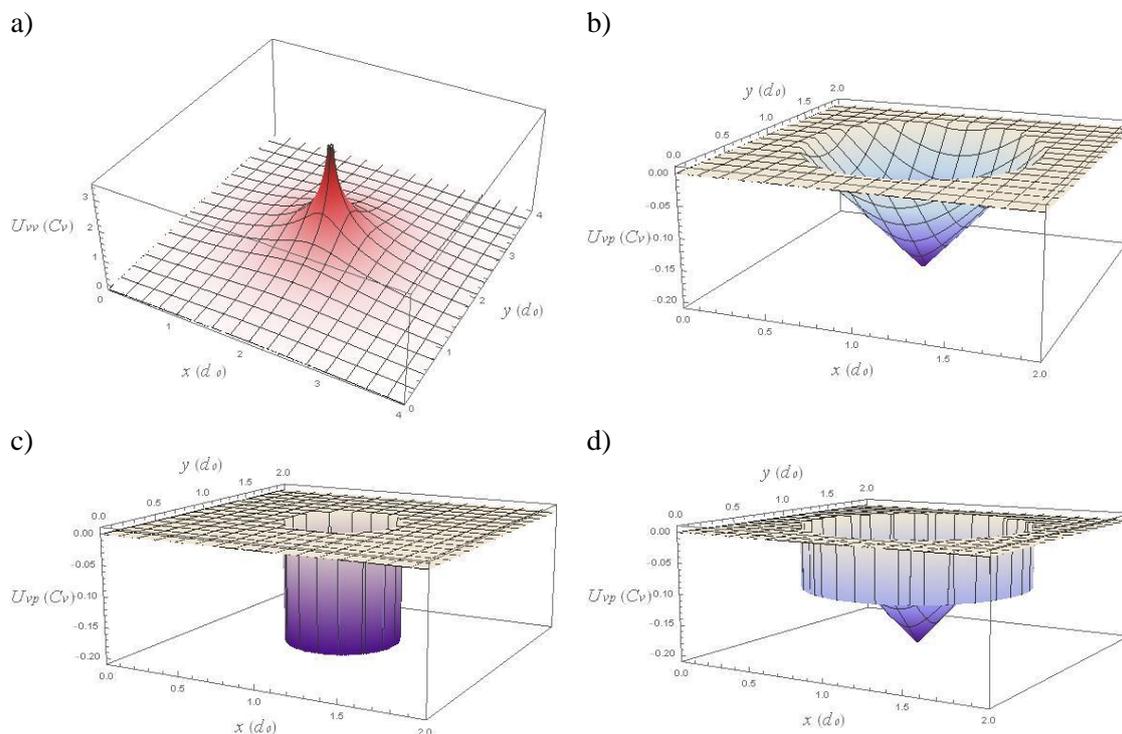
$$U_p(r_{vp}) = I_{p_1} \left(\text{se } R_{p_1} < r_{vp} \leq R_{p_2}\right) \quad \text{ou} \quad U_p(r_{vp}) = \left(-I_{p_2} / R_{p_2}\right) r_{vp} + I_{p_2} \left(\text{se } 0 \leq r_{vp} \leq R_{p_1}\right) \quad (7)$$

Onde  $r_{vp}$  é a distância entre o vórtice e o centro de aprisionamento, e  $I_p$  e  $R_p$  são, respectivamente, as intensidades máximas da energia e o raio de alcance dos centros de aprisionamento, cujos valores utilizados foram:  $I_{p1} = -0,1C_v$ ,  $I_{p2} = -0,2C_v$ ,  $R_{p1} = 0,35d_0$  e  $R_{p2} = 0,7d_0$ . Para todos os casos, as escalas de energia estão expressas em unidades de  $C_v = \phi_0 / (4\pi\lambda)$ , as escalas de tempo por  $t_0 = 16\eta\xi^2 / C_v$  e as escalas de distância por  $d_0 = 0,04\lambda$ . Aqui,  $\phi_0 = 2,07 \cdot 10^{-7} \text{ Gcm}^2$  é o valor do quantum de fluxo magnético de um vórtice, e  $\lambda$  e  $\xi$  a profundidade de penetração

e o comprimento de coerência do vórtice, respectivamente. Tais equações são válidas para qualquer supercondutor cuja relação  $\lambda = 100\xi$  seja satisfeita.

