

Universidade Federal Fluminense
Instituto de Física



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Estudo de propriedades críticas para
modelos de rede com estados
absorventes

Wellington Gomes Dantas
Orientador: Dr. Jürgen F. Stilck

Dissertação apresentada ao Instituto de Física, como parte dos requisitos
para a obtenção do título de doutor.

Niterói, abril de 2006

Resumo

Estudamos as transições de fases entre estados absorventes e ativos em modelos de rede markovianos. Duas categorias de modelos são usadas para o cálculo de suas propriedades críticas: aqueles que possuem conservação de partículas e outros que não. Em especial, abordamos variações do processo de contato e da pilha de areia de Manna, dois dos ícones principais das diferentes classes de universalidade estudadas para estas transições. Nosso estudo é feito através do uso de diferentes técnicas como campo médio, simulações, diagonalização exata e expansões em séries.

Abstract

In this work we study the phase transitions between an absorbing and an active state in markovian lattice models. We investigate two different categories of these models: with conserved number of particles and with fluctuating number of particles. In particular, we study variations of the contact process and the Manna sandpile, two icons of the systems that undergo phase transitions in nonequilibrium regime. Using techniques such as mean-field approximations, numerical simulations, exact diagonalization and series expansions we access the universality classes for these cases.

A Hatasou, Annie Wilkes, Golda e Stauffer (nã o Dietrich).

*“Onde quer que estejas, cave profundamente!
Em baixo está a fonte!
Deixe os homens sombrios a gritar:
‘Em baixo é sempre o inferno!’”*

Friedrich W. Nietzsche

Agradecimentos

Certo dia ao andar pelos corredores do IF-UFF me peguei pensando que já estou aqui faz seis anos! Isto para mim é surpreendente, pois significa que estou há mais tempo neste instituto do que aquele que fiquei na universidade onde fiz graduação (UFPB) e que está associada à minha casa. Mas esta surpresa não me deixa esquecer que aqui também tornou-se um pouco minha casa. Em todos estes anos fui acolhido por um ótimo ambiente, com suas qualidades e defeitos, pois assim é a vida real, mas acima de tudo com camaradagem e liberdade para que pudesse desenvolver o que me propus a fazer.

Nestes anos, amigos foram e vieram. Alguns estiveram por perto durante todo o processo de maturação de meus seis anos aqui, outros participaram apenas de algumas etapas. Tenho que agradecer a todos, pois eles de uma maneira direta ou indireta foram responsáveis por este ambiente de que falei. Gostaria de prestar minha homenagem a pessoas como André Schuwartz, Armando Ticona, Carlos Eduardo Galhardo (que embaixo do nome pomposo esconde a alcunha de “Gralha”), Cinthya Chianca, Claudia Gomes, Edson Caixeiro, Eliel Eleutério, Israel Vianna, Jorge Coelho, Karen Luz, Klauko Mota, Luciana Rios, Luis Fernando, Minos Adão, Roberto Peñaloza, Sérgio Botelho, Telio Nobre, Veit (não vou me arriscar escrever seu sobrenome) e outros tantos que não vou mencionar por falta de espaço. Todos foram meus cúmplices nestes anos e espero que continuem sendo em outros mais.

Agradeço também a meus professores daqui e outros que foram importantes em outras épocas. Minha eterna professora Graça, meu “mentor inicial” Raimundo Nonato, Pedro Christiano, Cezar Bonato, Andrea Latgé, Roberto Bechara, Fábio

Reis, Thadeu Penna, Paulo Murillo e Suzana Moss. Assim como aos funcionários João, Luana, Ana, Lúcia, Kátia, Rita e Yurié.

Obviamente, agradecerei aos meus pais, pelo seu empenho e pela liberdade que me deram, a confiança que depositaram para, mesmo quando criança, acreditar nos caminhos que escolhi, sem me podar, mas sem serem descuidados. Não posso traduzir o que sinto por eles, apenas rascunhar estas vagas idéias que apontam um pouco da contribuição que eles deram à minha vida. Juntamente com eles, tenho que mencionar meus irmãos (Maria, João Carlos e Antonio) e meus sobrinhos, inúmeros, que por falta de espaço não citarei nominalmente.

A Scheilla ofereço meus sinceros agradecimentos por ter, não apenas nos últimos seis, mas em nove anos, me aturado (o que não é fácil), me incentivado e, acima de tudo, ter dividido sua vida comigo e tomado conta da minha. Também à sua família que me recebeu como seu membro desde à época de nosso namoro. Em especial à D. Suzel, S. Ramos e D. Elizete, bem como Andréa e Angélica.

Finalmente, guardo meus últimos agradecimentos a meu orientador, mas a quem posso chamar também de amigo, Jürgen Stilck. Ele, que também me aturou, e dividiu seu conhecimento e humanidade, tornando muito menos complicada minha tarefa. O mesmo vale para sua maravilhosa família, Daisy, Thais e os garotos que, durante um certo tempo, me acolheram e me ajudaram todos estes anos.

Antes de terminar, ainda gostaria de agradecer ao prof. Ronald Dickman (UFMG) por sua disponibilidade em, sempre que precisei, me prestar auxílio no entendimento de aspectos técnicos deste trabalho.

Por fim, meus agradecimentos à Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) e a CAPES, pelo suporte financeiro nestes anos de doutorado.

Conteúdo

1	Introdução	10
2	Estudo de transições de fases em sistemas com estados absorventes	13
2.1	Cadeias de Markov	14
2.2	Equação mestra	21
2.3	Modelos de rede e a dinâmica de reação-difusão	28
2.3.1	Modelo de rede para o processo de decaimento radioativo	29
2.4	O processo de contato	30
2.5	Transições de fases	32
2.5.1	Teoria de escala para transições de fases em sistemas com estados absorventes	37
2.6	Percolação direcionada	42
2.7	Conjectura PD	45
2.8	Outros modelos da classe PD	46
2.8.1	Modelo ZGB	46
2.8.2	Autômato celular de Domany-Kinzel	48
2.9	Problemas nas evidências experimentais da classe PD	50
3	Modelos estudados	52
3.1	Modelo AB	53
3.1.1	Modelo AB com difusão	57
3.2	Modelo de Manna parametrizado	58
3.2.1	Modelo de Manna com variação da difusão	62
3.3	Modelo de três estados sem conservação de partículas	62
4	Aproximação de campo médio	65
4.1	Campo médio no processo de contato	66
4.2	Aproximação de campo médio para o modelo AB	70
4.2.1	Campo médio para o modelo AB com difusão	76
4.3	Aproximação de campo médio para o modelo de Manna parametrizado	80

4.4	Aproximação de campo médio para o modelo de três estados	88
5	Simulações numéricas	93
5.1	Simulações numéricas de grandezas dinâmicas	94
5.2	Simulações numéricas de grandezas estáticas	97
5.3	Simulações no modelo AB	100
5.4	Simulações no modelo de Manna parametrizado	107
5.4.1	Simulações no modelo de Manna com variação na difusão	114
5.5	Simulações para o modelo de três estados	115
6	Solução exata de modelos em tamanhos finitos	117
6.1	Álgebra de operadores	120
6.2	Forma funcional para operadores de evolução de alguns modelos	121
6.3	Exemplo de diagonalização exata para o PC	122
6.4	Diagonalização exata para o modelo AB	125
6.5	Diagonalização exata no modelo de Manna com restrição de altura	128
7	Expansões em séries	132
7.1	Expansões temporais	133
7.1.1	Exemplo de expansão temporal para o PC	134
7.2	Expansão perturbativa	135
7.3	Expansão em série supercrítica para o modelo AB	138
7.3.1	Derivação de alguns termos da série do modelo AB	141
7.4	Análise de séries	143
7.4.1	Método da razão	143
7.4.2	Aproximantes de Padé	144
7.4.3	Aproximantes diferenciais parciais	146
7.5	Resultados para a análise da série supercrítica do modelo AB	149
7.5.1	Resultados da série supercrítica a partir do método da razão	149
7.5.2	Resultados da série supercrítica a partir dos aproximantes d-log Padé	149
7.5.3	Resultados da série supercrítica a partir dos aproximantes diferenciais parciais	152
7.6	Expansão supercrítica para o modelo AB com difusão	156
7.6.1	Análise da série com difusão através de aproximantes d-log Padé	157
8	Conclusões e perspectivas	160
8.1	Perspectivas	163
A	Modelo de Glauber linear à temperatura nula	164

B Termos da série supercrítica do modelo AB**170**

Lista de Figuras

2.1	Ilustração do balanço detalhado entre dois estados arbitrários.	19
2.2	Ilustração de um estado absorvente a . Este estado recebe fluxo de outros estados, mas nenhuma probabilidade flui dele.	20
2.3	Linha de separação de fases no processo de contato.	31
2.4	Estados desordenado e ordenado para um ferromagneto.	33
2.5	Ilustrações de uma transição contínua e outra descontínua.	34
2.6	Rede de indivíduos saudáveis (sítios vazios) e doentes (sítios ocupados). Da esquerda para a direita, configurações estáveis da rede, na região super, crítica e subcrítica. À medida que o parâmetro de controle diminui, se aproximando de seu valor crítico, um “mar” de buracos emerge. . . .	36
2.7	Ilustração do comportamento ρ_a do parâmetro de ordem como função do parâmetro de controle p . Note que à medida que os tamanhos aumentam a curva toma forma do comportamento típico do parâmetro de ordem no limite termodinâmico. Esta curva refere-se a um caso genérico. . . .	41
2.8	Localização do ponto crítico p_c para uma função genérica $F(\bar{x})$. Note que o comportamento sub e supercrítico se caracterizam por curvas de concavidades não-nulas e opostas.	43
2.9	Ilustração da percolação isotrópica por ligações.	43
2.10	Ilustração do processo de percolação direcionada por ligações. Note que neste caso, existe uma direção privilegiada.	44
2.11	Diagrama de fases esquemático para o modelo ZGB. As concentrações de oxigênio (linha cheia) e monóxido (linha tracejada) são mostradas como função da taxa de adsorção y	48
2.12	Diagrama de fases esquemático para o autômato DK. As linhas tracejadas marcam os pontos críticos da percolação direcionada por ligação e por sítio. O ponto superior marca o ponto da percolação compacta, enquanto que o inferior corresponde ao autômato definido pela regra 18 de Wolfram.	49
2.13	Ilustrações da percolação direcionada compacta com o aumento ou diminuição do aglomerado de sítios ocupados.	50

3.1	Partículas do tipo B se transformam em partículas A através de contato.	54
3.2	Transição espontânea de uma partícula do tipo A .	54
3.3	Partículas do tipo A se transformam em partículas B por contato.	54
3.4	Ilustração da transição descontínua presente no modelo do votante tendencioso.	56
3.5	As duas partículas do sítio ativo são enviadas para cada um dos primeiros vizinhos.	61
3.6	Ambas as partículas do sítio ativo “pulam” para o mesmo vizinho.	61
3.7	Partículas do tipo A se transformam em partículas I_1 através de contato com partículas inativas.	63
3.8	Partículas do tipo A se transformam em partículas I_2 através de contato com partículas ativas ou inativas.	63
3.9	Partículas do tipo I_1 se transformam em partículas A através de contato.	63
3.10	Partículas do tipo I_1 se transformam em partículas I_2 através de contato com partículas ativas.	64
3.11	Partículas do tipo I_2 se transformam em partículas A através de contato com partículas ativas.	64
4.1	Comportamentos do parâmetro de ordem. A primeira figura mostra ρ no espaço dos parâmetros do modelo, (p_a, p_c) . Já na segunda vemos seu comportamento em função de p_a com p_c fixo. Observe que a transição fica mais pronunciada à medida que p_c diminui, sinalizando a transição descontínua que ocorre para $p_c = 0$.	75
4.2	Linha crítica do modelo AB obtida a partir da aproximação de pares.	75
4.3	Variação da linha crítica do modelo AB de acordo com a mudança da taxa de difusão, D . À medida que a difusão torna-se maior a linha crítica tende ao valor encontrado na aproximação de um sítio, $p_a^c = 1/2, \forall p_c$.	80
4.4	Linha crítica do modelo de Manna parametrizado.	87
4.5	Linha crítica do modelo de três estados obtida a partir da aproximação de um sítio.	89
4.6	Linha crítica do modelo de três estados obtida a partir da aproximação de pares.	92
5.1	Ilustração do comportamento da média de uma grandeza dinâmica obtida através de uma simulação numérica.	95
5.2	Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem para tempos longos para um certo tamanho de rede. A figura corresponde ao modelo de Manna parametrizado.	97

5.3	Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem como função do parâmetro de controle com tamanho fixo. Observe como as curvas se arranjam para valores distintos das regiões sub e supercríticas e na vizinhança do ponto crítico.	98
5.4	Flutuação do estado quase-estacionário do parâmetro de ordem, devido à presença do estado absorvente [64].	99
5.5	Diagrama de fases do modelo, mostrando estimativas para a linha de transição entre estados absorvente e ativo, na aproximação de campo médio de um (CM1) e dois (CM2) sítios e simulações (S). Na linha $p_a + p_c = 1$ o modelo corresponde ao processo de contato (PC) e ao modelo do votante (MGL), que é recuperado no ponto $(p_a = 1/2, p_c = 0)$	102
5.6	Valores críticos de $\lambda = p_a/(1 - p_a)$ como função de p_b . A curva tracejada é um ajuste de um polinômio de quinto grau aos pontos obtidos nas simulações.	102
5.7	Expoentes críticos dinâmicos como função da taxa p_c . As linhas tracejadas indicam os valores destes expoentes para a classe PD.	103
5.8	Erros relativos das estimativas dos expoentes críticos dinâmicos, quando comparados com seus valores da classe PD.	103
5.9	Verificação da relação de hiperescala para os expoentes críticos dinâmicos. A linha cheia marca o valor nulo que a soma $2d/z - 4\delta - 2\theta$ deveria satisfazer.	104
5.10	Limite para $p_c = 0$ do expoente dinâmico δ	105
5.11	Resultados da simulação para o número médio de partículas A como uma função do tempo, sobre o ponto $p_a = 1/2$ e $p_c = 0$. Os pontos apenas marcam a diferença entre as duas condições iniciais	106
5.12	Histogramas do valor médio do número de partículas A. A figura de cima corresponde ao modelo do votante $(p_a = 1/2, p_c = 0)$ e a outra se refere a um ponto ligeiramente abaixo deste $(p_a = 0.49, p_c = 0.001)$, onde o estado absorvente $\langle N_A \rangle = 0$ é estável.	107
5.13	Comportamento do parâmetro de ordem como função de ζ , para $L = 2000$ e $\lambda = 0$. A linha tracejada á apenas um guia.	109
5.14	Diagrama de fases do modelo de Manna parametrizado por λ , com restrição de altura. A linha pontilhada corresponde às simulações, enquanto que a linha cheia é o resultado da aproximação de pares.	110
5.15	Valores crítico obtidos para o caso $\lambda = 0$, $\zeta_c = 0.9291$, $\beta/\nu_\perp = 0.2832$ e $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1.456$	110
5.16	Valores críticos obtidos, com correção de escala, $\ln \rho_a = -\beta/\nu_\perp \ln L + AL^{-\phi} + B$, com $A = -0.08$, $\phi = 0.165$ e $B = -1.13$, para o caso $\lambda = 0$	111
5.17	Expoentes β/ν_\perp e ν_\parallel/ν_\perp como função do parâmetro λ	113

5.18	Comportamento do parâmetro de ordem, para $L = 500$, no ponto $\lambda = 1$, indicando uma transição de primeira ordem, com um salto $\Delta\rho_a = 0.15$.	113
5.19	Linha crítica do modelo de três estados obtida por simulação comparada com aquelas extraídas das aproximações de campo médio.	115
5.20	Valor obtido para os expoentes β/ν_\perp e β no caso específico de $\beta_2 = 0.1$.	116
6.1	Comportamento de autovalores para o caso não-degenerado e degenerado.	118
6.2	Autovalores como função do parâmetro de controle, obtidos da diagonalização exata do operador do PC para uma rede de dois sítios.	124
6.3	Autovalores do primeiro estado excitado em função do parâmetro de controle, para diferentes tamanhos. Estes dados referem-se ao modelo AB.	125
6.4	Os quadrado são estimativas obtidas do método de diagonalização exata, comparado com as linhas críticas advindas da simulação (linha cheia) e da aproximação de pares (linha tracejada).	126
6.5	Expoentes estáticos do modelo AB estimados através da diagonalização exata para tamanhos finitos. As linhas tracejadas marcam os valores da classe PD.	127
6.6	Autovalores do primeiro estado excitado do operador de Manna restrito.	129
6.7	Comportamento dos autovalores μ_1 em função de ζ para os dois maiores tamanhos de rede que foram calculados. Observe que, no caso $L = 15$, μ_1 não é monotônico.	130
7.1	Estimativa feita através do método da razão para diferentes valores do parâmetro α . Os resultados mostrados são para $\alpha = 0$ (círculos) e, sucessivamente de baixo para cima, $\alpha = 1, 2, 3, 5$ e $\alpha = 10$. A linha sólida mostra o comportamento assintótico esperado para o limite em que este modelo equivale ao PC.	150
7.2	Linha crítica e expoente crítico obtidos através dos aproximantes d-log Padé com e sem tendência.	151
7.3	Linha crítica do modelo calculada por simulações (triângulos) e pelos aproximantes de Padé (círculos).	151
7.4	Estimativa do expoente ϕ feita através da linha crítica determinada pelos aproximantes de Padé.	152
7.5	Resultados dos aproximantes diferenciais parciais para o ponto multicrítico e para os expoente β e ϕ . Cada círculo corresponde a um aproximante distinto.	154
7.6	Comparação entre a linha crítica obtida via simulação (triângulos) com a curva característica gerada pelos aproximantes diferenciais parciais. .	155

7.7	Comparação entre a linha crítica obtida pelos aproximantes (linha cheia) e a aproximação de linha crítica derivada da função universal $Z(z)$	156
7.8	Linhas críticas do modelo AB para diferentes valores da constante de difusão. Cada ponto possui uma barra de erro associada ao desvio do valor médio dos aproximantes.	158
7.9	Expoente crítico β calculado ao longo da linha crítica para diferentes valores da constante de difusão. As barras de erro correspondem ao desvio da média.	159

Lista de Tabelas

4.1	Estimativas do ponto e dos expoentes críticos do PC em várias dimensões e obtidos através de campo médio, simulações ou expansões em séries	69
4.2	Transições de um sítio no modelo AB	72
4.3	Transições de pares de sítios no modelo AB	73
4.4	Transições de um sítio no modelo AB com difusão	77
4.5	Transições de pares de sítios no modelo AB com difusão	78
4.6	Transições permitidas na aproximação de um sítio para o modelo de Manna parametrizado.	81
4.7	Transições de um sítio no modelo de Manna parametrizado.	82
4.8	Transições permitidas na aproximação de pares para o modelo de Manna parametrizado.	85
4.9	Transições de um sítio no modelo de Manna parametrizado.	86
4.10	Transições de pares para o modelo de três estados.	90
5.1	Valores críticos para o modelo ao longo do intervalo de domínio do parâmetro λ	112
7.1	Estimativas do expoente de “crossover” do modelo AB com difusão . . .	159
B.1	Coeficientes $b_{i,j}$ da série supercrítica para a probabilidade de sobrevivência de partículas A.	171

Capítulo 1

Introdução

Embora na natureza, em geral, vários sistemas evoluam de acordo com leis físicas bem conhecidas, em muitos casos é impossível descrevê-los através de métodos de primeiros princípios, uma vez que os detalhes microscópicos de sua dinâmica não são completamente conhecidos. Para superar esta dificuldade, uma maneira possível é tratar alguns dos graus de liberdade destes sistemas como elementos aleatórios que podem ser descritos através de regras probabilistas. Por esta razão, métodos de Mecânica Estatística são essenciais para o estudo das propriedades de sistemas complexos. Nesta descrição, o sistema físico em questão pode ser estudado a partir de um conjunto reduzido de variáveis, enquanto que os graus de liberdade restantes são considerados como um ruído efetivo com uma certa distribuição de probabilidades postulada. A natureza real deste ruído pode estar associada a vários fenômenos como, por exemplo, interações térmicas, movimento caótico ou mesmo flutuações quânticas, mas usualmente pode ser ignorada numa descrição estatística como aquela descrita acima.

A caracterização completa de tais sistemas é feita através do conhecimento da distribuição de probabilidades, $P_s(t)$, de encontrar o sistema num estado s , em um certo instante de tempo t . No equilíbrio termodinâmico, a distribuição do estado estacionário é a famosa distribuição de Gibbs, $P_s \sim e^{-H(s)/k_B T}$, onde $H(s)$ representa a hamiltoniana que contém informação acerca de sua dinâmica [1]. Uma vez que se conheça esta distribuição, todas as grandezas estacionárias que caracterizam o sistema podem ser obtidas. Entretanto, em muitos casos é difícil a obtenção exata desta distribuição e, portanto, das grandezas características. Desta forma, faz-se necessário o desenvolvimento e o uso de técnicas de aproximação que nos permitam, ao menos, estimá-las e assim termos um “esboço” do sistema em questão. Algumas destas ferramentas que possibilitam a obtenção de soluções aproximadas são, por exemplo, a técnica da expansão em série [2] e o grupo de renormalização [3]. Tais técnicas, entre outras, fornecem ao caso do equilíbrio termodinâmico um escopo teórico bem-estabelecido.

Um aspecto de natureza física particularmente interessante neste tipo de questão

é aquele em que os graus de liberdade microscópicos de um certo sistema se comportam coletivamente mesmo em largas escalas. Este tipo de comportamento coletivo é característico do fenômeno das transições de fases contínuas. Um exemplo típico deste caso é a transição ordem-desordem presente no modelo de Ising bidimensional, em que próximo de uma certa temperatura crítica T_c o sistema forma domínios ordenados, cujo comprimento diverge na temperatura crítica [4]. Notavelmente, neste tipo de transição, algumas grandezas físicas, na vizinhança do ponto crítico, podem se comportar da mesma forma em diferentes sistemas, mesmo que estes descrevam fenômenos diversos. Isto leva a crer que o comportamento crítico é determinado por propriedades de simetrias comuns entre modelos aparentemente distintos. Esta similaridade levou os físicos a dividirem os sistemas que possuíam as mesmas características críticas em classes, que ficaram conhecidas como *Classes de Universalidade*. Aparentemente o número destas classes é finito o que permitiria imaginar a confecção de uma “Tabela Periódica” para elas. Desde então, encontrar e catalogar estas classes é matéria obrigatória do estudo dos Fenômenos Críticos.

Apesar de no regime de equilíbrio termodinâmico, os fenômenos críticos serem razoavelmente bem entendidos, no caso fora-do-equilíbrio isto não é verdade. Mesmo com a existência de exemplos experimentais destas transições, como no caso do crescimento de superfícies [5] e da aparente validade do conceito de universalidade também para o regime fora-do-equilíbrio, a caracterização destas e dos ingredientes que as definem em cada modelo são ainda incipientes. Uma tarefa teórica importante, desta forma, é descobrir quais as características determinantes para que as propriedades críticas se incluam em uma certa classe de universalidade.

Dentro das transições de fases que ocorrem fora-do-equilíbrio termodinâmico uma classe tem chamado a atenção na literatura nos últimos anos. Trata-se das transições que ocorrem em modelos que apresentam os chamados *estados absorventes* [6, 7]. Estes estados têm como propriedade “aprisionar” a dinâmica do modelo, de forma que uma transição de qualquer estado para ele pode ocorrer, mas nunca o oposto.

A vasta maioria destas transições não podem ser caracterizadas através de soluções exatas, mas soluções aproximadas ou simulações [8] nos permitem ter um cenário bastante completo dos casos estudados. Algumas destas técnicas aproximativas são idênticas àquelas usadas nos problemas de equilíbrio como campo médio [9], expansões em séries [10] ou soluções em tamanhos finitos [11]. Neste trabalho concentraremos nossa discussão em dois aspectos: como matéria de estudo, analisaremos modelos de rede unidimensionais, definidos no capítulo 3, que apresentam transições de fases em sistemas com estados absorventes. Como técnicas para implementar este estudo usamos diferentes abordagens, pontuando seus aspectos mais relevantes. Estas técnicas serão o cálculo de campo médio (capítulo 4), simulações numéricas (capítulo 5), diagonalização exata em tamanhos finitos (capítulo 6) e expansões em séries (capítulo

7). Finalmente, no capítulo 8, apresentamos as conclusões e as perspectivas de continuidade deste trabalho.

Capítulo 2

Estudo de transições de fases em sistemas com estados absorventes

Se abandonarmos uma pedra muito pesada de uma certa altura, ela cairá verticalmente atingindo um lugar no solo diretamente abaixo de onde foi solta. A lei de Newton nos assegura que se fizermos a mesma coisa um milhão de vezes, abandonando a pedra do mesmo lugar ela continuará caindo exatamente no mesmo ponto do solo. Por outro lado, se o objeto solto for algo leve como uma pluma ou uma folha de papel, o atrito com o ar o fará cair em lugares diferentes à medida que esta experiência seja repetida. Enquanto o comportamento da pedra, “fiel” aos ensinamentos da dinâmica de Newton, é extremamente regular e determinístico, este segundo exemplo parece alheio às leis da física.

Porém se tivermos um pouco de paciência e resolvermos atirar a folha de papel um milhão de vezes, por exemplo, repetindo esta série três ou quatro vezes, notaremos que a forma como as folhas caem formam um padrão que é repetido em todas estas três ou quatro experiências. O que parecia completamente desordenado, na verdade exibe regularidade em cada um dos experimentos, tanto quanto o determinismo presente na pedra em queda livre.

Se dividirmos o chão em muitos quadrados, de forma que cada folha jogada caia em um deles, ao jogarmos um milhão de folhas, cada um dos quadrados terá uma certa quantidade delas. Em todas as repetições das experiências obteremos mais ou menos o mesmo número de folhas nos mesmos quadrados, de maneira que a chance de se encontrar um número n qualquer num certo quadrado será a mesma em cada uma das experiências. Se juntarmos a informação sobre a probabilidade (o número de folhas em cada quadrado dividido pelo número total de folhas) de se encontrar um número qualquer de folhas em cada quadrado, estaremos determinando a informação sobre a chamada *distribuição de probabilidades* e esta será a mesma se repetirmos a experiência um tanto de vezes, sendo que em cada uma destas deixamos cair um grande número

de folhas. Essa regularidade da distribuição de probabilidades sugere que ela é gerada por algum mecanismo tão determinístico quanto o mecanismo da queda livre.

Cada evento particular da queda de uma folha de papel não pode ser precisada com maior certeza do que a determinação da probabilidade de que esta folha caia num destes quadrados, mas quando falamos sobre a probabilidade de que um certo quadrado seja ocupado por uma fração dada do número de folhas atirado, a resposta é respaldada por uma certeza completa. A rigor, para termos completa certeza da distribuição de probabilidades seria necessário jogarmos um número infinito de folhas, mas quanto maior o número delas mais próximo serão os resultados de dois conjuntos de experimentos distintos.

Na sequência deste capítulo discutiremos aspectos relevantes para os casos estudados adiante que envolvem processos cuja determinação da distribuição de probabilidades é tarefa essencial para o entendimento de sua física.

2.1 Cadeias de Markov

Entre os processos aleatórios existem as chamadas cadeias de Markov, processos que ocorrem com a discretização do tempo e dos valores que uma certa variável aleatória possa assumir. O estudo destas cadeias norteará nossas discussões futuras a respeito dos modelos aqui analisados. Começaremos expondo a formulação e as características mais importantes destes processos, pavimentando assim o caminho para estabelecermos algumas das técnicas mais tarde usadas para a análise dos modelos¹.

Seja uma variável aleatória x_t que assume valores n_t para cada valor inteiro e distinto do parâmetro t . Em sistemas discretizados em que possamos associar este parâmetro com o tempo, chamamos esta variável x_t de estocástica e os processos que envolvem seu comportamento ficam inteiramente determinados até um instante $t = \ell$ se pudermos especificar a distribuição de probabilidades $P_\ell(n_0, n_1, n_2, \dots, n_\ell)$ de que no instante $t = 0$ esta variável tenha valor n_0 , no instante $t = 1$, tenha valor n_1 e assim sucessivamente.

Caso a probabilidade condicional $P_{\ell+1}(n_{\ell+1}|n_0, n_1, \dots, n_\ell)$ de que a variável estocástica assumo o valor $n_{\ell+1}$ no instante $\ell + 1$, dado que tenha assumido os valores $n_\ell, n_{\ell-1}, \dots$ nos instantes $\ell, \ell-1, \dots$, seja igual à probabilidade condicional $P_{\ell+1}(n_{\ell+1}|n_\ell)$, dizemos que o processo estocástico descrito pela variável x_t é markoviano. Esta igualdade que define um processo markoviano estabelece que a probabilidade de que a variável possua um certo valor num instante de tempo depende tão somente de qual valor ela tinha no instante anterior, sem depender de toda a história pregressa de sua evolução.

¹A discussão que segue é essencialmente uma síntese do texto didático exposto em [12].

Da definição de probabilidade conjunta podemos escrever

$$P_\ell(n_0, n_1, n_2, \dots, n_\ell) = P_\ell(n_\ell|n_{\ell-1})P_{\ell-1}(n_{\ell-1}|n_{\ell-2}) \cdots P_2(n_2|n_1)P_1(n_1|n_0)P_0(n_0), \quad (2.1)$$

mostrando que num processo markoviano determinar a probabilidade conjunta significa conhecer um conjunto de probabilidades condicionais como $P_\ell(n_\ell|n_{\ell-1})$ além da probabilidade do estado inicial $P_0(n_0)$.

Seja $P_\ell(n_\ell)$ a probabilidade de que no instante ℓ a variável x_t possua o valor n_ℓ , independentemente de quais valores ela tenha possuído antes deste momento. Assim,

$$P_\ell(n_\ell) = \sum_{n_0, \dots, n_{\ell-1}} P_\ell(n_0, n_1, n_2, \dots, n_\ell), \quad (2.2)$$

de maneira que se inserirmos a expressão (2.1) nesta última equação teremos que

$$\begin{aligned} P_\ell(n_\ell) &= \sum_{n_0, \dots, n_{\ell-1}} P_\ell(n_\ell|n_{\ell-1})P_{\ell-1}(n_{\ell-1}|n_{\ell-2}) \cdots P_1(n_1|n_0)P_0(n_0) \\ &= \sum_{n_{\ell-1}} P_\ell(n_\ell|n_{\ell-1}) \sum_{n_0, \dots, n_{\ell-2}} P_{\ell-1}(n_{\ell-1}|n_{\ell-2}) \cdots P_1(n_1|n_0)P_0(n_0) \\ &= \sum_{n_{\ell-1}} P_\ell(n_\ell|n_{\ell-1})P_{\ell-1}(n_{\ell-1}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Se definirmos a quantidade $T(n_{\ell+1}, n_\ell) = P_{\ell+1}(n_{\ell+1}|n_\ell)$, de modo que estamos considerando um subconjunto de processos markovianos cujas probabilidades condicionais não variam no tempo (chamados de processos markovianos estacionários), então a identidade (2.3) assumirá a seguinte forma

$$P_\ell(n_\ell) = \sum_{n_{\ell-1}} T(n_\ell, n_{\ell-1})P_{\ell-1}(n_{\ell-1}). \quad (2.4)$$

Observe que a expressão acima se assemelha ao resultado de um produto de matrizes, sendo que o elemento de matriz $T(n_\ell, n_{\ell-1})$ representa a probabilidade do sistema transitar da configuração $n_{\ell-1}$ para n_ℓ . Como $T(n, m)$ é igual à probabilidade condicional $P(n|m)$ então sempre teremos $T(n, m) \geq 0$, além de satisfazer à condição de normalização $\sum_n T(n, m) = 1$, implicando que a soma de qualquer coluna da matriz \hat{T} , da qual $T(n, m)$ é o elemento (n, m) , deve ser unitária. Damos o nome de *matriz estocástica* a esta matriz \hat{T} .

Se definirmos a matriz coluna $\hat{P}^{(\ell)}$ como aquela cujos elementos são as probabilidades P_ℓ , então a equação (2.4) seria escrita como o seguinte produto matricial

$$\hat{P}^{(\ell)} = \hat{T}\hat{P}^{(\ell-1)} \quad (2.5)$$

que é na verdade uma relação de recorrência estabelecendo que a distribuição de probabilidades $\hat{P}^{(\ell)}$ é obtida a partir da mesma num instante imediatamente anterior. Seguindo este raciocínio podemos deduzir que

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(\ell)} &= \hat{T}\hat{P}^{(\ell-1)} \\ &= \hat{T}^2\hat{P}^{(\ell-2)} \\ &= \hat{T}^3\hat{P}^{(\ell-3)} \\ &\vdots \\ &= \hat{T}^\ell\hat{P}^{(0)}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

de forma que

$$P_\ell(n) = \sum_m T^\ell(n, m)P_0(m), \quad (2.7)$$

nos permitindo interpretar o termo $T^\ell(n, m)$ como a probabilidade de transição do estado m para o estado n através de ℓ passos temporais.

O chamado estado estacionário é alcançado no limite $\lim_{\ell \rightarrow \infty} \hat{P}^{(\ell)} = \hat{P}$, de forma que neste estado a distribuição é independente do tempo. Para obtermos o estado estacionário a partir da relação de recorrência (2.5), este estado deve satisfazer à igualdade

$$\hat{T}\hat{P} = \hat{P}. \quad (2.8)$$

A relação (2.8) estabelece que a distribuição do estado estacionário \hat{P} é um autoestado da matriz \hat{T} cujo autovalor associado é unitário. Portanto, as propriedades desta matriz são imprescindíveis para garantirmos que, a partir de uma certa distribuição inicial qualquer é possível alcançar o mesmo estado estacionário. Para isso é importante especificarmos estas propriedades:

1. A matriz estocástica deve ter autovalores λ que satisfaçam a desigualdade $|\lambda| \leq 1$, sendo um deles igual à unidade.

Prova: Consideramos uma matriz estocástica \hat{T} em que os autovalores $\{\lambda_k\}$ não sejam degenerados e cujos autoestados à direita e à esquerda são, respectivamente, $\{\psi_k\}$ e $\{\phi_k\}$. Então,

$$\begin{aligned}\hat{T}\psi_k &= \lambda_k\psi_k \\ \phi_k\hat{T}\psi_k &= \lambda_k\phi_k.\end{aligned}\tag{2.9}$$

Enquanto ψ_k é uma matriz coluna, ϕ_k é uma matriz linha e ambos formam um conjunto ortonormalizado, de forma que

$$\phi_j\psi_k = \delta_{jk},\tag{2.10}$$

sendo δ_{jk} a distribuição delta de Kronecker. Já a propriedade de fechamento é expressa como

$$\sum_k \psi_k\phi_k = \hat{I},\tag{2.11}$$

onde \hat{I} é a matriz identidade.

A ℓ -ésima potência da matriz estocástica pode ser expressa em termos de seus autovalores e autovetores como,

$$\hat{T}^\ell = \sum_k \lambda_k^\ell \psi_k \phi_k.\tag{2.12}$$

Por sua vez, a distribuição de probabilidades num instante de tempo $t = \ell$ será

$$P_\ell = \hat{T}^\ell P_0 = \sum_k \lambda_k^\ell \psi_k (\phi_k P_0).\tag{2.13}$$

Sendo $\lambda_1 = 1$ o autovalor associado ao estado estacionário, então $\psi_1 = P_\infty$ é a distribuição de probabilidades deste estado e $\phi_1 = 1$. Assim, teremos

$$P_\ell = P + \sum_{k \neq 1} \lambda_k^\ell \psi_k (\phi_k P_0).\tag{2.14}$$

Se todos os autovalores da matriz \hat{T} são tais que $|\lambda_k| \leq 1$ e estes não são degenerados, então na soma da expressão acima, $|\lambda_k|^\ell \rightarrow 0$ se $\ell \rightarrow \infty$. Portanto, neste limite, $P \rightarrow P_\infty$ qualquer que seja a distribuição inicial.

2. As componentes do autovetor associado ao autovalor unitário devem ser não-negativas, pois elas serão identificadas como as probabilidades do estado estacionário.
3. Chamamos de matriz irredutível aquela em que para cada par (m, n) existe uma potência ℓ tal que $T^\ell(n, m) > 0$. O teorema matemático de Perron-Frobenius assegura que uma matriz irredutível possui o maior autovalor, em módulo, unitário e não-degenerado, além de um autovetor cujas componentes são estritamente positivas.

Com isso, o teorema garante que em casos onde a matriz estocástica é classificada como irredutível, o estado estacionário é único e a distribuição de probabilidades estritamente positiva.

Estas são algumas das propriedades de matrizes que ajudam a elucidar a natureza da matriz estocástica e sua relação com a existência e unicidade de um estado estacionário. À primeira vista, pode parecer que a discussão destes aspectos seja um excesso de zelo. Entretanto, não é óbvio que dada uma probabilidade inicial P_0 , sua evolução levará o sistema para um único estado estacionário, independente desta condição inicial. Então, é de fato importante conhecer quais as condições em que isto ocorre.

Encerrando a discussão das cadeias de Markov, é interessante abordarmos um tema central em sistemas estatísticos, o chamado *balanço detalhado*. Este estabelece condições para que uma distribuição de probabilidades do estado estacionário possa ser a distribuição de equilíbrio termodinâmico. É neste regime que grandezas macroscópicas como pressão e temperatura ficam definidas. A condição de balanço detalhado se estabelece da seguinte forma: tomando a equação

$$P(n) = \sum_m T(n, m)P(m) \quad (2.15)$$

e lembrando da propriedade de normalização da matriz estocástica $\sum_n T(n, m) = 1$, podemos reescrever (2.15) como

$$\sum_m [T(n, m)P(m) - T(m, n)P(n)] = 0. \quad (2.16)$$

Se a distribuição de probabilidades do estado estacionário for tal que cada termo da soma na equação acima se anule um a um, ou seja,

$$T(n, m)P_e(m) = T(m, n)P_e(n), \quad (2.17)$$

dizemos que o sistema possui balanço detalhado e sua distribuição do estado estacionário, $P_e(n)$, é a distribuição de equilíbrio termodinâmico.

Esta condição também é conhecida como *reversibilidade microscópica* pois, a grosso modo, sugere um cenário pictórico em que cada par de estados m e n recebe e perde um fluxo de probabilidades de mesma intensidade, de maneira que o fluxo líquido em cada um é nulo. Isto significa que a probabilidade do sistema transitar do estado m para o estado n é a mesma da transição inversa. Daí o nome reversibilidade microscópica, que poderia ser ilustrada da forma mostrada na figura (2.1).

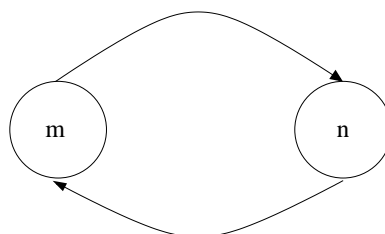


Figura 2.1: Ilustração do balanço detalhado entre dois estados arbitrários.

O balanço detalhado, entretanto, não está presente em todos os casos. Em sistemas onde existe uma certa tendência ou corrente externa, alguns estados podem ser privilegiados em detrimento de outros, de modo que o fluxo líquido num deles pode não ser nulo. Um exemplo, que será o centro de nossas discussões nos próximos capítulos, é o de dinâmicas que apresentam um ou mais *estados absorventes*. Um estado absorvente é aquele em que não existe nenhum fluxo de saída. Se a dinâmica de evolução do sistema leva-o a este estado, então nele fica aprisionado, sem possibilidade de transitar para outro. O estado absorvente, como já sugere o nome, é um “sorvedouro” de probabilidades. Uma ilustração do cenário dos fluxos de probabilidades deste estado é mostrado na figura (2.2).

Determinar se um sistema possui ou não balanço detalhado parece necessitar conhecermos a distribuição de probabilidades do estado estacionário. Porém, é possível prescindir desta informação e ainda saber sobre a reversibilidade microscópica, fazendo a escolha de uma trinca qualquer de estados n , n' e n'' e a sucessão de transições $n \rightarrow n' \rightarrow n'' \rightarrow n$. Com isto teremos,

$$\begin{aligned} n \rightarrow n' &\Rightarrow T(n', n)P(n) \\ n' \rightarrow n'' &\Rightarrow T(n'', n')T(n', n)P(n) \\ n'' \rightarrow n &\Rightarrow T(n, n'')T(n'', n')T(n', n)P(n). \end{aligned}$$

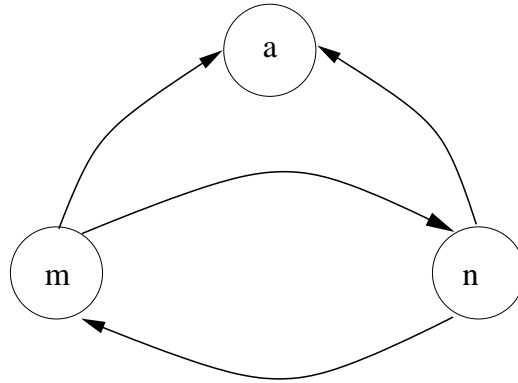


Figura 2.2: Ilustração de um estado absorvente a . Este estado recebe fluxo de outros estados, mas nenhuma probabilidade flui dele.

Já para trajetória inversa, $n \rightarrow n'' \rightarrow n' \rightarrow n$, temos

$$\begin{aligned} n \rightarrow n'' &\Rightarrow T(n'', n)P(n) \\ n'' \rightarrow n' &\Rightarrow T(n', n'')T(n'', n)P(n) \\ n' \rightarrow n &\Rightarrow T(n, n')T(n', n'')T(n'', n)P(n). \end{aligned}$$

Se o balanço detalhado existe então as expressões finais das sequências acima são iguais, de modo que a reversibilidade microscópica é cumprida para uma trinca qualquer de estados se esta satisfaz a igualdade

$$T(n, n'')T(n'', n')T(n', n) = T(n, n')T(n', n'')T(n'', n). \quad (2.18)$$

Finalmente, é necessário mostrar que, se o balanço detalhado é satisfeito, a matriz estocástica tem autovalores reais. Para isso definiremos a matriz $\hat{\mathbb{T}}$, tal que

$$\mathbb{T}(n, m) = \frac{1}{\chi(n)}T(n, m)\chi(m), \quad (2.19)$$

onde $\chi(n) = \sqrt{P_e(n)}$. Se dividirmos ambos os membros da equação (2.17) por $\chi(n)\chi(m)$, obtemos

$$\begin{aligned}\frac{T(n, m)P_e(m)}{\chi(n)\chi(m)} &= \frac{T(m, n)P_e(n)}{\chi(n)\chi(m)} \\ \frac{T(n, m)}{\chi(n)}\chi(m) &= \frac{T(m, n)}{\chi(m)}\chi(n) \\ \mathbb{T}(n, m) &= \mathbb{T}(m, n).\end{aligned}\tag{2.20}$$

Portanto, a matriz $\hat{\mathbb{T}}$ é simétrica. Como seus elementos são probabilidades, ou seja números reais, esta matriz é auto-adjunta ou hermitiana o que implica que seus autovalores são reais. Resta-nos então mostrar que os autovalores desta matriz são os mesmos da matriz \hat{T} . Fazemos isso tomando a equação de autovalores para \hat{T} , onde supomos que o autovalor λ está associado com um autovetor ψ ,

$$\hat{T}\hat{\psi} = \lambda\hat{\psi}\tag{2.21}$$

ou

$$\sum_n T(m, n)\psi_k(n) = \lambda_k\psi_k(m).\tag{2.22}$$

Dividindo a expressão (2.22) por $\chi(m)$, temos

$$\begin{aligned}\sum_n \frac{T(m, n)}{\chi(m)}\psi_k(n) &= \lambda_k \frac{\psi_k(m)}{\chi(m)} \\ \sum_n \frac{T(m, n)}{\chi(m)} \frac{\psi_k(n)}{\chi(n)}\chi(n) &= \lambda_k \frac{\psi_k(m)}{\chi(m)} \\ \sum_n \mathbb{T}(m, n) \frac{\psi_k(n)}{\chi(n)} &= \lambda_k \frac{\psi_k(m)}{\chi(m)}.\end{aligned}\tag{2.23}$$

Logo, λ_k também é autovalor de $\hat{\mathbb{T}}$ associado ao autovetor ψ/χ . Fica provado que, se o sistema possui balanço detalhado, a matriz estocástica associada possui autovalores reais.