A Figura 1 (a) mostra o gráfico tridimensional de  $U_V$  em função da distância entre dois vórtices: o primeiro localizado ao centro em  $(x=2,y=2)$ , e o segundo tendo suas posições variadas de  $(x=0,y=0)$  a  $(x=4,y=4)$ . A partir do gráfico, é possível observar que esta função, de fato, descreve uma interação repulsiva entre as linhas de campo, cujo potencial de repulsão aumenta rapidamente conforme os vórtices se aproximam e tende ao infinito, visto que, por definição, não pode haver a sobreposição de dois ou mais vórtices.

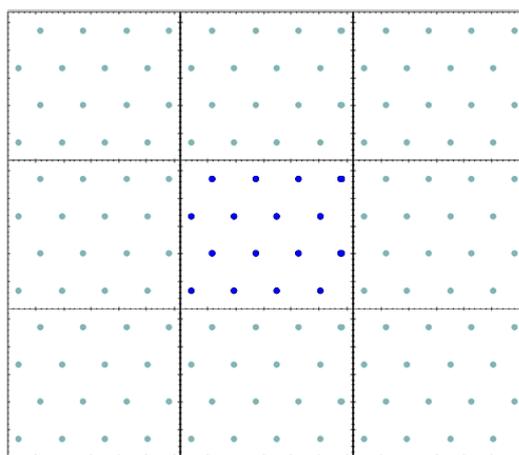
Já as Figuras 1 (b), (c) e (d), mostram o gráfico tridimensional de  $U_p$  em função da distância entre um vórtice e um centro de aprisionamento, estando este localizado ao centro em  $(x=1,y=1)$ , e o vórtice tendo suas posições variadas de  $(x=0,y=0)$  a  $(x=2,y=2)$ . A partir dos gráficos, é possível perceber que estas funções descrevem uma interação atrativa entre a linha de campo e o centro de aprisionamento, sendo que em (b) o potencial atrativo possui o formato de um “cone”, aumentando a partir de  $R_{p2}$  conforme o vórtice se aproxima de seu centro e tendo o menor valor de energia neste ponto. Já em (c), a função possui o formato de um “poço cilíndrico” de potencial, cuja energia de atração é máxima caso o vórtice esteja em qualquer local dentro do centro de aprisionamento e nula caso esteja fora. Já no gráfico da Figura (d), o formato do potencial é de um “poço cilíndrico” e de um “cone” sobrepostos, sendo possível perceber que a função descreve uma interação atrativa do tipo “poço” se a posição do vórtice estiver entre  $R_{p2}$  e  $R_{p1}$ , e do tipo “cônica” a partir de  $R_{p1}$ . Em virtude do formato geométrico das funções, denominarei os potenciais de interação vórtice-centro de aprisionamento referente às equações (5), (6) e (7) de “cônico”, “poço” e “poço-cônico”, respectivamente.



**Figura 1** – (a) Gráfico da energia potencial versus posições em  $x$  e  $y$  para a interação entre dois vórtices magnéticos, onde o gradiente de energia intensifica-se do branco ao vermelho. A seguir, gráficos da energia potencial versus posições em  $x$  e  $y$  para a interação entre um vórtice magnético e um centro de aprisionamento, com potenciais do tipo (b) cônico, (c) poço e (d) poço-cônico. O gradiente de energia decresce do branco para o azul.

As funções utilizadas no GSA foram  $E_1 = (4) + (5)$  para o potencial cônico,  $E_2 = (4) + (6)$  para o potencial poço e  $E_3 = (4) + (7)$  para o potencial poço-cônico. A quantidade de parâmetros  $D$  existentes nas funções correspondiam às posições dos vórtices e, considerando que cada vórtice possui dois valores ( $x$  e  $y$ ) que definem sua posição, tem-se que  $D = 18$  para 9 vórtices e  $D = 36$  para 18 vórtices. Para todos os casos, utilizaram-se 120 caixas imagens ao redor da caixa de simulação principal, bem como todos os valores de  $q_A$  e  $q_V$  entre 1 e 3, com variação de 0,1. Dessa forma, teve-se um conjunto de três equações de energia em função da posição para serem otimizadas. O objetivo então foi encontrar as posições dos arranjos de vórtices que tornam mínimo o valor dessas funções.

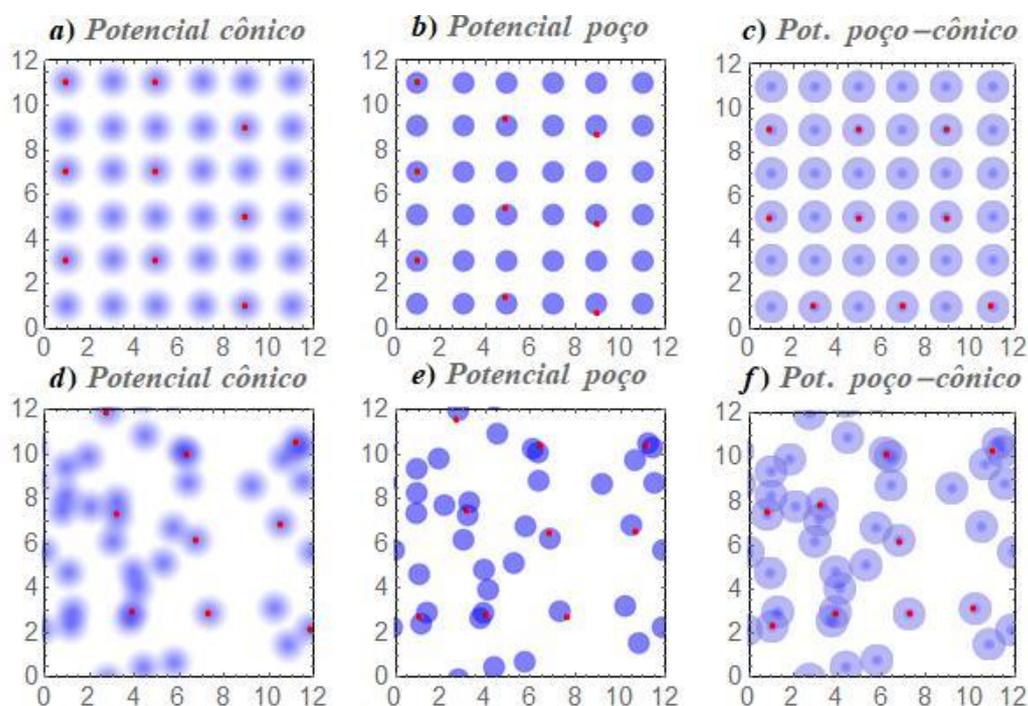
Os sistemas foram simulados utilizando condições periódicas de contorno, ou seja, dentro de uma “caixa” que descrevia uma determinada região dentro de um supercondutor afastada das bordas, com dimensões de  $L_x=12d_0$  por  $L_y=12d_0$ . Para a interação entre os vórtices, foram consideradas caixas imagens ao redor da caixa de simulação principal representando o restante do sistema, visto que simular toda uma amostra macroscópica demandaria um tempo de processamento computacional extremamente elevado, além de exigir considerações adicionais como a inclusão dos efeitos de superfície da amostra. As caixas imagens de vórtices são réplicas idênticas as da caixa de simulação principal contendo apenas vórtices, dispostas ao seu redor, formando um sistema muito maior que tende ao limite termodinâmico. Caso não houvesse as caixas imagens, os vórtices da caixa principal se deslocariam para as bordas devido às interações repulsivas existentes entre si. Dessa forma, as caixas imagens foram inseridas para manter os vórtices da caixa principal se comportando como se houvessem infinitos vórtices no sistema. A Figura 2 mostra esquematicamente, como exemplo, uma caixa de simulação principal, com 16 vórtices, localizada ao centro, e oito caixas imagens de vórtices localizadas ao redor, que deverão manter os vórtices da caixa principal estáveis. Apesar de estarem representadas apenas oito caixas imagens, geralmente é colocada uma quantidade muito maior, que depende do alcance do potencial dos vórtices. O critério de corte para o número de caixas imagens ocorre quando os vórtices das caixas mais distantes estiverem longe o suficiente dos vórtices da caixa de simulação central, de modo que o seu potencial não mais exerça uma influência significativa. Dessa forma, as linhas de fluxo da caixa principal estarão totalmente estáveis, exatamente como em uma região de uma amostra real (FILENGA, 2016).