2.2 Equação mestra

Encaminhamos nossa discussão até aqui mostrando que, em geral, um sistema estatístico fica determinado através do conhecimento de sua distribuição de probabilidades.

No entanto, encontrar esta distribuição não é uma tarefa simples como já se pode notar na formulação da matriz estocástica vista na seção anterior.

Uma maneira alternativa de se determinar a distribuição de probabilidades a partir da dinâmica de um sistema e de sua condição inicial é através da *equação mestra*. Esta equação costuma ser mais usual do que o método das matrizes estocásticas.

Para derivarmos esta equação na sua versão de estados discretos como aqueles da discussão das cadeias markovianas, escreveremos a matriz estocástica $T(n, m)$ de uma destas cadeias da seguinte forma,

$$T(n, m) = \begin{cases} \tau W(n, m) & \text{se } n \neq m \\ 1 - \tau \Omega(n) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.24)$$

sendo $\tau \ll 1$. Se recordarmos a relação válida para as matrizes estocásticas, $\sum_m T(m, n) = 1$, então temos

$$\begin{aligned} \sum_m T(m, n) &= \sum_{m \neq n} T(m, n) + T(n, n) \\ &= \tau \sum_{m \neq n} W(m, n) + 1 - \tau \Omega(n) = 1 \\ \Rightarrow \Omega(n) &= \sum_{m \neq n} W(m, n). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Por outro lado, temos que a probabilidade $P_\ell(n)$ satisfaz a relação,

$$\begin{aligned} P_{\ell+1}(n) &= \sum_m T(n, m) P_\ell(m) \\ &= \sum_{m \neq n} T(n, m) P_\ell(m) + T(n, n) P_\ell(n) \end{aligned} \quad (2.26)$$

e substituindo nela as equações (2.24) e (2.25), obtemos

$$\begin{aligned} P_{\ell+1}(n) &= \tau \sum_{m \neq n} W(n, m) P_\ell(m) + P_\ell(n) - \tau \Omega(n) P_\ell(n) \\ \frac{P_{\ell+1}(n) - P_\ell(n)}{\tau} &= \sum_{m \neq n} W(n, m) P_\ell(m) - \sum_{m \neq n} W(m, n) P_\ell(n). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Se definirmos a probabilidade de que o sistema ocupe o estado n num tempo $t = \tau \ell$, como $P(n, t) = P_\ell(n)$ e usando a igualdade (2.25), então a expressão (2.27) fica escrita na forma

$$\frac{P(n, t + \tau) - P(n, t)}{\tau} = \sum_{m \neq n} [W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t)] \quad (2.28)$$

ou, tomando o limite $\tau \rightarrow 0$,

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_{m \neq n} [W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t)]. \quad (2.29)$$

A equação (2.29) é a *equação mestra* e sua interpretação é evidente a partir da expressão matemática acima. Esta equação descreve como a probabilidade de um estado evolui com o tempo a partir do fluxo de transições de outros estados para este e dele para os outros estados. A quantidade $W(n, m)$ é uma probabilidade de transição do estado m para o estado n por unidade de tempo e, portanto, recebe o nome de taxa de transição. A taxa de transição de um certo sistema estatístico define toda a sua dinâmica, papel equivalente àquele desempenhado pela matriz estocástica nas cadeias markovianas.

É interessante notar que temos duas formulações distintas, mas equivalentes para a determinação da distribuição de probabilidades de um sistema submetido a uma dinâmica dada. Estas formas são a matriz estocástica e a equação mestra. Apesar de ser apenas uma analogia despretensiosa, poderíamos observar um paralelo entre estes dois métodos e as formulações matricial de Heisenberg e a equação de Schrödinger, na Mecânica Quântica. Ressalve-se que existe uma diferença essencial entre os dois formalismos quânticos e os métodos estocásticos de nossa discussão. Na Mecânica Quântica, o formalismo de Heisenberg refere-se a um cenário em que os operadores variam no tempo e não os estados, ocorrendo o oposto para a equação de Schrödinger. Nos problemas estocásticos, por outro lado, os estados (que estão relacionados à distribuição de probabilidades) evoluem no tempo nas descrições da equação mestra e da matriz estocástica. Desta forma, a analogia guarda semelhança apenas no fato de termos uma álgebra matricial ou uma equação diferencial para determinarmos o objeto de interesse na descrição do sistema em estudo: a função de onda nos casos quânticos e a distribuição de probabilidades nos problemas estocásticos.

As semelhanças com a Mecânica Quântica não param aqui. Podemos escrever a equação mestra de uma maneira distinta daquela mostrada em (2.29) se definirmos o elemento diagonal da taxa $W(n, m)$. Isto é feito tomando

$$\sum_m W(m, n) = 0, \quad (2.30)$$

o que corresponde a termos $W(n, n) = -\sum_{m \neq n} W(m, n) = -\Omega(n)$.

Se chamarmos de matriz de evolução a matriz \hat{W} cujos elementos são $W(n, m)$, podemos concluir que estes elementos são não-negativos fora da diagonal e negativos ou nulos nesta. Além disso, efetuando a soma

$$\begin{aligned} \sum_m W(n, m)P(m) &= \sum_{m \neq n} W(n, m)P(m) + W(n, n)P(n) \\ &= \sum_{m \neq n} [W(n, m)P(m) - W(m, n)P(n)], \end{aligned} \quad (2.31)$$

concluimos que a equação (2.29) poderia ser representada da maneira

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_m W(n, m)P(m, t) \quad (2.32)$$

que é simplesmente o produto das matrizes \hat{W} e \hat{P} , tal que

$$\frac{d}{dt}\hat{P} = \hat{W}\hat{P}, \quad (2.33)$$

sendo \hat{P} uma matriz coluna de n elementos e \hat{W} uma matriz $n \times m$.

A equação (2.33) é uma equação similar àquela do operador de evolução temporal quântico, conferindo novamente à taxa de transição o papel fundamental pela evolução dinâmica do sistema. Como no caso quântico, também podemos determinar uma solução formal para a expressão (2.33) dada por

$$\hat{P}(t) = e^{\hat{W}t}\hat{P}_0, \quad (2.34)$$

onde \hat{P}_0 é uma matriz coluna que corresponde à distribuição de probabilidades inicial.

Como é comum na álgebra de operadores, para dar sentido à exponencial na expressão(2.34), recorreremos à expansão de Taylor para representar,

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!},$$

de maneira que (2.34) é uma forma alternativa de escrever

$$\hat{P}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \hat{W}^n \hat{P}_0. \quad (2.35)$$

Realizar a soma de (2.35) significa resolver a equação mestra dadas as taxas de transição e a condição inicial. Porém, como no caso quântico, esta possibilidade está restrita à minoria dos problemas. Nos casos em que não é possível efetuar a soma ainda podemos estabelecer uma aproximação retendo alguns termos da série e, através de técnicas de extrapolação apropriadas, obtermos informações relevantes acerca das propriedades que caracterizam o sistema.

Imagine que queremos calcular o valor médio de uma função $F(n)$ a partir da distribuição de probabilidades $P(n, t)$. Fazemos isso a partir da soma

$$\langle F \rangle = \sum_n F(n)P(n, t). \quad (2.36)$$

Definindo a matriz linha $\hat{\Omega} = (111 \cdots 1)$, tal que

$$\hat{\Omega}\hat{P} = \sum_n \Omega(n)P(n, t) = \sum_n P(n, t) = 1, \quad (2.37)$$

então imediatamente concluímos que

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}F\hat{P} &= \sum_n \Omega(n)F(n)P(n, t) \\ &= \sum_n F(n)P(n, t) \\ &= \langle F \rangle. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Daí,

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \hat{\Omega}F \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \hat{W}^n \hat{P}_0 \\ &= f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} t^n f_n, \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde $f_0 = \hat{\Omega}F\hat{P}_0$ e $f_n = \hat{\Omega}F\hat{W}^n\hat{P}_0/n!$.

A partir da equação mestra também se pode determinar a condição de balanço detalhado. Na linguagem de taxas de transição esta condição é representada por

$$W(n, m)P_e(m) - W(m, n)P_e(n) = 0. \quad (2.40)$$

E através dela, assim como foi feito para as matrizes estocásticas, podemos mostrar que um sistema cuja distribuição estacionária satisfaz a condição (2.40) tem os autovalores de sua matriz de evolução sempre reais.

Voltando à equação mestra, os modelos que iremos discutir ao longo dos capítulos são definidos todos em uma rede, de modo que os estados ou configurações destes são representados por um vetor linha $\vartheta = (\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_N)$, sendo ϑ_i uma variável aleatória localizada no sítio i . Desta forma, as taxas de transições devem refletir a passagem de um estado ϑ para um estado ϑ' , ou seja $W(\vartheta', \vartheta)$. Além disso, adotaremos a dinâmica assíncrona, onde apenas um sítio da rede é alterado em cada instante de tempo. Com isso a taxa $W(\vartheta', \vartheta)$ pode ser expressa como

$$W(\vartheta', \vartheta) = \sum_{i=1}^N \delta_{\vartheta'_1, \vartheta_1} \delta_{\vartheta'_2, \vartheta_2} \cdots \delta_{(\vartheta'_i)^\dagger, \vartheta_i} \cdots \delta_{\vartheta'_N, \vartheta_N} w_i(\vartheta), \quad (2.41)$$

onde $\delta_{i,j}$ é a distribuição delta de Kronecker e $w_i(\vartheta)$ é taxa de transição de que o sistema se altere apenas no sítio i , passando o valor da variável aleatória naquele sítio de ϑ_i para $(\vartheta'_i)^\dagger$.

Desta forma a equação mestra fica escrita em termos das transições de um sítio da seguinte maneira

$$\frac{d}{dt} P(\vartheta, t) = \sum_{i=1}^N [w_i(\vartheta^i) P(\vartheta^i, t) - w_i(\vartheta) P(\vartheta, t)], \quad (2.42)$$

sendo ϑ^i a configuração em que ϑ^i é alterada apenas no sítio i , isto é $\vartheta^i = (\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, (\vartheta_i)^\dagger, \dots, \vartheta_N)$.

Se desejarmos calcular o valor médio de uma função $f(\vartheta)$ então devemos efetuar a seguinte soma

$$\langle f(\vartheta) \rangle = \sum_{\{\vartheta\}} f(\vartheta) P(\vartheta, t), \quad (2.43)$$

e se derivarmos com relação ao tempo a equação acima resultará que

$$\frac{d}{dt} \langle f(\vartheta) \rangle = \sum_{\{\vartheta\}} f(\vartheta) \frac{d}{dt} P(\vartheta, t), \quad (2.44)$$

onde podemos usar a equação (2.42) para escrever

$$\frac{d}{dt}\langle f(\vartheta) \rangle = \sum_{\{\vartheta\}} \sum_{i=1}^N [w_i(\vartheta^i)P(\vartheta^i, t) - w_i(\vartheta)P(\vartheta, t)]f(\vartheta). \quad (2.45)$$

Se invertemos a ordem dos somatórios e na primeira soma efetuarmos a transformação $\vartheta \rightarrow \vartheta^i$, notando que como a soma se estende sobre todas as configurações ϑ esta transformação não a altera, resulta então que a expressão (2.45) passa à forma,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle f(\vartheta) \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{\{\vartheta\}} [f(\vartheta^i)w_i(\vartheta)P(\vartheta, t) - f(\vartheta)w_i(\vartheta)P(\vartheta, t)] \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{\{\vartheta\}} [\{f(\vartheta^i) - f(\vartheta)\}w_i(\vartheta)P(\vartheta, t)] \\ &= \sum_{i=1}^N \langle \{f(\vartheta^i) - f(\vartheta)\}w_i(\vartheta) \rangle. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Os modelos que estudaremos aqui em sua maioria são expressos em termos de variáveis aleatórias do tipo Ising, $\sigma_i = \pm 1$, ou do tipo gás de rede, $\eta_i = 1$ ou 0 . Se quisermos calcular, por exemplo, a evolução da média de uma destas variáveis, a expressão (2.46) se particulariza como

1. Variável de Ising: $\sigma^i = -\sigma_i$

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_i \rangle = -2\langle \sigma_i w_i(\sigma) \rangle. \quad (2.47)$$

2. Variável de gás de rede: $\eta^i = 1 - \eta_i$

$$\frac{d}{dt}\langle \eta_i \rangle = \langle (1 - 2\eta_i)w_i(\eta) \rangle. \quad (2.48)$$

2.3 Modelos de rede e a dinâmica de reação-difusão

A equação mestra é apropriada para modelar um sistema através da dinâmica de seus constituintes microscópicos. Os modelos de rede, por sua vez, são o cenário adequado para aplicarmos regras que imitem as interações relevantes para a descrição física de sistemas estudados por estas equações. Geralmente, estes modelos não permitem uma comparação direta com o experimento, mas propiciam uma formulação matemática muito mais simples do que a descrição hidrodinâmica, que leva em conta campos e fatores mais diretamente mensuráveis, mas nem sempre de fácil manipulação algébrica.

Em geral, tais modelos são definidos em redes de geometria regular com sítios marcando as posições acessíveis nesta rede e cada sítio abrigando uma variável que assume valores que identificam propriedades específicas. Por exemplo, para modelar um sistema de partículas interagentes poderíamos escolher uma rede cujos sítios são ocupados por um certo número de partículas, com as mesmas interagindo com outras localizadas em sítios diferentes. Graças a esta localização é trivial estabelecer uma interação de curto alcance, por exemplo, entre as partículas. Num cenário mais complexo estas partículas podem simbolizar graus de liberdade genéricos do sistema.

Os modelos de rede encontraram lugar em diversas aplicações de Física e mesmo de outras ciências, como Química por exemplo [13]. Ali eles descrevem reações que ocorrem em solventes ou em uma superfície catalítica através de diversos passos intermediários definidos pelas propriedades específicas dos reagentes e catalisadores. Ao contrário, na descrição que se utilize de modelos de rede, tais passos são ignorados em favor de transições que ocorrem de acordo com regras probabilísticas. Pode-se identificar os reagentes como partículas de tipos diversos como A, B, C, \dots que ocupam sítios desta rede. Nesta descrição não são levados em conta momentos ou massas destes constituintes.

Uma reação se dá pela mudança na variável que indexa um ou mais sítios, como ocorre no caso da adsorção de uma partícula numa fase gasosa por uma superfície catalisadora. Podemos alterar o estado do sítio, antes vazio, associando a este uma variável de ocupação que passa de $\eta_i = 0$ para um valor unitário, representando a transformação $\emptyset \rightarrow A$. Já uma difusão de partículas nesta mesma superfície seria facilmente representada pela transição $A + \emptyset \rightarrow \emptyset + A$. Cada uma destas reações ocorre com uma certa probabilidade e a configuração da rede, isto é, seu conjunto de variáveis indexadoras, num determinado instante, representa a configuração da mesma para aquele momento.

As reações mais comuns num sistema de reação-difusão são as seguintes:

1. Transições originadas por uma partícula

$A \rightarrow \emptyset$	auto-destruição
$A \rightarrow 2A$	produção de descendência ou decoagulação
$A \rightarrow B$	transmutação
$A \rightarrow A + B$	criação de partículas

2. Transições binárias

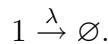
$2A \rightarrow \emptyset$	aniquilação de pares
$2A \rightarrow A$	coagulação ou coalescência
$A + B \rightarrow \emptyset$	aniquilação de duas espécies
$A + B \rightarrow B$	adsorção induzida de partículas

Quanto à difusão, a transformação que ocorre para gerar este processo é simplesmente $A + \emptyset \rightarrow \emptyset + A$, sendo um processo conservativo, pois não altera o número de partículas, e se dá com uma taxa proporcional à constante de difusão D . Se o processo de difusão é muito mais frequente que aqueles de reação, chamamos este regime de *limitado por reação*. Já quando ocorre o oposto, chama-se *limitado por difusão*.

Para ilustrar como um modelo de rede com dinâmica de reação-difusão pode ser facilmente tratado a partir de uma equação mestra como aquela definida em (2.42), usaremos um caso bem que pode ser trivialmente tratável.

2.3.1 Modelo de rede para o processo de decaimento radioativo

Seja uma rede de L sítios, com cada um destes ocupado por uma partícula ou vazio, permitindo-nos definir uma variável de ocupação, η_i , sendo $\eta_i = 1$ ou $\eta_i = 0$. Se um sítio é ocupado ($\eta_i = 1$) então, com uma taxa de transição λ ele se esvazia,



Com esta dinâmica, a taxa de transição do modelo é $w_i(\eta) = \lambda\eta_i$, de maneira que se usarmos a expressão (2.48), para calcularmos o valor da média de η_i , teremos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\eta_i\rangle &= \lambda\langle(1 - 2\eta_i)\eta_i\rangle \\ &= -\lambda\langle\eta_i\rangle, \end{aligned} \tag{2.49}$$

onde usamos que, uma vez que $\eta_i = 1$ ou 0 , $\eta_i^2 = \eta_i$. A solução para esta equação é trivial, $\langle \eta_i \rangle = -\langle \eta_i \rangle_0 \exp(-\lambda t)$, sendo $\langle \eta_i \rangle_0$ a condição inicial para esta média.

Como essa solução é válida para qualquer sítio então ela reflete o decaimento exponencial que é amplamente conhecido para o processo radioativo. Contudo, não são muitos os casos em que a solução para uma média da equação mestra seja tão facilmente obtida. De fato, a imensa maioria dos casos não nos permite obter uma solução exata para a equação mestra, apesar dos intensos esforços empregados na tentativa de superar estas dificuldades [14, 15, 16].

2.4 O processo de contato

Em 1974, T. E. Harris propôs um modelo de rede para imitar um processo de propagação de epidemias [17]. Neste modelo, em cada sítio se localiza um indivíduo que pode estar saudável (representado pela variável de gás de rede $\eta_i = 0$) ou doente (associado ao sítio ocupado, $\eta_i = 1$). Um indivíduo saudável pode se contaminar através de contato com outros indivíduos, primeiros vizinhos, que já estejam contaminados. Este contágio ocorre com uma taxa de transição igual a $\lambda n/z$, onde λ é um parâmetro positivo, n o número de primeiros vizinhos contaminados e z é o número de coordenação da rede (número de primeiros vizinhos). Por outro lado, se o indivíduo está infectado, ele pode se curar espontaneamente com uma taxa de transição unitária, independentemente do estado de sua vizinhança. Numa linguagem de transições, as regras do modelo são descritas como

$$\begin{array}{ccc} 1 & \xrightarrow{1} & \emptyset \\ 0 + 1 & \xrightarrow{\lambda} & 1 + 1. \end{array}$$

Por sua vez, a expressão para a taxa de transição é

$$\begin{aligned} w_i(\eta) &= \frac{\lambda}{z} \delta_{\eta_i,0} \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \delta_{\eta_i,1} \\ &= \frac{\lambda}{z} (1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i, \end{aligned} \quad (2.50)$$

onde usamos que \sum_{δ} é a soma sobre os primeiros vizinhos e $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker, de modo que $\delta_{\eta_i,0} = (1 - \eta_i)$ e $\delta_{\eta_i,1} = \eta_i$.

As regras dinâmicas deste modelo de epidemia permitem que um indivíduo que já tenha se recuperado da doença possa ser infectado novamente, sem qualquer memória de seu contágio passado. Com isso, cada configuração num certo instante de tempo depende unicamente da configuração da rede no instante imediatamente anterior e, por

isso, podemos qualificar este modelo como um processo markoviano. Esta definição também impõe uma regra de atualização assíncrona.

Se o sistema, levado por sua dinâmica, alcançar uma configuração em que todos os indivíduos estejam saudáveis, este estado nunca mudará pois nenhum indivíduo é contaminado a não ser através de contato. Esta configuração que “aprisiona” a dinâmica do sistema é portanto absorvente. Em sistemas que possuem uma configuração como esta, a configuração absorvente será sempre um estado estacionário. Nos casos em que o sistema é finito será verdadeiramente o único estado estacionário. Porém em sistemas infinitos, ou no limite termodinâmico (com a devida licença poética), outros estados estacionários podem emergir da dinâmica.

Voltando ao Processo de Contato (PC), a questão que se punha era se, para sistemas infinitos, além do estado absorvente existiria outro estado estacionário, em que uma parcela de indivíduos continuassem contaminados? Isto é, haveria uma solução estável que permitisse a persistência da epidemia? O trabalho de Harris, apesar de ser motivado por um aspecto aparentemente biológico, na verdade é concentrado na busca de uma prova matemática, através do estudo de probabilidades, que mostre que tal solução existe. Mesmo não tendo obtido a solução completa do modelo, Harris mostrou que, de fato, uma solução estacionária ativa emerge a partir de um determinado valor do parâmetro λ , que não é precisamente determinado por esta análise. Portanto, o cenário para este modelo é claro: para valores menores que um certo λ_c o estado estacionário do modelo é o vácuo ou uma rede completamente preenchida por indivíduos saudáveis. Já para valores maiores que λ_c a rede fica ocupada por uma fração de doentes. Poderíamos fazer uma leitura deste resultado em que cada um destes estados estacionários é visto como uma fase estável e a passagem de uma fase para outra ocorre através da variação deste parâmetro λ , como ilustra a figura (2.3).

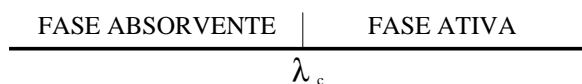


Figura 2.3: Linha de separação de fases no processo de contato.

Para ilustrar as dificuldades envolvidas na obtenção de soluções exatas para este problema, podemos tentar resolver a equação para a evolução temporal da média $\langle \eta_i \rangle$, que mede qual a probabilidade de um sítio qualquer estar ocupado. Numa situação em que a rede possa ser considerada homogêna, isto é, todos os sítios são tratados sem distinção, essa média pode assegurar se o sistema está ou não em um estado de vácuo. Tomando a equação (2.48) e a taxa de transição (2.50), temos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\eta_i\rangle &= \left\langle (1 - 2\eta_i) \left\{ \frac{\lambda}{z}(1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i \right\} \right\rangle \\
&= \frac{\lambda}{z} \sum_{\delta} \langle (1 - \eta_i)\eta_{i+\delta} \rangle - \langle\eta_i\rangle.
\end{aligned} \tag{2.51}$$

Se escolhermos uma rede homogênea e isotrópica de modo que podemos considerar $\rho \equiv \langle\eta_i\rangle$ e $\phi \equiv \langle\eta_i\eta_{i+\delta}\rangle \forall i$, então a soma contribuirá com $z(\rho - \phi)$, resultando que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho &= \lambda(\rho - \phi) - \rho \\
&= (\lambda - 1)\rho - \lambda\phi.
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Esta equação não é simples de se resolver como foi no caso da do decaimento radioativo (2.49), pois a presença do termo que representa a média do produto de dois sítios impede que a integremos de forma simples. Este termo representa as correlações presentes no sistema devido ao fato de que uma das transições - o contágio por contato - estabelece uma interação entre as partículas que não está presente no processo de decaimento, onde os sítios são independentes. A inexistência de uma técnica que possibilite lidar exatamente com estas correlações inibe a solução exata do PC e apenas resultados aproximados, como os cálculos de campo médio mostrados no capítulo 4 permitem estimar algumas das características do modelo. Além disso, outras técnicas utilizadas para este estudo são as simulações numéricas e as expansões em séries que discutiremos em capítulos posteriores. Estas ferramentas permitem estimar o valor de λ_c em $\lambda_c = 3.29785(2)$ [10], $1.6488(1)$ [18] e $\lambda_c = 1.3169(1)$ [19], para os casos uni, bi e tridimensionais, respectivamente.

2.5 Transições de fases

Certos sistemas podem ser encontrados em mais de uma fase, como por exemplo a água que existe na natureza em sua forma mais comum de líquido, mas também como gelo ou vapor. No caso da água, o estado pode ser alterado, fazendo com que a mesma mude de fase, se variarmos algum campo termodinâmico como a temperatura ou a pressão. Esta transformação recebe o nome de *transição de fases* e ocorre em diversos outros sistemas físicos.

Um destes outros exemplos é o caso dos materiais ferromagnéticos como o *Fe*, *Ni*, *Co* e *Mn* que acima de uma certa temperatura têm seus momentos magnéticos completamente desordenados ganhando uma ordem abaixo de uma certa temperatura específica T_c , chamada temperatura crítica.

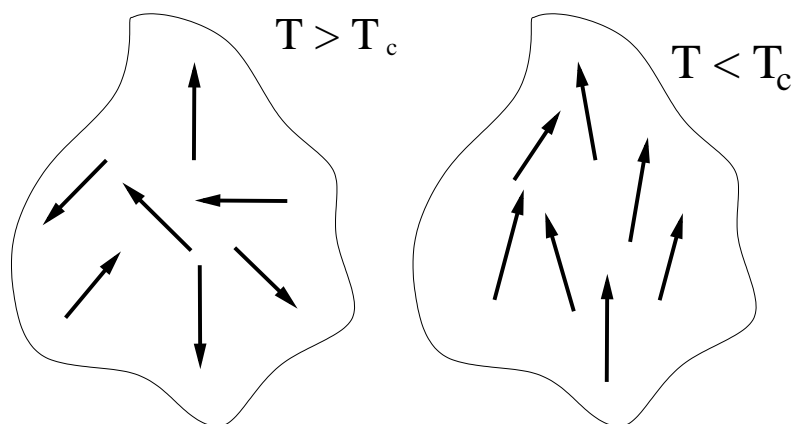


Figura 2.4: Estados desordenado e ordenado para um ferromagneto.

Para qualificarmos a passagem de um estado desordenado para o outro ordenado, podemos analisar o comportamento que assume a grandeza chamada *magnetização*, m . Esta grandeza mede a orientação média dos momentos magnéticos de um certo material. Para o caso desordenado, existe igual chance do momento ter qualquer orientação de modo que a magnetização é nula. Por outro lado, o estado ordenado tem claramente uma orientação preferencial, ou seja $m \neq 0$. Sendo assim, parece lógico usarmos a magnetização para determinar em quais das fases (ordenada ou desordenada) se encontra o sistema. Analogamente ao caso da água que mudava de uma fase a outra através da variação de campos termodinâmicos como a temperatura, o mesmo ocorre para o material ferromagnético, caracterizando esta passagem como uma transição de fases.

De uma maneira geral, a teoria das transições de fases estabelece um vocabulário apropriado para as grandezas características deste fenômeno. Aquela grandeza que serve para nos orientar sobre a passagem de uma fase a outra, como a magnetização, chamamos de *parâmetro de ordem*, f , já aquela que provoca a mudança de fases, como a temperatura em nossos exemplos, é chamada de *parâmetro de controle*, p , e o valor deste parâmetro onde ocorre a transição é designado como *ponto crítico*, p_c . Numa descrição devida a Landau [20] o parâmetro de ordem também é definido como a função que tem um valor nulo abaixo do ponto crítico e não-nulo acima deste

O mesmo Landau caracterizou as transições de fases em duas categorias: as transições contínuas e descontínuas. Na primeira categoria, o parâmetro de ordem varia continuamente de uma fase para outra, enquanto que nas descontínuas este parâmetro sofre um salto no ponto crítico. O caso do ferromagnetismo é um exemplo clássico de uma transição contínua, enquanto que o caso da transição da água entre suas fases de líquido e vapor, à pressão atmosférica, é uma transição descontínua.

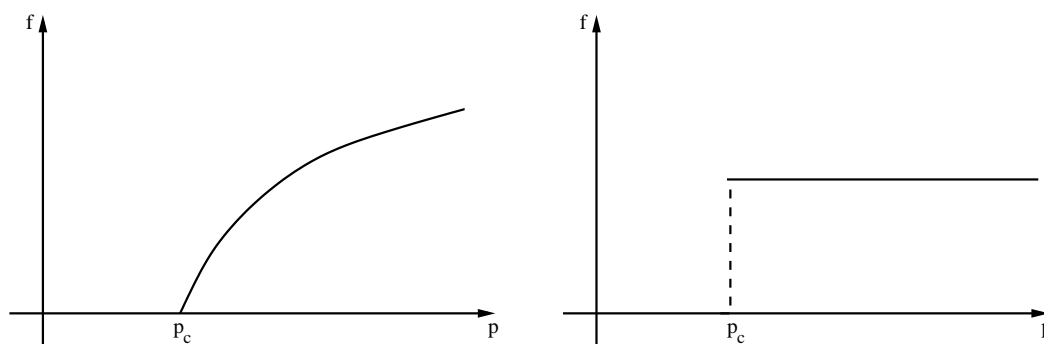


Figura 2.5: Ilustrações de uma transição contínua e outra descontínua.

Esta maneira que discutimos as características das transições de fases é inteiramente fenomenológica, mas para sistemas que estejam no regime do equilíbrio termodinâmico é possível caracterizá-las através das singularidades dos potenciais termodinâmicos. No regime de equilíbrio térmico, a probabilidade do estado estacionário, como já discutimos, satisfaz à condição de balanço detalhado e é uma distribuição de equilíbrio termodinâmico, como a distribuição de Boltzmann-Gibbs, $P_e \sim \exp(-\beta H)$, onde $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura, e H é o hamiltoniano do sistema que determina suas propriedades microscópicas. Uma outra classificação da categoria de transições foi dada por Ehrenfest [21], que usa o conceito de transições de primeira e segunda ordem, ao invés de contínua e descontínua. Esta nomenclatura está relacionada com a ordem da derivada da energia livre que possua uma singularidade. Numa relação entre as formas de Landau e Ehrenfest, poderíamos associar, geralmente, as transições contínuas com as de segunda ordem, enquanto que as descontínuas seriam similares às de primeira.

Nos sistemas fora-do-equilíbrio termodinâmico não podemos definir uma energia livre e nem sequer uma função hamiltoniana é geralmente possível de ser construída para estes. Apesar disso, os conceitos de fases e transições entre estas emerge de forma fenomenológica, mas não apenas como analogia aos casos de equilíbrio. Um dos exemplos de como é possível falar de transições de fases no regime fora-do-equilíbrio é o modelo do processo de contato, discutido na seção anterior.

Neste modelo, os estados estacionários absorvente e ativo podem ser vistos como fases, uma vez que caracterizam um arranjo bem determinado dos constituintes microscópicos do sistema, como ocorre com os momentos magnéticos do ferromagneto. Além disso, outras associações são diretamente plausíveis, como a identificação da densidade de sítios ativos (ou indivíduos infectados, na linguagem original do modelo) com o parâmetro de ordem, e a taxa de infecção, λ , com o parâmetro de controle. Observe que esta associação preenche completamente os requisitos que estabelecemos

na definição da nomenclatura associada às transições.

Numa visão termodinâmica, as transições de fases se originam quando num sistema de muitos corpos há uma competição entre a energia deste sistema, que deve ser minimizada e a sua entropia que é maximizada, no equilíbrio. Os ferromagnetos a campo nulo, são costumeiramente modelados pelo hamiltoniano de Ising

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.53)$$

onde J é a constante de troca, $\sigma_i = \pm 1$ é a variável do momento magnético e $\langle i, j \rangle$ simboliza que a soma se dá sobre sítios i e j que são primeiros vizinhos. Nestes, a minimização da energia acontece quando os momentos magnéticos σ_i se alinham numa mesma direção. Contrariamente, uma configuração em que todos eles estejam alinhados minimiza também a entropia, pois existiria apenas uma configuração acessível ao sistema. Desta forma, para alcançarmos uma entropia máxima o sistema deve ser tão desordenado quanto possível. Portanto, enquanto a energia propicia um estado com magnetização não-nula, a entropia “luta” por um equilíbrio em que esta magnetização é nula. Desta disputa entre ordem e desordem se origina a transição de fases neste sistema.

Apesar de não possuir equilíbrio termodinâmico, o PC exhibe características similares a esta dualidade termodinâmica presente no ferromagnetismo. Claro que, como já frisamos em uma oportunidade anterior, um sistema muito longe do equilíbrio termodinâmico não permite que se defina quantidades como energia ou entropia, mas uma competição entre ordem e desordem também aparece no PC. Se imaginarmos que o estado de vácuo, onde todos os indivíduos estão saudáveis (que é o estado absorvente deste modelo), representa um ordenamento, então a desordem estaria relacionada ao estado ativo, onde podem coexistir indivíduos doentes e saudáveis, como ocorreria na fase desordenada dos ferromagnetos. A dinâmica do modelo, por outro lado, provoca o embate das transições que tendem a levar o sistema para um lado ou outro, de maneira que mesmo sem podermos associar qualquer grandeza termodinâmica para o PC, o mecanismo de competição ordem-desordem proveniente da interação de muitos corpos, continua presente e provoca a transição.

Uma diferença marcante dos modelos fora-do-equilíbrio que estudaremos aqui, em relação à teoria das transições de fases no equilíbrio é que, neste último regime, uma transição não ocorre num sistema unidimensional, como mostra um argumento heurístico de Landau [20], para casos em que as interações são de curto alcance. Porém, o PC exhibe uma transição de fases mesmo em uma dimensão, como mostrou Harris em seu trabalho a respeito da existência de uma outra solução estacionária que não a trivial. É necessário frisar que modelos fora-do-equilíbrio não estão no escopo do

argumento proposto por Landau, pois este está centrado no comportamento da energia livre, elemento sem definição neste regime.

Se analisarmos como as configurações de uma rede, no PC, evoluem à medida que nos aproximamos do ponto crítico a partir de um valor de $\lambda > \lambda_c$, o que veríamos seria algo como o que ilustra a figura (2.6)². Esta figura é dividida em três painéis. O primeiro, na extrema esquerda, corresponde ao sistema num ponto em que $\lambda > \lambda_c$. Os demais, indo da esquerda para a direita, são relacionados a $\lambda = \lambda_c$ e $\lambda < \lambda_c$, respectivamente. No primeiro painel, observamos algumas pequenas regiões brancas, que correspondem a ilhas de indivíduos saudáveis. À medida que o parâmetro de controle se aproxima do valor crítico, a extensão destas ilhas aumenta. No ponto crítico elas formam um aglomerado que pode atravessar todo o sistema. Isto demonstra que próximo ao ponto crítico emerge um comportamento coletivo que leva o sistema ao ordenamento, como ocorre no caso do sistema ferromagnético quando os momentos se organizam em domínios cuja extensão é da mesma ordem do tamanho do sistema, dando origem a uma magnetização não-nula.

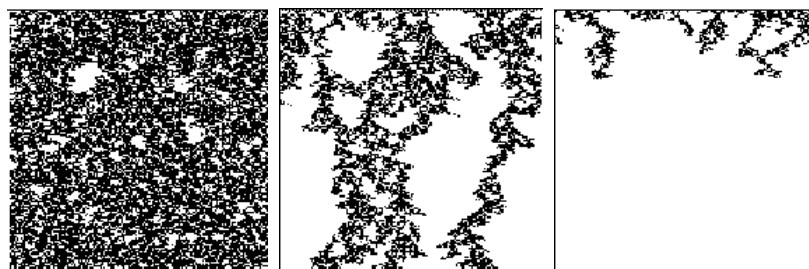


Figura 2.6: Rede de indivíduos saudáveis (sítios vazios) e doentes (sítios ocupados). Da esquerda para a direita, configurações estáveis da rede, na região super, crítica e subcrítica. À medida que o parâmetro de controle diminui, se aproximando de seu valor crítico, um “mar” de buracos emerge.

Designado por comprimento de correlação, o tamanho médio destes aglomerados diverge quando o sistema se encontra sobre o ponto crítico e esta é uma característica marcante das transições de fases contínuas fora ou no equilíbrio termodinâmico. Uma diferença relativa aos dois regimes é que fora-do-equilíbrio, a evolução temporal é determinante para a caracterização do problema. Então é necessário definirmos uma escala de evolução temporal e outra espacial, de maneira que teremos dois comprimentos de correlação que divergem no ponto crítico.

Uma consequência direta desta divergência do comprimento de correlação é o comportamento das grandezas que caracterizam as transições tal como no PC ocorre com a densidade de sítios ativos. Na região subcrítica ($\lambda < \lambda_c$) esta densidade é nula,

²Esta figura, assim como (2.9) e (2.10) foram retiradas do excelente trabalho de revisão[7].

enquanto que para a região supercrítica ($\lambda > \lambda_c$) a densidade converge para um valor finito e não-nulo, indo à zero à medida que nos aproximamos do valor crítico. O comportamento deste parâmetro de ordem é

$$\rho \sim \Delta^\beta, \quad (2.54)$$

onde $\Delta = \lambda - \lambda_c$ e o expoente β é chamado de *expoente crítico*. Os valores dos expoentes críticos, em um dado sistema, dependem, entre outras coisas, da dimensão deste sistema.

Uma transição de fases não é caracterizada apenas por um expoente crítico, mas por um conjunto deles, cada um associado a uma diferente grandeza. Um conceito que emergiu da descoberta destes expoentes é que sistemas governados por regras microscópicas completamente distintas podiam possuir o mesmo conjunto de expoentes. Este conceito recebeu o nome de *universalidade* e sua origem se encontra no fato de que, na vizinhança do ponto crítico, apenas as propriedades de simetria são relevantes em todos estes sistemas independentemente de seus detalhes microscópicos.

O conceito de universalidade sugere a idéia de acumular numa classe todos os exemplos de sistemas que possuam os mesmos expoentes críticos, de modo a se construir uma “tabela periódica”, onde cada elemento corresponde a distintos conjuntos de expoentes críticos. Então, assim como ocorreu com Mendeleev, os físicos estatísticos encontram o desafio de catalogar e prever as classes de universalidade.

2.5.1 Teoria de escala para transições de fases em sistemas com estados absorventes

A teoria de escala em sistemas físicos que estejam no regime de equilíbrio termodinâmico estabelece qual o comportamento de certas grandezas na vizinhança de um ponto crítico. No equilíbrio, estas relações são extraídas a partir da energia livre e da relação que esta guarda com cada uma das grandezas. Entretanto, no regime fora-do-equilíbrio estamos desprovidos de uma energia livre o que nos permite ter apenas uma formulação fenomenológica desta teoria de escala, como aquela proposta por Grassberger e De La Torre em [8].

Nesta descrição fenomenológica definimos um comportamento para a densidade de uma partícula, ou seja a probabilidade condicional de que exista uma partícula localizada numa posição \vec{r} em um instante de tempo t , dado que no instante de tempo inicial, $t = 0$, a rede era ocupada por apenas uma partícula localizada na origem. Esta grandeza é esperada escalar como

$$\rho(\vec{r}, t) \sim t^{\theta-d/z} F(\vec{r}/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (2.55)$$

onde d é a dimensão do sistema, F é uma função de escala universal, $\Delta = \lambda - \lambda_c$ e ν_{\parallel} é um expoente crítico relativo ao comprimento de correlação temporal, ξ_{\parallel} . Outra grandeza cuja escala será definida é a probabilidade de que o sistema possua ao menos uma partícula ativa num instante de tempo t , também chamada de probabilidade de sobrevivência, P_s , que comporta-se como

$$P_s(t) \sim t^{-\delta} G(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}). \quad (2.56)$$

A partir da equação (2.55) podemos determinar o comportamento de escala para o número médio de partículas, N , fazendo,

$$\begin{aligned} N(t) &= \int d^d r \rho(\vec{r}, t) \\ &= \int d^d r t^{\theta-d/z} F(\vec{r}/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}) \\ &= t^{\theta-d/z} \int d^d r F(\vec{r}/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Usando a troca de variáveis $\vec{x} = \vec{r}/t^{1/z}$, o que implicará que $d^d x = d^d r t^{-d/z}$, resulta que

$$\begin{aligned} N(t) &= t^{\theta-d/z} t^{d/z} \int d^d x F(\vec{x}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}) \\ &\sim t^{\theta} f(\Delta t^{1/\nu_{\perp}}). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Para a função de espalhamento média, $R^2(t) = \langle r^2 \rangle$, temos

$$\begin{aligned} R^2(t) &= \langle \vec{r}^2(t) \rangle = \frac{1}{N(t)} \int d^d r r^2 \rho(\vec{r}, t) \\ &= \frac{1}{N(t)} \int d^d \vec{r}^2 t^{\theta-d/z} F(\vec{r}/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}) \end{aligned} \quad (2.59)$$

e usando a mesma mudança de variável da demonstração anterior, teremos

$$\begin{aligned} R^2(t) &= \frac{1}{N(t)} t^{\theta-d/z} \int d^d x t^{2/z} \vec{x}^2 t^{d/z} F(\vec{x}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}) \\ &= \frac{1}{N(t)} t^{\theta+2/z} \int d^d x \vec{x}^2 F(\vec{x}, \Delta t^{1/\nu_{\perp}}) \\ &\sim t^{2/z} g(\Delta t^{1/\nu_{\perp}}). \end{aligned} \quad (2.60)$$

Portanto, sobre o ponto crítico, $\Delta = 0$, o comportamento destas grandezas dinâmicas exibe leis de potência,

$$\begin{aligned} N(t) &\sim t^\theta \\ P_s(t) &\sim t^{-\delta} \\ R^2(t) &\sim t^{2/z}. \end{aligned}$$

No estado estacionário, a probabilidade de sobrevivência $P_s(t \rightarrow \infty) = P_\infty$ se comporta como

$$P_\infty = \Delta^{\beta'}, \quad (2.61)$$

onde, em geral, $\beta' \neq \beta$.

Por outro lado, ainda no estado estacionário vale a relação [7],

$$\rho(\vec{r}, t) \sim P_\infty \rho_\infty, \quad (2.62)$$

sendo $\rho_\infty = \rho(t \rightarrow \infty) \sim \Delta^\beta$, logo

$$\rho(\vec{r}, t) \sim \Delta^{\beta+\beta'}. \quad (2.63)$$

Lembrando que

$$\rho(\vec{r}, t) \sim t^{\theta-d/z} F(\vec{r}/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_\perp}) \quad (2.64)$$

se escolhermos $\Delta t^{1/\nu_\perp} = c$, então $t \sim \Delta^{-\nu_\perp}$, de forma que para o estado estacionário

$$\rho \sim \Delta^{\nu_\perp d/z - \nu_\perp \theta} \quad (2.65)$$

e comparando com (2.63), temos

$$\frac{d}{z} - \theta = \frac{\beta + \beta'}{\nu_\perp} \quad (2.66)$$

que é a chamada *relação de hiperescala* e associa diferentes expoentes. Ela assume a forma particular

$$\frac{d}{z} - \theta = \frac{2\beta}{\nu_{\perp}} \quad (2.67)$$

que também pode ser escrita como

$$\frac{d}{z} - \theta = 2\delta, \quad (2.68)$$

se usarmos a relação $\delta = \beta/\nu_{\perp}$, obtida da comparação $P_{\infty} \sim \Delta^{\beta}$, no caso em que $\beta = \beta'$.