**Figura 2** – Caixas imagens de vórtices ao redor da caixa de simulação principal. As caixas imagens foram inseridas para manter os vórtices da caixa principal se comportando como se houvessem inúmeros vórtices no restante do sistema, analogamente a uma região supercondutora real que é observada por um microscópio (FILENGA, 2016).

### 3 Resultados

As posições de menor energia obtidas para 9 vórtices são mostradas na Figura 3. A partir das imagens, é possível observar para os arranjos quadrados que, para o potencial cônico e poço-cônico, as posições dos vórtices coincidem com a região central dos centros de aprisionamento, que possuem menor energia. Já para o potencial poço, as posições coincidem com uma região qualquer dentro dos centros de aprisionamento, visto que toda esta já corresponde ao valor de menor energia. Já para os arranjos aleatórios, observa-se uma preferência dos vórtices em buscar as regiões de menor energia onde há sobreposições mais intensas de potenciais, indicados nas figuras pelas regiões azuis mais escuras, com diferentes posições de equilíbrio para cada potencial utilizado.



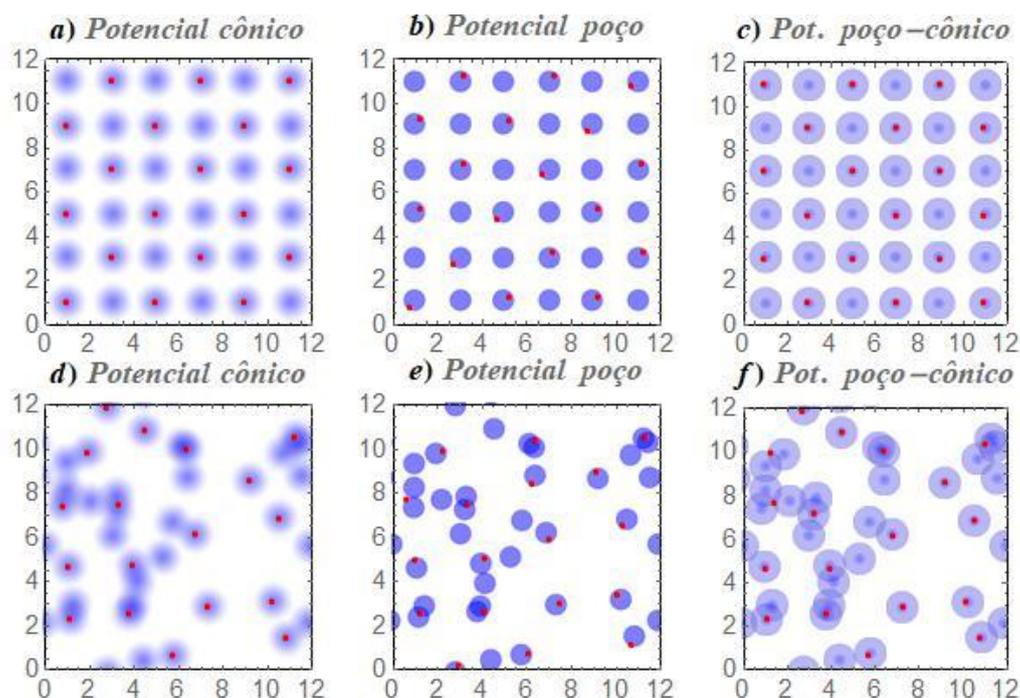
**Figura 3** – Posições de menor energia obtidas para 9 vórtices (pontos vermelhos) em arranjos de centros de aprisionamento (círculos azuis) quadrados – em (a), (b) e (c) – e aleatórios – em (d), (e) e (f). Em (a) e (d) foram utilizados potenciais cônicos, em (b) e (e) potenciais poço, e em (c) e (f) potenciais poço-cônico para os centros de aprisionamento. As escalas de distância estão expressas em unidades de  $d_0$ .