A igualdade $\beta = \beta'$ pode ser justificada, do ponto de vista físico, pela simetria de reversão temporal existente em alguns sistemas [7]. É importante notar que esta coincidência entre os expoentes β e β' implica que, no estado estacionário, a probabilidade de sobrevivência coincide com a densidade de partículas, ρ_{∞} .

Finalizando, vale ressaltar que os comprimentos de correlação espacial, ξ_{\perp} , e temporal, ξ_{\parallel} , estão relacionados, respectivamente, aos expoentes críticos ν_{\perp} e ν_{\parallel} , da seguinte forma

$$\begin{aligned} \xi_{\perp} &\sim \Delta^{-\nu_{\perp}} \\ \xi_{\parallel} &\sim \Delta^{-\nu_{\parallel}} \end{aligned} \quad (2.69)$$

Teoria de escala para tamanhos finitos

Na vizinhança do ponto crítico, onde o comprimento de correlação é infinito, propriedades intensivas do sistema dependem fortemente do tamanho do mesmo. Esta dependência ocorre comumente com a razão L/ζ_{\perp} [22], ou seja $L^{1/\nu_{\perp}}\Delta$, pois $\zeta_{\perp} \sim \Delta^{-\nu_{\perp}}$.

É necessário resaltar que alguns cuidados especiais devem ser tomados quando discutimos uma teoria de escala para sistemas finitos que possuam estados absorventes, pois nestes casos apenas este estado é realmente estacionário. Isto nos leva a estudar a escala para os chamados *estados quase-estacionários* que são aqueles que sobrevivem num tempo suficientemente longo, mas não infinito, em diversas repetições independentes.

O estado quase-estacionário é alcançado após um transiente cuja duração depende do tamanho do sistema e da distância para o ponto crítico. Os valores calculados como médias convergem para seu valor estacionário no limite termodinâmico, $L \rightarrow \infty$, como ilustra a figura (2.7) para a densidade de sítios ativos de um modelo genérico. Esta grandeza, para grandes valores de L e na vizinhança do ponto crítico se comporta como

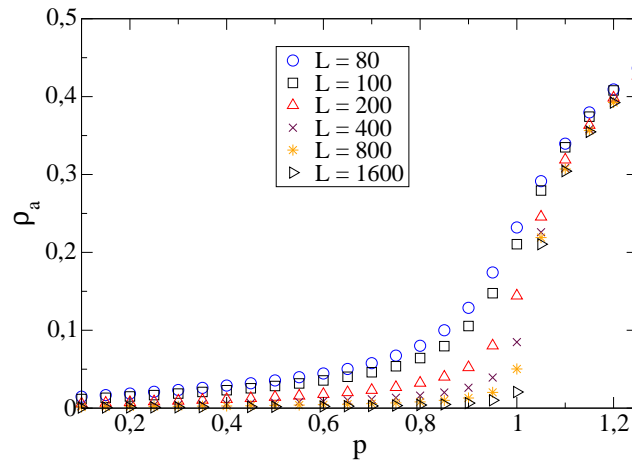


Figura 2.7: Ilustração do comportamento ρ_a do parâmetro de ordem como função do parâmetro de controle p . Note que à medida que os tamanhos aumentam a curva toma forma do comportamento típico do parâmetro de ordem no limite termodinâmico. Esta curva refere-se a um caso genérico.

$$\bar{\rho}(\Delta, L) \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}} f(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}), \quad (2.70)$$

com a barra simbolizando uma média feita sobre o estado quase-estacionário.

Uma outra grandeza que apresenta escala com o tamanho é o tempo de vida de uma amostra, isto é, o tempo característico que o sistema se mantém fora do estado absorvente. Tal escala de tempo está relacionada ao comprimento de correlação temporal, ζ_{\parallel} , da forma $\tau \sim \zeta_{\parallel}$. Como este comprimento de correlação tem seu comportamento crítico dado pela relação $\zeta_{\parallel} \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$, então temos que

$$\tau \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}. \quad (2.71)$$

Por outro lado, como a dependência com o tamanho ocorre segundo a escala $L^{1/\nu_{\perp}}\Delta$, então $\Delta \sim L^{-1/\nu_{\perp}}$, de forma que

$$\tau \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (2.72)$$

Resumindo, no ponto crítico temos as seguintes relações de escala no regime dinâmico e estático

- Grandezas dinâmicas

1. Número médio de partículas: $N(t) \sim t^{\theta}$

2. Probabilidade de sobrevivência: $P_s(t) \sim t^{-\delta}$
3. Espalhamento de partículas: $R^2(t) \sim t^{2/z}$

- Grandezas estáticas

1. Densidade de sítios ativos: $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$
2. Tempo de sobrevivência: $\tau \sim L^{\nu_\parallel/\nu_\perp}$
3. Parâmetro de ordem: $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$

Ainda existem outras grandezas que possuem relações semelhantes na criticalidade do sistema, como encontramos em [8], mas nos fixaremos apenas nestas, para uso futuro.

A análise de escala determina não apenas os expoentes críticos, mas também o ponto crítico. Seja um parâmetro de ordem genérico, f , que depende de uma variável x e cujo parâmetro de controle é p , com o ponto crítico localizado em $p = p_c$. Seu comportamento na vizinhança deste ponto será ditado por

$$f(x) \sim x^\alpha g(p). \quad (2.73)$$

Se estudarmos a função $F(\bar{x}) = \ln f(x)$, sendo $\bar{x} = \ln x$, constataremos que esta se comporta, no ponto crítico, da seguinte maneira

$$F(\bar{x}) = \alpha \bar{x}, \quad (2.74)$$

implicando que num gráfico F .vs. \bar{x} , ou num log-log da equação (2.73) teremos uma reta para o ponto crítico, cuja inclinação é numericamente igual ao expoente crítico. Já para as regiões sub e supercrítica, este gráfico apresentará uma curva com concavidade negativa ou positiva, respectivamente, como ilustra a figura (2.8).

2.6 Percolação direcionada

O modelo de percolação isotrópica pode ser visto como um processo dinâmico para a conectividade em meios porosos. Um destes meios porosos poderia ser, por exemplo, uma rocha com poros interligados por canais que podem possuir permeabilidades diferentes. Do ponto de vista físico, um problema interessante seria determinar quanto desta rocha é invadida pela água se nela fosse imersa.

Para imitar este sistema real, imaginamos uma rede em que cada sítio simboliza um poro e a conectividade desta rede (as ligações entre os sítios) formam canais, como ilustra a figura (2.9). Cada uma destas ligações possui probabilidade p de estar

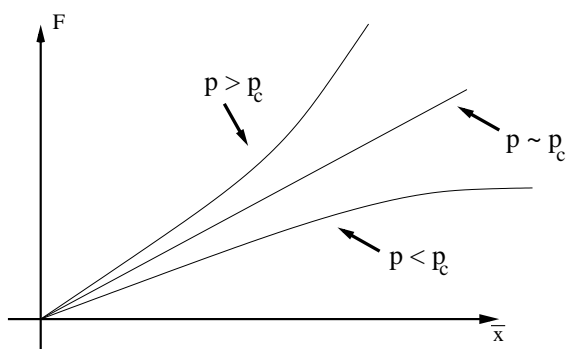


Figura 2.8: Localização do ponto crítico p_c para uma função genérica $F(\bar{x})$. Note que o comportamento sub e supercrítico se caracterizam por curvas de concavidades não-nulas e opostas.

aberta e $1 - p$ de não. Claramente, quando p é muito grande a água penetra em distâncias da mesma ordem de grandeza da extensão da rocha. Por outro lado, se $p \ll 1$, a penetração ocorre numa extensão finita muito menor do que a extensão da rocha. Ambos os regimes são separados por uma transição de fases contínua, cujo ponto crítico é localizado em $p = p_c$ [23, 24].

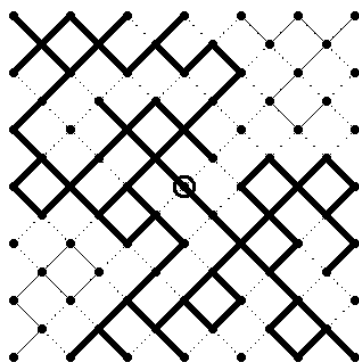


Figura 2.9: Ilustração da percolação isotrópica por ligações.

Já a Percolação Direcionada (PD), introduzida por Broadbent e Hammersley, em 1957 [25], é uma variante do processo descrito acima em que se introduz uma direção privilegiada, com cada sítio tendo sua conectividade orientada por esta direção, como ilustra a figura (2.10). Podemos pensar que este modelo descreveria o mesmo problema físico da penetração de água em rochas, mas levando em conta um forte efeito gravitacional que força a água a se propagar na direção deste campo. Esta alteração não inibe a transição entre o regime de uma fase “seca” e outra “molhada”, sendo ainda uma transição contínua.

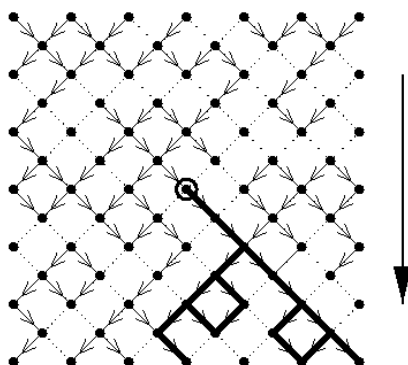


Figura 2.10: Ilustração do processo de percolação direcionada por ligações. Note que neste caso, existe uma direção privilegiada.

Graças à introdução desta direção privilegiada, a PD pode ser vista como um modelo $(d + 1)$ -dimensional, onde d refere-se à dimensão espacial, representada pelas ligações horizontais da figura (2.10) e a direção vertical representa a dimensão temporal. Quanto às regras deste modelo, elas são definidas como segue: cada sítio é indexado por uma variável binária s_i ($s_i = 0, 1$), simbolizado um sítio “seco” ou “molhado”. Num certo tempo, o conjunto $\{s_i\}$ define a configuração instantânea do sistema. A dinâmica é determinada de acordo com as seguintes regras markovianas:

1. Sorteamos dois números aleatórios, z_i^\pm , homogeneamente distribuídos no intervalo $[0, 1]$.
2. Dada uma configuração da rede num instante de tempo t , sua configuração no instante $t + 1$ é obtida fazendo a seguinte atualização sobre todos os sítios da rede,

$$s_i(t + 1) = \begin{cases} 1 & \text{se } s_{i-1}(t) = 1 \text{ e } z_i^- < p \\ 1 & \text{se } s_{i+1}(t) = 1 \text{ e } z_i^+ < p \\ 0 & \text{do contrário,} \end{cases} \quad (2.75)$$

sendo p a probabilidade da ligação continuar aberta. Esta dinâmica, ao contrário daquela que define o PC atualiza, num certo instante, todos os sítios de uma única vez (dinâmica síncrona). Sendo o tempo um parâmetro discretizado e tendo o modelo esta dinâmica síncrona, ele recebe o nome de autômato celular probabilístico da percolação direcionada.

Claramente uma configuração em que todos os sítios estejam vazios é um estado absorvente. Então, podemos definir um parâmetro de ordem, P_∞ , de que um sítio

escolhido aleatoriamente pertença ao aglomerado infinito. No estado em que $P_\infty = 0$, a fase “seca” é alcançada no estado estacionário. Já para o regime em que P_∞ é finito e não-nulo, a fase “molhada” determina este estado.

A transição entre a fase “seca” (absorvente) e a fase “molhada” (ativa) é caracterizada pelos mesmos expoentes críticos do modelo do PC, o que coloca estes dois problemas na mesma classe de universalidade. Esta classe, na verdade, recebe o nome de classe PD, pois o modelo de percolação direcionada é anterior ao PC e, portanto, tem a primazia para batizar este conjunto de expoentes críticos.

2.7 Conjectura PD

Não apenas o PC possui os mesmos expoentes críticos da percolação direcionada, mas vários outros modelos de reação-difusão com estados absorventes apresentam esta característica. O fato de que estes modelos possuem regras microscópicas que originam o aparecimento deste estado absorvente, os faz violarem o balanço detalhado e, portanto, impossibilita-os de alcançar um regime de equilíbrio termodinâmico. Com isso, técnicas bem estabelecidas no equilíbrio não podem ser usadas nestes casos para verificar se um dado modelo, definido por sua dinâmica microscópica, pertence ou não a uma certa classe de universalidade.

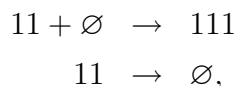
Contudo, o estudo de diversos modelos de reação-difusão com estados absorventes levou Janssen e Grassberger [26, 27] à formulação de uma conjectura que estabelece que modelos caracterizados por certas propriedades devem pertencer à classe PD. Estas características são as seguintes:

1. O modelo exibe uma transição de fases contínua entre um estado ativo e um *único* estado absorvente.
2. A transição é caracterizada por um parâmetro de ordem escalar positivo.
3. As regras dinâmicas envolvem interações de curto alcance.
4. O sistema não tem atributos tais como simetrias adicionais ou impurezas aleatórias.

Note que esta conjectura não impõem limites para que um modelo pertença à classe PD. O que é estabelecido é que os casos com as características apontadas acima devem pertencer a esta classe, não impedindo que aqueles que não possuam tais ingredientes não pertençam a ela.

Na verdade existem mesmo alguns exemplos de modelos que violam ao menos uma das características acima e mesmo assim possuem expoentes críticos compatíveis com

a classe. Essa possibilidade, enfatizada pelo comportamento crítico de sistemas como a variante do processo de contato com criação e aniquilação por pares de partículas [28], isto é,



levou à extensão desta conjectura alterando-se a assertiva (1) para incluir modelos com múltiplos estados absorventes ou mesmo infinitos, desde que estes estados não estejam relacionados por alguma simetria como ocorre no caso do modelo do votante discutido no apêndice A.

A classe PD parece muito robusta, de forma que uma vasta maioria de modelos com estados absorventes estão inclusos nela, com somente poucas exceções, conhecidas até agora, comportando-se distintamente. Apesar deste quadro aparentemente simples os modelos desta classe, como o processo de contato, não possuem soluções exatas mesmo no caso unidimensional, o que inviabiliza explorações mais sistemáticas às razões que justifiquem esta robustez. Isto, por outro lado, torna a tarefa de procurar outros comportamentos em modelos simples um atraente desafio no estudo das transições de fases para sistemas com estados absorventes.

2.8 Outros modelos da classe PD

Existem diversos modelos que pertencem à classe de universalidade PD, a maioria deles advinda de variantes do processo de contato. Entretanto, discutiremos dois modelos desta classe que não guardam semelhança direta com o PC, apesar de possuírem as características determinadas pela conjectura PD. São eles: o modelo ZGB para uma superfície catalisadora e o autômato celular de Domany-Kinzel.

2.8.1 Modelo ZGB

O modelo ZGB foi introduzido em 1986 por Ziff, Gullari e Barshad [29] para descrever o processo de oxidação do monóxido de carbono, CO . Este modelo incorpora características do processo real tais como a necessidade das moléculas de CO serem adsorvidas juntamente com as de oxigênio para reagirem, num processo químico conhecido como mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. O agente intermediário desta reação costuma ser um metal do grupo da platina. Além disso, é notado que enquanto as moléculas de monóxido necessitam de uma área de adsorção relativamente pequena, o oxigênio requer uma área maior, dissociando-se quando adsorvido na superfície e liberando seus átomos para reagirem independentemente com o CO .

Os experimentos realizados para a oxidação do monóxido de carbono por Ehsasi *et al*, Ertl e Koch, Christmann e Ertl, Golchet e White e Matsushima, Hashimoto e Toyoshima [30], mostraram que o comportamento da taxa de produção do gás carbônico (CO_2), R , cresce com o aumento da pressão parcial de monóxido, P_{CO} . Para temperaturas baixas, esta taxa cresce até um certo valor de P_{CO} , caindo suavemente após. Este comportamento indica que existe um valor crítico para a oxidação do monóxido e depois deste valor ele não mais oxida devido ao envenenamento da superfície catalisadora por moléculas de CO . Isto impede que outras moléculas de oxigênio sejam adsorvidas, fazendo cessar o processo de oxidação.

Este regime das reações em que a placa de platina fica totalmente coberta por moléculas de CO pode ser visto como um estado absorvente da dinâmica da reação, uma vez que este estado inibe, em princípio, outras reações das moléculas adsorvidas.

O modelo ZGB se propõe tratar este processo químico, modelando os reagentes como espécies de partículas que interagem numa rede quadrada cujos sítios estão vazios ou ocupados por uma das duas espécies. A dinâmica do modelo ocorre de forma sequencial, ou seja numa dinâmica assíncrona, da seguinte maneira:

1. Um sítio vazio é ocupado por uma molécula de CO com uma probabilidade y .
2. Com uma probabilidade $1 - y$ um par de sítios vizinhos é ocupado pela molécula dissociada de O_2 , isto é, cada átomo de oxigênio ocupa um sítio deste par.
3. Moléculas de CO vizinhas de um átomo de oxigênio, reagem com este se transformando em CO_2 e deixando os dois sítios vazios. A taxa desta reação é infinita, de modo que ela ocorre instantaneamente.

Quando a rede fica completamente preenchida com oxigênio ou moléculas de monóxido de carbono, o sistema é aprisionado num estado absorvente, uma vez que a dinâmica descrita acima fica retida nestas configurações específicas. O diagrama de fases esquemático deste modelo, mostrado na figura (2.11), exhibe três fases, uma que se encerra no ponto y_1 , onde a rede fica completamente coberta por oxigênio, enquanto para $y > y_2$, o estado estacionário corresponde a uma rede completamente coberta por moléculas de monóxido de carbono. Entre os dois valores encontra-se uma fase em que o sistema alcança um estado ativo, com uma fração de sítios ocupados por monóxido e outra por oxigênio. A transição entre a fase de oxigênio e a fase ativa é contínua e possui expoentes críticos da classe PD, já a transição entre a fase do monóxido e a ativa é de primeira ordem, ou seja, descontínua. Para este modelo extensivas simulações já foram realizadas corroborando sua relação com a classe de universalidade da percolação direcionada [31, 32].

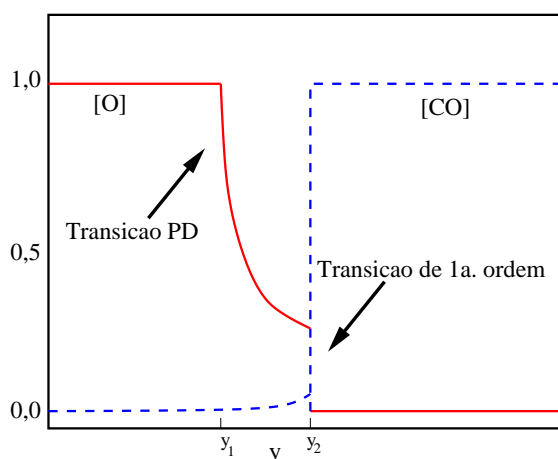


Figura 2.11: Diagrama de fases esquemático para o modelo ZGB. As concentrações de oxigênio (linha cheia) e monóxido (linha tracejada) são mostradas como função da taxa de adsorção y .

2.8.2 Autômato celular de Domany-Kinzel

Autômatos celulares são algoritmos que mapeiam uma configuração de rede em uma nova a partir de regras apropriadas a cada sistema que este autômato modela. A evolução temporal ocorre, portanto, de forma discreta e como cada nova configuração depende unicamente da anterior, então a dinâmica do autômato é markoviana. A atualização se dá simultaneamente para todos os sítios da rede, mesmo que as interações envolvidas sejam locais, o que coloca os autômatos celulares na categoria de sistemas que evoluem através de uma dinâmica síncrona. Dizemos também que o autômato pode ser determinístico ou estocástico, dependendo da natureza das regras de atualização. Uma visão geral dos autômatos determinísticos, incluindo um esquema de classificação das regras, é encontrado no trabalho de Wolfram [33].

Nos restringiremos nesta discussão a um autômato celular probabilístico conhecido como autômato de Domany-Kinzel [34, 35]. Este é definido em uma rede quadrada e cada um dos sítios encontra-se vazio ou ocupado por uma partícula, tornando apropriado o uso das variáveis de gás de rede para sua descrição. Cada sítio da rede é atualizado de acordo com as seguintes regras:

1. Sorteamos um número aleatório, z_i , distribuído uniformemente no intervalo $[0, 1]$.
2. Dado uma configuração no tempo t o estado de cada sítio s_i no tempo $t + 1$ será determinado da maneira

$$s_i(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{se } s_{i-1}(t) \neq s_{i+1}(t) \text{ e } z_i < p_1 \\ 1 & \text{se } s_{i-1}(t) = s_{i+1}(t) = 1 \text{ e } z_i < p_2 \\ 0 & \text{do contrário,} \end{cases} \quad (2.76)$$

onde p_1 e p_2 são probabilidades independentes.

Ao contrário do modelo de PD, o autômato de Domany-Kinzel possui duas probabilidades associadas, mas é possível mapeá-lo no PD se escolhermos apropriadamente os valores destas probabilidades. A percolação direcionada de ligações é recuperada se escolhermos $p_1 = p$ e $p_2 = p(2 - p)$ e a percolação de sítios corresponde à escolha $p_1 = p_2 = p$.

O estado absorvente desta dinâmica é alcançado se a rede está completamente vazia, mas existe também uma solução ativa para uma certa região de valores das probabilidades p_1 e p_2 . Desta forma, emerge uma transição entre as fases ativa e absorvente que se dá ao longo de uma linha crítica mostrada no diagrama de fases esquemático ilustrado pela figura (2.12).

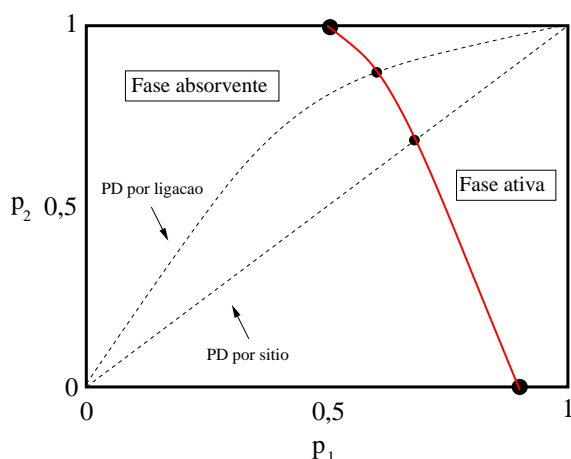


Figura 2.12: Diagrama de fases esquemático para o autômato DK. As linhas tracejadas marcam os pontos críticos da percolação direcionada por ligação e por sítio. O ponto superior marca o ponto da percolação compacta, enquanto que o inferior corresponde ao autômato definido pela regra 18 de Wolfram.

O ponto do espaço dos parâmetros em que $p_1 = 1/2$ e $p_2 = 1$, corresponde a uma dinâmica em que aparece outro estado absorvente. Pois com estes valores para as probabilidades, a configuração em que todos os sítios estão ocupados também é absorvente. Se tomarmos um aglomerado de sítios ocupados, apenas os sítios que estão nas bordas do aglomerado podem sofrer transformações, aumentando ou diminuindo

o tamanho deste aglomerado, como mostra a figura (2.13). Por esse comportamento essa dinâmica recebe o nome de Percolação Direcionada Compacta (PDC).

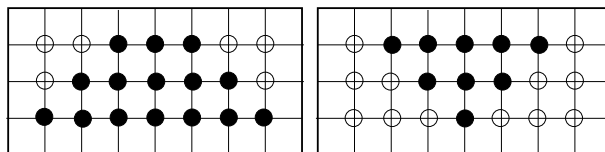


Figura 2.13: Ilustrações da percolação direcionada compacta com o aumento ou diminuição do aglomerado de sítios ocupados.

A PDC possui expoentes críticos distintos da classe PD, de forma que a linha crítica do autômato de Domany-Kinzel, mostrada na figura (2.12) apresenta os mesmos expoentes críticos, exceto no ponto terminal superior.

2.9 Problemas nas evidências experimentais da classe PD

Apesar do crescente número de exemplos de modelos simples que exibem seus expoentes, a classe de universalidade PD carece de uma verificação experimental. De fato, a aparente simplicidade em se definir modelos que pertençam à esta classe (o que a torna o equivalente do modelo de Ising para sistemas fora-do-equilíbrio termodinâmico) não encontra eco na implementação de experimentos capazes de reproduzir as características essenciais destes modelos responsáveis pela transição entre um estado absorvente e um ativo.

Grassberger enfatizou, ao tratar dos problemas abertos para este estudo [36], que:

“...ainda não há experimentos onde o comportamento crítico PD tenha sido observado. Esta é uma situação estranha em vista dos vastos e sucessivos esforços em entendê-lo. Elaborar e realizar tal experimento tem estado no topo de minha lista de problemas abertos.”

A aparente razão para esta dificuldade parece estar na obtenção experimental de um estado verdadeiramente absorvente. Em geral, sistemas reais produzem flutuações que impossibilitam a estabilidade de tal estado. Muito embora estas flutuações sejam rapidamente suprimidas, elas podem ser suficientemente fortes para “suavizar” a transição tornando difícil precisar os expoentes críticos com exatidão. Além disso, inhomogeneidades espaciais ou temporais também podem impedir o sistema de alcançar os mesmos valores para os expoentes críticos da classe PD.

Nas reações de oxidação do monóxido de carbono, imitadas pelo modelo ZBG, apenas a transição descontínua é verificada, de modo que a fase de “envenenamento” por oxigênio não é reproduzida experimentalmente. A razão para isso parece estar no fato de que, mesmo quando a superfície fica completamente coberta por átomos de oxigênio, o monóxido ainda pode ser adsorvido. O mecanismo para possibilitar esta adsorção, mesmo no regime saturado, poderia ser uma disorção térmica do oxigênio, ou seja a energia térmica na placa de platina agiria como um campo externo que dirige o sistema para longe do estado absorvente.

No caso da disseminação de epidemias, como aquela modelada pelo PC, os casos reais mostram que o mecanismo de contágio pode ser extremamente inhomogêneo, ao contrário daquilo enfatizado nos modelos de reação-difusão. Além disso, uma doença pode ser espalhada em escalas de longo alcance, quando é disseminada através de outros agentes como, por exemplo, mosquitos. Este cenário mais realístico, entretanto, não permite a reprodução das propriedades críticas da classe PD, de forma que esta ainda carece de uma realização experimental.

Capítulo 3

Modelos estudados

Uma descrição de um fenômeno físico, em geral, se dá pela simplificação dos detalhes contidos no sistema em questão. Não é interessante, na construção de uma teoria, que um grande número de variáveis tenha de ser levado em conta para que esta seja bem-sucedida. Por outro lado, em certas condições, estas teorias se mostram incrivelmente precisas mesmo idealizando o sistema estudado.

Um exemplo disso é o da queda de um corpo de massa relativamente alta nas proximidades da superfície. Como bem sabemos, a resistência do ar é um fator importante para ser levado em conta numa descrição realista da queda livre. Apesar disso, podemos desprezá-la e, ainda assim, obter resultados em boa concordância com os experimentos reais. Particularmente quando a massa do objeto em queda é grande.

Desta forma funciona o método científico, tentando descrever um fenômeno a partir de um conjunto mínimo de elementos necessários para reproduzir o que o experimento mostra e, com isso, tornar possível a derivação de uma teoria que abarque numa mesma descrição todos aqueles processos que tenham os mesmos ingredientes básicos.

Muitas vezes não temos uma teoria que explique ou preveja um certo fenômeno físico. Nestes casos, frequentemente adotamos o seguinte procedimento para superar esta deficiência: imaginamos um sistema muito mais simples do que o original e aplicamos regras sobre este “sistema imaginário” que, consideramos serem determinantes para reproduzir a física do caso real. Chamamos este “esboço” de modelo físico e sua utilização é muito comum nos casos em que não se conhece uma teoria apropriada. Além disso, os modelos podem ser úteis até mesmo para a confecção de uma teoria geral, pois a partir do estudo de modelos distintos para um mesmo sistema pode ser possível reconhecer quais são os ingredientes realmente importantes para determinar a física deste sistema. A título de clareza podemos imaginar o exemplo dado no início desta discussão como uma forma de modelarmos um fenômeno desconhecido. Se incluirmos uma força de resistência do ar para estudarmos a queda de um corpo de massa m na proximidade da superfície terrestre, deveremos determinar esta força em função

das variáveis pertinentes ao corpo em si e/ou ao seu movimento. Este é um problema não-trivial, pois esta força pode depender de vários fatores como a massa do corpo, sua forma, assim como da densidade atmosférica do local onde ocorre a queda. Mas, como seria extremamente complicado elaborar uma expressão para a força que levasse em conta todos estes fatores, pode-se escolher expressões simples para esta força como, por exemplo, $F_{ar} = -bv$, em que ela é tanto maior, em intensidade, quanto maior for a velocidade de sua queda e o parâmetro b responde por diversos ingredientes tais como a forma do objeto e a viscosidade do ar. Assim como escolhemos uma dependência linear com a velocidade, poderíamos ter “apostado” em uma outra potência, fracionária inclusive. Então, um sistema em queda com uma força de resistência do ar $F_{ar} = -bv^n$, pode ser considerado um modelo para descrever o movimento de queda de um corpo de massa m nas proximidades da superfície terrestre.

Neste trabalho, usaremos diversos modelos com o objetivo de investigar a natureza da criticalidade em sistemas fora-do-equilíbrio termodinâmico e com estados absorventes. Em nosso caso, estes modelos são imprescindíveis, uma vez que estamos num patamar deste estudo em que nenhuma teoria física é definitiva para uso. Portanto, a confecção destes modelos guarda a esperança de podermos alcançar algum entendimento geral destes sistemas, o que possibilitaria almejar a obtenção de uma teoria para os mesmos.

Os exemplos que discutiremos a seguir são de modelos de rede unidimensionais e markovianos que podem ser divididos em duas categorias: aqueles que não possuem leis de conservação e aqueles que possuem. Sobre todos eles discutiremos suas definições e principais características e, nos capítulos posteriores, aplicaremos sobre os mesmos algumas técnicas de cálculos que nos permitirão extrair alguma informação a respeito de suas propriedades críticas e de como estas se relacionam.

3.1 Modelo AB

Seja uma rede unidimensional de L sítios, sendo que cada um destes pode estar ocupado por dois tipos de partículas A ou B , sem permitir dupla ocupação ou sítios vazios. A dinâmica deste modelo se dá da seguinte forma:

1. Sorteamos um sítio aleatoriamente.
2. Se o sítio sorteado for ocupado por uma partícula B , este passa a ser ocupado por uma partícula A com uma taxa de transição igual a $p_a n_a / 2$, sendo p_a um parâmetro positivo e n_a o número de primeiros vizinhos deste sítio que estão ocupados por partículas do tipo A .



Figura 3.1: Partículas do tipo B se transformam em partículas A através de contato.

3. Se o sítio for ocupado por uma partícula A , então ele pode passar a ser ocupado por uma partícula B através de dois processos:

- (a) Espontaneamente, isto é, sem depender da sua vizinhança, com uma taxa p_c , sendo esta também positiva.

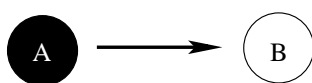


Figura 3.2: Transição espontânea de uma partícula do tipo A .

- (b) Ou por contato com seus primeiros vizinhos do tipo B , com uma taxa de transição $p_b n_b / 2$, sendo p_b um parâmetro positivo e n_b , o número de sítios primeiros vizinhos ocupados por partículas do tipo B .

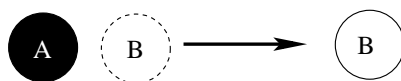


Figura 3.3: Partículas do tipo A se transformam em partículas B por contato.

Para fazer o estudo do modelo, adotamos um vínculo entre os três parâmetros definidos acima. Como temos a liberdade de fixar um deles, pois isto equivale a reescalar o tempo na equação mestra, optamos por defini-los obedecendo à seguinte relação $p_a + p_b + p_c = 1$. Com isso, todos os resultados deste modelo serão expressos em termos das variáveis p_a e p_c , ficando o valor da outra imediatamente determinado.

Devemos chamar a atenção para o fato de que quando a rede está completamente preenchida por partículas B todos os processo dinâmicos cessam. Isto qualifica este estado - uma rede completamente preenchida por partículas B - como um estado absorvente do modelo que, por sua vez é também um estado estacionário. A questão seguinte a ser respondida é se esta dinâmica, assim como no caso do PC [17], apresenta outro estado estacionário além do estado absorvente.

Este modelo generaliza o processo de contato no sentido que inclui uma taxa extra permitindo que, na linguagem do processo de contato, indivíduos se curem através do contato com uma vizinhança saudável. Isto provoca um decréscimo em ilhas de sítios

ocupados em meio a um “mar” de sítios vazios. Entretanto, pelo menos em princípio, as simetrias deste modelo são as mesma presentes no PC, a menos de um ponto, que discutiremos mais adiante. Isto nos induz a pensar que este modelo terá uma linha crítica no plano (p_a, p_c) com os mesmos expoentes críticos do PC, exceto no tal ponto especial.

Para sistematizar este estudo é interessante escrever uma expressão para sua taxa de transição, o que nos permite, por exemplo obter a equação mestra para a distribuição de probabilidades deste problema. Para fazer isso, podemos associar uma variável binária a cada sítio de modo que o valor desta variável indica se o sítio está ocupado por uma partícula da espécie A ou B . Uma associação possível seria com uma variável de gás de rede η_i , sendo $\eta_i = 1$ se o sítio é ocupado por uma partícula A ou $\eta_i = 0$ se a partícula for do tipo B . Assim uma configuração da rede num certo instante de tempo seria inteiramente especificada pelo vetor $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_L)$. Com esta escolha de variável a taxa de transição do modelo $w_i(\eta)$ será

$$w_i(\eta) = \frac{\lambda}{2}(1 - \gamma\eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i, \quad (3.1)$$

onde $\lambda = p_a/(1 - p_a)$, $\gamma = (1 - p_c)/p_a$ e $\delta = \pm 1$. Obviamente se fizermos $p_b = 0$, ou seja $\gamma = 1$, recuperamos a forma da taxa de transição do Processo de Contato, como pode ser visto em [12].

Uma outra variável em que é possível escrever a taxa do modelo é aquela conhecida como variável de Ising, $\sigma = \pm 1$, em que a associação agora pode ser, $A \rightarrow \sigma = 1$ e $B \rightarrow \sigma = -1$. Com isso, a forma funcional da taxa de transição do modelo será

$$w_i(\sigma) = \frac{\alpha}{2} \left[1 + \beta\sigma_i - \frac{1}{2}(\epsilon\sigma_i + \xi) \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \right], \quad (3.2)$$

sendo $\alpha = (1 + p_c)/2$, $\beta = (2p_a - p_c - 1)/(1 + p_c)$, $\epsilon = (1 - p_c)/(1 + p_c)$ e $\xi = (2p_a + p_c - 1)/(1 + p_c)$. Apesar desta expressão para a taxa de transição necessitar de um número bem maior de parâmetros, ela é útil na identificação de outro importante comportamento limite deste problema. No ponto $p_a = p_b$ e $p_c = 0$, o que equivale a fazermos $\alpha = 1/2$, $\beta = 0$, $\epsilon = 1$ e $\xi = 0$, a taxa de transição é escrita da seguinte forma

$$w_i(\sigma) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2}\sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \right], \quad (3.3)$$

que é a taxa do modelo do votante ou modelo de Glauber unidimensional à temperatura zero [37]. Este modelo é um caso particular da versão dinâmica do modelo unidimensional de Ising. No caso menos restrito, que chamaremos de Modelo do Votante Tendencioso, em que tomamos apenas $p_c = 0$, ou seja, $\alpha = 1/2$, $\beta = \xi = 2p_a - 1 = \Gamma$ e $\epsilon = 1$, aparecem duas possíveis soluções estacionárias. Se $\Gamma > 0$, isto é $p_a > 1/2$, então a solução em que todos os sítios possuem sinal positivo, ou todas as partículas são do tipo A , é estável. Caso contrário, a solução estacionária é aquela em que a rede é completamente preenchida por partículas B . Chamamos a atenção para que ambas as soluções são estados absorventes do modelo neste limite, uma vez que como $p_c = 0$, nenhuma transição espontânea é mais permitida. Além disso, a transição entre uma solução e outra se dá pelo ajuste do parâmetro p_a e, ao contrário do que ocorre com o PC, esta transição além de ser entre dois estados absorventes é descontínua, sendo o “ponto crítico” localizado em $p_a = 1/2$, como ilustra a figura 3.4.

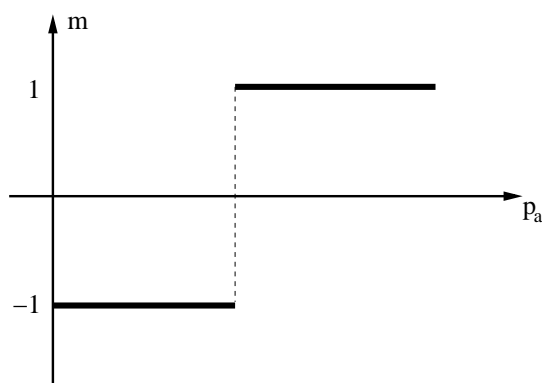


Figura 3.4: Ilustração da transição descontínua presente no modelo do votante tendencioso.

Esta transição, ao contrário daquela presente no PC, que pertence à classe de universalidade da percolação direcionada, está na classe da percolação direcionada compacta, pois se imaginarmos um aglomerado de partículas do tipo $A(B)$ com bordas de partículas $B(A)$, então apenas reações superficiais ocorrem, aumentando ou diminuindo o aglomerado, mas nunca acontecerá destas ilhas serem "invadidas" por partículas de outra espécie em seu núcleo. Então, este modelo possui dois comportamentos distintos: ao longo da linha crítica, com $p_c \neq 0$, seu comportamento crítico deve ser do tipo PD, devido às suas características que respeitam a Conjectura PD, quais sejam, possuir apenas um estado absorvente, um parâmetro de ordem escalar, ausência de simetrias adicionais e interações de curto alcance. Enquanto isso, no ponto $p_c = 0$, existe a simetria $A \rightleftharpoons B$, o que permite que este modelo pertença a outra classe de universalidade, a já citada classe PDC. O modelo AB , portanto, tem como principal

ingrediente a interseção destas duas classes de universalidade, com uma linha crítica de expoentes do tipo PD terminando num ponto dominado pelo comportamento crítico da classe PDC.

Esta interseção de classes propicia-nos estudar o comportamento multicrítico deste modelo, em particular determinar qual seria o expoente de “crossover” desta interseção e comparar seu valor com o de outros modelos que possuem este mesmo comportamento.

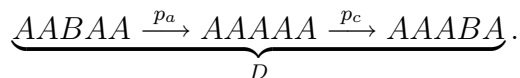
Voltando ao limite do modelo do votante, onde $p_a = p_b$ e $p_c = 0$, observamos um resultado curioso que pode ser obtido exatamente para o parâmetro de ordem $\langle \sigma_i \rangle$. A partir da equação mestra podemos mostrar que a equação de evolução temporal para a variável de Ising σ_i é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle &= -2 \langle \sigma_i w(\sigma) \rangle \\ &= -\alpha \left\{ \langle \sigma_i \rangle - \frac{1}{2} \langle \sigma_i^2 \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \rangle \right\} \\ &= -\alpha \langle \sigma_i \rangle + \frac{\alpha}{2} [\langle \sigma_{i-1} \rangle + \langle \sigma_{i+1} \rangle]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Considerando uma rede homogênea, ou seja $m \equiv \langle \sigma_i \rangle$, $\forall i$, então vê-se que a solução da equação (3.4) será $m = m_0$, onde m_0 é a condição inicial do sistema. Este modelo é conservativo, como veremos adiante, e mesmo para uma rede não-homogênea esta característica persiste. Verificaremos isto através da solução da equação (3.4), como é apresentada no Apêndice A.

3.1.1 Modelo AB com difusão

Uma interessante variação em modelos de rede com estados absorventes é a inclusão de processos difusivos. Tais processos podem ter efeito redundante como ocorre no PC [38], mas também podem ocasionar efeitos consideráveis, até mesmo modificando sua classe de universalidade [39]. Em nosso caso o efeito não deve ser tão grande, pois de certa forma a dinâmica do processo já contempla eventos difusivos, como podemos ver através da seguinte sequência de reações,



Entretanto, é interessante verificar como as propriedades multicríticas deste modelo são influenciadas pela presença da difusão. Como veremos no próximo capítulo, cálculos de campo médio sugerem que o expoente de “crossover” se altera de acordo com o valor da constante de difusão D .

3.2 Modelo de Manna parametrizado

Nos anos 80 e 90, a literatura de sistemas críticos foi invadida por trabalhos que tentavam explicar ou reforçar o conceito de criticalidade auto-organizada (no inglês, *Self - Organized Criticality*, SOC). O que há de curioso neste tema já é sugerido pelo seu próprio nome. Em sistemas que apresentam SOC, ao contrário do que ocorre normalmente em sistemas que sofrem uma transição de fases, o ponto crítico era alcançado automaticamente, sem a necessidade do ajuste de algum parâmetro de controle. Imagine alcançar, num material magnético, uma magnetização espontânea sem variar sua temperatura!

O ícone entre os sistemas destes “miraculosos” fenômenos era o modelo da *Pilha de Areia*, proposto por Bak, Tang e Wiesenfeld (BTW)[40]. Uma pilha de areia, neste contexto, trata-se de um autômato celular com uma variável “grão”, z_i (também chamada de “energia”), que pode ser inteira ou real. Sua dinâmica funciona com a adição, em cada passo de tempo, de um “grão de areia” num sítio escolhido aleatoriamente. Se o sítio i alcança um limiar de energia z_c , ele relaxa transferindo uma quantidade y_i de energia para seus j primeiros vizinhos de forma que,

$$\begin{aligned} z_i &\longrightarrow z_i - z_c \\ z_j &\longrightarrow z_j + y_i. \end{aligned} \tag{3.5}$$

É possível que o j -ésimo primeiro vizinho do sítio que relaxa também alcance seu limiar após receber esta quantidade de energia e esse processo pode iniciar uma reação em cadeia que dure até que nenhum dos sítios possua atividade, ou seja $z_i < z_c$, $\forall i$. Esta reação recebe o nome de “avalanche” e enquanto ela dura nenhum “grão” é adicionado ao sistema. Eventualmente, o sistema pode perder energia (ou “grãos”) com avalanches que alcancem suas bordas. Por fim, quando a dinâmica leva o sistema para um estado estacionário, este fica caracterizado pela distribuição do tamanho das avalanches, que segue uma lei de potência [40, 41, 42] como

$$P_s \sim s^{-\tau}. \tag{3.6}$$

A equação (3.6) é uma assinatura de um regime crítico, pois carrega consigo a invariância por escala presente na criticalidade. Observe que, em princípio, não tivemos que ajustar nenhum parâmetro do modelo para que esta distribuição fosse alcançada. Este é o “espírito” da SOC!

Elucidar a natureza desta “auto-organização” passou a ser o objetivo de numerosos trabalhos [43, 44, 45]. Entretanto, o caráter não-local de sua dinâmica dificulta uma abordagem analítica, pois grande parte do ferramental teórico prescinde da localidade

como ingrediente das reações de um sistema. De fato, esta não-localidade está visivelmente presente em modelos como a pilha de areia. O estado de um sítio k , qualquer, depende da configuração inteira do sistema, pois este sítio pode ser atingido por uma avalanche, mesmo que tenha uma energia menor que o limiar z_c , assim como seus primeiros vizinhos.

Mais recentemente, uma forma diferente de enxergar o problema e desmistificar a emergência da SOC, foi abordada através da relação entre os modelos usuais de pilhas de areia e modelos fora-do-equilíbrio com estados absorventes [46, 47]. Esta conexão é feita através das pilhas de areia conservativas, também chamadas de *Pilhas de Areia de Energia Fixa* (PAEF). Nestes modelos, apesar de respeitar as regras microscópicas das pilhas de areia comuns, não existe uma taxa de entrada ou saída de grãos. Com isso, o sistema é fechado e sua energia ζ (ou número de “grãos”) é uma quantidade fixada pela condição inicial. Cada sítio pode ser qualificado como *ativo*, quando potencialmente pode participar de uma avalanche ou *inativo*, quando não. Com isso, uma configuração do modelo em que não existem sítios ativos é dita absorvente. Para um valor abaixo de ζ_c o sistema alcançará um estado estacionário absorvente; contrariamente, o sistema converge para um estado onde persiste sua atividade. Separando estas duas fases encontra-se o ponto crítico do modelo, marcado por $\zeta = \zeta_c$. A relação entre o comportamento das PAEFs e as pilhas de areia comuns é entendida se lembrarmos que sempre que o sistema, no caso das pilhas usuais, não possui atividade, “grãos” de areia, ou energia, são adicionados, ou seja, para $\zeta < \zeta_c$, $d\zeta/dt > 0$; já no caso em que elas possuem, a energia é dissipada, ou seja, para $\zeta > \zeta_c$, $d\zeta/dt < 0$. De forma que o único ponto estável é mesmo o ponto crítico. Esta conexão mostra que os modelos que apresentam SOC escondem, intrinsecamente em sua dinâmica, o parâmetro de controle responsável pela emergência desta “espontânea” criticalidade e, com isso pode-se, em princípio, resgatar estes modelos para o mundo comum dos fenômenos críticos.

Um dos modelos PAEFs é o chamado modelo da pilha de areia de Manna [44, 46]. Neste, uma rede possui sítios ocupados por z_i partículas, sem limite de ocupação, sendo os sítios em que $z_i \geq 2$ chamados *ativos*. Dada uma rede de L sítios, construímos a condição inicial, distribuindo aleatoriamente N partículas, de modo que a densidade de partículas é $\zeta = N/L^d$ (onde d é a dimensão do sistema). Esta condição inicial será uma configuração homogênea e espacialmente descorrelacionada. Feito isso, a dinâmica do modelo, no caso unidimensional, é a seguinte:

1. Sorteamos aleatoriamente um sítio.
2. Se o sítio escolhido é ativo ($z_i \geq 2$), então ele relaxa, perdendo duas partículas para seus primeiros vizinhos:
 - (a) Com uma probabilidade 1/2 uma partícula é doada para cada um dos primeiros vizinhos.

- (b) Com uma probabilidade $1/4$, ambas as partículas migram para apenas um dos primeiros vizinhos, sorteado aleatoriamente.

É evidente que o caso em que a rede fica desprovida de sítios ativos é um estado absorvente e existem infinitos deles neste modelo, pois qualquer arranjo de partículas em que não exista ao menos um sítio ocupado por duas delas é absorvente. Este ingrediente, a existência de infinitos estados absorventes, contraria a Conjectura PD. Mas, além disso, uma outra característica do modelo o torna bom candidato a apresentar expoentes críticos distintos daqueles da classe PD. Esta característica é o acoplamento existente entre o seu parâmetro de ordem, a densidade de sítios ativos ρ_a , e o parâmetro de controle, ζ . Este acoplamento implica que o parâmetro de ordem está relacionado a um campo conservado, uma vez que o número de partículas é fixo pela condição inicial.

De fato, resultados advindos de simulações [48] apontam para expoentes do modelo de Manna numericamente diferentes daqueles do PC. Além disso, simulações em vários modelos correlatos [49] permitem supor que “*todos os modelos estocásticos, com um número infinito de estados absorventes em que o parâmetro de ordem possui sua evolução dinâmica acoplada a um campo conservativo e não-difusivo, definem uma única classe de universalidade*” [50].

Discutiremos mais extensivamente aqui um caso particular do modelo de Manna que é o chamado modelo restrito de Manna. Nesta variação, um sítio só pode ser ocupado por, no máximo, duas partículas, de modo que os sítios da rede podem ser classificados como ativos ou inativos com nenhuma ou uma partícula. Este caso foi estudado por Dickman, Tomé e de Oliveira em [51], nas versões chamadas cooperativa e independente, e mostrou, numericamente, ter os mesmos expoentes críticos do modelo original. Tão somente uma leve variação no ponto crítico é encontrada, da ordem de 0,8% em duas dimensões e 2% em uma. Isto deve-se, provavelmente, ao fato de que quando o sistema, no modelo irrestrito, encontra-se na região supercrítica, mas com uma densidade próxima a ζ_c , a grande maioria dos sítios ativos são aqueles com duas partículas.

Estudaremos uma parametrização deste modelo restrito, considerando o caso independente, onde as transições que podem fazer com que um sítio seja mais que duplamente ocupado, são apenas parcialmente realizadas. Isto é, se um sítio ativo pode enviar para um de seus primeiros vizinhos duas partículas, mas este já é ocupado por uma, então apenas uma é enviada e o sítio doador continua ocupado por uma partícula. Por outro lado, incluímos nas regras de transições um parâmetro λ , cujo domínio é $[-1, 1]$, de forma que, se um sítio é ativo:

1. Ele envia, se for compatível com a restrição de altura, uma partícula para cada um de seus primeiros vizinhos, com uma probabilidade $(1 + \lambda)/2$.

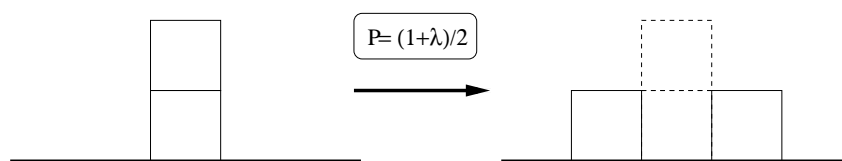


Figura 3.5: As duas partículas do sítio ativo são enviadas para cada um dos primeiros vizinhos.

2. Envia, com probabilidade $(1 - \lambda)/4$, ambas as partículas para um de seus primeiros vizinhos.

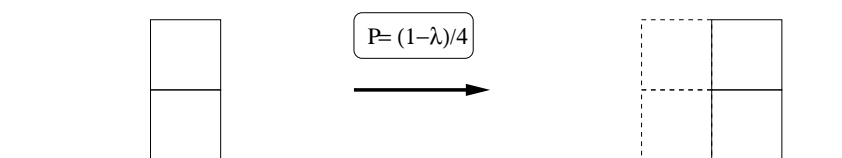


Figura 3.6: Ambas as partículas do sítio ativo “pulam” para o mesmo vizinho.

Com esta parametrização, o modelo restrito de Manna ganha dois limites interessantes na sua dinâmica: no caso em que $\lambda = 1$, as regras são as mesmas daquelas da pilha de areia BTW conservativa, pois todo sítio ativo cederá suas duas partículas para os vizinhos, a menos que isto desrespeite o vínculo da altura restrita. Como verificado em [46] a versão conservativa do modelo BTW possui uma transição de primeira ordem em uma dimensão. No caso em que $\lambda \rightarrow -1$, o modelo tende a uma difusão de pares de partículas, pois no caso $\lambda = -1$, os sítios ativos mandam um par de partículas para um de seus primeiros vizinhos, tendo isto o mesmo efeito de uma difusão. É importante salientar que no ponto $\lambda = -1$ não haverá mais nenhuma transição de fases, pois a fase absorvente é suprimida, uma vez que o número de sítios ativos é conservado neste limite.

Estes limites poderiam alterar os valores dos expoentes críticos, mudando a universalidade do modelo? Essa pergunta torna-se interessante pois em uma situação similar no modelo AB, vimos que as simetrias são mantidas, apesar da linha crítica ser encerrada em um ponto com universalidade distinta da classe PD. Mesmo assim, a menos deste ponto, como ficará claro mais adiante, toda a linha pertence à classe PD. Seria o modelo de Manna tão robusto frente à mudança de suas regras dinâmicas quanto é o PC? Esta pergunta parece ter importância em ser respondida visto que o modelo de Manna é um dos escassos exemplos de modelos com estados absorventes que, aparentemente, não pertencem à imensa classe PD.

3.2.1 Modelo de Manna com variação da difusão

O modelo de Manna com restrição de altura pode ser entendido como sendo uma composição entre a dinâmica da pilha de areia BTW conservativa e um processo de difusão de pares de partículas. Como já nos referimos na discussão do modelo AB com difusão, o papel desta pode alterar bastante as propriedades críticas de um sistema. Desta forma, investigamos como os expoentes críticos do problema de Manna com restrição de altura são afetados quando alteramos a dinâmica de difusão. Esta modificação, feita apenas no processo em que as duas partículas migram para um dos vizinhos, pode ser feita da seguinte forma:

- O processo de difusão acontece com passo de largura dois ao invés de um, como no caso original. Isso quer dizer que um sítio ativo pode difundir as duas partículas para um segundo vizinho com probabilidade $1/4$.

Frise-se que estas alterações visam testar a robustez do modelo de Manna com respeito a modificações em suas regras de dinâmica, tornando assim uma tarefa menos complicada entender quais as simetrias importantes para que modelos como este pertençam à mesma classe de universalidade.

3.3 Modelo de três estados sem conservação de partículas

Este modelo imita as regras dos processos presentes na pilha de areia de Manna, mas ao contrário desta não conserva o número de partículas. O caso unidimensional que estudaremos aqui pode ser definido como sendo aquele em que numa rede de L sítios, cada um destes pode estar ocupado por partículas dos tipos A , I_1 ou I_2 , sem permitir que qualquer sítio esteja vazio. As partículas A são chamadas de ativas. É possível traçar um paralelo, portanto, entre estas três espécies de partículas e os diferentes tipos de sítios presentes no modelo de Manna com restrição de altura. As partículas ativas são equivalentes àqueles sítios em que $z_i = 2$, ao passo que $I_1 \rightarrow z_i = 0$ e $I_2 \rightarrow z_i = 1$.

A dinâmica deste modelo é definida como segue:

1. Sorteamos aleatoriamente um sítio
2. Se o sítio é do tipo A , então podem ocorrer as seguintes reações:
 - (a) A partícula pode se transformar em uma do tipo I_1 , com uma taxa de transição igual a $\beta_2 n_{I_1}/2$, onde n_{I_1} é o número de primeiros vizinhos do tipo I_1 .

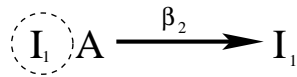


Figura 3.7: Partículas do tipo A se transformam em partículas I_1 através de contato com partículas inativas.

Esta transição procura imitar a transição em que um sítio ativo no modelo de Manna restrito é vizinho de um sítio sem partículas e transfere suas duas partículas para este, tornando-se vazio.

- (b) A partícula A também pode se transformar numa do tipo I_2 e isso ocorre segundo a taxa $\beta_2/2(n_{I_1} + n_{I_2}) + 1/2n_A$, onde n_A é o número de primeiros vizinhos do tipo A .

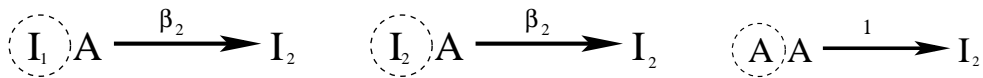


Figura 3.8: Partículas do tipo A se transformam em partículas I_2 através de contato com partículas ativas ou inativas.

Este caso é equivalente aos casos em que um sítio ativo é vizinho de um sítio vazio ou ocupado por uma partícula e a transição envia apenas uma de suas partículas para este sítio. A transição em que o sítio ativo é vizinho de outro ativo, não encontra paralelo no modelo de Manna restrito. Sua inclusão deve-se ao fato de que ela evita o aparecimento de um estado absorvente com toda a rede ocupada por partículas ativas. Tal estado pode ser alcançado no modelo de Manna restrito, mas apenas em densidades da ordem de $\zeta = 2$

3. Por outro lado, se a partícula sorteada é do tipo I_1 então as transições a ela possíveis são:

- (a) Se transformar em uma partícula do tipo A com uma taxa de transição igual a $\beta_1 n_A/2$.

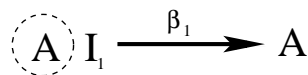


Figura 3.9: Partículas do tipo I_1 se transformam em partículas A através de contato.

- (b) Se transformar numa partícula de espécie I_2 segundo uma taxa $n_A/2$.

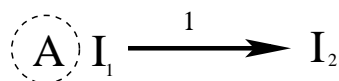


Figura 3.10: Partículas do tipo I_1 se transformam em partículas I_2 através de contato com partículas ativas.

Aqui um sítio vazio pode tornar-se ocupado por uma partícula ou ativo se for vizinho de um sítio ativo que lhe envia uma ou duas partículas no processo de desabamento.

4. Finalmente se a partícula é do tipo I_2 , então a única transição possível é aquela que ela torna-se do tipo A , ocorrendo com uma taxa $\beta_1 n_A/2$.

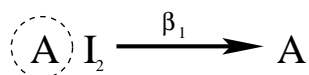


Figura 3.11: Partículas do tipo I_2 se transformam em partículas A através de contato com partículas ativas.

Este último caso é similar ao anterior, mas com um sítio já ocupado por uma partícula. Graças à restrição de altura, este sítio recebe apenas uma partícula do vizinho ativo, tornando-se ele mesmo ativo.

Saliente-se que estas reações, apesar de feitas no intuito de criar uma mímica do modelo da pilha de areia de Manna com restrição de altura, são tais que apenas um sítio tem sua configuração alterada, visto que as regras deste modelo não respeitam à conservação de partículas.

Com estas regras, o estado absorvente fica definido por qualquer configuração que não possua partículas A , de forma que existe um número infinito de estados absorventes, assim como no modelo de Manna, mas sem conservar o número total de partículas $N = n_A + n_{I_1} + n_{I_2}$. Apesar de termos um modelo, cujas regras imitam as do modelo de Manna restrito, não existe a conservação de partículas. Por outro lado, é a conservação de partículas que parece ser elemento decisivo para que o modelo da pilha de areia possua expoentes críticos distintos. Esta é uma nova oportunidade para descobrir quais são os expoentes deste modelo e se existe alguma relação com uma classe conhecida. Talvez, ambiciosamente, poderíamos ser capazes de testar e compreender as simetrias fundamentais para o comportamento crítico de sistemas como as pilhas de areia conservativas.

Capítulo 4

Aproximação de campo médio

Em geral, sistemas compostos por muitos corpos têm nas correlações, originadas na interação entres estes corpos, uma dificuldade intrínseca para o estudo de suas propriedades relevantes. O mais comum nestes casos é a dificuldade de calcular estas correlações, restando a alternativa de construir interações efetivas com o objetivo de aproximar os resultados destas aproximações o máximo possível daqueles advindos de um cenário mais realístico. Este procedimento prolifera em diversas áreas como física nuclear relativística [52], estado sólido [53], entre muitas outras.

Uma das mais conhecidas destas aproximações é a chamada aproximação de campo médio (CM). Nesta aproximação, considera-se que cada constituinte do sistema está submetido a um campo efetivo V , constante, substituindo a interação entre os componentes, de forma que nenhuma estrutura espacial é levada em conta. Dentro desta aproximação, as partículas que formam o sistema não se “enxergam”, pois a interação ocorre apenas através deste campo efetivo, de modo que podemos dizer que estas partículas são independentes.

Para ilustrar esta discussão, podemos imaginar um sistema formado por “spins” com orientações para “cima” ou para “baixo”, de modo que cada um destes entes poderia ser indexado através de uma variável $\sigma_i = \pm 1$. Desse modo, o estado do sistema num dado instante de tempo é definido pelo vetor $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots)$. Caso queiramos calcular uma quantidade que envolva a média do produto de dois destes “spins”, teríamos que realizar a seguinte operação,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j P(\sigma)}{\sum_{\{\sigma\}} P(\sigma)}, \quad (4.1)$$

onde a soma é sobre todas as configurações de “spins” com σ_i e σ_j e $P(\sigma)$ é a probabilidade daquela configuração. Se os “spins” são independentes, então a probabilidade de que um deles tenha valor σ_i e outro σ_j é descorrelacionada, como é a probabilidade de que ao jogarmos uma moeda em uma vez o resultado seja *cara* e na vez seguinte

coroa. Assim, teremos que $P(\sigma) = P(\sigma^i)P(\sigma^j)$. Desta forma, a média calculada em (4.1) será

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{\sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j P(\sigma^i) P(\sigma^j)}{\sum_{\{\sigma\}} P(\sigma^i) P(\sigma^j)} \\ &= \frac{\sum_{\{\sigma^i\}} \sigma_i P(\sigma^i) \sum_{\{\sigma^j\}} \sigma_j P(\sigma^j)}{\sum_{\{\sigma^i\}} P(\sigma^i) \sum_{\{\sigma^j\}} P(\sigma^j)} \\ &= \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Esta aproximação, como visto acima, elimina qualquer correlação existente entre as partes do sistema. Como consequência, não podemos esperar que os resultados dela provenientes sejam fidedignos àqueles demonstrados pela experiência. De fato, as correlações são um ingrediente muito importante na vasta maioria dos sistemas formados por muitos corpos e, em sistemas de baixa dimensionalidade, elas assumem um papel quase fundamental [54, 55]. Por outro lado, CM pode ser razoável em sistemas de reagentes que difundem rapidamente, pois a difusão rápida destrói as correlações originadas pelas reações. Em casos como estes, a aplicação do CM é justificada.

Especificamente em modelos de rede com estados absorventes, as correlações são importantíssimas para a determinação das propriedades críticas. Podemos ver isso estudando o mais famoso exemplo entre estes modelos, o Processo de Contato.

4.1 Campo médio no processo de contato

A taxa de transição do Processo de Contato é dada por

$$w_i(\eta) = \frac{\lambda}{z} (1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i, \quad (4.3)$$

onde devemos lembrar que z é o número de coordenação da rede, η_i é uma variável tipo gás de rede, ou seja, $\eta_i = 0, 1$ e a soma \sum_{δ} significa que esta é feita sobre os primeiros vizinhos do sítio i .

A partir da taxa de transição dada acima e a equação (2.48) e considerando o caso isotrópico e homogêneo, $\rho \equiv \langle \eta_i \rangle$ e $\phi \equiv \langle \eta_i \eta_{i+\delta} \rangle$, obtemos a expressão (2.52) para a evolução da densidade de sítios ativos. Nesta equação, o valor de ρ depende de conhecermos como este se relaciona com a média do produto de dois sítios, ϕ . Para resolvermos esta equação seria necessário conhecermos uma forma funcional que relacionasse ρ e ϕ , isto é, $\phi = f(\rho)$. Como não conhecemos esta função f , faremos

uso da aproximação mais grosseira neste nível que é desconsiderar as correlações, de modo que $\phi = \langle \eta_i \rangle \langle \eta_j \rangle = \rho^2$. Com isso a equação (2.52) fica na forma da equação de Malthus-Verhulst,

$$\frac{d}{dt}\rho = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2 \quad (4.4)$$

e o estado estacionário desta é estável em $\rho = 0$ para $\lambda < 1$ e em $\rho = (\lambda - 1)/\lambda$ para $\lambda \geq 1$. Este resultado reflete uma transição contínua entre a fase absorvente, em que $\rho = 0$, para a fase ativa, ocorrendo no valor crítico $\lambda_c = 1$. Vê-se também que na região supercrítica, onde o estado estacionário mantém uma fração de sítios ocupados, o parâmetro de ordem ρ pode ser expandido em torno do ponto crítico, resultando em

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c) = \Delta^{\beta_{CM}}, \quad (4.5)$$

com o expoente $\beta_{CM} = 1$. Outro expoente pode ser obtido se integrarmos a equação (4.4), o que resulta para $\lambda \neq 1$ em,

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda - ce^{-(\lambda-1)t}}, \quad (4.6)$$

onde $c = \lambda - (\lambda - 1)/\rho_0$, sendo $\rho_0 = \rho(t = 0)$.

Na região subcrítica, $\lambda < 1$, a solução (4.6) relaxa para zero exponencialmente,

$$\rho_{sub} = Ae^{-(1-\lambda)t}, \quad (4.7)$$

enquanto que na região supercrítica o sistema relaxa para a solução ativa da seguinte maneira,

$$\rho_{super} = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}. \quad (4.8)$$

Em ambos os casos o tempo de relaxação τ , definido por $\rho \sim \exp(-t/\tau)$, tem a mesma dependência,

$$\tau \sim |\lambda_c - \lambda|^{\nu_{\parallel}^{CM}}, \quad (4.9)$$

sendo $\nu_{\parallel}^{CM} = 1$.

Se integrarmos a equação (4.4), mas desta vez tomando o valor de λ sobre o ponto crítico, resulta que o comportamento do parâmetro de ordem é $\rho \sim t^{-\beta/\nu_{\parallel}}$, sendo $\beta/\nu_{\parallel} = 1$.

O expoente de escala espacial ν_{\perp} também pode ser determinado nesta aproximação se permitirmos flutuações espaciais através da inclusão de um processo difusivo de partículas. Isto é feito através da extensão da equação (4.4) para um parâmetro de ordem ρ que dependerá, agora, também da posição do sítio e que possui uma difusão cuja taxa é D ,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) = \Delta\rho(\vec{x}, t) - \lambda\rho^2(\vec{x}, t) + D\nabla^2\rho(\vec{x}, t), \quad (4.10)$$

onde $\Delta = \lambda - \lambda_c$. Podemos reescalar o parâmetro de ordem na forma $\rho(\vec{x}, t) \rightarrow \Lambda^{-\beta/\nu_{\perp}}\rho(\Lambda\vec{x}, \Lambda^z t)$. Se o substituirmos na equação (4.10) e dividirmos o resultado por $\Lambda^{-\beta/\nu_{\perp}}$, obteremos

$$\Lambda^z \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) = \Delta\rho(\vec{x}, t) - \lambda\Lambda^{-\beta/\nu_{\perp}}\rho^2(\vec{x}, t) + D\Lambda^2\nabla^2\rho(\vec{x}, t). \quad (4.11)$$

Para que esta reescala mantenha a equação (4.10) invariante, é necessário impor que $z = \beta/\nu_{\perp} = 2$. Assim, os valores críticos obtidos através da aproximação de campo médio para o processo de contato são:

$$\lambda_c^{CM} = 1 \quad \beta_{CM} = 1 \quad \nu_{\parallel}^{CM} = 1 \quad \nu_{\perp}^{CM} = 1/2$$

Quando comparamos estes resultados com os valores mais precisos já obtidos para este problema, provenientes de simulações [56] e expansões em séries [57], mostrados na tabela (4.1) percebe-se que a aproximação de campo médio fornece valores muito distantes destes, o que é fruto de termos desconsiderado as correlações do sistema. Entretanto, à medida que a dimensão se torna maior, os valores críticos se aproximam daqueles previstos pelo campo médio. De fato, em fenômenos críticos é comum definirmos a chamada *dimensão crítica superior*, d_c , que é a dimensão a partir da qual os valores de campo médio tornam-se exatos. No Processo de Contato essa dimensão é igual a $d_c = 4$ [58].

Então, apesar de não fornecer valores precisos para as quantidades críticas, a aproximação de campo médio possibilita uma visão qualitativa do comportamento do sistema, prevendo a transição e sua ordem corretamente, como no caso do PC. Esta aproximação tem a vantagem de ser mais simples, de modo que seu uso, a despeito da falta de precisão de seus resultados quantitativos, permite divisar um pouco os mecanismos da transição e algumas peculiaridades do modelo que talvez não sejam

facilmente perceptíveis em outras técnicas mais precisas como, por exemplo, a simulação numérica.

Valores críticos	CM	$d = 1$ [56]	$d = 2$ [31]	$d = 3$ [19]
λ_c	1	3.2979	1.649	1.317
β	1	0.276486(8)	0.584(4)	0.81(1)
ν_\perp	1/2	1.096854(4)	0.734(4)	0.581(5)
ν_\parallel	1	1.733847(6)	1.295(6)	1.105(5)
z	2	1.580745(10)	1.76(3)	1.90(1)

Tabela 4.1: Estimativas do ponto e dos expoentes críticos do PC em várias dimensões e obtidos através de campo médio, simulações ou expansões em séries

Por fim, devemos salientar que existem formas de melhorar a aproximação de campo médio a partir de estimativas aproximadas para correlações de baixa ordem. No exemplo que discutimos aqui, isso seria o equivalente a escrevermos uma equação de evolução para a função ϕ . Fazendo isso, teríamos uma equação que envolveria médias do produto de três sítios, $\Theta = \langle \eta_i \eta_j \eta_k \rangle$. A relação entre esta função e a função ϕ também é desconhecida, de modo que seria necessário, assim como fizemos à ϕ com respeito a ρ , usar uma aproximação para esta. A aproximação em questão é a chamada Aproximação de Pares, que consiste em escrevermos $\Theta = F(\phi, \rho)$, possibilitando-nos ter um sistema fechado de duas equações. Estas aproximações podem ser continuadas numa infinidade hierárquica de outras equações, levando-se em conta correlações de ordem cada vez maior, mas imputando a necessidade de truncá-las em algum momento, supondo uma dependência da maior delas com as outras menores, de modo a termos um sistema fechado. Chamamos este tipo de variação do CM como aproximações de aglomerados e seu uso, associado a técnicas de extrapolação adequadas [9, 59], permite a melhora da estimativa dos valores críticos. Outra variação do CM foi aquela proposta por Ben-Nain e Krapivsky [60], que usam a evolução de intervalos vazios para determinar as grandezas críticas do PC. Neste caso, a aproximação simples leva a um ponto crítico no caso unidimensional $\lambda_c = 4$, muito mais próximo do que a aproximação usual. Além disso, o expoente $\beta = 1/2$, em razoável acordo com daquele obtido pelas simulações [56]. No entanto, esta aproximação produz uma transição descontínua, ao contrário do que realmente é.

Ao longo do restante do capítulo aplicaremos a Aproximação de Campo Médio, em sua versão simples chamada aproximação de um sítio e na versão de pares, para iniciarmos a discussão sobre as propriedades críticas dos modelos discutidos no capítulo 3.

4.2 Aproximação de campo médio para o modelo AB

Para implementar a aproximação de campo médio no modelo AB, usaremos duas formas distintas: uma diretamente analítica, escrevendo a equação de evolução para o parâmetro de ordem a partir da equação mestra e da taxa de transição do modelo dada pela equação (3.1) e a outra forma é feita através da contagem de reações.

Fazendo uso da taxa de transição do modelo, calcularemos uma solução unidimensional para $\langle \eta_i \rangle$. A equação para esta quantidade será

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \eta_i \rangle &= \langle (1 - 2\eta_i) w_i(\eta) \rangle \\
 &= \left\langle (1 - 2\eta_i) \left[\frac{\lambda}{2} (1 - \gamma \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i \right] \right\rangle \\
 &= \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} \langle (1 - 2\eta_i) (1 - \gamma \eta_i) \eta_{i+\delta} \rangle + \langle (1 - 2\eta_i) \eta_i \rangle \\
 &= \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} \langle \eta_{i+\delta} \rangle - (2 - \gamma) \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} \langle \eta_i \eta_{i+\delta} \rangle - \langle \eta_i \rangle, \tag{4.12}
 \end{aligned}$$

onde usamos que $\eta_i^2 = \eta_i$.

Impondo a condição de isotropia e homogeneidade da rede, tal que $\rho \equiv \langle \eta_i \rangle$ e $\phi \equiv \langle \eta_i \eta_{i+\delta} \rangle$, $\forall i$, temos

$$\frac{d}{dt} \rho = (\lambda - 1) \rho - \lambda(2 - \gamma) \phi. \tag{4.13}$$

A solução estacionária, se usarmos a aproximação de campo médio de um sítio, que implica fazer $\phi = \rho^2$, será

$$\rho = \begin{cases} 0 & \text{se } p_a < 1/2 \\ \frac{2p_a - 1}{2p_a + p_c - 1} & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{4.14}$$

lembrando que $\lambda \equiv p_a / (1 - p_a)$ e $\gamma \equiv 1 - p_c / p_a$.

Note que nesta aproximação temos apenas um ponto crítico em $p_a = 1/2$ para qualquer que seja o valor de p_c . Além disso, se tomarmos o limite em que $p_c = 0$, o que equivale segundo as regras do modelo ao limite do modelo do votante com tendência como mostrado no capítulo 3 esta solução exhibe uma transição de primeira ordem, contrariamente ao que acontece para qualquer valor diferente de $p_c = 0$. Por outro lado, exatamente no limite do modelo do votante (modelo de Glauber linear à temperatura nula) o resultado na região subcrítica torna-se indefinido, pois tanto o numerador quanto o denominador são nulos. Esta indeterminação reflete o caráter

conservativo do modelo, uma vez que neste limite a equação a ser resolvida seria $\dot{\rho} = 0$, como vemos no apêndice A.

Voltando à solução exibida em (4.14), podemos extrair que o comportamento do parâmetro de ordem na região supercrítica, mas a uma pequena distância do ponto crítico localizado em $p_a = 1/2$, é dado por

$$\rho \sim (p_a - 1/2)^{\beta_{CM}}, \quad (4.15)$$

com $\beta_{CM} = 1$.

Por outro lado, a equação (4.13), na aproximação de campo médio e com os parâmetros assumindo valores sobre o ponto crítico, o que consiste em fazer $\lambda = \lambda_c = 1$, assume a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\rho = (2 - \gamma)\rho^2, \quad (4.16)$$

cuja integração resulta no comportamento assintótico $\rho \sim t^{-(\beta/\nu_{\parallel})_{CM}}$, que determina que o expoente $(\beta/\nu_{\parallel})_{CM} = 1$, isto é, $\nu_{\parallel}^{CM} = 1$. Não é difícil concluir que, incluindo as flutuações espaciais, como feito para o PC, o expoente ν_{\perp}^{CM} terá o mesmo valor $\nu_{\perp}^{CM} = 1/2$ obtido no PC.

Com esta análise, apesar de sabermos das limitações da aproximação CM, obtivemos algumas interessantes características qualitativas sobre a criticalidade do modelo. Obviamente, a própria existência da transição carece ser provada através de uma técnica mais precisa, tal como simulações computacionais. Entretanto, ingredientes que sabíamos existir no modelo quando discutimos suas regras estão refletidos nestes resultados, tais como a presença de uma transição de primeira ordem na linha determinada por $p_c = 0$ e a equivalência entre os expoentes críticos deste modelo e aqueles do PC, garantindo assim a sustentação da hipótese de que as simetrias definidas pelas regras, para $p_c \neq 0$, eram idênticas àsquelas do PC e respeitavam a conjectura PD.

Na sequência desta discussão reobteremos este resultado extraindo a equação para o parâmetro de ordem através da contagem de transições, o que consiste em reconstruir a equação mestra sem a posse de uma expressão analítica da taxa de transição do modelo. Isso nos “abrirá as portas” para, usando desta mesma estratégia, derivar novos resultados numa aproximação de pares que, em princípio, é mais precisa do que a aproximação de um sítio.

Para implementar esta técnica enumeramos na tabela (4.2) as configurações de um sítio e as possíveis transições que este sítio pode sofrer com sua respectiva taxa.

Para construir a equação de evolução para, digamos, a quantidade $P_i(A)$ que corresponde à probabilidade de que um sítio seja ocupado por uma partícula A , relacionamos como positivas todas as transições que vão para a configuração A e como

Configuração	Transição	taxa
A \square B	B	$p_b P(AB)$
\square A B	A	$p_a P(AB)$
A	B	$p_c P(B)$

Tabela 4.2: Transições de um sítio no modelo AB

negativas aquelas que saem de A originando outras configurações, tendo como peso as respectivas taxas de transição. Com isso, teremos

$$\frac{d}{dt} P_i(A) = \frac{p_a}{2} \sum_{\delta} P_{i+\delta}(AB) - \frac{p_b}{2} \sum_{\delta} P_{i+\delta}(AB) - p_c P_i(A). \quad (4.17)$$

Considerando isotropia e homogeneidade, encontraremos

$$\frac{d}{dt} P(A) = (p_a - p_b) P(AB) - p_c P(A). \quad (4.18)$$

Usando a notação $\rho \equiv P(A)$ e $P(B) = 1 - P(A) = 1 - \rho$ podemos resolver a equação anterior na aproximação de campo médio, onde $P(AB) = P(A)P(B) = \rho(1 - \rho)$, resultando

$$\frac{d}{dt} \rho = (2p_a + p_c - 1)\rho(1 - \rho) - p_c \rho$$

ou simplesmente,

$$\frac{d}{dt} \rho = (2p_a - 1)\rho - (2p_a + p_c - 1)\rho^2. \quad (4.19)$$

A equação (4.19), claramente leva às mesmas soluções estacionárias já mostradas em (4.14) e, portanto todas as conclusões retiradas a partir desta solução se repetem também para a equação (4.19), obtida através da contagem de reações.

Sem realizar nenhuma aproximação, a solução da equação (4.18) carece do conhecimento da probabilidade de dois sítios, $P(AB)$. Para determiná-la, construiremos uma equação de evolução para esta probabilidade através da contagem de reações para pares de partículas, de forma similar àquela usada para a obtenção da equação (4.18).

Configuração	Transição	taxa
\boxed{A} BB	AB	$\frac{p_a}{2}P(ABB)$
AB	BB	$\frac{p_b}{2}P(AB)$
AB	AA	$\frac{p_a}{2}P(AB)$
AB	BB	$p_cP(AB)$
\boxed{B} AB	BB	$\frac{p_b}{2}P(BAB)$
AB \boxed{A}	AA	$\frac{p_a}{2}P(ABA)$
AA \boxed{B}	AB	$\frac{p_b}{2}P(AAB)$
AA	AB	$p_cP(AA)$

Tabela 4.3: Transições de pares de sítios no modelo AB

Conhecendo as reações e suas respectivas taxas, como mostradas na tabela (4.3), temos que a equação para a probabilidade $P(AB)$ é dada por

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(AB) &= \frac{p_a}{2}P(ABB) + \frac{p_b}{2}P(AAB) + p_cP(AA) - \frac{p_b}{2}P(AB) + \\
 &- \frac{p_a}{2}P(AB) - p_cP(AB) - \frac{p_b}{2}P(BAB) - \frac{p_a}{2}P(ABA) \\
 &= \frac{p_a}{2}[P(ABB) - P(ABA)] + \frac{p_b}{2}[P(AAB) - P(BAB)] + \\
 &- \frac{1}{2}(p_a + p_b + 2p_c)P(AB) + p_cP(AA) \\
 &= \frac{p_a}{2}[P(ABB) - P(ABA)] + \frac{p_b}{2}[P(AAB) - P(BAB)] + \\
 &- \frac{1}{2}(1 + p_c)P(AB) + p_cP(AA). \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

Adicionando esta equação à (4.18), temos um sistema para resolver,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(A) &= (p_a - p_b)P(AB) - p_cP(A) \\
 \frac{d}{dt}P(AB) &= \frac{p_a}{2}[P(ABB) - P(ABA)] + \frac{p_b}{2}[P(AAB) - P(BAB)] + \\
 &\quad - \frac{1}{2}(1 + p_c)P(AB) + p_cP(AA),
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

mas a segunda equação não só depende de probabilidades de dois sítios, como também de três, de forma que para obtermos uma solução a partir do sistema (4.21) é necessário impormos uma aproximação de pares. Esta aproximação é feita como se segue,

$$P(\eta_i\eta_j\eta_k) \approx \frac{P(\eta_i\eta_j)P(\eta_j\eta_k)}{P(\eta_j)}. \tag{4.22}$$

Fazendo uso da expressão acima e das relações

$$\begin{aligned}
 P(BB) &= P(B) - P(AB) = 1 - \rho - \phi, \\
 P(AA) &= P(A) - P(AB) = \rho - \phi,
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

onde $\rho \equiv P(A)$ e $\phi \equiv P(AB)$, podemos reescrever o sistema (4.21) como um conjunto fechado de equações, na seguinte forma,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\rho &= (p_a - p_b)\phi - p_c\rho \\
 \frac{d}{dt}\phi &= \frac{p_a}{2} \left[\frac{(1 - \rho - \phi)\phi - \phi^2}{1 - \rho} \right] + \frac{p_b}{2} \left[\frac{(\rho - \phi)\phi - \phi^2}{\rho} \right] + \\
 &\quad - \frac{1}{2}(1 + p_c)\phi + p_c(\rho - \phi).
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

A solução estacionária do sistema de equações (4.24) é

$$\rho = \begin{cases} 0 & \text{se } p_a < p_a^c \\ \frac{4p_a^2 - 4p_a + p_a p_c + 1 - p_c}{4p_a^2 - 4p_a + 2p_a p_c + 1 - p_c} & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{4.25}$$

onde $p_a^c = 1/8[4 - p_c + \sqrt{8p_c + p_c^2}]$.

Esta solução é representada pela figura (4.1), mostra uma tendência no comportamento do parâmetro de ordem em tornar-se cada vez mais pronunciado na vizinhança de p_a^c .

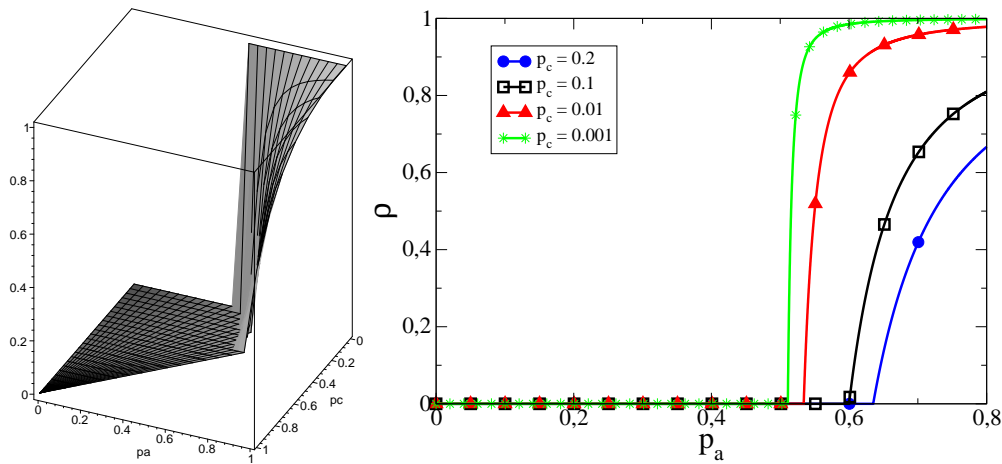


Figura 4.1: Comportamentos do parâmetro de ordem. A primeira figura mostra ρ no espaço dos parâmetros do modelo, (p_a, p_c) . Já na segunda vemos seu comportamento em função de p_a com p_c fixo. Observe que a transição fica mais pronunciada à medida que p_c diminui, sinalizando a transição descontínua que ocorre para $p_c = 0$.

Diferentemente da aproximação de um sítio, quando a linha crítica independe de p_c com $p_a^c = 1/2$, este último resultado leva a uma linha crítica que é função de p_c , como mostra a figura (4.2).

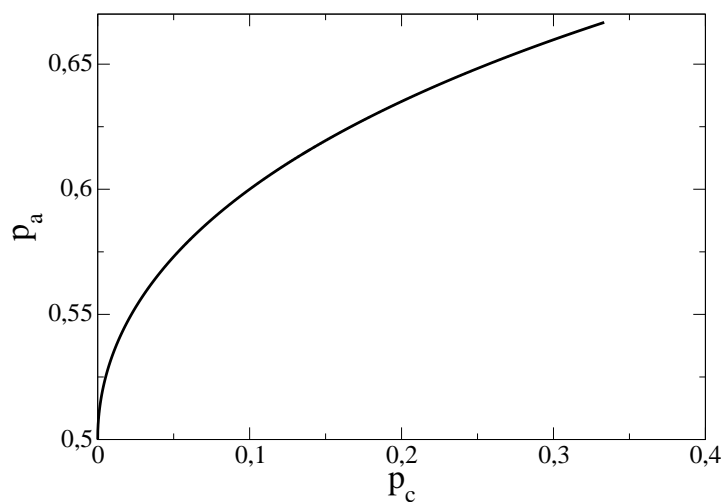


Figura 4.2: Linha crítica do modelo AB obtida a partir da aproximação de pares.

Além disso, se tomarmos a solução supercrítica mostrada em (4.25) e realizarmos uma expansão de Taylor em torno de $p_a = p_a^c$, o resultado é

$$\rho = c(p_a - p_a^c)^\beta \sim \Delta^\beta, \quad (4.26)$$

com $c \equiv 8(p_c^2 + 8p_c + 3\sqrt{8p_c + p_c^2})/(p_c(p_c - \sqrt{8p_c + p_c^2} - 4)^2)$ e $\beta = 1$, como na aproximação de um sítio.

É interessante observar também que ao longo da linha que define o modelo do votante tendencioso, isto é, $p_c = 0$, o parâmetro de ordem sofre um salto de tamanho unitário no ponto $p_a^c = 1/2$, caracterizando uma transição de primeira ordem, como já era apontado pela aproximação de um sítio. Finalmente, se invertermos a linha crítica, escrevendo $p_c = f(p_a)$ e expandirmos esta função f na vizinhança do ponto onde ocorre a transição descontínua, ou seja, $p_a = 1/2$, teremos $p_c \sim (p_a - 1/2)^\phi$, com $\phi = 2$. Como discutiremos mais adiante, este é o expoente de “crossover” entre as duas classes de universalidade: a classe PD que regula a criticalidade ao longo de toda a linha, com $p_c \neq 0$, e a classe PDC que define os expoentes críticos para este ponto em particular.

Portanto, apesar do expoente crítico β não ter se alterado, assim como os demais, o fato de termos levado em conta alguma correlação foi suficiente para obtermos uma linha crítica mais estruturada do que aquela da aproximação de um sítio. Outras informações, como a dependência com o parâmetro e o expoente de “crossover”, foram extraídas nesta aproximação de pares. Na aproximação de campo médio para um sítio, podemos quantificar este expoente com valor infinito, pois na linha crítica temos $p_a = 1/2$.

4.2.1 Campo médio para o modelo AB com difusão

Na variante do modelo AB em que incluímos uma taxa de difusão D , tal que uma partícula A pode deixar um sítio e migrar para o vizinho, desde que este esteja ocupado por uma do tipo B , as possíveis transições do modelo são as mesmas já enumeradas na tabela (4.2), além é claro daquelas que contabilizam o processo difusivo de uma partícula, de modo que o conjunto inteiro de transições é mostrado na tabela (4.4).