A Tabela 1 a seguir mostra os valores de energia total  $U_T$  encontrados para cada sistema representado na Figura 3.

**Tabela 1** – Valor total de energia para cada sistema com 9 vórtices

Tipo de Potencial	Tipo de arranjo	$U_T (C_v)$
Cônico	Quadrado	-1.5677555010
Poço	Quadrado	-1.5682444308
Poço-cônico	Quadrado	-1.5677692266
Cônico	Aleatório	-1.8256185888
Poço	Aleatório	-2.5248908144
Poço-cônico	Aleatório	-2.0452571961

Já as posições de menor energia obtidas para 18 vórtices são mostradas na Figura 4. A partir das imagens, pode-se novamente observar para arranjos quadrados que, para o potencial cônico e poço-cônico, as posições dos vórtices coincidem com a região central dos centros de aprisionamento e, para o potencial poço, as posições coincidem com uma região qualquer dentro dos mesmos. Para os arranjos aleatórios, também é possível observar novamente uma preferência dos vórtices em buscar as regiões de menor energia onde há sobreposições mais intensas dos potenciais (regiões azuis mais escuras), com diferentes posições de equilíbrio para cada potencial utilizado.



**Figura 4** – Posições de menor energia obtidas para 18 vórtices (pontos vermelhos) em arranjos de centros de aprisionamento (círculos azuis) quadrados – em (a), (b) e (c) – e aleatórios – em (d), (e) e (f). Em (a) e (d) foram utilizados potenciais cônicos, em (b) e (e) potenciais poço, e em (c) e (f) potenciais poço-cônico para os centros de aprisionamento. As escalas de distância estão expressas em unidades de  $d_0$ .

A Tabela 2 a seguir mostra os valores de energia total  $U_T$  encontrados para cada sistema representado na Figura 4.

**Tabela 2** – Valor total de energia para cada sistema com 18 vórtices

Tipo de Potencial	Tipo de arranjo	$U_T (C_v)$
Cônico	Quadrado	-1.5300677926
Poço	Quadrado	-1.5411976312
Poço-cônico	Quadrado	-1.5300677929
Cônico	Aleatório	-1.4245986305
Poço	Aleatório	-2.3610203239
Poço-cônico	Aleatório	-1.7651468202

Para os sistemas com arranjos quadrados de centros de aprisionamento, a simetria final formada pelos vórtices segue um padrão triangular. Tal padrão é bem conhecido pela literatura, sendo reportado teoricamente (REICHHARDT; GRØNBECH-JENSEN, 2001) e experimentalmente (FASANO; MENGHINI, 2008). Para todos os casos, nota-se também que os



vórtices buscam ficar mais afastados o possível uns dos outros, visto que a força de repulsão se torna muito intensa para pequenas distâncias, tal como é descrito pela Equação (4). No entanto, para distâncias entre vórtices não muito próximas, o potencial atrativo dos centros de aprisionamento passa a ter maior relevância, levando a diferentes posições de equilíbrio para cada tipo de potencial. De fato, as diferentes funções de potenciais justificam o fato de que, embora os arranjos sejam os mesmos, as posições de menor energia obtidas sejam diferentes.