Dadas estas transições, a equação para a evolução de $P(A)$ é exatamente igual ao caso sem difusão (equação (4.18)) de maneira que a inclusão de uma taxa de difusão ao modelo não altera os resultados de uma aproximação de um sítio, mantendo assim o ponto crítico em $p_a = 1/2$ para qualquer que seja o valor dos outros parâmetros, p_c e D . Isso acontece porque nas transições de um sítio a difusão funciona como “fonte” e “sorvedouro” para um certo estado, A ou B , de modo que na equação de evolução de $P(A)$, por exemplo, ela contribui com dois termos de mesma intensidade e sinais

Configuração	Transição	taxa
A \square B	B	$p_b P(AB)$
A \square B	B	$D P(AB)$
\square A B	A	$p_a P(AB)$
\square A B	A	$D P(AB)$
A	B	$p_c P(B)$

Tabela 4.4: Transições de um sítio no modelo AB com difusão

opostos, portanto se anulando e desta forma não contribuindo efetivamente para a evolução desta quantidade.

Porém, o mesmo não ocorre para a aproximação de dois sítios, em que os termos mostrados na tabela (4.5) não se anulam mutuamente. Desta maneira, as equações necessárias, nesta aproximação, para determinarmos as propriedades estacionárias do modelo são aquelas expressas em (4.27).

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(A) &= (p_a - p_b)P(AB) - p_c P(A) \\
 \frac{d}{dt}P(AB) &= \frac{1}{2}(p_a + D)P(ABB) + \frac{1}{2}(p_b + D)P(AAB) + p_c P(AA) + \\
 &\quad - \frac{p_b}{2}P(AB) - \frac{p_a}{2}P(AB) - p_c P(AB) + \\
 &\quad - \frac{1}{2}(p_a + D)P(ABA) - \frac{1}{2}(p_b + D)P(BAB) \\
 &= \frac{1}{2}(p_a + D)[P(ABB) - P(ABA)] + \\
 &\quad + \frac{1}{2}(p_b + D)[P(AAB) - P(BAB)] + \\
 &\quad - \frac{1}{2}(1 + p_c)P(AB) + p_c P(AA). \tag{4.27}
 \end{aligned}$$

Lembrando da aproximação de pares (4.22) e das relações (4.23), podemos reescrever este par de equações na forma,

Configuração	Transição	taxa
\boxed{A} BB	AB	$\frac{p_a}{2}P(ABB)$
\boxed{A} BB	AB	$\frac{D}{2}P(ABB)$
AB	BB	$\frac{p_b}{2}P(AB)$
AB	AA	$\frac{p_a}{2}P(AB)$
AB	BB	$p_cP(AB)$
\boxed{B} AB	BB	$\frac{p_b}{2}P(BAB)$
\boxed{B} AB	BB	$\frac{D}{2}P(BAB)$
AB \boxed{A}	AA	$\frac{p_a}{2}P(ABA)$
AB \boxed{A}	AA	$\frac{D}{2}P(ABA)$
AA \boxed{B}	AB	$\frac{p_b}{2}P(AAB)$
AA \boxed{B}	AB	$\frac{D}{2}P(AAB)$
AA	AB	$p_cP(AA)$

Tabela 4.5: Transições de pares de sítios no modelo AB com difusão

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\rho &= (p_a - p_b)\phi - p_c\rho \\
 \frac{d}{dt}\phi &= \frac{1}{2}(p_a + D) \left\{ \frac{(1 - \rho - \phi)\phi - \phi^2}{1 - \rho} \right\} + \\
 &+ \frac{1}{2}(p_b + D) \left\{ \frac{(\rho - \phi)\phi - \phi^2}{\rho} \right\} + \\
 &- \frac{1}{2}(1 + p_c)\phi + p_c(\rho - \phi),
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

cuja solução estacionária é

$$\rho = \begin{cases} 0 & \text{se } p_a < p_a^c \\ \frac{4p_a^2 - 4p_a + p_a p_c + 1 - p_c + 2Dp_a - D}{4p_a^2 - 4p_a + 2p_a p_c + 1 - p_c + 2Dp_a + Dp_c - D} & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{4.29}$$

onde $p_a^c = 1/8[4 - (p_c + 2D) + \sqrt{8p_c + (p_c + 2D)^2}]$.

Ao contrário da aproximação que não considera nenhuma correlação, aqui temos uma linha crítica com dependência de todos os parâmetros do modelo. Além disso, no ponto que corresponde ao modelo do votante, o parâmetro de ordem continua descontínuo, com o salto localizado em $p_a^c = 1/2$. O resultado de campo médio, portanto, sugere que as características críticas do modelo não se alteram para $p_c = 0$ se incluirmos difusão. Outro detalhe importante é como o expoente de crossover, ϕ , depende da difusão. Se expressarmos p_c como função de p_a na vizinhança do ponto onde ocorre o salto do parâmetro de ordem, isto é em $p_a = 1/2$, temos que $p_c = 4D(p_a - 1/2)$, de modo que $\phi = 1$, diferentemente do caso sem difusão quando este expoente era $\phi = 2$.

Finalmente, se a difusão assumir um valor infinito, o que significa que a probabilidade de difusão é unitária, a linha crítica p_a^c tende ao valor constante $1/2$, reproduzindo o mesmo comportamento da aproximação de um sítio, como podemos observar na figura (4.3). Desta forma, o expoente de “crossover” torna-se infinito neste limite. De fato, este resultado não surpreende pois o limite de difusão infinita destrói as correlações e recupera o comportamento observado numa aproximação de campo médio de um sítio.

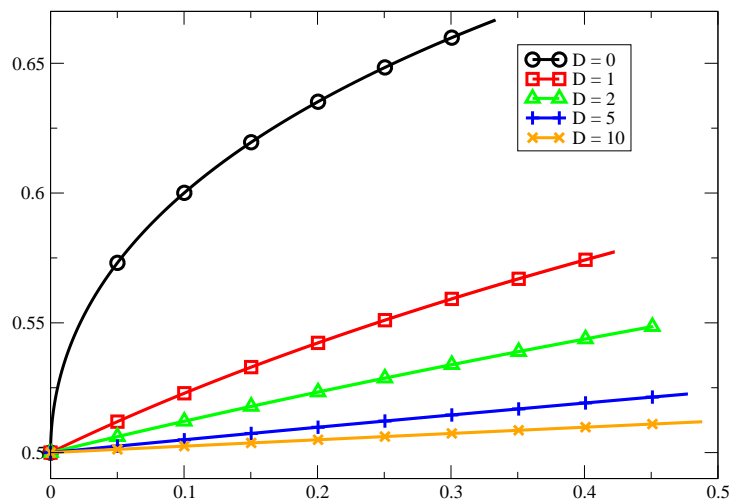


Figura 4.3: Variação da linha crítica do modelo AB de acordo com a mudança da taxa de difusão, D . À medida que a difusão torna-se maior a linha crítica tende ao valor encontrado na aproximação de um sítio, $p_a^c = 1/2$, $\forall p_c$.

4.3 Aproximação de campo médio para o modelo de Manna parametrizado

Para escrevermos uma expressão da taxa de transição deste modelo, como fizemos com o modelo AB através da equação (3.1), seria preciso expressá-la por partes, uma vez que as regras deste modelo impõem restrições que não nos deixam ter uma forma simples para esta taxa. Assim, é mais prático obtermos equações de campo médio diretamente da contagem de transições provenientes das regras dinâmicas do modelo, ao invés de derivá-las de uma expressão de taxa, como fizemos na seção (4.2) para a aproximação de um sítio do modelo AB.

Para determinar estas equações necessita-se observar quais são as possíveis transições permitidas pelas regras do modelo. Diferentemente do modelo AB, onde um sítio ativo podia gerar qualquer configuração que fosse uma combinação de sítios ativos e inativos, neste caso nem todas as combinações são possíveis, devido ao vínculo de conservação do número de partículas. Na tabela (4.6) explicitamos quais os sítios que permitem a geração de uma configuração e quais não.

Sabedores disto podemos agora construir as transições e associar cada uma destas a uma taxa que respeite as definições do modelo. É necessário atentar para o fato de que configurações de três sítios também contribuirão para esta aproximação, como pode ser visto na tabela (4.7), visto que as transições ocorrem com o “desabamento”

de partículas para os dois vizinhos, simultaneamente, ao contrário do que ocorre para o modelo AB, onde apenas o sítio atualizado é alterado.

	De	0	1	2
Para	0	-	X	✓
	1	✓	-	✓
	2	✓	✓	-

Tabela 4.6: Transições permitidas na aproximação de um sítio para o modelo de Manna parametrizado.

A partir da tabela (4.7) escreveremos, para o caso homogêneo, as seguintes equações para as probabilidades $P(z_i)$ de que o sítio esteja ocupado por $z_i = 0, 1, 2$ partículas,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(0) &= \frac{1-\lambda}{2}P(02) + \frac{1+\lambda}{2}P(020) + (1+\lambda)P(021) + \\
 &+ (1+\lambda)P(121) - (1+\lambda)P(02) - \frac{1-\lambda}{2}P(02) \\
 &= \frac{1+\lambda}{2}[P(020) + P(121) + 2P(021) - 2P(02)], \tag{4.30}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(1) &= (1+\lambda)P(02) + \frac{1-\lambda}{2}P(12) + (1+\lambda)P(221) + \\
 &+ (1+\lambda)P(022) - (1+\lambda)P(12) - \frac{1-\lambda}{2}P(12) \\
 &= (1+\lambda)[P(02) + P(221) + P(022) - P(12)] \tag{4.31}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}P(2) &= \frac{1-\lambda}{2}P(02) + (1+\lambda)P(12) + \frac{1-\lambda}{2}P(12) + \\
 &- \frac{1-\lambda}{2}P(02) - \frac{1+\lambda}{2}P(020) - (1+\lambda)P(021) + \\
 &- \frac{1+\lambda}{2}P(121) - \frac{1-\lambda}{2}P(12) - (1+\lambda)P(221) - (1+\lambda)P(022) \\
 &= \frac{1+\lambda}{2}[2P(12) - P(020) - P(121) + \\
 &- 2P(021) - 2P(221) - 2P(022)]. \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

Configuração	Transição	taxa
0 $\boxed{2}$	1	$(1 + \lambda)P(02)$
0 $\boxed{2}$	2	$\frac{1-\lambda}{2}P(02)$
1 $\boxed{2}$	2	$(1 + \lambda)P(12)$
1 $\boxed{2}$	2	$\frac{1-\lambda}{2}P(12)$
$\boxed{0}$ 2	0	$\frac{1-\lambda}{2}P(02)$
$\boxed{0}$ 2 $\boxed{0}$	0	$\frac{1+\lambda}{2}P(020)$
$\boxed{0}$ 2 $\boxed{1}$	0	$(1 + \lambda)P(021)$
$\boxed{1}$ 2 $\boxed{1}$	0	$\frac{1+\lambda}{2}P(121)$
$\boxed{1}$ 2	1	$\frac{1-\lambda}{2}P(12)$
$\boxed{2}$ 2 $\boxed{2}$	1	$(1 + \lambda)P(221)$
$\boxed{0}$ 2 $\boxed{2}$	1	$(1 + \lambda)P(022)$

Tabela 4.7: Transições de um sítio no modelo de Manna parametrizado.

Em todas as equações, os termos relacionados à transição em que duas partículas de um sítio ativo tentam dirigir-se ao mesmo vizinho se anulam mutuamente, de maneira que este tipo de transição não contribui para a dinâmica das probabilidades, nesta aproximação, e não desempenhará qualquer papel para a solução estacionária. Curiosamente, isto é o mesmo que ocorre com a difusão na aproximação de um sítio. De fato, isto não parece ser mera coincidência, pois podemos interpretar, no modelo restrito, a transição em questão como um processo difusivo para pares de partículas. Sua ação, como mostra os exemplos abaixo,

$$20 \longrightarrow 02$$

$$21 \longrightarrow 12$$

tem o mesmo efeito de uma difusão para um sistema que possa ser imaginado como composto por partículas de três espécies, 0, 1 ou 2.

Aplicando a aproximação de campo médio onde nenhuma correlação está presente, ou seja

$$P(\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_N) = \prod_{i=1}^N P(\alpha_i), \quad (4.33)$$

e adotando a notação $x \equiv P(0)$, $y \equiv P(1)$ e $z \equiv P(2)$, as equações (4.30)-(4.32) assumem a nova forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x &= \frac{1+\lambda}{2}z[(x+y)^2 - 2x] \\ \frac{d}{dt}y &= (1+\lambda)z[x - y + z(x+y)] \\ \frac{d}{dt}z &= \frac{1+\lambda}{2}z[2y - 2z(x+y) - (x+y)^2]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Uma solução óbvia é aquela em que $z = 0$, o que significa não haver qualquer sítio com duas partículas. Como sabemos, uma configuração sem sítios duplamente ocupados é absorvente, pois a dinâmica ficaria aprisionada nesta configuração. Por outro lado, se usarmos as propriedades de normalização, $x + y + z = 1$ e a definição de uma densidade de partículas, $\zeta = x + 2z$, sendo ζ uma quantidade constante, podemos obter uma outra solução. Substituindo em qualquer uma das equações (4.34) as variáveis $y = \zeta - 2z$ e $x = 1 + z - \zeta$, a solução estacionária, na aproximação de campo médio, será

$$z = \begin{cases} 0 & \text{se } \zeta < \zeta_c \\ 2 - \sqrt{5 - 2\zeta} & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.35)$$

onde $\zeta_c = 1/2$.

Esta é a mesma solução encontrada para o modelo de Manna com restrição de altura ($\lambda = 0$) como mostrado em [51]. Além disso, se expandirmos a parte supercrítica da solução (4.35) na vizinhança do ponto crítico, temos que $z \sim (\zeta - \zeta_c)^\beta$, com $\beta = 1$. Outro expoente pode ser encontrado se resolvermos a equação (4.34) para a variável z sobre o ponto crítico, o que significa $y = 1/2 - 2z$ e $x = 1/2 + z$, de forma que

$$\frac{d}{dt}z = \frac{1 + \lambda}{2}z^2(z - 4), \quad (4.36)$$

cuja solução é

$$z(t) = 4 \left[W \left\{ -\frac{z_0 - 4}{z_0} \exp \left(\frac{4 + 8z_0 t(\lambda + 1) - z_0}{z_0} \right) \right\} + 1 \right]^{-1}, \quad (4.37)$$

sendo $W(x)$ a função de Lambert [61]. Apesar da solução não-trivial, no limite estacionário o comportamento desta solução é simples e igual a $z(t \rightarrow \infty) \sim t^{-\beta/\nu_{\parallel}}$, com o expoente $\beta/\nu_{\parallel} = 1$.

Na aproximação de campo médio de um sítio para o modelo parametrizado de Manna encontramos algumas semelhanças com os resultados obtidos no modelo AB. Como neste último, apesar da introdução de um parâmetro extra, o resultado estacionário, para a aproximação de um sítio, independe deste, de maneira que a transição continua a ocorrer no mesmo ponto do modelo original para qualquer valor do parâmetro adicional. Outra semelhança se dá sobre os valores dos expoentes obtidos nesta aproximação para ambos os modelos. Nos dois casos obtivemos valores unitários para os expoentes críticos β e ν_{\parallel} . A adição de alguma correlação poderia mudar este quadro como ocorreu no modelo AB quando empregamos a aproximação de pares? É o que tentaremos responder agora através desta nova aproximação.

A tabela (4.8) enumera as transições possíveis para um par de sítios no modelo de Manna parametrizado, enquanto a tabela (4.9) relaciona estas transições com suas respectivas taxas, o que nos permite construir as equações (4.38).

	De	00	01	02	11	12	22
Para	00	-	X	✓	X	X	X
	01	✓	-	✓	X	✓	X
	02	✓	✓	-	X	✓	✓
	11	X	✓	✓	-	✓	X
	12	X	✓	✓	✓	-	✓
	22	X	X	✓	X	✓	-

Tabela 4.8: Transições permitidas na aproximação de pares para o modelo de Manna parametrizado.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}z &= \frac{1+\lambda}{2} \left\{ 2u - \frac{1}{z}(r+u)^2 - 2\frac{(z-r-u)}{z}(r+u) \right\} \\
 \frac{d}{dt}s &= \frac{1+\lambda}{2} \left\{ \frac{r(1+z-\zeta-s-r)}{1+z-\zeta} + \frac{r^2}{z} \right\} + \\
 &+ \frac{1+\lambda}{4} \left\{ \frac{ru}{z} - \frac{su}{\zeta-2z} - \frac{rs}{1+z-\zeta} \right\} + \frac{1-\lambda}{4} \frac{ru}{z} \\
 \frac{d}{dt}r &= \frac{1-\lambda}{4} \left\{ \frac{r(1+z-\zeta-s-r)}{1+z-\zeta} - \frac{ru}{z} \right\} + \\
 &+ \frac{3+\lambda}{4} \left\{ \frac{su}{\zeta-2z} - \frac{r^2}{z} - \frac{r^2}{1+z-\zeta} \right\} + \\
 &+ \frac{1+\lambda}{2} \frac{u^2}{z} - \frac{1+3\lambda}{4} \frac{r(z-r-u)}{z} \\
 \frac{d}{dt}u &= \frac{1-\lambda}{4} \frac{rs}{1+z-\zeta} + \frac{1+\lambda}{2} \left\{ \frac{r^2}{1+z-\zeta} + \frac{r(z-r-u)}{z} \right\} + \\
 &+ \frac{3+\lambda}{4} \left\{ \frac{u(\zeta-2z-s-2u)}{\zeta-2z} + \frac{u(z-2r-2u)}{z} \right\}, \tag{4.38}
 \end{aligned}$$

onde usamos a aproximação de pares definida em (4.22) e definimos as seguintes variáveis

$$\begin{aligned}
 z &\equiv P(2) \\
 s &\equiv P(01) \\
 r &\equiv P(02) \\
 u &\equiv P(12),
 \end{aligned}$$

com

Configuração	Transição	taxa
00 $\boxed{2}$	01	$\frac{1+\lambda}{2} P(002)$
00 $\boxed{2}$	02	$\frac{1-\lambda}{4} P(002)$
01 $\boxed{2}$	02	$\frac{1+\lambda}{2} P(012)$
01 $\boxed{2}$	02	$\frac{1-\lambda}{4} P(201)$
$\boxed{2}$ 01	11	$\frac{1+\lambda}{2} P(201)$
$\boxed{2}$ 01	21	$\frac{1-\lambda}{4} P(201)$
02 $\boxed{0}$	00	$\frac{1-\lambda}{4} P(020)$
02 $\boxed{1}$	10	$\frac{1+\lambda}{2} P(021)$
02 $\boxed{1}$	01	$\frac{1-\lambda}{4} P(021)$
02 $\boxed{0}$	10	$\frac{1+\lambda}{2} P(020)$
02 $\boxed{2}$	11	$\frac{1+\lambda}{2} P(022)$
$\boxed{2}$ 02	12	$\frac{1+\lambda}{2} P(202)$
02 $\boxed{2}$	22	$\frac{1-\lambda}{4} P(022)$
11 $\boxed{2}$	12	$\frac{1+\lambda}{2} P(112)$
11 $\boxed{2}$	12	$\frac{1-\lambda}{4} P(112)$
12 $\boxed{0}$	10	$\frac{1-\lambda}{4} P(120)$
12 $\boxed{0}$	20	$\frac{1+\lambda}{2} P(120)$
12 $\boxed{1}$	20	$\frac{1+\lambda}{2} P(121)$
12 $\boxed{1}$	11	$\frac{1-\lambda}{4} P(121)$
$\boxed{2}$ 12	22	$\frac{1+\lambda}{2} P(212)$
$\boxed{2}$ 12	22	$\frac{1-\lambda}{4} P(212)$
$\boxed{0}$ 22	02	$\frac{1-\lambda}{4} P(022)$
$\boxed{0}$ 22	12	$\frac{1+\lambda}{2} P(022)$
$\boxed{1}$ 22	12	$\frac{1+\lambda}{2} P(122)$
$\boxed{1}$ 22	12	$\frac{1-\lambda}{4} P(122)$

Tabela 4.9: Transições de um sítio no modelo de Manna parametrizado.

$$\begin{aligned}
 P(00) &= 1 + z - \zeta - s - r \\
 P(11) &= \zeta - 2z - s - u \\
 P(22) &= z - r - u.
 \end{aligned}$$

A solução estacionária do conjunto de equações (4.38) não é obtida como uma expressão simples. Ao invés disso podemos derivá-la integrando numericamente este conjunto através de um algoritmo apropriado como o de Runge-Kuta de quarta ordem [62]. Com esta integração encontramos uma transição contínua entre as fases ativa e absorvente, cuja linha crítica, nesta aproximação, isto é, $\zeta_c = f(\lambda)$ para $-1 < \lambda \leq 1$, é mostrada na figura (4.4).

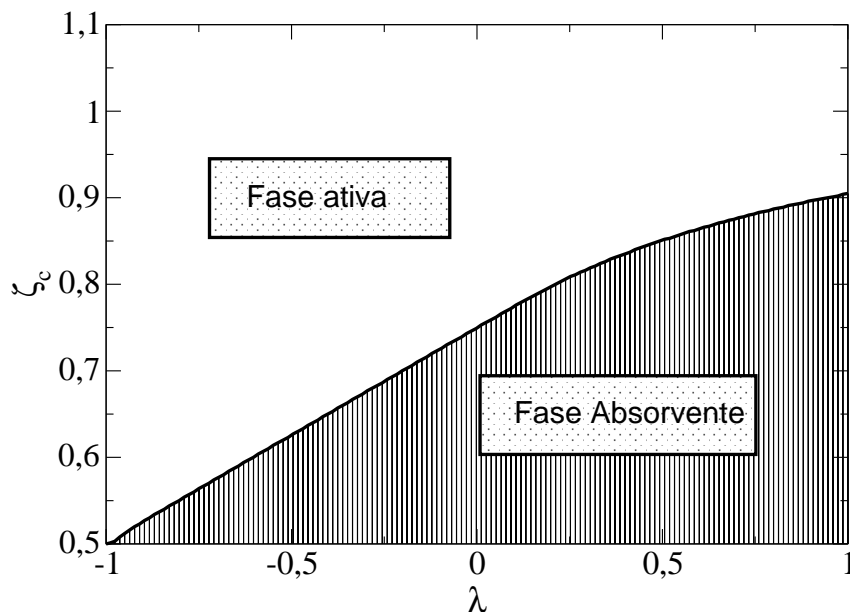


Figura 4.4: Linha crítica do modelo de Manna parametrizado.

Como no caso do modelo AB, a aproximação de pares leva a um cenário mais complexo para a criticalidade do modelo. Ao invés de um único ponto crítico temos uma linha crítica, que determina para cada valor do parâmetro uma densidade onde o sistema passa de um estado absorvente para um ativo em seu regime estacionário. Uma interessante característica deste resultado é que na vizinhança do ponto $\lambda = -1$, onde a dinâmica é frequentemente difusiva, a densidade crítica se aproxima do mesmo valor que tinha na aproximação de um sítio. Isto se deve ao fato de que a alta taxa difusiva

anula os efeitos de correlação de maneira que o comportamento crítico do sistema se aproxima daquele previsto no campo médio, no qual estas correlações inexistem.

Poderíamos analisar o sistema no outro extremo, $\lambda = 1$. Neste limite, transições em que as duas partículas deixam o sítio ativo e migram para um dos vizinhos não acontecem mais e apenas transições em que cada uma das partículas passa a cada um dos vizinhos ocorre com probabilidade unitária. Este tipo de dinâmica é a mesma que define o modelo da pilha de areia BTW, mas aqui com conservação de partículas. Ocorre que na pilha BTW conservativa e unidimensional, como já foi mostrado em [46], a transição de fases é de primeira ordem. Tomando $\lambda = 1$ nas equações (4.38) a solução estacionária mostra que a transição é descontínua em $\zeta_c = 0.91$, com um salto de $\Delta\rho_a \approx 0.02$, valores inferiores àqueles advindos das simulações em que $\zeta_c = 1$ e $\Delta = 0.15$.

4.4 Aproximação de campo médio para o modelo de três estados

Uma vez que já conhecemos o “caminho das pedras” para o cálculo de campo médio que realizamos até agora sobre estes modelos não perderemos tempo discutindo as nuances da técnica, pois isso já foi feito nos dois exemplos anteriores. Desta feita, podemos diretamente escrever as equações (4.39), que ditam a evolução das probabilidades $P(A)$ e $P(I_1)$. Admitindo uma condição homogênea para a rede e lembrando a relação de normalização, $P(A) + P(I_1) + P(I_2) = 1$, uma das probabilidades fica imediatamente determinada. Sendo assim, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(A) &= (\beta_1 - 2\beta_2)P(I_1A) + (\beta_1 - \beta_2)P(I_2A) - P(AA) \\ \frac{d}{dt}P(I_1) &= (\beta_2 - \beta_1 - 1)P(I_1A), \end{aligned} \quad (4.39)$$

cuja solução estacionária, na aproximação de campo médio em que $P(\Gamma\Delta) = P(\Gamma)P(\Delta)$ e com a adoção da notação $x \equiv P(I_1)$ e $y = P(A)$, é

$$y = \begin{cases} 0 & \text{se } \beta_1 < \beta_1^c \\ \frac{\beta_1 - \beta_1^c}{1 + \beta_1 - \beta_2} & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.40)$$

onde $\beta_1^c = \beta_2$ e na região supercrítica $P(I_1A) = 0$, ou seja não existe, no estado estacionário, uma configuração tal que dois sítios consecutivos estejam ocupados por partículas I_1 e A . Diferentemente dos modelos discutidos anteriormente, onde a aproximação de campo médio de um sítio sempre resultava num único ponto crítico para

qualquer valor do parâmetro adicional, neste caso o diagrama de fases, como mostrado na figura (4.5), exibe uma dependência linear entre os parâmetros de controle do modelo.

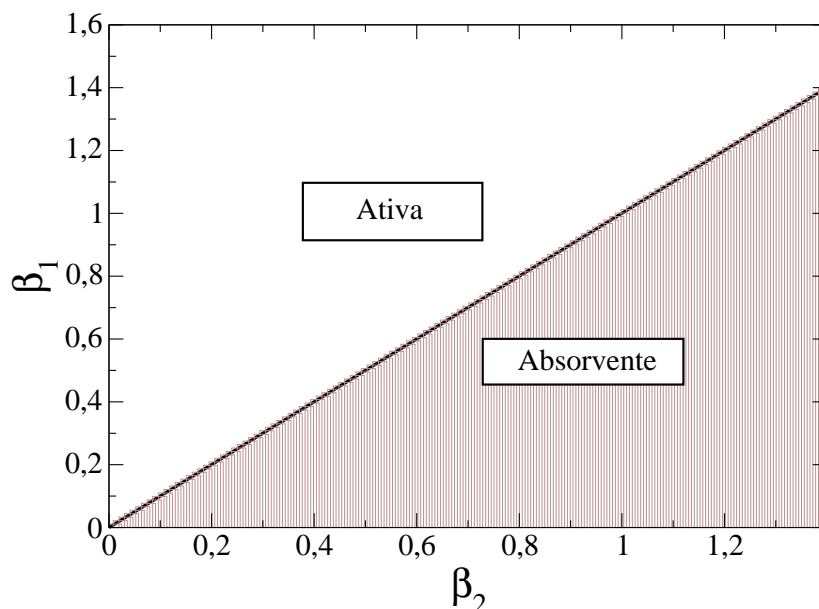


Figura 4.5: Linha crítica do modelo de três estados obtida a partir da aproximação de um sítio.

Assim como nos casos anteriores, o resultado da aproximação de campo médio exibe uma transição contínua entre um estado absorvente e um ativo com o parâmetro de ordem, na vizinhança do ponto crítico, se comportando de acordo com uma lei de escala, $y \sim (\beta_1 - \beta_1^c)^\beta$, sendo expoente $\beta = 1$ como em todos os exemplos mostrados até aqui. O expoente β/ν_{\parallel} é obtido integrando a equação para y , assumindo $\beta_1 \rightarrow (\beta_1^c)^+$, o que impõe $\beta_2 = \beta_1$ e $x = 0$, de forma que o comportamento do parâmetro de ordem será $y \sim t^{-\beta/\nu_{\parallel}}$, com $\beta/\nu_{\parallel} = 1$. Para a aproximação de pares, extraímos suas equações a partir da lista de transições de dois sítios mostrada na tabela (4.10).

Estado inicial	Estado final	Taxa
$I_1 I_1 \boxed{A}$	$I_1 A$	$\frac{\beta_1}{2} P(I_1 I_1 A)$
$I_1 I_1 \boxed{A}$	$I_1 I_2$	$\frac{1}{2} P(I_1 I_1 A)$
$I_1 I_2 \boxed{A}$	$I_1 A$	$\frac{\beta_1}{2} P(I_1 I_2 A)$
$\boxed{A} I_1 I_2$	$I_2 I_2$	$\frac{1}{2} P(A I_1 I_2)$
$\boxed{A} I_1 I_2$	$A I_2$	$\frac{\beta_1}{2} P(A I_1 I_2)$
$A I_1 \boxed{A}$	$A I_2$	$\frac{1}{2} P(A I_1 A)$
$A I_1 \boxed{A}$	AA	$\frac{\beta_1}{2} P(A I_1 A)$
$\boxed{A} A I_1$	$I_2 I_1$	$\frac{1}{2} P(A A I_1)$
$A I_1$	$I_2 I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(A I_1)$
$A I_1$	$A I_2$	$\frac{1}{2} P(A I_1)$
$A I_1$	AA	$\frac{\beta_1}{2} P(A I_1)$
$A I_1$	$I_1 I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(A I_1)$
$\boxed{I_1} A I_1$	$I_1 I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_1 A I_1)$
$\boxed{I_1} A I_1$	$I_2 I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_1 A I_1)$
$\boxed{I_2} A I_1$	$I_2 I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_2 A I_1)$
$A I_2 \boxed{A}$	AA	$\frac{\beta_1}{2} P(A I_2 A)$
$\boxed{I_1} A I_2$	$I_2 I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_1 A I_2)$
$\boxed{I_1} A I_2$	$I_1 I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_1 A I_2)$
$\boxed{I_2} A I_2$	$I_2 I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_2 A I_2)$
$\boxed{A} A I_2$	$I_2 I_2$	$\frac{1}{2} P(A A I_2)$
$A I_2$	$I_2 I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(A I_2)$
$A I_2$	AA	$\frac{\beta_1}{2} P(A I_2)$
$AA \boxed{I_1}$	$A I_1$	$\frac{\beta_2}{2} P(A A I_1)$
$AA \boxed{I_1}$	$A I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(A A I_1)$
$AA \boxed{I_2}$	$A I_2$	$\frac{\beta_2}{2} P(A A I_2 A)$
$I_2 I_2 \boxed{A}$	$I_2 A$	$\frac{\beta_2}{2} P(I_2 I_2 A)$
AA	$A I_2$	$\frac{1}{2} P(AA)$
$\boxed{A} AA$	$A I_2$	$\frac{1}{2} P(AAA)$

Tabela 4.10: Transições de pares para o modelo de três estados.

Com isso, o conjunto de equações que determinam as propriedades estacionárias do modelo é

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}x &= (\beta_2 - 1 - \beta_1)r \\
 \frac{d}{dt}y &= (\beta_1 - 2\beta_2)r + (\beta_1 - \beta_2)s - (y - r - s) \\
 \frac{d}{dt}r &= \frac{\beta_1}{2} \left[\frac{r(x - r - u)}{x} + \frac{us}{1 - x - y} - \frac{r^2}{x} - r \right] + \\
 &+ \frac{\beta_2}{2} \left[\frac{(y - r - s)r}{y} - 2r - 2\frac{r^2}{y} - \frac{s^2}{y} \right] + \\
 &- \frac{1}{2} \left[\frac{r^2}{x} + \frac{r(y - r - s)}{y} + r \right] \\
 \frac{d}{dt}s &= \frac{1}{2} \left[\frac{r^2}{x} + (y - s) - \frac{s(y - r - s)}{y} + \frac{(y - r - s)^2}{y} \right] + \\
 &+ \frac{\beta_1}{2} \left[2\frac{s(1 - x - y - u - s)}{1 - x - y} - \frac{s^2}{1 - x - y} - s \right] + \\
 &+ \frac{\beta_2}{2} \left[\frac{r(y - r - s)}{y} + \frac{s(y - r - s)}{y} - 2\frac{rs}{y} - \frac{s^2}{y} - s \right] \\
 \\
 \frac{d}{dt}u &= \frac{1}{2} \left[\frac{r(x - u - r)}{x} + \frac{r(y - r - s)}{y} - \frac{ru}{x} \right] + \\
 &+ \frac{\beta_2}{2} \left[r + \frac{r^2}{y} + 2\frac{rs}{y} \right] - \frac{\beta_1}{2} \left[\frac{su}{1 - x - y} + \frac{ru}{x} \right], \tag{4.41}
 \end{aligned}$$

onde adotamos a notação $r \equiv P(I_1A)$, $s \equiv P(I_2A)$ e $u = P(I_1I_2)$, além das relações

$$\begin{aligned}
 P(I_1I_1) &= x - u - r \\
 P(I_2I_2) &= 1 - x - y - u - s \\
 P(AA) &= y - r - s.
 \end{aligned}$$

Este conjunto de equações possui como solução estacionária uma transição contínua entre um estado absorvente ($y = 0$) e outro ativo, separados por uma linha crítica determinada pela expressão (4.42) e ilustrada pela figura (4.6).

$$\beta_1^{(c)} = \frac{1}{6} \left[5\beta_2 - 1 + \sqrt{\beta_2^2 + 38\beta_2 + 1} \right]. \tag{4.42}$$

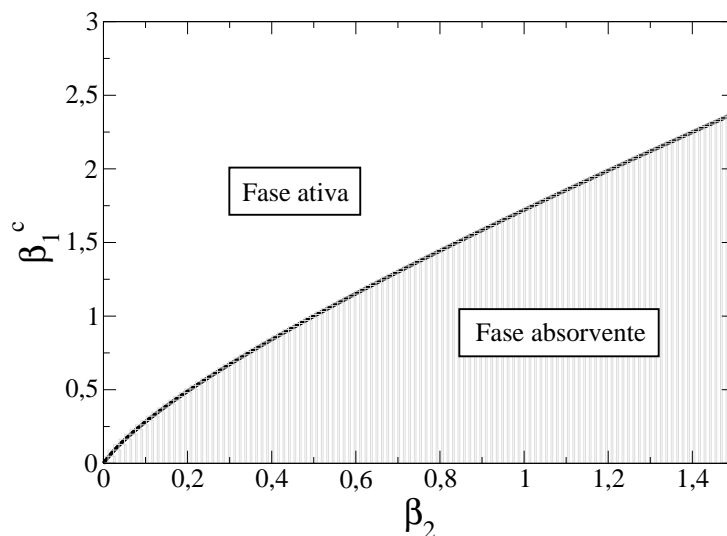


Figura 4.6: Linha crítica do modelo de três estados obtida a partir da aproximação de pares.

No limite em que o parâmetro $\beta_2 \rightarrow 0$, o valor do ponto crítico β_1^c também tende a zero, uma vez que o parâmetro β_2 é responsável pela aniquilação de partículas ativas, de maneira que a região supercrítica é maior para este regime. Por outro lado, se o limite válido é o de alta aniquilação de partículas ativas, a linha crítica torna-se linear, pois $\beta_1^c \rightarrow \beta_2$, se $\beta_2 \rightarrow \infty$.

É importante salientar que este modelo não é baseado em nenhuma outra motivação que não seja a de se estudar um caso cujas regras dinâmicas sejam similares àquelas da pilha de areia de Manna com restrição de altura, mas sem conservação de partículas. Esta comparação torna-se importante quando lembramos que as propriedades críticas do modelo de Manna são geralmente creditados à lei de conservação introduzida pela constância no número de partículas, de modo que este modelo com estados absorventes não respeita os critérios da conjectura PD.

Capítulo 5

Simulações numéricas

Como destacamos nos capítulos anteriores, a solução da equação mestra para modelos de rede, como aqueles apresentados no capítulo 3, não é uma tarefa sempre factível. De fato, as grandes dificuldades encontradas para obter soluções intensificam a procura de técnicas aproximativas como aquela discutida no capítulo 4. Neste capítulo, entretanto, discutiremos uma técnica usual para o estudo das propriedades de interesse destes modelos, em particular a caracterização de suas propriedades críticas.

As simulações numéricas se propõem a implementar em um modelo computacional as regras dinâmicas de cada sistema em particular e medir as grandezas de interesse. Isto se dá como, no caso do PC, se acompanhássemos a evolução da configuração da rede imitando as regras do modelo e contando como evolui o número de indivíduos doentes, por exemplo. Esta técnica possui algumas limitações, como a impossibilidade de efetuarmos a dinâmica numa rede realmente infinita, onde ocorre de fato a caracterização das transições de fases. Ainda assim é possível estimar o comportamento crítico de cada modelo a partir da evolução das grandezas, levando-se em conta, por exemplo, como cada uma delas se comporta como função do tamanho da rede. Além disso, as simulações não permitem observar aspectos gerais da solução, mas apenas ter informações específicas para valores dados dos parâmetros de um determinado modelo.

Modelos de rede são apropriados para abordagem de simulações, pois nestes o espaço já é uma variável discreta e o tempo pode ser facilmente computado como tal, tornando natural o emprego desta técnica, o que não aconteceria para um sistema contínuo.

Adiante, estudaremos, usando simulações numéricas, o comportamento de cada um dos modelos descritos no capítulo 3 e caracterizaremos as transições de fases absorventes para ativas, que já foram qualitativamente analisadas no cálculo de campo médio. Estas simulações abordarão sempre a determinação do comportamento crítico através da estimativa dos expoentes críticos dinâmicos e/ou estáticos para cada um dos casos. Algumas estratégias são imprescindíveis para que a análise seja bem-sucedida,

como veremos a seguir.

5.1 Simulações numéricas de grandezas dinâmicas

Observe que a dinâmica do processo de contato, descrita no capítulo 2, estabelece que devemos sortear um sítio e executar sobre ele as regras do modelo. Entretanto, se seguirmos esta instrução literalmente, correremos o risco de executar diversas vezes uma operação inútil. Como um sítio vazio só pode se tornar ocupado se ao menos um dos vizinhos também estiver ocupado, então o sorteio de um sítio vazio com vizinhos vazios não contribui para a dinâmica, o que nos forçaria a sortear outro sítio até que encontrássemos uma possibilidade de realizar uma transição. Desta forma, seria muito mais econômico se sorteássemos um sítio ocupado, escolhendo em seguida se devemos realizar a dinâmica de criação em um de seus vizinhos ou sua aniquilação espontânea, com cada processo ocorrendo segundo a probabilidade determinada pelas regras do modelo. Assim, para tornarmos a simulação menos dispendiosa temporalmente, podemos manter uma lista de sítios ocupados, também chamados de ativos, e escolhermos entre estes qual será usado para a atualização naquele passo de tempo. Lembrando que o tempo neste tipo de processo ocorre em passos discretos, equivalentes cada um a uma atualização da rede. A escala de tempo fica coerentemente definida se impormos que cada passo temporal é igual a $\Delta t = 1/N_{ativos}$, sendo N_{ativos} o número de sítios ativos em cada passo de tempo [63].

Se o sistema evolui de um tempo inicial até um tempo t_{max} , podemos acompanhar o comportamento de uma determinada grandeza dentro deste intervalo de tempo, mas para esta medida fazer sentido é necessário repetir o processo, neste mesmo intervalo de tempo, uma certa quantidade de vezes, num processo similar àquele discutido na introdução do capítulo 2. Se, para um dado tempo t , esta grandeza, na i -ésima repetição tiver o valor $c_i(t)$, então seu valor médio para este mesmo instante será dado por

$$\langle c(t) \rangle = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} c_i(t), \quad (5.1)$$

onde N_r é o número de repetições efetuadas

Na simulação de grandezas dinâmicas geralmente utilizamos como condição inicial uma configuração em que uma partícula ativa se encontra na origem do sistema e todo o restante da rede é inativa (vazia no caso do PC). Esta condição evita que a simulação sofra de efeitos de tamanho finito, pois teremos uma rede de tamanho L com apenas uma partícula, de modo que a atividade pode nunca alcançar toda a rede, o que originaria possíveis prejuízos para a estimativa de valores como o ponto crítico e os expoentes. Obviamente, asseguramos também uma condição de contorno, de modo

a definir como a dinâmica se processa nas bordas do sistema. Em nossas discussões restringiremos as simulações a casos unidimensionais com uma rede de tamanho L e condições de contorno periódicas, ou seja, um anel.

Calculado o valor médio de uma certa grandeza, em função do tempo, podemos usar os aspectos discutidos na teoria de escala para sistemas com estados absorventes, abordada no capítulo 2, para determinar o ponto crítico e o expoente associado a esta grandeza. Na figura (5.1), mostramos como se comporta uma destas médias para um modelo cujo parâmetro de controle é a variável p . Vemos que para $p < p_c$, o logaritmo natural da média tende a diminuir para valores altos de t , ocorrendo o oposto para $p > p_c$. Entretanto, no ponto crítico, $p = p_c$, este não possui concavidade.

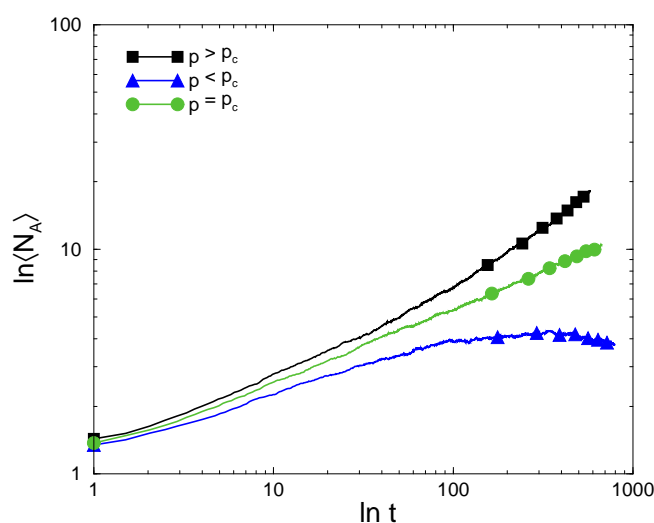


Figura 5.1: Ilustração do comportamento da média de uma grandeza dinâmica obtida através de uma simulação numérica.

Portanto, lembrando que no ponto crítico as grandezas possuem um comportamento de lei de potência, a inclinação da curva sem concavidade define o valor numérico do expoente crítico associado a esta grandeza.

Entretanto, este método pode não ser muito seguro visto que uma má determinação do ponto crítico pode ocasionar valores muito pouco precisos para os expoentes. Uma forma de obtermos uma estimativa mais acurada pode ser adotar o algoritmo sugerido por Grassberger e De La Torre em [8], onde as médias de três grandezas dinâmicas são calculadas, como poderia ser para o número médio de partículas, $N(t)$, a probabilidade de sobrevivência, $P_s(t)$ e o espalhamento de partículas, $R^2(t)$. Se para um dado valor do parâmetro de controle, p , usarmos a interpolação

$$\begin{aligned}
\ln N(t) &= \theta_0 + \theta_1 \ln t + \theta_2 \ln^2 t \\
\ln P_s(t) &= \delta_0 + \delta_1 \ln t + \delta_2 \ln^2 t \\
\ln R^2(t) &= 2/z_0 + 2/z_1 \ln t + 2/z_2 \ln^2 t,
\end{aligned} \tag{5.2}$$

então o valor de p que minimize a soma $|\theta_2| + |\delta_2| + |2/z_2|$, será o ponto crítico e os respectivos termos lineares seus expoentes. Com esta maneira de calcularmos o ponto crítico as flutuações das estimativas para os expoentes tornam-se menores.

Um problema que podemos encontrar nestas simulações é a presença de flutuações estatísticas induzidas pela existência do estado absorvente. Nas simulações, uma certa repetição é encerrada, iniciando outra, se o sistema cai num estado absorvente. Deste modo, em tempos longos, onde a probabilidade disto ocorrer torna-se maior, a estatística é piorada, pois temos um tamanho de amostras menores dado que o sistema pode cair muitas vezes no estado absorvente. Vale lembrar que em sistemas finitos, o único e verdadeiro estado estacionário é absorvente. Por outro lado, é o comportamento de tempos longos, para uma certa grandeza, que sinaliza qual a sua concavidade e, portanto, se o sistema está ou não no ponto crítico. Para minimizar estas flutuações podemos redefinir a escala de tempo, separando-o em intervalos iguais, cuja distância pode ser tipicamente logarítmica, como por exemplo \log_2 , adotada em [31]. Dentro de cada janela de comprimento logarítmico somamos todos os valores da grandeza, por exemplo $N(t)$, cujo valor de t esteja compreendido no intervalo desta janela. Depois dividimos a soma total pelo número de casos que caem dentro de cada uma das janelas. Com isso, teremos flutuações menores e uma estimativa menos imprecisa das curvas mostradas na figura (5.1).

Com o intervalo de tempo igualmente espaçado também podemos calcular os expoentes críticos usando a determinação de inclinações locais para a curva cujo valor de p se aproxima do ponto crítico. Estas inclinações locais são definidas como,

$$\theta(t) = \ln[N(t)/N(t/b)] / \ln b, \tag{5.3}$$

onde b é um número inteiro e positivo. O mesmo pode ser feito para as demais grandezas e seus respectivos expoentes.

Sobre as grandezas dinâmicas típicas calculadas em nosso estudo, deve-se dizer que a determinação da probabilidade de sobrevivência é feita a partir da contagem de quantas vezes o sistema entra no estado absorvente, ou seja calculamos a probabilidade de que o sistema “morra” e P_s é dada como a probabilidade complementar. Já para a grandeza R^2 é necessário ter algum cuidado visto que esta grandeza corresponde à média de x^2 , sendo x a localização de uma partícula gerada num instante de tempo

em relação à origem. Entretanto, como usamos condições de contorno periódicas esta distância tem uma definição dúbia, de modo que usamos a menor distância num sentido ou noutro para realizar o cálculo. Finalmente, o cálculo do número de sítios ativos é simplesmente a contagem, para um certo passo da simulação, do número de sítios ocupados, o que é trivialmente realizado.

5.2 Simulações numéricas de grandezas estáticas

Para a determinação de grandezas estáticas, isto é, aquelas que são calculadas em tempos longos, escolhamos como condição inicial uma rede preenchida aleatoriamente, de modo a termos uma configuração inicial uniforme e espacialmente decorrelacionada. A evolução de uma grandeza qualquer como o parâmetro de ordem ocorre com esta evoluindo a partir de um transiente e saturando para um valor limite que dependerá do parâmetro de controle e do tamanho do sistema, como mostra a figura (5.2).

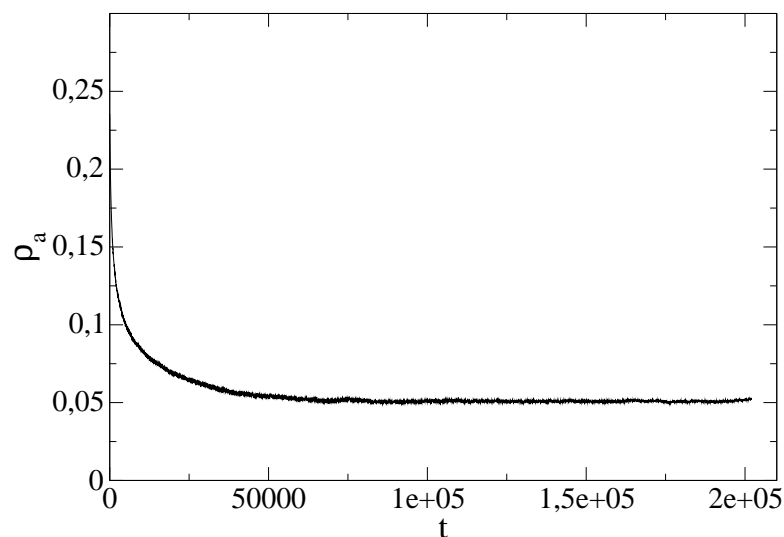


Figura 5.2: Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem para tempos longos para um certo tamanho de rede. A figura corresponde ao modelo de Manna parametrizado.

Se variarmos o valor do parâmetro de controle, p , mantendo fixo o tamanho da rede, obteremos a dependência $\rho(p)$. Para cada tamanho diferente a curva vai se aproximando do comportamento do parâmetro de ordem no limite termodinâmico, nulo para valores abaixo do ponto crítico e diferente de zero na região supercrítica, como mostra a figura (5.3), extraída também do problema da pilha de areia de Manna

parametrizada. Fixando um valor do parâmetro de controle e colecionando os valores de ρ para tamanhos distintos, encontraremos um comportamento semelhante àquele da figura (5.1), isto é concavidades opostas para as regiões fora da criticalidade, enquanto na vizinhança do ponto crítico esta grandeza é relacionada com o tamanho do sistema através de uma lei de escala, como discutimos na seção 2.5.1.

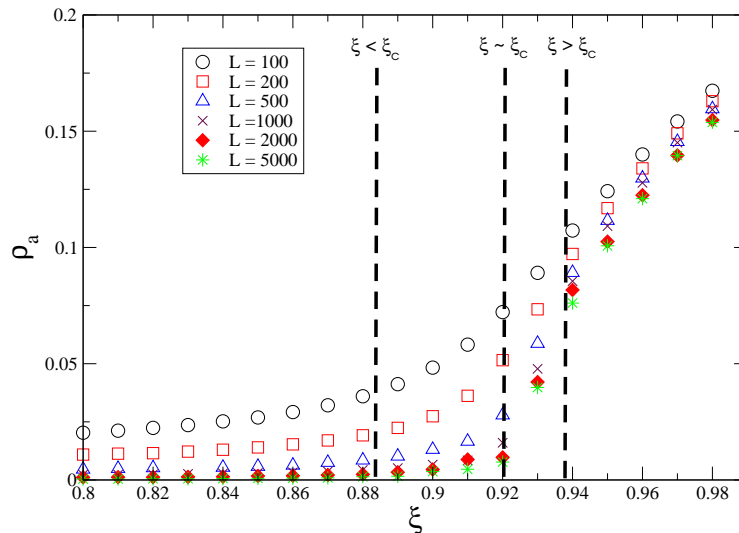


Figura 5.3: Ilustração do comportamento do parâmetro de ordem como função do parâmetro de controle com tamanho fixo. Observe como as curvas se arranjam para valores distintos das regiões sub e supercríticas e na vizinhança do ponto crítico.

Outra grandeza que apresenta escala para tamanhos finitos é o tempo de sobrevivência, τ . Esta quantidade é medida a partir da probabilidade de sobrevivência do estado estacionário, P_∞ , cuja dependência com τ espera-se que seja

$$P_\infty \sim \exp(-t/\tau), \quad (5.4)$$

com este tempo apresentando a seguinte lei de escala na vizinhança do ponto crítico,

$$\tau \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}. \quad (5.5)$$

Assim como no caso do parâmetro de ordem, o ponto crítico e o expoente são estimados através da análise do comportamento de curvas $\ln \tau$ vs. $\ln L$, com o ponto crítico determinado para o valor do parâmetro de controle que fazem as curvas se aproximarem ao ajuste de uma reta, sendo a inclinação desta o valor da razão $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$.

Um problema a ser superado nas simulações de tamanho finito são os efeitos do estado absorvente. Enquanto nas simulações dinâmicas este efeito é menor e pode ser minimizado adotando-se uma reescala temporal, com vistas a diminuir flutuações estatísticas em tempos longos, o caso estático pode ser um pouco mais dramático.

Nestas simulações, estamos interessados em obter informações a respeito do estado estacionário, porém o único estado estacionário de um sistema finito, que possua um estado absorvente, é este último. Desta maneira, determinamos um estado que é chamado de *estado quase-estacionário*. Este estado se aproxima tanto mais do estado estacionário de um sistema infinito, quanto maior for o tamanho da rede. Apesar disso, os efeitos de flutuação do estado absorvente podem comprometer a determinação do estado quase-estacionário. Quando calculamos o valor do parâmetro de ordem do modelo para um certo valor do parâmetro de controle, a simulação é efetuada até um tempo máximo t_{max} . Se este tempo for muito maior que o tempo de relaxação da grandeza, quando seu valor atravessa uma região transiente e satura em torno de uma média, podemos escolher como valor quase-estacionário para este parâmetro de ordem, o valor médio entre um tempo t_1 e t_2 , sendo $t_{trans} < t_1, t_2 < t_{max}$, onde t_{trans} é o tempo em que o transiente perde efeito.

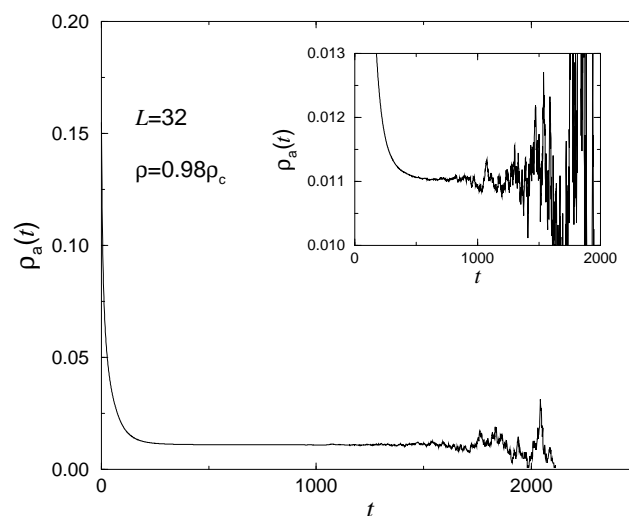


Figura 5.4: Flutuação do estado quase-estacionário do parâmetro de ordem, devido à presença do estado absorvente [64].

Para valores do parâmetro de controle próximos do ponto crítico, entretanto, o sistema pode alcançar o estado absorvente diversas vezes. Como discutido no caso da simulação de quantidades dinâmicas, o cálculo das grandezas estáticas se dá como

uma média em diversas repetições do sistema. Desta forma, em tempos longos, quando o sistema cai muitas vezes no estado absorvente, esta média irá ser prejudicada por flutuações originadas da pobreza de estatística, o que gera grande oscilação no cálculo desta quantidade, como atesta a figura (5.4). Estas flutuações claramente se refletem numa má estimativa do valor do parâmetro de ordem, pois a média terá um grande desvio associado.

Para superar este problema, Dickman e Oliveira [65] estabeleceram um método de procura do estado estacionário que evita que o sistema caia no estado absorvente. A estratégia consiste em guardar uma lista das últimas configurações anteriores ao passo em que o sistema alcança o estado estacionário. Se isso ocorrer, ao invés de iniciar uma nova repetição, continuamos a simulação escolhendo uma das configurações, guardadas no reservatório de configurações, para dar prosseguimento à simulação. Manter um reservatório muito grande pode não ser sensato. Isto poderia permitir à simulação continuar a dinâmica a partir de uma configuração completamente decorrelacionada daquela anterior à entrada do sistema no estado absorvente.

Este método foi implementado no PC [66] e se mostrou bastante funcional, resultando em valores tão precisos quanto os da forma usual de simulação e com a vantagem adicional de evitar ambiguidades no cálculo de grandezas pertinentes ao modelo em redes finitas. Entretanto, o trabalho [66] sugere que uma correção de escala nas grandezas estáticas é necessária para estimar precisamente os expoentes críticos. Adiante utilizaremos este método e encontraremos a mesma necessidade, induzindo-nos a pensar que esta correção é uma característica intrínseca que emerge deste método.

A partir de agora, estudaremos os modelos discutidos no capítulo 3 do ponto de vista das simulações numéricas.

5.3 Simulações no modelo AB

No modelo AB, apresentado na seção 3.1, realizamos simulações com vistas apenas à determinação dos expoentes dinâmicos do modelo. Os resultados, sumarizados no trabalho [67], são obtidos através de uma simulação do modelo em uma rede unidimensional de L sítios, inicialmente ocupada por uma única partícula A , localizada na origem da rede. Também mantemos uma lista de sítios ocupados por partículas A que é sempre atualizada quando uma nova partícula A é adicionada ao sistema ou uma destas partículas é removida. O processo de simulação dá-se da seguinte maneira:

1. Sorteamos aleatoriamente um sítio da lista de sítios ativos.
2. Escolhemos um número aleatório p , localizado no intervalo $[0, 1]$, obtido através de uma distribuição uniforme.

3. Se este número p for menor do que p_a , uma partícula B de um dos primeiros vizinhos do sítio escolhido é trocada por uma partícula A . Caso contrário, esta partícula ativa pode ser transformada em uma partícula do tipo B espontaneamente ou através do contato com uma partícula B , que seja sua primeira vizinha.
4. Sorteamos um novo número aleatório q . Se $q < p_c/1 - p_a$, então a partícula A se transforma em B independentemente de sua vizinhança, caso contrário se transformará em B com uma probabilidade proporcional ao número de primeiros vizinhos B .
5. Cada passo de tempo equivale a $\Delta t = 1/N_A$, onde N_A é o número de sítios ativos. O processo é repetido até que se alcance um valor de t_{max} ou que o sistema atinja um estado absorvente, onde não exista nenhuma partícula A ocupando a rede. Se isso ocorre, então uma nova repetição é iniciada.
6. Um número N_r de repetições é efetuado e ao final delas calculamos médias dos valores de cada grandeza em função do tempo, sendo que este fica escalado, ao final da simulação, usando-se intervalos logarítmicos igualmente espaçados.

As simulações realizadas para este modelo usaram $L = 10000$ sítios, com um tempo máximo de $t_{max} = 100000$ e $N_r = 10000$ repetições. O número de sítios é suficientemente alto para garantir que nenhum aglomerado de partículas A irá se propagar ao longo de toda a rede, o que acarretaria efeitos de tamanho finito.

Através das simulações do modelo AB, para as quantidades dinâmicas $N(t)$, $P_s(t)$ e $R^2(t)$, encontramos uma região no plano (p_a, p_c) , onde a atividade de partículas A persiste. A existência desta região ativa corrobora o resultado de campo médio encontrado na seção 4.2, mostrando que esta não era um artefato originado da aproximação. Utilizamos as estratégias delineadas na seção 5.1, para a determinação do ponto crítico bem como dos expoentes associados às grandezas relacionadas acima. Isso nos possibilitou estimar a linha crítica do modelo, mostrada na figura (5.5).

Observe que esta linha crítica possui a mesma concavidade obtida a partir da aproximação de pares, o que atesta o sucesso qualitativo do cálculo de campo médio. Por outro lado, os resultados das simulações apontam para uma região ativa menor do que aquela do campo médio. Isto também não é surpreendente visto que, mesmo em problemas de equilíbrio termodinâmico, o campo médio tem o efeito de superestimar a região supercrítica.

A título de comparação podemos estimar o valor crítico do parâmetro λ do PC através de nossos resultados, desde que recordemos que este parâmetro guarda a relação $\lambda = p_a/(1 - p_a)$ com os parâmetros do modelo AB e que o PC é alcançado no limite $p_b \rightarrow 0$. Como vemos na figura (5.6), o valor de λ alcança um valor limite $\lambda =$

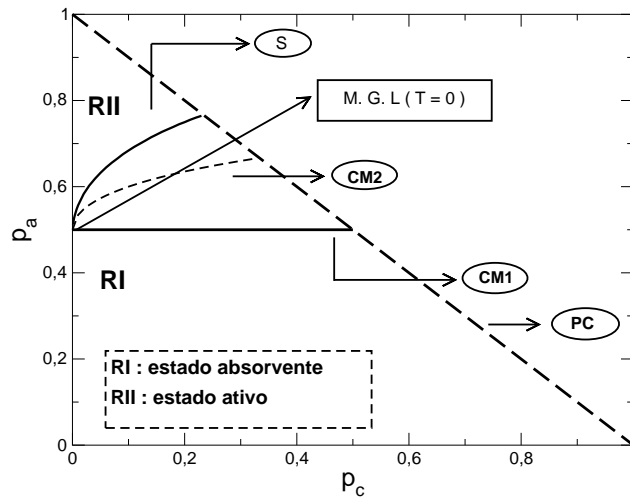


Figura 5.5: Diagrama de fases do modelo, mostrando estimativas para a linha de transição entre estados absorvente e ativo, na aproximação de campo médio de um (CM1) e dois (CM2) sítios e simulações (S). Na linha $p_a + p_c = 1$ o modelo corresponde ao processo de contato (PC) e ao modelo do votante (MGL), que é recuperado no ponto ($p_a = 1/2, p_c = 0$).

3.2945 ± 0.0116 , concordando muito bem com o ponto crítico do PC unidimensional estimado em [10].

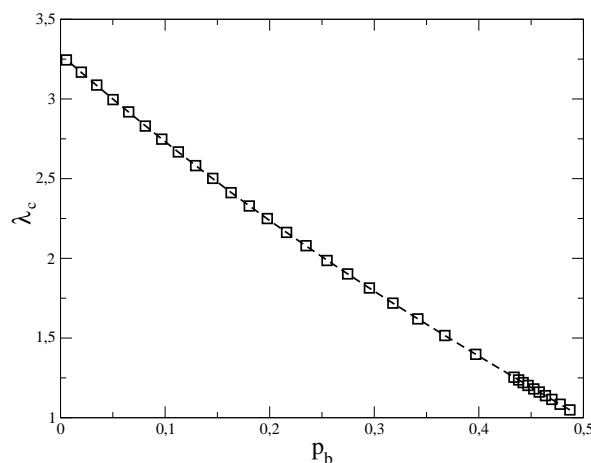


Figura 5.6: Valores críticos de $\lambda = p_a / (1 - p_a)$ como função de p_b . A curva tracejada é um ajuste de um polinômio de quinto grau aos pontos obtidos nas simulações.

Usando as relações de escala mostradas em (2.61) podemos calcular os expoentes dinâmicos θ , δ e $2/z$, ao longo de toda a linha crítica, ou melhor, como uma função do parâmetro p_c . O comportamento destes expoentes ao longo da linha são mostrados na figura (5.7). Para a região próxima ao limite do PC, onde $p_c \approx 0.22$, os expoentes possuem valores próximos àqueles da classe PD. Entretanto, à medida que a taxa p_c diminui, se aproximando do ponto em que o modelo AB é identificado com o modelo do votante, este desvio aumenta, como mostra a figura (5.8) com o erro relativo dos expoentes do modelo AB comparados com os mesmos da classe PD.

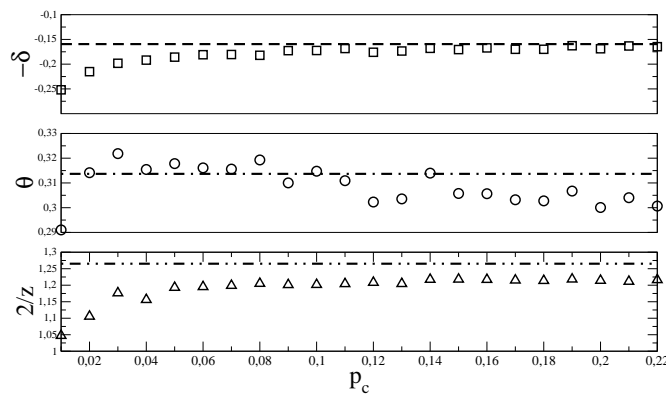


Figura 5.7: Expoentes críticos dinâmicos como função da taxa p_c . As linhas tracejadas indicam os valores destes expoentes para a classe PD.

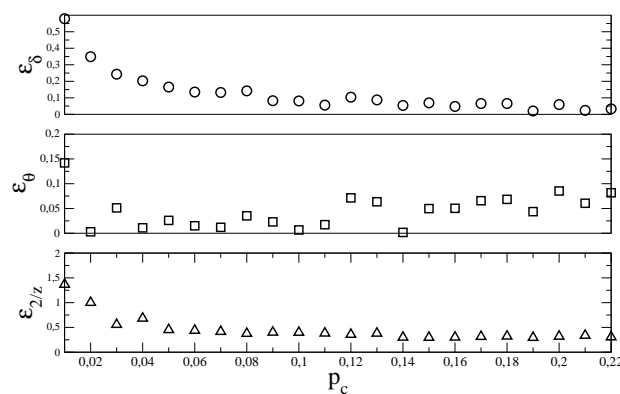


Figura 5.8: Erros relativos das estimativas dos expoentes críticos dinâmicos, quando comparados com seus valores da classe PD.

Este desvio também é manifesto na relação de hiperescala que define o vínculo entre os expoentes dinâmicos, como mostrada em (2.68). Novamente, a hiperescala é satisfeita razoavelmente bem na vizinhança do ponto em que o modelo AB se aproxima do PC, mas esta concordância fica cada vez pior para valores menores de p_c , como podemos ver através da figura (5.9).

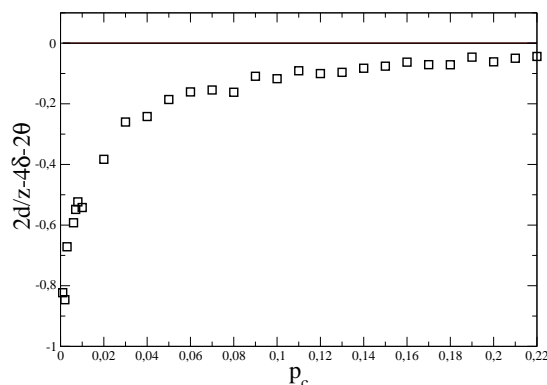


Figura 5.9: Verificação da relação de hiperescala para os expoentes críticos dinâmicos. A linha cheia marca o valor nulo que a soma $2d/z - 4\delta - 2\theta$ deveria satisfazer.

Todos estes indícios apontam para uma mudança de comportamento dos expoentes críticos na vizinhança da linha $p_c = 0$, em que o modelo possuirá dois estados absorventes, uma rede cheia de partículas A ou B , que são simétricos, uma vez que se trocamos A por B a dinâmica continua idêntica ao longo desta linha. Este fato impõe ao modelo uma simetria proibida pela conjectura PD para as características de um sistema que pertença a esta classe. Desta forma, ao longo da linha $p_c = 0$, temos um modelo cujos expoentes críticos não necessariamente pertencem à classe PD. De fato, ao longo desta linha o comportamento crítico é o mesmo da percolação direcionada compacta, cujos expoentes são $\theta_s = 0$, $\delta_s = 1/2$ e $2/z_s = 1$, com a relação de hiperescala sendo $\delta_s + \theta_s = d/z_s$ [68].

A rigor, esta tendência dos expoentes para valores distintos de PD ao longo da linha, especialmente para valores de $p_c \rightarrow 0$, pode ser visto como um artefato numérico do processo de simulação e não como uma perda de universalidade do modelo. Realmente, o mais sensato seria esperarmos que os expoentes, dadas as simetrias do modelo AB, tivessem os mesmos valores da classe PD ao longo de toda a linha crítica, exceto em $p_c = 0$. Entretanto, isto não ocorre pois numericamente esta mudança de comportamento nos valores destes expoentes deve ficar assinalada por uma tendência como aquela mostrada na figura (5.7) e não por uma mudança abrupta como seria no caso de uma solução exata.

Para verificarmos esta tendência dos expoentes, utilizamos uma extrapolação cúbica dos pontos na região em que $p_c \approx 0$, para determinar seus valores no ponto $p_c = 0$. Esta extrapolação é ilustrada na figura (5.10) para o expoente δ . Este ajuste indica que os expoentes assumirão os seguintes valores em $p_c = 0$: $\delta = 0.44$, $\theta = 0.07$ e $2/z = 0.01$, portanto com um desvio de apenas 0.5% da relação de hiperescala. Desta forma, podemos aceitar que os desvios nos valores dos expoentes críticos dinâmicos ao longo da linha crítica do modelo AB são apenas um reflexo desta interseção entre duas classes de universalidade distintas, a classe PD que domina toda a linha e a classe PDC, presente unicamente no ponto $p_c = 0$.

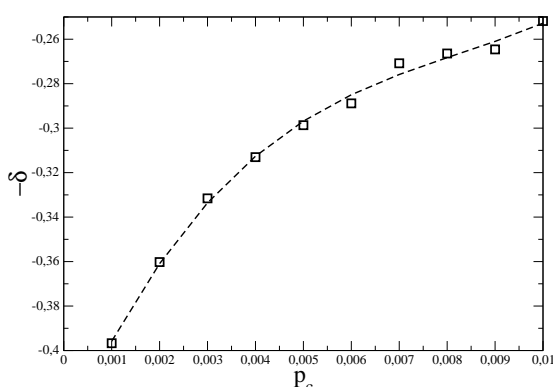


Figura 5.10: Limite para $p_c = 0$ do expoente dinâmico δ .

Esta situação em que duas classes de universalidade se interceptam é bastante similar àquilo que ocorre no autômato celular de Domany-Kinzel que, como discutimos na seção 2.8.2, possui um ponto em que sua dinâmica reproduz àquela da PDC, enquanto que o restante da linha crítica é da classe PD. Portanto, assim como no caso DK existe um ponto onde se dá esta interseção de classes que podemos, inspirados no que ocorre no regime de equilíbrio termodinâmico, chamar de *ponto multicrítico*. No modelo AB este ponto encontra-se em $p_a = 1/2$ e $p_c = 0$. Novamente, usando o que sabemos do comportamento de sistemas em equilíbrio, podemos afirmar que, na vizinhança deste ponto, qualquer densidade estacionária pode exibir o seguinte comportamento,

$$g(p_a - 1/2, p_c) \sim (p_a - 1/2)^{e_g} F\left(\frac{p_c}{|p_a - 1/2|^\phi}\right). \quad (5.6)$$

O expoente crítico associado com a variável g , e_g , poderia pertencer à classe PDC e a função de escala $F(z)$ é singular para um valor z_0 de seu argumento, que corresponde à linha crítica próxima ao ponto multicrítico. Então, na vizinhança deste ponto, a

linha crítica se comporta como $p_c = z_0(p_a - 1/2)^\phi$, sendo ϕ chamado de expoente de “crossover”.

A partir dos resultados obtidos com a simulação numérica para a linha crítica, realizamos um ajuste dos pontos numa região tão próxima do ponto multicrítico quanto nossos dados permitiram para estimar o valor deste expoente ϕ . Uma maneira de estimar o valor da amplitude z_0 e do expoente ϕ é definirmos uma variável $y = \ln p_c$ e outra $x = \ln(p_a - 1/2)$, de forma que teremos a relação $y = A + \phi x$, sendo $A = \ln z_0$. Assim, o valor de z_0 é extraído do coeficiente linear da reta e ϕ de sua inclinação. Os valores que obtivemos através deste ajuste foram $z_0 = 0.47 \pm 0.08$ e $\phi = 1.80 \pm 0.03$. É interessante notar que este mesmo expoente, obtido através da aproximação de campo médio de pares, vale $\phi = 2$ para o modelo AB, bem como para o DK.

Voltando a atenção para a região próxima a este ponto multicrítico, realizamos simulações em que a condição inicial contempla uma ou duas partículas A na rede com todos os demais sítios ocupados por partículas B , verificamos que, mesmo em tempos longos, o valor médio do número de partículas mantém-se no valor inicial, como podemos ver na figura (5.11).

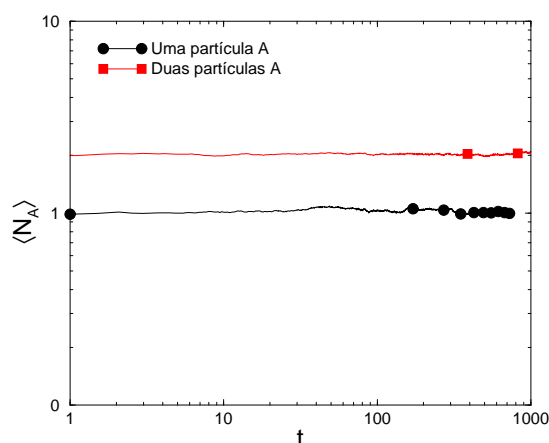


Figura 5.11: Resultados da simulação para o número médio de partículas A como uma função do tempo, sobre o ponto $p_a = 1/2$ e $p_c = 0$. Os pontos apenas marcam a diferença entre as duas condições iniciais

A dispersão em torno destes valores médio é realmente pequena, como vista na figura (5.12). Sobre o ponto multicrítico, a média se concentra em torno do valor inicial, enquanto que um pequeno desvio deste ponto leva o sistema para um dos dois estados absorventes da linha $p_c = 0$.

Então estes resultados parecem corroborar as conclusões apresentadas no apêndice A de que, sobre o ponto multicrítico, o modelo depende fortemente da condição inicial, sendo esta em média mantida até o estado estacionário. Por outro lado, o modelo do

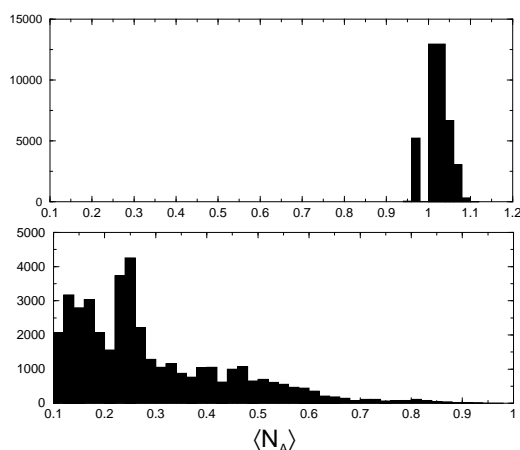


Figura 5.12: Histogramas do valor médio do número de partículas A. A figura de cima corresponde ao modelo do votante ($p_a = 1/2, p_c = 0$) e a outra se refere a um ponto ligeiramente abaixo deste ($p_a = 0.49, p_c = 0.001$), onde o estado absorvente $\langle N_A \rangle = 0$ é estável.

votante com tendência, que corresponde ao modelo AB com $p_c = 0$, leva o sistema a duas soluções estáveis correspondentes a dois estados absorventes simétricos, com a rede completamente preenchida por qualquer uma das duas espécies.

5.4 Simulações no modelo de Manna parametrizado

A simulação do modelo discutido na seção 3.2 se concentrou na determinação de sua linha crítica, bem como de seus expoentes estáticos, β , β/ν_\perp e ν_\parallel/ν_\perp . O modelo da pilha de areia de Manna tem atraído grande atenção devido ao fato de que a determinação de sua universalidade, especificamente no caso unidimensional, continua suscitando discussões. Os expoentes deste modelo, obtidos sempre a partir de simulações [48, 51] mostram, quase todos, apenas pequenas diferenças com aqueles da classe PD. Entretanto o expoente β que na classe PD vale $\beta = 0.276$ tem o valor $\beta = 0.412$ para os resultados do modelo de Manna. Contudo, simulações mais extensas de Dickman [69] apontam para um valor deste expoente mais próximo da classe PD.

Nosso estudo, condensado no trabalho [70], discute através de simulações, para o estado quase-estacionário do modelo de Manna parametrizado, outros aspectos acerca da universalidade deste modelo. Em especial, sua robustez frente às mudanças das regras microscópicas da dinâmica. Assim como no problema do modelo AB, seria interessante investigar o quão suscetível pode ser o comportamento crítico deste modelo ao alterarmos sua dinâmica. Como já foi discutido na sua apresentação, na seção 3.2,

um dos limites extremos que ele pode assumir é o da dinâmica BTW conservativa, que possui uma transição descontínua. Diferentemente do modelo AB, onde a transição descontínua levava a uma outra classe de universalidade distinta da linha, isto não ocorre aqui. Porém, isto não impede que a mudança na natureza da transição não seja sentida pelos expoentes.

Nossa simulação consiste em, fazendo uso do método do estado quase-estacionário desenvolvido por Oliveira e Dickman [65], usar redes de L sítios com condições de contorno periódicas, preenchidas com N partículas, de modo que a densidade de partículas, que será o parâmetro de controle do modelo, é dada por $\zeta = N/L$. A condição inicial é gerada da seguinte forma: sorteamos um sítio e sobre ele depositamos uma partícula. Se o sítio já estiver ocupado por uma partícula, receberá mais uma e tornar-se-á ativo, de maneira que guardaremos sua posição numa lista de sítios ativos. Por outro lado, caso ele seja ativo nenhuma partícula a mais será sobre ele depositada, respeitando assim a restrição de altura. Esta distribuição de partículas gera uma condição inicial uniforme e espacialmente decorrelacionada.

Sorteamos da lista de sítios ativos um deles e sobre este empregamos a dinâmica do modelo, definida na seção 3.2. Lembrando que a cada passo de tempo, a última configuração é guardada num reservatório. O tempo, ao final da simulação é contado em intervalos igualmente espaçados, usando a técnica de um histograma logarítmico e com isso diminuindo as flutuações. Um tempo máximo, t_{max} , é estipulado para cada tamanho de rede, assim como um número de repetições N_r sobre o qual calcularemos as médias das quantidades estudadas. No estudo deste modelo, os valores tipicamente usados foram $L = 100 - 5000$ sítios, $t_{max} = 4 \times 10^4 - 2 \times 10^7$ passos e $N_r = 2000$ repetições.

O parâmetro de controle deste modelo, $\zeta = N/L$, não pode assumir valores continuamente, pois para cada tamanho só podemos variá-lo em submúltiplos deste. Desta maneira, o que obteremos ao calcular os valores do parâmetro de ordem, por exemplo, é um conjunto de pontos como aquele mostrado na figura (5.13).

Como é razoável esperar que, em geral, nenhuma descontinuidade esteja presente no comportamento de uma quantidade como o parâmetro de ordem, podemos interpolar os pontos calculados através da simulação e, assim, dispor de valores que não são acessíveis para aquele tamanho.

De posse destes dados, podemos usar as relações de escala (2.70) e (2.72) para determinar os expoentes críticos. O tempo de sobrevivência τ , entretanto, não foi calculado com o método de determinação do estado quase-estacionário, mas com a simulação usual, onde uma nova repetição é começada logo que o sistema caia no estado absorvente. Isto ocorreu pois os resultados para esta grandeza apresentaram menores flutuações no método de simulação usual do que naquele outro. Para determinarmos estes expoentes, fixamos um valor de ζ e observamos a dependência das

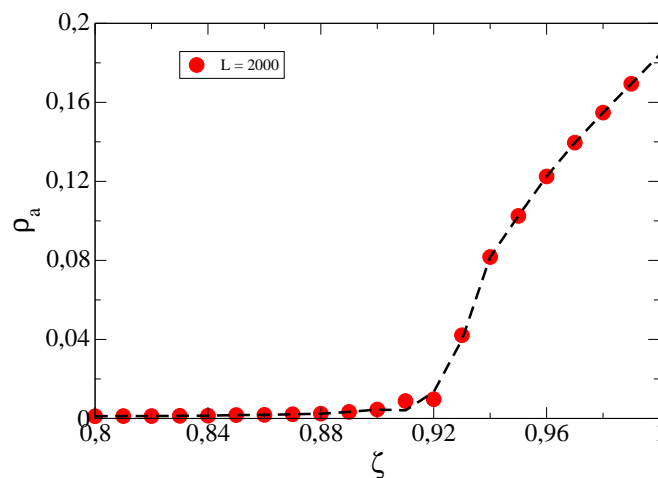


Figura 5.13: Comportamento do parâmetro de ordem como função de ζ , para $L = 2000$ e $\lambda = 0$. A linha tracejada é apenas um guia.

grandezas calculadas, como a densidade de sítios ativos ou o tempo de sobrevivência, com o tamanho da rede. Assim como já foi discutido em outros resultados anteriores, utilizamos uma escala log-log para identificar em que valor de ζ esta grandeza apresentará o comportamento mais próximo de uma lei de potência, traduzido como uma reta nesta escala, sendo este valor o ponto crítico e a inclinação desta reta o valor numérico do respectivo expoente. Realizando a mesma manobra para valores diferentes do parâmetro λ , obtivemos a linha crítica mostrada na figura (5.14).

Esta linha crítica, comparada com aquela obtida pela aproximação de pares, possui uma região supercrítica menor, evidenciando a tendência que esta aproximação apresenta para superestimar esta região ou, em outras palavras, subestimar o ponto crítico. Outra conclusão interessante é a tendência demonstrada pela linha crítica, na região negativa do parâmetro λ em se aproximar assintoticamente do valor $\zeta_c = 1/2$, quando $\lambda \rightarrow -1$. Ocorre que na vizinhança deste ponto a maior parte da dinâmica ocorre em transições em que um par de partículas é jogado para um dos primeiros vizinhos, imitando, assim, um processo difusivo. Mas é sabido que numa dinâmica dominada pela difusão, o comportamento crítico tende para aquele apresentado numa aproximação de campo médio simples, cujo valor de densidade crítica para este modelo é $\zeta_c = 1/2$.

Quanto aos expoentes críticos, um interessante teste de coerência pode ser feito ao calcularmos seus valores para o parâmetro λ nulo, onde recuperamos o modelo da pilha restrita, já estudado em [51]. Para este valor do parâmetro, numa escala di-log temos o seguinte comportamento das duas grandezas aqui calculadas, no ponto crítico

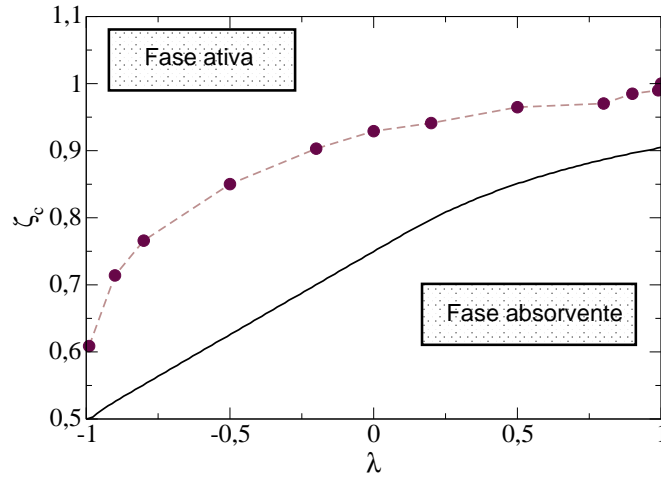


Figura 5.14: Diagrama de fases do modelo de Manna parametrizado por λ , com restrição de altura. A linha pontilhada corresponde às simulações, enquanto que a linha cheia é o resultado da aproximação de pares.

localizado em $\zeta_c = 0.9291$.

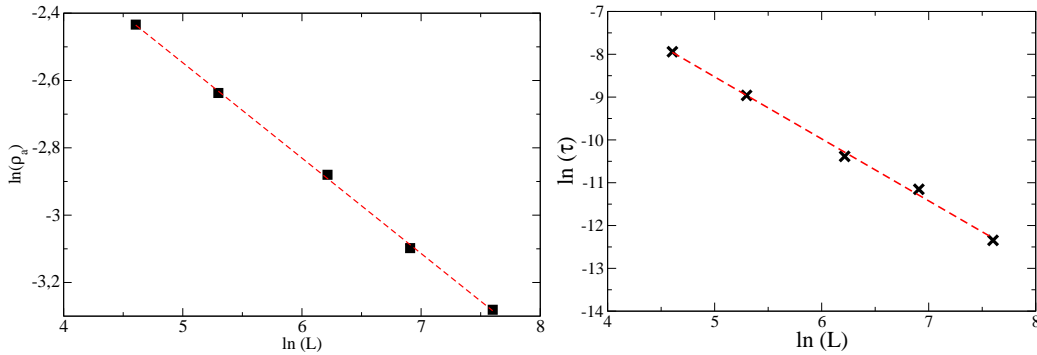


Figura 5.15: Valores crítico obtidos para o caso $\lambda = 0$, $\zeta_c = 0.9291$, $\beta/\nu_\perp = 0.2832$ e $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1.456$.

Os valores encontrados para estes expoentes, assim como para o ponto crítico estão, quase todos, em bom acordo com aqueles obtidos em [51], na versão do modelo chamada independente, quais sejam estes $\zeta_c = 0.92965(3)$, $\beta/\nu_\perp = 0.247$ e $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1.45(3)$. A excessão se dá no expoente β/ν_\perp calculado a partir do método de simulação do estado quase-estacionário. Entretanto, no emprego deste método para determinar as características críticas do PC, uma correção na forma de escala tem que

ser implementada para recuperar o expoente correto [66]. Fazendo uso desta mesma correção, $\ln \rho_a = \beta/\nu_\perp \ln L + A/L^\phi + B$, recuperamos o valor $\beta/\nu_\perp = 0.247$ com $A = -0.08$, $B = -1.13$ e $\phi = 0.165$, como mostra o ajuste da figura (5.16).

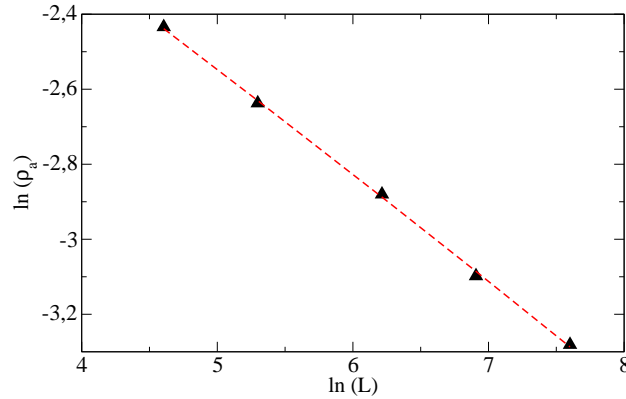


Figura 5.16: Valores críticos obtidos, com correção de escala, $\ln \rho_a = -\beta/\nu_\perp \ln L + AL^{-\phi} + B$, com $A = -0.08$, $\phi = 0.165$ e $B = -1.13$, para o caso $\lambda = 0$.

Portanto, uma questão posta sobre este método de simulação do estado quase-estacionário é se, implicitamente, ele não impõe uma correção sobre a lei de potência que estas grandezas apresentam na criticalidade. Tanto o PC como o modelo simulado aqui parecem carecer desta correção para fornecerem valores razoáveis para os expoentes críticos.

Quanto ao valor do expoente β , sua estimativa é obtida através de processos que acumulam vários erros numéricos. Uma forma que utilizamos foi a de empregar a relação de escala para o parâmetro de ordem,

$$\rho_a \sim (\zeta - \zeta_c)^\beta. \quad (5.7)$$

Usando um valor tentativa ζ_c^L para o ponto crítico, em cada tamanho L , analisamos, na região supercrítica ($\zeta > \zeta_c$), o comportamento da função $y = \beta x$, sendo $y = \ln \rho_a$ e $x = \ln(\zeta - \zeta_c^L)$. Como buscamos uma reta para determinarmos o ponto crítico e o expoente β , então o valor de ζ_c^L que correspondia ao ponto crítico, naquele tamanho, deveria ser dado pela escolha que maximizasse a correlação dos pontos num ajuste linear. Este procedimento é repetido para todos os tamanhos estudados e com isto uma extrapolação para $L \rightarrow \infty$ era tomada para determinar o ponto crítico e o expoente β . Sem a correção de escala, estimamos $\beta = 0.426$, enquanto que com a correção o valor obtido foi $\beta = 0.412$, em perfeito acordo com aquele calculado em [51]. Entretanto, para outros valores de λ este método se mostrou pouco confiável, pois a extrapolação

não podia ser feita com boa precisão. Deste modo, para apenas alguns valores de λ calculamos este expoente e, dados os vários problemas numéricos, torna-se difícil afirmar que seu valor realmente se distancia tanto daquele da classe PD.