Tomando por base os resultados contidos nas Tabelas 1 e 2, para todos os casos, observa-se também que o potencial poço é o que possui os menores valores para a conformação de mínima energia dos vórtices, seguido dos potenciais poço-cônico e cônico, respectivamente. Em se tratando de supercondutores, os menores valores de energia conduzem a uma maior estabilidade no sistema, podendo levar a valores críticos expressivamente mais elevados de corrente elétrica e temperatura.

Apesar dos cálculos terem sido feitos com um número pequeno de vórtices, esperam-se resultados análogos para sistemas maiores. Vale ressaltar também que o potencial poço-cônico é uma proposta deste trabalho e ainda não validada experimentalmente. Apesar de se tratar de um resultado teórico, espera-se que o presente trabalho possa dar uma perspectiva para pesquisas futuras.

#### 4 Conclusão

Através da utilização do *GSA*, foi possível obter as posições de menor energia dos vórtices magnéticos para diferentes sistemas com diferentes arranjos de centros de aprisionamento e quantidade de vórtices, bem como diferentes tipos de potenciais atrativos. Os resultados obtidos são consistentes com o que seria teoricamente esperado e estão em acordo com o encontrado na literatura, sendo que a otimização desse tipo de sistema utilizando o potencial poço-cônico até o momento não havia sido reportada.

#### 5 Referências

ANDRICIOAEI, I.; STRAUB, J. E. Generalized simulated annealing algorithms using Tsallis statistics: Application to conformational optimization of a tetrapeptide. **Physical Review E**, v. 53, n. 4, p. R3055-R3058, 1996.

FASANO, Y.; MENGHINI, M. Magnetic-decoration imaging of structural transitions induced in vortex matter. **Superconductor Science and Technology**, v. 21, n. 2, p. 1-24, 2008.

FILENGA, D. **Correntes críticas e comportamento dinâmico dos vórtices em fitas supercondutoras do tipo II com arranjos conformes de centros de aprisionamento**. 2016. 120 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais) – Unesp, Bauru, 2016.

FILENGA, D. Minimização da energia das linhas de fluxo magnético em um sistema supercondutor com centros de aprisionamento. In: ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 4., 2017, Bauru. **Caderno de trabalhos completos e resumos**. Bauru: Unesp, Faculdade de Ciências, 2017. p. 488-490. Disponível em: <[http://www.fc.unesp.br/Home/Departamentos/Matematica/ermac/caderno-ermac\\_2017.pdf](http://www.fc.unesp.br/Home/Departamentos/Matematica/ermac/caderno-ermac_2017.pdf)>. Acesso em: 19 out. 2017.

LEMES, M. R.; ZACHARIAS, C. R.; DAL PINO JR, A. Generalized simulated annealing: Application to silicon clusters. **Physical Review B**, v. 56, n. 15, p. 9279-9281, 1997.



---

POOLE JR., C. P.; FARACH, H. A.; CRESWICK, R. J. **Superconductivity**. 2. ed. San Diego: Academic Press, 2007.

REICHHARDT, C.; GRØNBECH-JENSEN, N. Critical currents and vortex states at fractional matching fields in superconductors with periodic pinning. **Physical Review B**, v. 63, n. 5, p. 1-10, 2001.

TSALLIS, C.; STARIOLO, D. A. Generalized simulated annealing. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 233, n. 1-2, p. 395-406, 1996.

XIANG, Y.; GONG, X. G. Efficiency of generalized simulated annealing. **Physical Review E**, v. 62, n. 3, p. 4473-4476, 2000.

---

Artigo recebido em jun. 2017 e aceito em nov. 2017.