A tabela (5.1) mostra todos os valores do ponto crítico e dos expoentes calculados para diversos valores do parâmetro λ , indo de um extremo a outro de seu domínio.

λ	ζ_c	β/ν_\perp	ν_\parallel/ν_\perp	β
-0.99	0.6087	0.274	1.744	-
-0.90	0.714	0.260	1.844	-
-0.80	0.7659	0.2764	1.026	-
-0.50	0.8501	0.312	1.264	0.509
-0.20	0.903	0.302	1.149	0.490
0.00	0.9291	0.247	1.456	0.412
0.20	0.9412	0.537	1.423	0.564
0.50	0.9648	0.656	1.309	0.594
0.80	0.9703	0.972	1.520	-
0.90	0.9849	0.970	1.746	-
0.99	0.99	1.021	1.500	-

Tabela 5.1: Valores críticos para o modelo ao longo do intervalo de domínio do parâmetro λ .

O comportamento destes expoentes fica mais claro ao olharmos para a figura (5.17) que mostra uma tendência do expoente β/ν_\perp em crescer para valores positivos de λ , enquanto mantém um patamar, para valores negativos, ligeiramente maior do que o valor do modelo original, $\lambda = 0$. Por outro lado, o expoente ν_\parallel/ν_\perp parece completamente irregular.

Interessante notar que β/ν_\perp cresce à medida que $\lambda \rightarrow 1$, onde o modelo parametrizado torna-se idêntico ao modelo BTW conservativo. Este, como foi discutido em [48], possui uma transição descontínua para $\zeta = 1$ com um salto $\Delta\rho_a = 0.15$, valores que conseguimos reproduzir em nossas simulações, como atesta a figura (5.18). A pre-

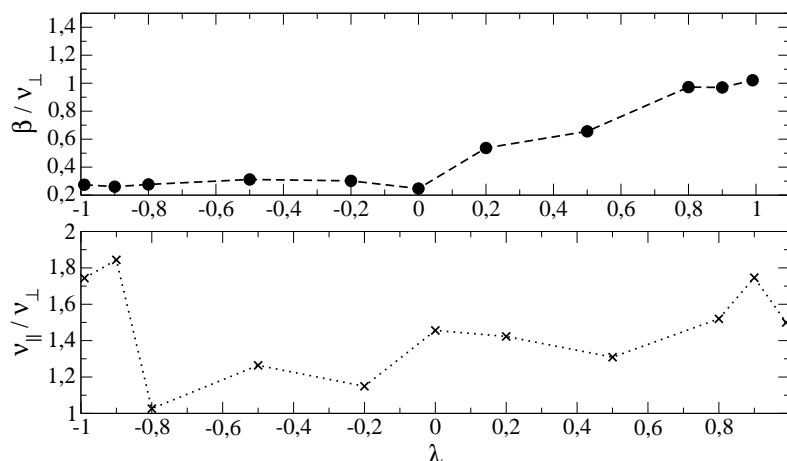


Figura 5.17: Expoentes β/ν_{\perp} e $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ como função do parâmetro λ .

sença de uma transição descontínua no fim da linha crítica, poderia como ocorre no modelo AB, induzir uma flutuação tendenciosa dos expoentes, levando seus valores a aproximarem-se de algum outro.

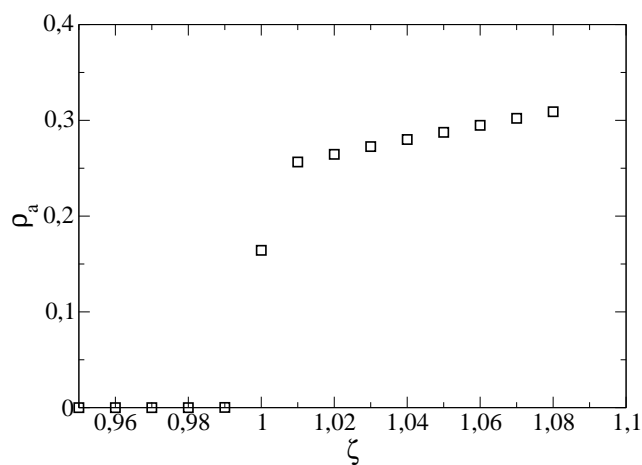


Figura 5.18: Comportamento do parâmetro de ordem, para $L = 500$, no ponto $\lambda = 1$, indicando uma transição de primeira ordem, com um salto $\Delta\rho_a = 0.15$.

Entretanto, no caso do modelo AB, tínhamos uma outra classe no ponto extremo, mesmo sendo a transição de primeira ordem. Não é claro, entretanto se o BTW conservativo unidimensional, define expoentes críticos, de modo que esta tendência em β/ν_{\perp} pode não ser um aparente sinal de “crossover” entre dois regimes, mas apenas

uma flutuação numérica ou mesmo um indicativo de que estes expoentes sofrem forte influência dos detalhes microscópicos da dinâmica, o que os poria num regime de menor robustez do que aqueles da classe PD. Isso é o que parece indicar a intensa flutuação do expoente $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$.

Finalizando a discussão, devemos chamar a atenção para o fato de que, mesmo com o ponto crítico tendendo para seu valor de campo médio, à medida que $\lambda \rightarrow -1$, o mesmo não ocorre com os expoentes críticos, visto que β/ν_{\perp} , que deveria tender ao valor unitário parece se manter num patamar em torno de $\beta/\nu_{\perp} = 0.29$, enquanto o outro expoente varia erraticamente sem indicar uma tendência em se dirigir para 2, que seria seu valor de campo médio. Isso poderia ocorrer devido à distância ainda razoável do ponto crítico de campo médio em que verificamos estes valores, visto que para $\lambda = -0.99$, $\zeta_c = 0.6087$. Porém, através de simulações esta conclusão parece um tanto difícil de ser corroborada ou desmentida. Um outro aspecto, igualmente interessante, é determinar se a transição contínua do modelo original, só passa a ser de primeira ordem em $\lambda = 1$ ou se seria possível a existência de um ponto tricrítico para valores de λ entre o nulo e o unitário.

5.4.1 Simulações no modelo de Manna com variação na difusão

Ainda no espírito de verificar a sensibilidade do comportamento crítico do modelo de Manna restrito com respeito às mudanças em sua dinâmica, propomos esta variação descrita na subseção 3.2.1. Na simulação deste modelo, usamos a mesma condição inicial descrita na seção anterior, bem como quase os mesmos procedimentos. A exceção se dá no fato de que esta variação lidará unicamente com o modelo definido em $\lambda = 0$, além de que a transição que leva duas partículas a um dos primeiros vizinhos, com a mesma probabilidade, passará a levar este par de partículas a um dos segundos vizinhos, ainda com a mesma probabilidade e respeitando o vínculo da restrição de altura. Então o sub-processo difusivo, representado por estas transições, torna-se equivalente a uma caminhada aleatória de passo duplo.

Realizando simulações idênticas ao do caso parametrizado, encontramos os seguintes valores críticos para este caso:

$$\begin{aligned}\zeta_c &= 0.850 \\ \beta/\nu_{\perp} &= 0.832 \\ \nu_{\parallel}/\nu_{\perp} &= 0.995.\end{aligned}$$

Novamente, estes resultados atestam uma forte dependência das regras da dinâmica sobre o comportamento crítico do modelo. O cenário geral, então, parece nos

conduzir à conclusão de que modelos como o da pilha de areia de Manna não possuem a mesma robustez de sua universalidade quanto aqueles da classe PD, que mantêm-se mesmo com variações em sua dinâmica que não violem as características prescritas pela conjectura PD.

5.5 Simulações para o modelo de três estados

O modelo de três estados, descrito na seção 3.3, foi estudado através de simulações do estado quase-estacionário [65]. As simulações ainda estão em um estado embrionário, pois os tamanhos estudados variaram de $L = 80 - 1600$ e parece necessário observar tamanhos maiores para este sistema. Mesmo assim, estimamos a linha crítica do modelo, como mostra a figura (5.19), além dos expoentes β e β/ν_{\perp} para um particular ponto desta linha.

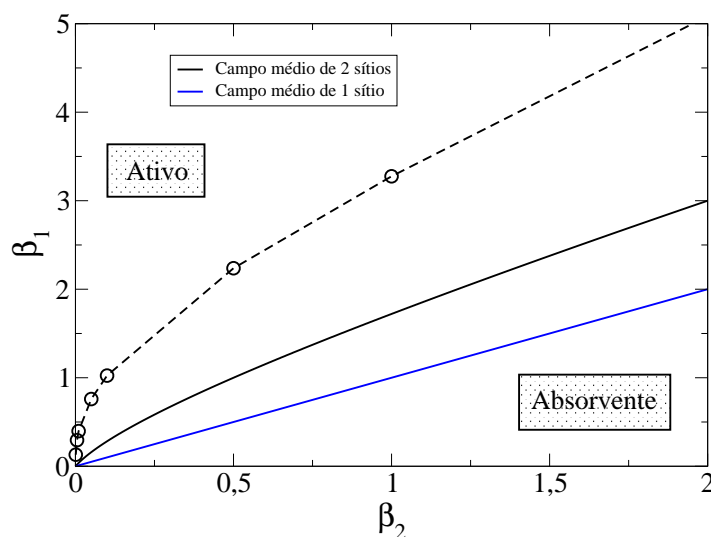


Figura 5.19: Linha crítica do modelo de três estados obtida por simulação comparada com aquelas extraídas das aproximações de campo médio.

Para o valor de $\beta_2 = 0.1$, calculamos os expoentes β/ν_{\perp} e β . Os valores obtidos, como mostra a figura (5.20), foram $\beta = 0.37$ e $\beta/\nu_{\perp} = 0.45$. Expoentes dinâmicos também foram estimados para este ponto exibindo valores compatíveis com aqueles da classe PD. Entretanto, os expoente estáticos não coincidem com os expoentes daquela classe, $\beta = 0.2765$ e $\beta/\nu_{\perp} = 0.2520$ [10]. Entendemos, contudo, que seria razoável explorar tamanhos maiores para confirmar estes valores e verificar a existência, de

fato, da distinção das propriedades críticas deste modelo com respeito à classe de universalidade PD.

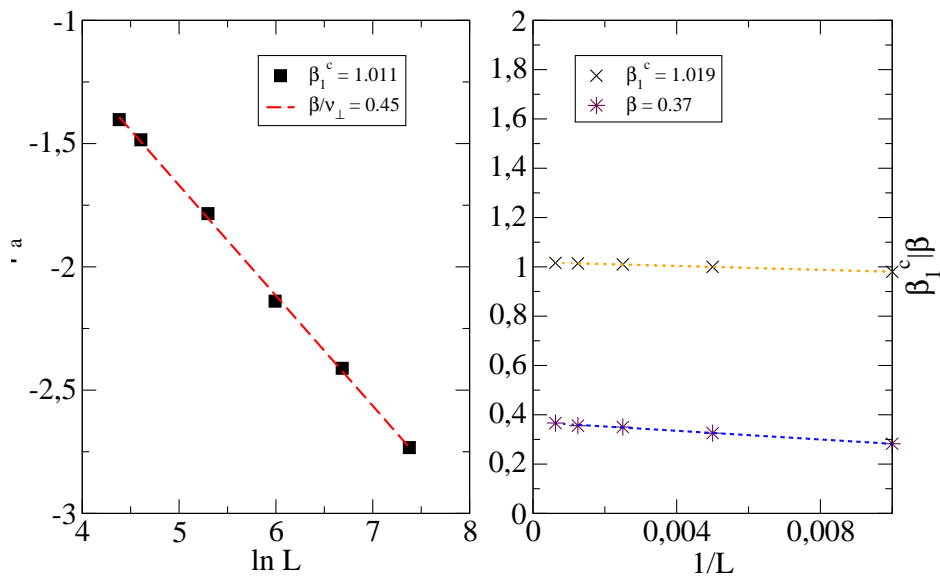


Figura 5.20: Valor obtido para os expoentes β/ν_{\perp} e β no caso específico de $\beta_2 = 0.1$.

Capítulo 6

Solução exata de modelos em tamanhos finitos

Modelos como os que estamos discutindo possuem a barreira da correlação como grande empecilho para obtermos soluções exatas. Uma das maneiras de contornar esta dificuldade é a solução exata destes sistemas em tamanhos finitos. Na verdade, esta estratégia é muito usada no equilíbrio termodinâmico através da diagonalização de matrizes de transferência ou do operador hamiltoniano, aliada a uma análise dos resultados de tamanhos finitos de técnicas de escala [22] e de algoritmos de extrapolação [71]. Isto permite obter propriedades relativas ao limite termodinâmico a partir dos dados para tamanhos finitos. Em modelos fora-do-equilíbrio, esta técnica também já se mostrou útil na estimativa de propriedades críticas de modelos da classe PD [11].

Desenvolvemos este procedimento a partir da equação (2.33), que pode ser escrita na base em que o operador \hat{W} é diagonal, da seguinte maneira,

$$\frac{d}{dt}\hat{P} = \mu\hat{P}, \quad (6.1)$$

onde μ corresponde aos autovalores do operador de evolução temporal. Note que o estado estacionário, $dP/dt = 0$, corresponde a um autovalor nulo μ_0 . Por outro lado, num sistema que possua um estado absorvente, a única solução estacionária para um caso finito é este estado. Então o autovalor μ_0 estará associado a este estado.

Para estudarmos as propriedades de interesse destes modelos temos que nos concentrar não no estado absorvente, mas no primeiro estado excitado do sistema $\Gamma = \mu_1$. Este autovalor tende ao valor nulo à medida que o sistema toma tamanhos maiores, de modo que ele torna-se degenerado com μ_0 no limite termodinâmico.

Geralmente as transições de fases no equilíbrio termodinâmico estão associadas à degenerescência dos autovalores dominantes da matriz de transferência do sistema que sofre esta transição. Pictoricamente poderíamos enxergar isso como se o fato de que

não existiria degenerescência do maior autovalor assegurasse a analiticidade da energia livre e consequentemente a ausência de uma transição de fases. Esta afirmação pode ser entendida se imaginarmos uma dependência de μ com um parâmetro de controle T , como ilustramos na figura (6.1).

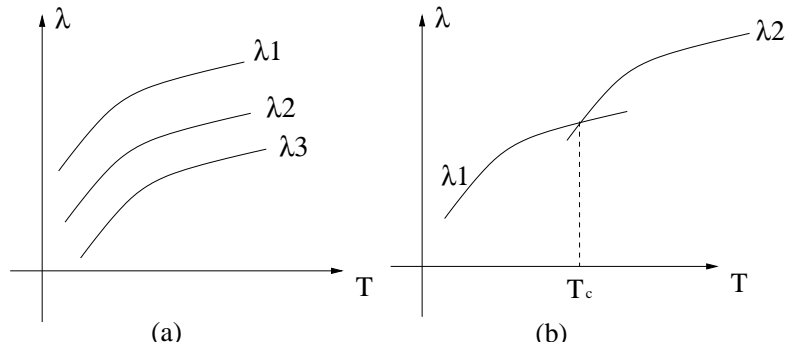


Figura 6.1: Comportamento de autovalores para o caso não-degenerado e degenerado.

Para o caso em que o autovalor é não-degenerado em qualquer T , como em (6.1.a), a energia livre é definida unicamente por μ_1 e não possuirá descontinuidades em si mesma ou em qualquer de suas derivadas. No caso (6.1.b), onde para um certo valor T_c , os valores de μ_1 e μ_2 coincidem e a energia livre pode apresentar uma descontinuidade em sua primeira derivada ocasionando uma transição de fases de primeira ordem.

Com esta imagem, podemos imaginar que a natureza do autovalor μ_1 é similar àquela do estado quase-estacionário das simulações numéricas, apresentadas no capítulo anterior. Como o estado quase-estacionário, relacionado com o auto-estado de \hat{W} , $|\psi_1\rangle$, deve decair na fase inativa na forma exponencial, $e^{-\mu_1 t}$, este autovalor pode ser associado ao comprimento de correlação temporal, de modo que $\mu_1^{-1} \sim \zeta_{\parallel}$. Por outro lado, como vimos na subseção 2.5.1, $\zeta_{\parallel} \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$ e $\Delta \sim L^{-1/\nu_{\perp}}$, então

$$\mu_1 \sim L^{-\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}} h(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (6.2)$$

Se derivarmos esta equação com respeito ao parâmetro de ordem p , sendo $\Delta = p - p_c$, obteremos

$$\frac{d}{dp} \mu_1 \sim L^{-\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} + 1/\nu_{\perp}} h'(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (6.3)$$

O autovalor μ_1 , portanto, fornece a possibilidade de estimarmos dois expoentes críticos, além do ponto crítico que pode ser obtido a partir da grandeza Y_L , definida como

$$Y_L(p) = \frac{\ln[\mu_1(p; L+1)/\mu_1(p; L-1)]}{\ln[(L+1)/(L-1)]}. \quad (6.4)$$

A interseção desta função para dois tamanhos sucessivos $Y_L = Y_{L+1}$, resulta no valor numérico de um ponto crítico associado ao tamanho L , p_c^L . A partir da estimativa de um conjunto $\{p_c^L\}$, usando um algoritmo de extrapolação apropriado, podemos obter uma estimativa para o ponto crítico no limite termodinâmico.

Já mostramos que em modelos com dinâmica assíncrona, podemos escrever a equação mestra como

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_i [w_i(\eta^i)P(\eta^i, t) - w_i(\eta)P(\eta, t)], \quad (6.5)$$

onde η^i simboliza uma nova configuração que se distingue da original apenas pelo estado do sítio i .

Definindo o vetor estado $|\psi(t)\rangle = \sum_\eta P(\eta, t)|\eta\rangle$, com a relação de ortonormalidade $\langle\eta'|\eta\rangle = \delta_{\eta',\eta}$, e derivando-o com respeito ao tempo, teremos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= \sum_\eta \frac{d}{dt}P(\eta, t) \\ &= \sum_\eta \sum_i [w_i(\eta^i)P(\eta^i, t) - w_i(\eta)P(\eta, t)]|\eta\rangle. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Trocando $\eta^i \leftrightarrow \eta$, no primeiro somatório, resultará na seguinte expressão

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= \sum_\eta \sum_i [w_i(\eta)P(\eta, t)|\eta^i\rangle - w_i(\eta)P(\eta, t)]|\eta\rangle \\ &= \sum_{i,\eta} w_i(\eta)P(\eta, t)[|\eta^i\rangle - |\eta\rangle]. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Agora, definiremos os seguintes dois operadores

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{F}}_i|\eta\rangle &= |\eta^i\rangle \\ \hat{\mathbb{Z}}_i|\eta\rangle &= w_i(\eta)|\eta\rangle \end{aligned} \quad (6.8)$$

que nos permitirão reescrever a equação (6.7) na forma

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= \sum_{i,\eta} w_i(\eta)P(\eta,t)[\hat{\mathbb{F}}_i|\eta\rangle - |\eta\rangle] \\
 &= \sum_{i,\eta} w_i(\eta)P(\eta,t)[\hat{\mathbb{F}}_i - 1]|\eta\rangle \\
 &= \sum_{i,\eta} [\hat{\mathbb{F}}_i - 1]\hat{\mathbb{Z}}_i P(\eta,t)|\eta\rangle \\
 &= \sum_i [\hat{\mathbb{F}}_i - 1]\hat{\mathbb{Z}}_i \sum_{\eta} P(\eta,t)|\eta\rangle \\
 &= \sum_i [\hat{\mathbb{F}}_i - 1]\hat{\mathbb{Z}}_i|\psi(t)\rangle \\
 &\equiv \hat{S}|\psi(t)\rangle,
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

onde $\hat{S} = \sum_i [\hat{\mathbb{F}}_i - 1]\hat{\mathbb{Z}}_i$ é um operador de evolução temporal equivalente àquele definido pela equação (2.33).

Apesar desta demonstração ser válida para modelos em que apenas um sítio é alterado em cada atualização, não é impossível estender o papel do operador de evolução temporal para dinâmicas em que os primeiros vizinhos do sítio também possam ser atualizados em cada passo.

6.1 Álgebra de operadores

Para simplificar nossa discussão, derivaremos resultados para modelos que usem variáveis do tipo gás de rede ($\eta_i = 0, 1$), não significando que outras variáveis não possam ser igualmente usadas. Com estas variáveis, cada sítio da rede é indexado pelo estado $|\eta_i\rangle$, de modo que uma configuração da rede, em um determinado instante, fica dada pelo produto direto,

$$|\eta\rangle = \prod_i \otimes |\eta_i\rangle. \tag{6.10}$$

Podemos definir operadores de criação e aniquilação que alteram estes estados da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{A}_i^\dagger|\eta\rangle &= (1 - \eta_i)|\eta^i\rangle \\
 \mathbb{A}_i|\eta\rangle &= \eta_i|\eta^i\rangle,
 \end{aligned}$$

sendo $|\eta^i\rangle = (\eta_1, \eta_2, \dots, 1 - \eta_i, \dots, \eta_L)$.

Observe que a soma destes operadores atuando sobre uma configuração $|\eta\rangle$ resulta que $(\mathbb{A}_i^\dagger + \mathbb{A}_i)|\eta\rangle = |\eta^i\rangle$, o que nos proporciona concluir que, de acordo com as definições (6.8), $\hat{\mathbb{F}}_i = \mathbb{A}_i^\dagger + \mathbb{A}_i$. Além disso, temos que

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i |\eta\rangle &= \mathbb{A}_i^\dagger [\eta_i |\eta^i\rangle] \\ &= \eta_i (1 - (1 - \eta_i)) |\eta_1, \eta_2, \dots, 1 - (1 - \eta_i), \dots, \eta_L\rangle \\ &= \eta_i^2 |\eta\rangle = \eta_i |\eta\rangle. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Com isso, concluímos que o operador número é dado por

$$\hat{\mathbb{N}}_i \equiv \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i. \quad (6.12)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger |\eta\rangle &= \mathbb{A}_i (1 - \eta_i) |\eta^i\rangle \\ &= (1 - \eta_i)^2 |\eta\rangle \\ &= (1 - \eta_i) |\eta\rangle \end{aligned} \quad (6.13)$$

Portanto, o comutador destes operadores é dado por

$$[\mathbb{A}_i^\dagger, \mathbb{A}_i] = 2\eta_i - 1, \quad (6.14)$$

enquanto o anticomutador, vale

$$\{\mathbb{A}_i^\dagger, \mathbb{A}_i\}_+ = 1. \quad (6.15)$$

6.2 Forma funcional para operadores de evolução de alguns modelos

A partir da álgebra que acabamos de definir e da forma para o operador de evolução temporal dada pela expressão (6.9), podemos expressar este operador em termos dos operadores \mathbb{A} e \mathbb{A}^\dagger , lembrando que $\hat{\mathbb{N}}_i |\eta\rangle = \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger |\eta\rangle = \eta_i |\eta\rangle$.

Usando a equação (2.50) para a taxa de transição do PC, podemos escrever o operador $\hat{\mathbb{Z}}_i$,

$$\hat{\mathbb{Z}}_i = \frac{\lambda}{2} (1 - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i) (\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1}) + \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i, \quad (6.16)$$

e com ele determinar a forma de \hat{S} ,

$$\begin{aligned}\hat{S}_i &= (\hat{\mathbb{F}}_i - 1)\hat{Z}_i \\ &= (\mathbb{A}_i^\dagger + \mathbb{A}_i - 1) \left[\frac{\lambda}{2}(1 - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i)(\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1}) + \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i \right]\end{aligned}\quad (6.17)$$

Usando que $\mathbb{A}_i^2 = (\mathbb{A}_i^\dagger)^2 = 0$, além das relação de anticomutação entre os operadores de criação e aniquilação, obteremos

$$\hat{S} = \sum_i \left[\frac{\lambda}{2}(\mathbb{A}_i^\dagger - \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger)(\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1}) + (\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i) \right] \quad (6.18)$$

como o operador de evolução para o processo de contato.

Já o operador do modelo AB, obtido de forma similar, possui a seguinte forma funcional,

$$\begin{aligned}\hat{S} &= \sum_i \left[\frac{p_a}{2}(\mathbb{A}_i^\dagger - \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger)(\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1}) + \right. \\ &\quad + \frac{p_b}{2}(\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i)(2 - \mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} - \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1}) + \\ &\quad \left. + p_c(\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i) \right].\end{aligned}\quad (6.19)$$

Modelos como o de Manna restrito não têm uma expressão simples para seu operador de evolução temporal porque suas transições são condicionadas à configuração do sítio i e de sua vizinhança, de maneira que uma definição deste operador deve ser feita por partes. Já o modelo sem restrição de altura permite uma expressão simples, como podemos ver em [72].

6.3 Exemplo de diagonalização exata para o PC

Ilustraremos o método de diagonalização exata para o operador de evolução temporal de uma rede finita, usando o PC para isso. Uma escolha simples seria estudar o PC numa rede de dois sítios com condições de contorno periódicas. Neste caso, as possíveis combinações que poderíamos ter são,

$$\begin{aligned}|1\rangle &= |00\rangle & |2\rangle &= |01\rangle \\ |3\rangle &= |10\rangle & |4\rangle &= |11\rangle\end{aligned}\quad (6.20)$$

um conjunto que forma a base do operador \hat{S} . Nosso próximo passo é aplicar este operador sobre cada um dos 2^2 elementos desta base. Obviamente $\hat{S}|1\rangle = 0$, pois esta configuração representa o estado absorvente nesta rede. Já para o elemento $|2\rangle$, temos

$$\hat{S}|2\rangle = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)|2\rangle, \quad (6.21)$$

onde \hat{S}_i refere-se a parte do operador que atua sobre o sítio i . Calculando cada um destes termos, sempre tendo em mente que as condições de contorno implicam que $\eta_0 = \eta_2$ e $\eta_3 = \eta_1$, com o índice de localização do sítio crescendo da esquerda para a direita,

$$\begin{aligned} \hat{S}_1|2\rangle &= \lambda(\mathbb{A}_1^\dagger - \mathbb{A}_1\mathbb{A}_1^\dagger)(\mathbb{A}_2^\dagger\mathbb{A}_2)|2\rangle + (\mathbb{A}_1 - \mathbb{A}_1^\dagger\mathbb{A}_1)|2\rangle \\ &= \lambda(\mathbb{A}_1^\dagger - \mathbb{A}_1^\dagger\mathbb{A}_1)|2\rangle \\ &= \lambda[|4\rangle - |2\rangle]. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Num procedimento similar para o termo restante, temos que o resultado de $\hat{S}|2\rangle$ é

$$\hat{S}|2\rangle = |1\rangle - (1 + \lambda)|2\rangle + \lambda|4\rangle. \quad (6.23)$$

Computando a ação do operador para os demais elementos da base, construímos os elementos $s_{i,j}$ da representação matricial do operador \hat{S} , sendo $s_{i,j} = \langle i|\hat{S}|j\rangle$. Abaixo, mostramos a representação matricial deste operador,

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -(1 + \lambda) & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -(1 + \lambda) & 1 \\ 0 & \lambda & \lambda & -2 \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

Note que a soma de cada coluna é nula e seus autovalores são:

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 0 \\ \mu_1 &= -\frac{1}{2}[(3 + \lambda) - \sqrt{\lambda^2 + 6\lambda + 1}] \\ \mu_2 &= -(1 + \lambda) \\ \mu_3 &= -\frac{1}{2}[(3 + \lambda) + \sqrt{\lambda^2 + 6\lambda + 1}], \end{aligned} \quad (6.25)$$

cujos comportamento em função do parâmetro do modelo, λ , é visto na figura (6.2).

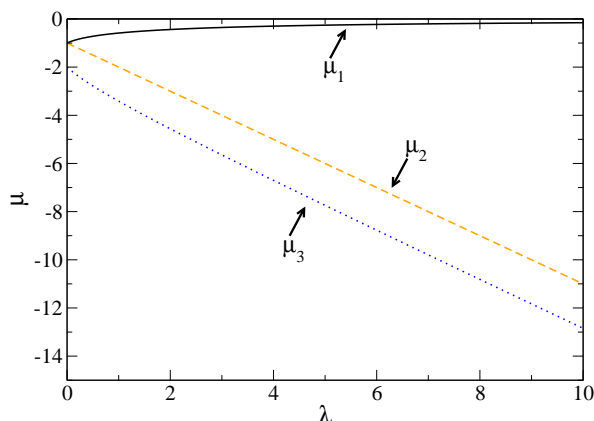


Figura 6.2: Autovalores como função do parâmetro de controle, obtidos da diagonalização exata do operador do PC para uma rede de dois sítios.

Enquanto todos os demais autovalores mostram uma tendência a aumentarem seu módulo, μ_1 , tende a zero, corroborando a expectativa que, no limite termodinâmico, este autovalor esteja relacionado ao autoestado da fase ativa.

A princípio, a base de vetores do operador de evolução temporal é formada por 2^L elementos, uma vez que cada sítio pode ter duas configurações. Entretanto, esta base pode ser reduzida, visto que a condição de contorno periódica produz uma simetria de rotação discreta \mathbb{C}_m , o que torna equivalentes os vetores conectados por uma rotação cíclica. Como por exemplo,

$$|01\rangle \rightarrow |10\rangle. \quad (6.26)$$

Pode-se mostrar que a redução da base, levando-se em conta esta simetria de rotação, produzirá uma matriz que é um bloco daquela original, mas que contará necessariamente com o autovalor μ_1 . Este bloco pode ser ainda mais reduzido se descartamos o vetor associado ao vácuo, $|00\rangle$, uma vez que este não se conecta a nenhum outro estado. Desta forma, a representação matricial do operador \hat{S} na base reduzida é dada por

$$\hat{S}' = \begin{pmatrix} -(1+\lambda) & 2 \\ \lambda & -2 \end{pmatrix}. \quad (6.27)$$

Os autovalores desta matriz são $\mu = -1/2[(3+\lambda) \pm \sqrt{\lambda^2 + 6\lambda + 1}]$, mostrando que, de fato, o autovalor μ_1 está neste bloco da matriz \hat{S} . Esta redução é de grande importância para que possamos estudar o modelo em tamanhos progressivamente

maiores, dado que com ela uma rede de largura L terá 2^{L-1} estados formando sua base. Computacionalmente, por outro lado, a implementação do algoritmo para obtermos o valor de μ_1 é simples. Inicialmente geramos todas as combinações, para uma rede de largura L , de sítios ocupados ou vazios, com cada configuração associada a um número inteiro, por exemplo $|11\rangle \rightarrow 3$. Usando de acesso *bit a bit*, realizamos rotações cíclicas sobre cada número e ao final apenas o menor dos números gerados por estas rotações é mantido como elemento da base. Na sequência, usando das regras do modelo que definem a ação do operador \hat{S} , calculamos os elementos da matriz associada ao operador e a diagonalizamos, usando o método da potência, que é bastante efetivo para o cálculo de autovalores extremos (o maior ou o menor) de uma matriz.

Uma vez calculados o valor de μ_1 para cada tamanho, como ilustramos com a figura (6.3), usamos a definição dada pela equação (6.4) para definir, a partir da interseção dos valores de Y_L e Y_{L+1} , um conjunto de valores críticos $\{p_c\}_L$ que é extrapolado para o limite termodinâmico, p_c^∞ , fazendo uso de um algoritmo de extrapolação como aquele desenvolvido por Burlisch e Stoer [71]. Determinado o ponto crítico, os expoentes $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ e $1/\nu_{\perp}$, são obtidos através das relações (6.2) e (6.3).

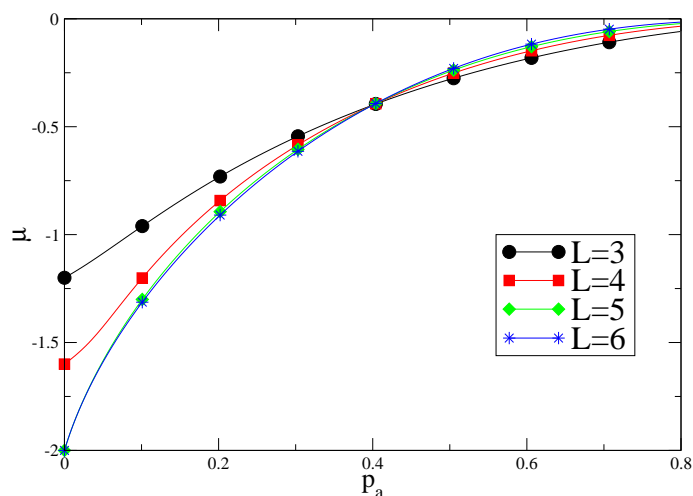


Figura 6.3: Autovalores do primeiro estado excitado em função do parâmetro de controle, para diferentes tamanhos. Estes dados referem-se ao modelo AB.

6.4 Diagonalização exata para o modelo AB

Calculamos o autovalor do operador dado pela expressão (6.19), para tamanhos distintos, indo desde $L = 3$ até $L = 15$. Usando os procedimentos mencionados na seção

precedente fomos capazes de estimar a linha crítica do modelo no plano (p_a, p_c) , como mostrada na figura (6.4).

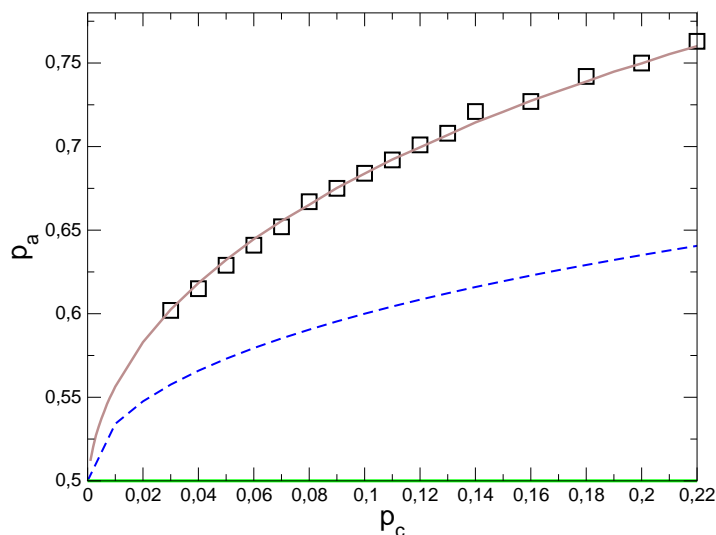


Figura 6.4: Os quadrado são estimativas obtidas do método de diagonalização exata, comparado com as linhas críticas advindas da simulação (linha cheia) e da aproximação de pares (linha tracejada).

Valores abaixo de $p_c \approx 0.02$ não puderam ser estimados devido às grandes flutuações na estimativa dos pontos críticos para tamanhos finitos, obtidos da interseção $Y_L = Y_{L+1}$, o que propagava erro para a extrapolação. Provavelmente, valores maiores de L precisariam ser estudados para obtermos estimativas mais precisas nesta região. Mesmo assim, principalmente próximo ao ponto em que este modelo coincide com o PC, os valores estão em bom acordo com a linha crítica extraída dos resultados de simulações numéricas.

A grande dificuldade no estudo de tamanhos maiores é o aumento da dimensão da matriz que representa o operador, o que custa um preço computacional tanto de memória quanto de tempo de processamento. Técnicas alternativas têm sido desenvolvidas para se estudar sistemas de tamanhos finitos, de modo a possibilitar valores cada vez maiores de L . Uma destas técnicas é o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade [73](na literatura é referido como DMRG, do inglês *Density Matrix Renormalization Group*) que foi empregada com grande sucesso em alguns modelos do equilíbrio. Uma adaptação do método para sistemas fora-do-equilíbrio, que não possuem matrizes simétricas representando o operador \hat{S} , como é comum no equilíbrio, foi usado no estudo de modelos com reação-difusão [11], alcançando valores de L su-

periores a 60. Entretanto, a condição de contorno apropriada para o uso do DMRG é a condição de extremos abertos que costumeiramente implica numa convergência mais lenta dos valores p_c^L para p_c^∞ .

Os expoentes críticos são mostrados na figura (6.5) e vê-se que, próximo ao limite do PC, a concordância entre os valores destes expoentes e aqueles da classe PD, é boa. Porém, para valores menores de p_c a concordância piora e, diferentemente dos expoentes dinâmicos, estes não demonstram uma tendência na direção de $p_c \rightarrow 0$, impedindo-nos de obtermos estimativas destes expoentes na vizinhança do ponto multicrítico. Para a classe PDC os valores destes expoentes são $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 2$ e $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} - 1/\nu_{\perp} = 1$, que parecem estar longe do comportamento mostrado na figura (6.5) para a região de pequenos valores do parâmetro p_c .

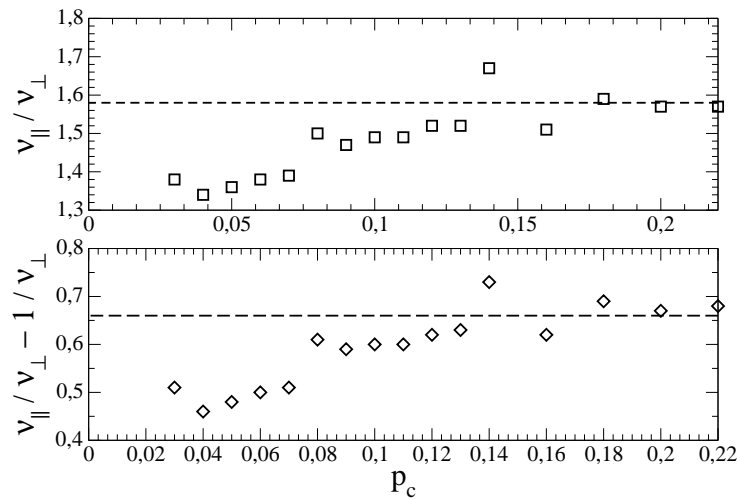


Figura 6.5: Expoentes estáticos do modelo AB estimados através da diagonalização exata para tamanhos finitos. As linhas tracejadas marcam os valores da classe PD.

Quanto ao ponto multicrítico, localizado em $(p_a = 1/2, p_c = 0)$, podemos estimar, a partir da linha crítica obtida com esta técnica de diagonalização exata, o expoente de “crossover” ϕ , dado pela relação (5.6). O expoente encontrado foi $\phi = 2.242 \pm 0.072$, novamente próximo do valor $\phi = 2$, extraído da aproximação de campo médio para este modelo AB, bem como para o autômato DK.

6.5 Diagonalização exata no modelo de Manna com restrição de altura

O modelo de Manna sem restrição de altura possui o operador de evolução temporal expresso pela equação

$$\hat{S}_i = \sum_i \left[\frac{1}{4} (\mathbb{A}_{i-1}^\dagger + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger)^2 - (\mathbb{A}_i^\dagger)^2 \right] \mathbb{A}_i^2. \quad (6.28)$$

Entretanto, quando impomos uma restrição sobre a altura máxima que os sítios podem atingir, não é possível definir uma expressão simples para este operador. Apesar disso, podemos construir os elementos da representação matricial realizando as transições em cada sítio ativo e contabilizando seus pesos apropriados.

Dada uma rede de L sítios, construímos uma base de vetores fixando o número de partículas que ocuparão esta rede. Como no caso discutido na seção anterior, estados que não possuam nenhum sítio ocupado por duas partículas não se conectam a nenhum outro, pois estão associados a um estado absorvente. Como construiremos o bloco da matriz \hat{S} que contém o autovalor μ_1 , desprezaremos estes estados além de empregar a simetria de rotação do grupo \mathbb{C}_m .

Para exemplificar, construiremos um elemento da matriz para o caso de uma rede de três sítios com três partículas, ou seja, cuja densidade linear é $\zeta = 1$. Com esta escolha, a base de estados é dada por

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |012\rangle & |5\rangle &= |120\rangle \\ |2\rangle &= |021\rangle & |6\rangle &= |201\rangle \\ |3\rangle &= |102\rangle & |7\rangle &= |210\rangle \\ |4\rangle &= |111\rangle & & . \end{aligned} \quad (6.29)$$

Como já dissemos, o vetor $|4\rangle$ será descartado e se implementarmos a simetria de rotação discreta, reduzimos esta base para apenas dois elementos, $|1\rangle = |012\rangle$ e $|2\rangle = |021\rangle$. Lembrando que empregamos condições de contorno periódicas, temos

$$\hat{S}|012\rangle = \frac{1}{2}|120\rangle + \frac{1}{4}|210\rangle + \frac{1}{4}|102\rangle - |012\rangle, \quad (6.30)$$

onde o termo negativo tem o propósito de garantir a normalização do operador. Graças à simetria que conecta os vetores, esta relação é escrita na forma mais simples

$$\hat{S}|1\rangle = \frac{1}{2}[|2\rangle - |1\rangle]. \quad (6.31)$$

Para o outro elemento, temos

$$\hat{S}|2\rangle = \frac{1}{2}[|1\rangle - |2\rangle]. \quad (6.32)$$

De maneira que a matriz tem a forma

$$\hat{S}' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (6.33)$$

cujos autovalores são $\mu_1 = -1$ e $\mu_2 = 0$. É interessante notar que mesmo tendo eliminado os vetores relacionados aos estados absorventes, ainda assim um autovalor nulo persistiu. Isso acontece pois a combinação linear $|1\rangle + |2\rangle$ funciona como um estado absorvente efetivo, pois as transições do modelo levam um ao outro.

Para o modelo de Manna com restrição de altura realizamos diagonalização de redes com $L = 6 - 15$ sítios, obtendo valores de μ_1 em função do parâmetro de controle do modelo, sua densidade de partículas. Como já frisamos anteriormente, este parâmetro só varia em submúltiplos do tamanho da rede, de forma que interpolamos estes valores no intervalo $[0, 1]$ para que tivéssemos acesso aos valores intermediários. Na figura (6.6), mostramos como estes autovalores se comportam em função de ζ .

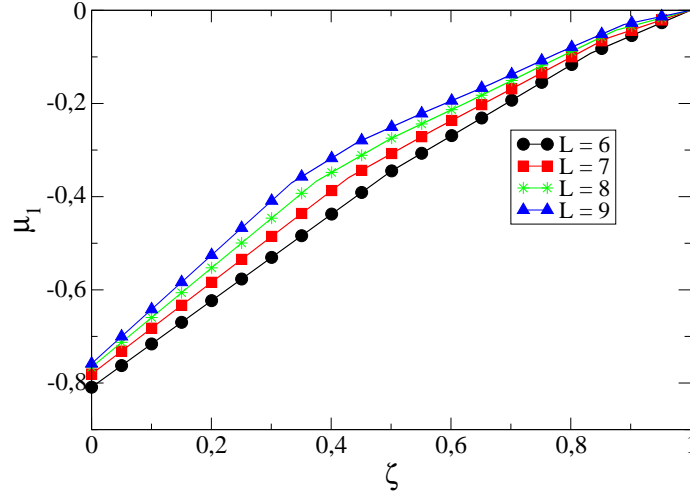


Figura 6.6: Autovalores do primeiro estado excitado do operador de Manna restrito.

Utilizando um procedimento análogo àquele descrito na seção anterior, obtivemos um conjunto de valores para o ponto crítico do modelo $\{\zeta_c\}_L$ e extrapolando para o limite termodinâmico, através de um ajuste quadrado na relação ζ_c^L vs $.1/L$. Com isso, determinamos $\zeta_c = 0.937 \pm 0.015$ que intercepta o valor $\zeta_c = 0.92965$, obtido por

simulações [51]. Alternativamente, obtivemos uma estimativa para este mesmo ponto crítico e para o expoente $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ usando a relação de escala (6.2). Isso é feito fixando-se um valor do parâmetro de controle e colecionando, para os diferentes tamanhos, os respectivos μ_1 . Fora da criticalidade as curvas numa escala log-log apresentarão uma concavidade não-nula, enquanto que o ponto crítico é marcado por um comportamento de lei de potência, sendo o expoente crítico a inclinação da reta que aparece nesta escala di-log. Seguindo este procedimento, estimamos o ponto crítico em $\zeta_c = 0.914$ e o expoente crítico tendo o valor $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1.794$. O ponto crítico difere 1.7% do valor encontrado nas simulações, enquanto o expoente crítico, que nas simulações vale 1.45, tem uma diferença maior cerca de 20%. Esta diferença exarcebada pode ser fruto da pouca precisão na determinação do ponto crítico. Os efeitos de tamanho podem prejudicar uma melhor estimativa para ζ_c , porém os dois maiores tamanhos calculados nesta diagonalização, $L = 14$ e $L = 15$, apresentaram um estranho comportamento próximo ao valor da criticalidade, como mostra a figura (6.7). Já o expoente $1/\nu_{\perp}$ apresenta flutuações muito maiores para tamanhos distintos, o que nos impediu estimar um valor de limite termodinâmico.

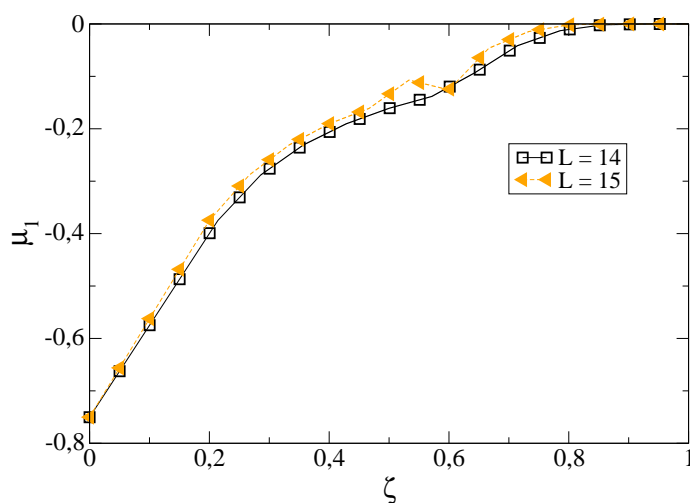


Figura 6.7: Comportamento dos autovalores μ_1 em função de ζ para os dois maiores tamanhos de rede que foram calculados. Observe que, no caso $L = 15$, μ_1 não é monotônico.

A diagonalização exata chega muitas vezes a ser encarada apenas como um método didático para a investigação deste tipo de modelo. Entretanto, apesar de sua pouca precisão numérica ela auxilia numa compreensão maior da evolução do sistema. Seus resultados qualitativos também se mostram consistentes com o que é obtido em outras

técnicas como vimos nestes exemplos. Por outro lado, as flutuações são mais intensas, visto que nesta abordagem ficamos restritos a tamanhos de rede pequenos. Obter tamanhos maiores implica melhorar os algoritmos para a construção da base de estados e da representação matricial do operador \hat{S} . Como já mencionamos aqui uma das possibilidades é o uso da DMRG que, devido às condições de contorno necessárias, tende a ter uma convergência mais lenta.

No modelo AB a técnica de diagonalização exata se mostrou razoavelmente funcional, fornecendo estimativas em boa concordância para a linha crítica e os expoentes, a menos da região próxima ao limite do modelo do votante. Já para o modelo de Manna com restrição de altura, o sucesso é apenas relativo. Embora os valores alcançados por esta técnica não tenham boa precisão quando comparados com aqueles obtidos via simulações numéricas, apontam na mesma direção. Entretanto, os efeitos de tamanho parecem ser mais importantes do que em casos de modelos sem conservação de partículas.

Uma fonte de erro para o modelo de Manna advém claramente do fato de que é necessário interpolar os pontos para obtermos estimativas do autovalor μ_1 ao longo de todo o intervalo de interesse. Por outro lado, como apenas tamanhos relativamente pequenos foram estudados, alguns deles como $L = 6, 7, 8, 9, 10$ alcançam, no máximo, densidades como $\zeta = 0.9$, valor aquém do ponto crítico. Assim, a interpolação pode gerar um erro que se propaga para a determinação do ponto crítico e é ainda mais decisivo para o valor do expoente. Seria necessário desenvolver métodos que possibilitassem alcançar tamanhos de rede maiores sem onerar tanto o custo computacional.

Deste ponto de vista, o modelo parametrizado parece uma interessante “ponta de prova” para o método, pois em valores negativos do parâmetro λ o ponto crítico assume valores menores do que o do modelo original. Isso propiciaria o uso de tamanhos menores que abarcassem densidades da ordem deste ponto.

Capítulo 7

Expansões em séries

Problemas que envolvem sistemas de muitos corpos interagentes, geralmente não possuem uma solução exata. Algumas técnicas para se extrair informações a respeito de propriedades destes sistemas já foram apresentadas nos capítulos anteriores. A aproximação de campo médio propicia resultados qualitativos, mas quantitativamente errados. As simulações, por sua vez, permitem a obtenção de melhores resultados quantitativos, apesar de não permitirem uma análise controlada do problema, além de envolver dificuldades relacionadas a tamanhos finitos que podem ser decisivas para a determinação de quantidades relevantes.

Neste capítulo abordaremos uma técnica que se mostrou bem-sucedida em problemas de equilíbrio termodinâmico, as expansões em séries. Neste regime, estas expansões são feitas a partir a função de partição, podendo ser divididas em expansões de altas ou baixas temperaturas. Já fora-do-equilíbrio, a expansão é feita a partir da equação mestra escrita na forma (6.9), podendo ser uma expansão temporal [72] ou uma expansão perturbativa [57].

Esta técnica tem se mostrado bastante efetiva para a determinação de propriedades universais de modelos como os que estudamos aqui. Especialmente em casos em que o número de partículas não se conserva [57, 74] seus resultados são bastante precisos. Por outro lado, em casos conservativos, as séries podem não ser tão bem-sucedidas [72].

Em nosso estudo usaremos expansões em séries para estudarmos as propriedades críticas do modelo AB, com e sem difusão. Mostraremos que esta abordagem se presta especialmente para analisarmos a interseção de classes de universalidade que este modelo propicia. Em muito nossa discussão é uma extensão do trabalho [75].

7.1 Expansões temporais

A expressão $|\psi(t)\rangle = e^{\hat{S}t}|\psi(0)\rangle$ é a solução formal da expressão (6.9), sendo $|\psi(0)\rangle$ o vetor de distribuição de probabilidades inicial. Escrevendo a exponencial como uma série de Taylor, este estado fica determinado pela série (2.35) e, como, geralmente, não sabemos somar todos os termos, retemos um número finito deles, usando de algoritmos de extrapolação para extrair propriedades como o ponto crítico e os expoentes.

Para calcularmos médias, definiremos o projetor,

$$\langle | = \sum_{\{\eta\}} \langle \eta |, \quad (7.1)$$

e lembrando que o vetor estado é definido como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\{\eta\}} P(\eta, t) |\eta\rangle, \quad (7.2)$$

temos que

$$\begin{aligned} \langle |\psi(t)\rangle &= \sum_{\{\eta\}} \sum_{\{\eta'\}} P(\eta, t) \underbrace{\langle \eta' | \eta \rangle}_{\delta_{\eta\eta'}} \\ &= \sum_{\{\eta\}} P(\eta, t) \\ &= 1. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Esta é, portanto, a condição de normalização para o vetor estado.

Calculando o valor esperado $\langle |\mathbb{A}_i|\psi(t)\rangle$, teremos

$$\begin{aligned} \langle |\mathbb{A}_i|\psi(t)\rangle &= \sum_{\{\eta\}} \sum_{\{\eta'\}} \langle \eta' | \mathbb{A}_i | \eta \rangle P(\eta, t) \\ &= \sum_{\{\eta\}} \sum_{\{\eta'\}} \eta_i \langle \eta' | \eta \rangle P(\eta, t) \\ &= \sum_{\{\eta\}} \eta_i P(\eta, t) = \langle \eta_i \rangle, \end{aligned} \quad (7.4)$$

onde usamos a definição do operador de aniquilação \mathbb{A}_i .

Por outro lado, sabemos que

$$\begin{aligned}\langle |A_i|\psi(t)\rangle &= \langle |A_i e^{\hat{S}t}|\psi(0)\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \langle |A_i \hat{S}^k|\psi(0)\rangle.\end{aligned}\tag{7.5}$$

Portanto a média de ocupação de um sítio é dada por,

$$\langle \eta_i \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \langle |A_i \hat{S}^k|\psi(0)\rangle.\tag{7.6}$$

A probabilidade de sobrevivência que equivale a probabilidade de que o sistema não caia num estado absorvente até um tempo t , pode ser calculada como a média

$$\begin{aligned}P_s(t) &= 1 - P_0(t) = 1 - \langle 0|\psi(t)\rangle \\ &= 1 - \langle 0|e^{\hat{S}t}|\psi(0)\rangle \\ &= 1 - \sum_k \frac{t^k}{k!} \langle 0|\hat{S}^k|\psi(0)\rangle.\end{aligned}\tag{7.7}$$

Podemos ilustrar o cálculo destas quantidades através de séries, obtendo alguns termos para o PC, dada uma configuração inicial para o sistema. Para esta condição é usual escolhermos a chamada *condição de semente ativa*, onde a rede é inicialmente ocupada por uma única partícula ativa. Representamos esta configuração por $|1\rangle$. Em geral, representaremos todas as configurações por números binários em que os sítios que estejam à esquerda da partícula ativa mais a esquerda e os que estão à direita do sítio ativo mais a direita são omitidos. Estas configurações também são invariantes por translação. Ilustrando estas definições, a configuração $|\circ\circ\bullet\circ\bullet\circ\bullet\rangle$ corresponde ao vetor estado $|10101\rangle$.

7.1.1 Exemplo de expansão temporal para o PC

Vamos calcular como o operador de evolução temporal \hat{S} do PC, dado pela expressão (6.18), age sobre uma configuração inicial $|1\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{S}|1\rangle &= \lambda[|11\rangle - |1\rangle] + [|0\rangle - |1\rangle] \\ &= |0\rangle - (1 + \lambda)|1\rangle - \lambda|11\rangle.\end{aligned}\tag{7.8}$$

Calculando \hat{S}^2 , teremos

$$\hat{S}^2|1\rangle = \hat{S}|0\rangle - (1 + \lambda)\hat{S}|1\rangle - \lambda\hat{S}|11\rangle. \quad (7.9)$$

Notando que $\hat{S}|0\rangle = 0$ e já sabendo o resultado anterior, resta-nos apenas determinar $\hat{S}|11\rangle$, o que faremos abaixo

$$\begin{aligned} \hat{S}|11\rangle &= \lambda[|111\rangle - |11\rangle] + 2[|1\rangle - |11\rangle] \\ &= 2|1\rangle - (\lambda + 2)|11\rangle + \lambda|111\rangle. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Então, resulta que $\hat{S}^2|1\rangle$ é dado pela expressão,

$$\hat{S}^2|1\rangle = -(1 + \lambda)|0\rangle + (\lambda^2 + 1)|1\rangle + \lambda(2\lambda + 3)|11\rangle + \lambda^2|111\rangle. \quad (7.11)$$

Até a segunda ordem, a probabilidade de sobrevivência $P_s(t)$, cuja expressão é dada pela relação (7.7),

$$\begin{aligned} P_s(t) &= 1 - \langle 0|\hat{S}|1\rangle t - \langle 0|\hat{S}^2|1\rangle \frac{t^2}{2} + \dots \\ &= 1 - t + (1 + \lambda) \frac{t^2}{2} + \dots \end{aligned} \quad (7.12)$$

Geralmente, uma série proporciona melhores resultados quanto maior for o número de termos. Calcular estes termos passa a ser o desafio para a obtenção de uma maior acuidade nos resultados deste método. Dependendo do modelo estudado, a dificuldade na derivação de muitos termos pode ser um fator limitante para seu emprego. Além disso, a convergência destas séries não pode ser assegurada *a priori*, de modo que o método das expansões em séries pode ser uma tarefa bastante ingrata, pois surpresas desagradáveis nunca podem ser descartadas.

7.2 Expansão perturbativa

A partir da equação (6.9) podemos derivar uma outra expansão em séries, chamada de *expansão perturbativa*. Neste caso, regimes de tempos longos são alcançados se fizermos uma transformação de Laplace sobre esta equação, chamando de $|\tilde{\psi}(z)\rangle$ o vetor transformado de forma que

$$\int_0^\infty |\psi(t)\rangle e^{-zt} dt = \int_0^\infty e^{-(z-\hat{S})t} |\psi(0)\rangle dt. \quad (7.13)$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 |\tilde{\psi}(z)\rangle &= \left[\int_0^\infty e^{-(z-\hat{S})t} dt \right] |\psi(0)\rangle \\
 &= -\frac{1}{z-\hat{S}} e^{-(z-\hat{S})t} \Big|_0^\infty |\psi(0)\rangle \\
 &= (z-\hat{S})^{-1} |\psi(0)\rangle.
 \end{aligned} \tag{7.14}$$

Esta expressão representa a série

$$|\tilde{\psi}(z)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{S}^n}{z^{n+1}} |\psi(0)\rangle. \tag{7.15}$$

Por outro lado, temos que

$$z|\psi(z)\rangle = \int_0^\infty |\psi(t)\rangle z e^{-zt} dt, \tag{7.16}$$

e se efetuarmos a integração por partes resultará que,

$$\begin{aligned}
 z|\psi(z)\rangle &= -|\psi(t)\rangle e^{-zt} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-zt} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\
 &= |\psi(0)\rangle + \int_0^\infty \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle e^{-zt} dt.
 \end{aligned} \tag{7.17}$$

Tomando o limite em que $z \rightarrow 0$, teremos

$$\begin{aligned}
 \lim_{z \rightarrow 0} z|\psi(z)\rangle &= |\psi(0)\rangle + \int_0^\infty \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle dt \\
 &= |\psi(0)\rangle + [|\psi(\infty)\rangle - |\psi(0)\rangle] \\
 &= |\psi(\infty)\rangle,
 \end{aligned} \tag{7.18}$$

ou seja, o vetor de estado estacionário é definido pelo limite acima.

Em geral, o operador de evolução temporal de modelos que possuem uma transição entre uma fase ativa e outra absorvente, possui duas partes distintas: uma responsável pela criação de partículas ativas (que favorece a fase ativa ou fase supercrítica) e outra relacionada a aniquilação destas partículas ou produção de partículas inativas

(que favorece a fase absorvente ou fase subcrítica). Desta forma poderíamos separar o operador da seguinte maneira,

$$\hat{S} = \lambda\hat{W} + \hat{V}, \quad (7.19)$$

onde o operador \hat{W} é responsável pela aniquilação de partículas ativas, enquanto \hat{V} produz estas partículas. O parâmetro λ pode ser encarado como um parâmetro perturbativo o que torna o operador a quem ele multiplica menos relevante na expansão perturbativa do que o outro. Assim, a expressão acima seria apropriada para uma expansão supercrítica. Com esta separação a equação (7.14) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(z)\rangle &= \underbrace{(z - \hat{V})}_{\hat{F}} - \lambda\hat{W}^{-1}|\psi(0)\rangle \\ &= (\hat{F} - \lambda\hat{W})^{-1}|\psi(0)\rangle \\ &= \frac{1}{\hat{F}} \frac{1}{1 - \frac{\lambda\hat{W}}{\hat{F}}} \\ &= \frac{1}{\hat{F}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda\hat{W}}{\hat{F}} \right)^n |\psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Supondo que o vetor transformado, $|\tilde{\psi}(z)\rangle$, pode ser expandido numa série de potências do parâmetro λ , obtemos

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(z)\rangle &= |\tilde{\psi}_0\rangle + \lambda|\tilde{\psi}_1\rangle + \lambda^2|\tilde{\psi}_2\rangle + \dots + \lambda^n|\tilde{\psi}_n\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\tilde{\psi}_k\rangle. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Para que as equações (7.20) e (7.21) sejam iguais é necessário que

$$|\tilde{\psi}_n\rangle = \frac{\hat{W}^n}{\hat{F}^{n+1}} |\psi(0)\rangle, \quad (7.22)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_0\rangle &= \frac{1}{z - \hat{V}} |\psi(0)\rangle \\ |\tilde{\psi}_1\rangle &= \frac{W}{(z - \hat{V})^2} |\psi(0)\rangle \\ &\vdots \\ |\tilde{\psi}_n\rangle &= \frac{W}{(z - \hat{V})^{n+1}} |\psi(0)\rangle. \end{aligned} \quad (7.23)$$

De uma maneira geral, temos

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_0\rangle &= \frac{1}{(z - \hat{V})} |\psi(0)\rangle \\ |\tilde{\psi}_n\rangle &= \frac{W}{(z - \hat{V})} |\tilde{\psi}_{n-1}\rangle \end{aligned} \quad (7.24)$$

Quanto à aplicação do operador $(z - \hat{V})^{-1}$ sobre uma configuração (\mathcal{C}) qualquer, podemos usar a seguinte identidade

$$\begin{aligned} \frac{1}{z} \left[1 + \frac{\hat{V}}{(z - \hat{V})} \right] (\mathcal{C}) &= \frac{1}{z} \left[\frac{z - \hat{V} + \hat{V}}{z - \hat{V}} \right] \\ &= (z - \hat{V})^{-1}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Portanto,

$$(z - \hat{V})^{-1}(\mathcal{C}) = \frac{1}{z} \left[(\mathcal{C}) + (z - \hat{V})^{-1} \hat{V}(\mathcal{C}) \right]. \quad (7.26)$$

É importante salientar que, diferentemente da expansão perturbativa que conhecemos de Mecânica Quântica, onde o operador não-perturbado é a parte solúvel do problema, o mesmo não é verdade no formalismo apresentado aqui. Na verdade sabemos tão pouco sobre a solução exata do operador \hat{V} quanto do modelo inteiro. Todavia, as relações derivadas acima continuam sendo válidas, pois elas prescindem apenas da hipótese de que o estado $|\tilde{\psi}(z)\rangle$ pode ser expandido em potências do parâmetro de perturbação. Outras formulações para expansões em séries perturbativas diagonalizam uma das partes do operador \hat{S} , mais comumente \hat{W} , e sistematizam a expansão numa forma mais similar àquela da Mecânica Quântica [74]. Até aqui os resultados para ambas as formas têm se mostrado comparáveis.

7.3 Expansão em série supercrítica para o modelo AB

Para desenvolvermos a técnica da expansão perturbativa supercrítica no modelo AB, começaremos reescrevendo o operador dado pela expressão (6.19) da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
 \hat{S} &= \sum_i [(\mathbb{A}_i^\dagger - \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger)(\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1})] + \\
 &+ \left(\frac{2p_c}{p_a} \right) \left[\frac{p_b}{2p_c} \sum_i [(\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i)(2 - \mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1})] + \right. \\
 &\left. + \sum_i (\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i) \right]. \tag{7.27}
 \end{aligned}$$

A primeira soma refere-se a um termo de criação de partículas ativas A , enquanto que as outras duas, dentro do colchete, dão conta da aniquilação destas partículas. Deste modo, podemos escrever o operador completo como $\hat{S} = \lambda \hat{W} + \hat{V}$, sendo

$$\hat{W} = \alpha \sum_i [(\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i)(2 - \mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1})] + \sum_i (\mathbb{A}_i - \mathbb{A}_i^\dagger \mathbb{A}_i)$$

e

$$\hat{V} = \sum_i [(\mathbb{A}_i^\dagger - \mathbb{A}_i \mathbb{A}_i^\dagger)(\mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_{i-1} + \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_{i+1})], \tag{7.28}$$

com $\lambda = 2p_c/p_a$ e $\alpha = p_b/2p_c$, de forma que no ponto multicrítico estes parâmetros valem $\lambda = 0$ e $\alpha = \infty$.

Para determinarmos como estes operadores agem sobre uma configuração (\mathcal{C}) qualquer, analisaremos as possíveis configurações para um sítio e sua primeira vizinhança.

- Ação do operador \hat{V}

1. O sítio i está ocupado

$$\hat{V}_i(\mathcal{C}) = 0$$

2. O sítio i está vazio

- (a) Ambos os vizinhos estão vazios

$$\hat{V}_i(\mathcal{C}) = 0$$

- (b) Um dos vizinhos está ocupado

$$\hat{V}_i(\mathcal{C}) = (\mathcal{C}'_i) - (\mathcal{C}),$$

onde (\mathcal{C}'_i) representa a configuração original alterada pela criação de uma partícula ativa no sítio i .

(c) Os dois vizinhos estão ocupados

$$\hat{V}_i(\mathcal{C}) = 2[(\mathcal{C}'_i) - (\mathcal{C})]$$

• Ação do operador \hat{W}

1. O sítio i está vazio

$$\hat{W}_i(\mathcal{C}) = 0$$

2. O sítio i está ocupado

$$\hat{W}_i(\mathcal{C}) = (\mathcal{C}''_i) - (\mathcal{C}),$$

onde (\mathcal{C}''_i) representa a configuração original alterada pela troca de uma partícula A localizada no sítio i por uma partícula do tipo B .

(a) Ambos os vizinhos estão vazios

$$\hat{W}_i(\mathcal{C}) = 2\alpha[(\mathcal{C}''_i) - (\mathcal{C})],$$

(b) Um dos vizinhos está ocupado

$$\hat{W}_i(\mathcal{C})\alpha = [(\mathcal{C}''_i) - (\mathcal{C})]$$

(c) Ambos os vizinhos estão ocupados

$$\hat{W}_i(\mathcal{C}) = 0$$

Resumindo estas possibilidades em uma única expressão para cada um dos operadores, temos

$$\hat{V}(\mathcal{C}) = \sum_{i=1}^{q_1} (\mathcal{C}'_i) + 2 \sum_{i=1}^{q_2} (\mathcal{C}'_i) - (q_1 + 2q_2)(\mathcal{C}), \quad (7.29)$$

onde q_1 é o número de sítios com partículas B e um vizinho do tipo A e q_2 é o mesmo número, mas com dois vizinhos ocupados por partículas A . Por outro lado,

$$\hat{W}(\mathcal{C}) = \alpha \sum_{i=1}^{r_1} (\mathcal{C}''_i) + 2\alpha \sum_{i=1}^{r_2} (\mathcal{C}''_i) + \sum_{i=1}^r (\mathcal{C}''_i) - [\alpha(r_1 + 2r_2) + r](\mathcal{C}), \quad (7.30)$$

onde r_1 é o número de sítios ocupados por partículas A e um vizinho B , r_2 é o mesmo número com dois vizinhos B e r é o número total de sítios ocupados por partículas A .

Desta forma, a expressão para a atuação do operador $(z - \hat{V})^{-1}\mathcal{C}$, dada pela equação (7.26), será

$$\begin{aligned} (z - \hat{V})^{-1}(\mathcal{C}) &= \frac{1}{z} \left[(\mathcal{C}) + (z - \hat{V})^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{q_1} (\mathcal{C}'_i) + 2 \sum_{i=1}^{q_2} (\mathcal{C}'_i) - (q_1 + 2q_2)(\mathcal{C}) \right\} \right] \\ &= z_{\tilde{q}} \left[(\mathcal{C}) + (z - \hat{V})^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{q_1} (\mathcal{C}'_i) + 2 \sum_{i=1}^{q_2} (\mathcal{C}'_i) \right\} \right], \end{aligned} \quad (7.31)$$

onde $z_{\tilde{q}} = 1/(z + \tilde{q})$, onde $\tilde{q} = q_1 + 2q_2$. Observe que $(z - \hat{V})^{-1}(0) = 1/z(0)$, sendo (0) a representação da configuração em que todos os sítios da rede estão ocupados por partículas do tipo B .

7.3.1 Derivação de alguns termos da série do modelo AB

Para mostrar como este formalismo funciona no modelo AB, construiremos alguns termos da série supercrítica deste modelo para a probabilidade de sobrevivência. Assim como ilustramos na série temporal do PC, usaremos uma condição inicial em que a rede é ocupada por apenas uma partícula ativa. A simbologia das configurações é a mesma usada naquele exemplo.

Vamos calcular a probabilidade de sobrevivência até a terceira ordem em λ . Isso pode ser mais facilmente implementado se calcularmos a probabilidade de que o sistema atinja o estado de vácuo (ausência de partículas ativas). Então, se omitirmos o termo z^{-1} , teremos que

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |1\rangle \\ |\tilde{\psi}_0\rangle &= (z - \hat{V})^{-1}|1\rangle \\ &= \frac{1}{2} [|1\rangle + (z - \hat{V})^{-1} \{2|11\rangle\}] \\ &= \frac{1}{2} [|1\rangle + \{|11\rangle + (z - \hat{V})^{-1}(2|111\rangle)\}] \\ &= \frac{1}{2} [|1\rangle + |11\rangle + |111\rangle] \end{aligned} \quad (7.32)$$

Agora, para calcularmos o próximo termo $|\tilde{\psi}_1\rangle$, devemos atuar o operador de aniquilação sobre o estado $|\tilde{\psi}_0\rangle$. Este último conta com estados de até três partículas, mas quando atuarmos o operador \hat{W} basta conservarmos termos com $N - n$ partículas, onde N é a ordem máxima que desejamos calcular e n a ordem do termo que está sendo calculado. Em nosso caso específico $N = 3$ e $n = 1$, de maneira que conservaremos termos com até duas partículas. Isso ocorre pois termos com mais partículas

não contribuirão para a probabilidade de que o sistema atinja o estado absorvente na ordem N .

$$\begin{aligned}
|\tilde{\phi}_1\rangle &= \hat{W}|\tilde{\psi}_0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\{(2\alpha + 1)[|0\rangle - |1\rangle] + 2(\alpha + 1)[|1\rangle - |11\rangle] + 2(\alpha + 1)|11\rangle + |101\rangle\} \\
&= \frac{1}{2}[(2\alpha + 1)|0\rangle + |1\rangle + |101\rangle] \\
|\tilde{\psi}_1\rangle &= (z - \hat{V})^{-1}|\tilde{\phi}_1\rangle \\
&= \frac{1}{2}(2\alpha + 1)|0\rangle + \frac{1}{4}|1\rangle + \frac{1}{4}|11\rangle + \frac{1}{8}|101\rangle
\end{aligned} \tag{7.33}$$

Os demais termos são

$$\begin{aligned}
|\tilde{\phi}_1\rangle &= \frac{1}{4}(2\alpha + 1)|0\rangle + \frac{1}{4}(2\alpha + 2)|1\rangle, \\
|\tilde{\psi}_2\rangle &= \frac{1}{4}(2\alpha + 1)|0\rangle + \frac{1}{8}(2\alpha + 2)|1\rangle \\
|\tilde{\phi}_2\rangle &= \frac{1}{8}(2\alpha + 2)(2\alpha + 1)|0\rangle \\
|\tilde{\psi}_3\rangle &= \frac{1}{8}(2\alpha + 2)(2\alpha + 1)|0\rangle.
\end{aligned}$$

Desta forma, determinamos a probabilidade de que o sistema caia no estado absorvente, P_0 , colecionando os termos relativos ao vácuo, $|0\rangle$. Assim, a probabilidade de sobrevivência no estado estacionário é dada por

$$\begin{aligned}
P_\infty &= 1 - \lim_{z \rightarrow 0} zP_0 \\
&= 1 - \frac{1}{2}(2\alpha + 1)\lambda - \frac{1}{4}(2\alpha + 1)\lambda^2 - \frac{1}{8}(2\alpha + 2)(2\alpha + 1)\lambda^3 + \dots
\end{aligned} \tag{7.34}$$

Esta operações algébricas podem ser realizadas em um computador, utilizando um algoritmo apropriado. As configurações com n partículas são expressas como números inteiros, enquanto os coeficientes são expressos como variáveis de dupla precisão. Inicialmente, tentamos expressar estas variáveis como números racionais, o que evitaria erros numéricos. Entretanto os denominadores eram números inteiros que cresciam rápido demais de ordem para ordem, inviabilizando esta tentativa. Para implementação do algoritmo computacional, usamos um processador Athlon MP220, com 1Gb de memória. O tempo de computação não é o grande impedimento neste cálculo (cerca de 6hs são necessárias para obtermos 25 termos). A memória, por outro lado, é o fator

limitante, pois cada configuração calculada está associada a um polinômio em α , cujo número de monômios cresce quase que exponencialmente de ordem para ordem.

A forma geral para a probabilidade de sobrevivência é

$$P_\infty = 1 - \frac{1}{2}(2\alpha + 1)\lambda - \sum_{i=2}^{25} \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij} \lambda^i \alpha^j. \quad (7.35)$$

Note que apesar da variável α divergir no modelo do votante, o produto $\alpha\lambda$ é finito, de modo que nenhum dos termos da série é divergente. Calculamos 25 termos que são mostrados no apêndice B. Estes termos concordam no limite $p_b = 0$, até a vigésima quarta ordem, com aqueles calculados em [57] para o processo de contato (Alertamos que neste trabalho, a variável λ é igual à metade daquela de nosso cálculo).

7.4 Análise de séries

Para determinarmos propriedades específicas de um determinado modelo a partir de sua série é necessário empregarmos algumas técnicas para a análise desta. Na verdade, o que temos é uma soma finita que, em geral, não tem um termo geral conhecido. Além disso, mesmo que soubéssemos o termo geral da série ainda teríamos o desafio de descobrir para que função esta série convergiria. Conhecendo a expressão (7.35) não temos como imediatamente inferir informações como qual o ponto crítico do modelo AB e qual o expoente crítico associado a esta probabilidade de sobrevivência. Por essa razão, se faz necessário usarmos algumas técnicas auxiliares que nos permitam descobrir estas grandezas a partir dos termos que calculamos.

Em problemas de equilíbrio termodinâmico estas técnicas já há muito desempenham este papel no estudo dos fenômenos críticos [2]. Duas das mais conhecidas são o *o método da razão* [2] e os *aproximantes de Padé* [76].

7.4.1 Método da razão

O método da razão constitui uma análise de séries que possibilita bons resultados em casos muito restritos. Este método costuma falhar quando o ponto crítico não é a singularidade mais próxima da origem, quando esta singularidade não está no eixo real ou mesmo se a série é alternada em que os coeficientes alternam o sinal erráticamente.

O formalismo deste método, discutido em [2], constitui-se em tomarmos a expansão em série de uma função $f(x)$, tal que

$$f(x) \sim (x - x_c)^{1+g}, \quad (7.36)$$

possa ser expandida numa série $f(x) = \sum_i a_i x^i$, sendo que a razão de seus coeficientes $r_n = a_n/a_{n-1}$ se comporta, para grandes valores da ordem n , como

$$r_n \sim x_c \left[1 + \frac{g}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \right]. \quad (7.37)$$

Se, para $n \rightarrow \infty$, o comportamento de r_i for linear com $1/n$, então da expressão acima podemos determinar o ponto crítico e o expoente usando uma análise gráfica para esta razão em função do inverso da ordem do coeficiente.

7.4.2 Aproximantes de Padé

Novamente consideramos a série de P_∞ com α fixo, tendo assim uma série de uma variável. Considerando uma função genérica $f(x)$ que possua uma singularidade num ponto x_c , tal que

$$f(x) = (x_c - x)^{-\beta}. \quad (7.38)$$

Definiremos a função $F(x) = \frac{d}{dx} \ln f(x)$, o que determina que

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{d}{dx} \ln f(x) = \frac{d}{dx} \ln(x_c - x)^{-\beta} \\ &= -\beta \frac{d}{dx} \ln(x_c - x) \\ &= \frac{\beta}{x_c - x}. \end{aligned} \quad (7.39)$$

Por outro lado, se a função $f(x)$ é expressa como uma soma finita de N termos,

$$f(x) = \sum_{i=1}^N a_n x^{n-1}, \quad (7.40)$$

então

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{d}{dx} \ln f(x) = \frac{f'(x)}{f(x)} \\ &= \frac{\sum_{n=2}^N (n-1) a_n x^{n-2}}{\sum_{n=1}^N a_n x^{n-1}}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Considerando que a função $F(x)$ possa ser expressa como a razão de dois polinômios de x , com graus L e M ,

$$F(x) = \frac{P_L(x)}{Q_M(x)}, \quad (7.42)$$

damos o nome de aproximante de Padé [76] a esta função e o ponto crítico da função $f(x)$, como podemos ver da equação (7.39), é identificado com uma das raízes do polinômio $Q_M(x)$, enquanto o expoente β é o resíduo deste aproximante.

Se estes polinômios tiverem a forma

$$P_L(x) = p_1 + p_2x + p_3x^2 + \dots + p_Lx^{L-1} + p_{L+1}x^L$$

e

$$Q_M(x) = q_1 + q_2x + q_3x^2 + \dots + q_Lx^{M-1} + q_{M+1}x^M \quad (7.43)$$

podemos usar a expressão (7.41) para relacioná-los com os termos da série da seguinte forma,

$$\begin{aligned} & (p_1 + p_2x + p_3x^2 + \dots + p_{L+1}x^L)(a_1 + a_2x + a_3x^2 + \dots + a_{N+1}x^N) \\ &= (q_1 + q_2x + q_3x^2 + \dots + q_{M+1}x^M)(a_2x + 2a_3x + \dots + Na_{N+1}x^{N-1}). \end{aligned} \quad (7.44)$$

Por identidade polinomial determinamos um conjunto de equações lineares, cuja solução fixa os valores dos coeficientes dos polinômios P_L e Q_M ,

$$\begin{aligned} p_1a_1 &= a_2q_1 \\ p_1a_2 + p_2a_1 &= a_2q_2 + 2a_3q_1 \\ p_1a_3 + p_2a_2 + p_3a_1 &= a_2q_3 + 2a_3q_2 + 3a_4q_1 \\ p_1a_4 + p_2a_3 + p_3a_2 + p_4a_1 &= a_2q_4 + 2a_3q_3 + 3a_4q_2 + 4a_5q_1 \\ &\vdots \\ \sum_{i=1}^{L+M+2} p_i a_{L+M+3-i} &= \sum_{i=2}^{L+M+2} (i-1)a_i q_{L+M+3-i}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

Generalizando, a k -ésima linha deste sistema de equações, considerando a escolha $q_1 = 1$, é expressa por

$$\sum_{i=1}^k kp_i a_{k+1-i} - \sum_{i=2}^k (k+1-i)q_i a_{k+2-i} = ka_{k+1}. \quad (7.46)$$

Como temos $L + M + 1$ incógnitas, devemos ter o mesmo número de equações para, a partir dos termos da série, determinar o aproximante de Padé desejado, respeitando à restrição $L + M + 1 \leq 1$.

Existem variações deste método que modificam a forma funcional de $f(x)$, explorando o que podemos conhecer do problema. Uma destas variações é o aproximante tendencioso que redefine a função $F(x)$ como sendo

$$F(x) = (x - x_c) \frac{d}{dx} \ln f(x). \quad (7.47)$$

Com esta definição, o aproximante resulta no expoente β . Construindo aproximantes tendenciosos de diferentes ordens, todos se interceptam no ponto crítico, como podemos ver no exemplo usado para a série supercrítica do PC [57].

Outra variante do aproximante d-log Padé trata-se dos chamados aproximantes inomogêneos [77] que se prestam para a análise de séries para uma função $f(x)$ cujo comportamento geral seja ditado pela expressão,

$$f(x) = \frac{A(x)}{(x_c - x)^\beta} + B(x). \quad (7.48)$$

Para este tipo de função a equação que determina os polinômios do aproximante $F(X)$, é dada pela equação

$$P_L(x) = Q_M(x)F(x) + R_S(x) \frac{d}{dx} F(x), \quad (7.49)$$

onde o polinômio genérico $H_g(x)$ é um polinômio de grau g na variável x .

7.4.3 Aproximantes diferenciais parciais

Os métodos para análise de séries apresentados até aqui, servem para o estudo de funções de uma variável, $f(x)$. Entretanto, o modelo AB, que estamos estudando através de uma expansão supercrítica, tem suas quantidades, tal como a probabilidade de sobrevivência, como função de duas variáveis, α e λ . Apesar de ser possível fixar uma delas e analisar a série da outra, seria mais interessante fazer a análise da série sem usar deste artifício, usando toda a informação disponível.

Uma generalização dos aproximantes de Padé, os chamados Aproximantes Diferenciais Parciais (que usa a sigla PDA, advinda do inglês *Partial Differential Approximants*)[78], é apropriada para a análise de séries com duas variáveis. Além disso este método foi desenvolvido para lidar especificamente com funções $f(x, y)$ que se caracterizam por um ponto multisingular,

$$f(x, y) \approx \frac{1}{|\Delta\tilde{x}|^\gamma} Z \left(\frac{\Delta\tilde{y}}{|\Delta\tilde{x}|^\phi} \right), \quad (7.50)$$

onde

$$\Delta\tilde{x} = (x - x_c) - (y - y_c)/e_2$$

e

$$\Delta\tilde{y} = (y - y_c) - e_1(x - x_c), \quad (7.51)$$

sendo γ e ϕ os expoentes e $e_{1,2}$ os eixos de escala.

Comparando esta equação com aquela escrita em (5.6), associamos o expoente γ com a quantidade f quando $\Delta\tilde{y} = 0$, o que significa que, no modelo AB, devemos esperar que $-\gamma = \beta' = 1$, que é o expoente da classe PDC para a probabilidade de sobrevivência. Já o expoente ϕ é o expoente de “crossover” para a interseção das classes PD e PDC, enquanto que a função Z possui uma singularidade em um ou mais pontos de seu argumento, correspondendo à linha crítica incidente sobre o ponto multicrítico.

Se esta função de duas variáveis puder ser expandida numa série,

$$f(x, y) = \sum_{k,k'} a_{k,k'} x^k y^{k'} \quad (7.52)$$

sua substituição na equação definidora dos aproximantes $F(x, y)$,

$$P_L(x, y)F(x, y) = Q_M(x, y) \frac{\partial F(x, y)}{\partial x} + R_N(x, y) \frac{\partial F(x, y)}{\partial y}, \quad (7.53)$$

onde os polinômios nas variáveis x, y , P, Q e R com graus L, M e N , respectivamente, determinam os coeficientes destes polinômios. Com estas relações é possível construir um conjunto de equações lineares para se determinar os coeficientes destes polinômios. O ponto multicrítico (x_c, y_c) é aquele que anula simultaneamente os polinômios Q e R . Um aspecto deste método, que não ocorre no caso dos aproximantes de Padé, é

que a definição dos polinômios não prescinde tão somente do grau dos polinômios, mas de sua forma específica, pois podemos ter um arranjo de grau três, por exemplo, das seguintes maneiras distintas,

$$T(x) = 2x^2y + 3x^3 + xy^2 + y^3.$$

ou

$$V(x) = 2xy^2 + 3x^3 + x^2y + y^3.$$

Assim, não é suficiente determinar um número L, M ou N para se definir um polinômio, mas um conjunto destes números que sintetizam formas distintas de cada polinômio. Logo, dada uma série caracterizada por um conjunto de K coeficientes, como escrita na equação (7.52), pode ter arranjos diferentes para os polinômios P_L, Q_M e R_N respeitando $K = L + M + N - 1$. Um dos coeficientes destes polinômios é adotado como unitário.

Uma outra maneira de se determinar os aproximantes $F(x, y)$ é integrando a equação (7.53). Isso pode ser feito através do método das características. Uma variável τ é definida, tal que

$$\frac{d}{d\tau}x = Q_M(x(\tau), y(\tau)), \quad \frac{d}{d\tau}y = R_N(x(\tau), y(\tau)). \quad (7.54)$$

Sendo que ao longo da curva característica $(x(\tau), y(\tau))$, a equação (7.53) satisfaz a relação

$$\frac{dF}{d\tau} = P_L(x(\tau), y(\tau))F(x(\tau), y(\tau)). \quad (7.55)$$

O conjunto destas três equações, dada uma condição inicial, determinam o aproximante F ao longo de uma característica. Pode-se mostrar que se escolhermos uma condição inicial que esteja sobre a linha crítica, a curva característica reproduzirá a linha crítica a partir deste ponto inicial.

Uma subrotina bastante completa devido à D.F. Styer [79] é disponível para a implementação do algoritmo de determinação deste método. Esta rotina requer como dados de entrada os coeficientes da série a ser analisada e de um arquivo que determine as formas específicas dos polinômios característicos, P_L, Q_M e R_N . É possível gerar diversos aproximantes com escolhas distintas de formas para cada conjunto K . O resultado fornece os valores do ponto multicrítico, (x_c, y_c) , bem como os expoentes γ e ϕ , além dos eixos de escala $e_{1,2}$. As curvas características também podem ser obtidas, assim como estimativas das quantidades críticas já mencionada fixando-se vínculos.

7.5 Resultados para a análise da série supercrítica do modelo AB

Analisaremos os resultados da série supercrítica derivada para o modelo AB, cujos coeficientes são mostrados na tabela do apêndice B. Efetuaremos esta análise fazendo uso das técnicas apresentadas na seção anterior, procurando determinar todas as propriedades relevantes para a caracterização da transição de fases presente neste modelo.

7.5.1 Resultados da série supercrítica a partir do método da razão

Se fixarmos um valor para a variável α , a probabilidade de sobrevivência, que é expressa segundo a equação (7.35), terá a forma

$$P_\infty = 1 - \sum_{i=1}^{25} a_i(\alpha)\lambda^i. \quad (7.56)$$

Como exame preliminar dos resultados, podemos aplicar o método da razão [2] para analisar esta série. Os resultados para $r_i = a_i/a_{i-1}$ como função de $1/i$ são mostrados na figura (7.1). No caso $\alpha = 0$ (círculos), um comportamento linear é observado assintoticamente para $1/i \rightarrow 0$, permitindo-nos ajustá-lo pela função $r_i \approx 1,6489(1 - 0.7231/i)$, o que implica num ponto crítico $\lambda_c = 0.6064$ e $\beta = 0.2769$. Estes resultados está em perfeito acordo com aqueles conhecidos para o PC [57].

No caso $\alpha = 0$, em que o comportamento assintótico de r_i parece mesmo linear, atesta que a singularidade física da série, ou seja seu ponto crítico, é a mais próxima da origem. Entretanto, se nos determos mais atentamente na figura (7.1), perceberemos que para outros valores do parâmetro α o comportamento desta razão só pode ser linear em grande valores de n . Isto dificulta nossa análise, pois seria necessário derivarmos muito mais termos para termos estimativas razoáveis para os demais valores de α .

7.5.2 Resultados da série supercrítica a partir dos aproximantes d-log Padé

Ainda usando a série para a probabilidade de sobrevivência com a variável α fixa, partimos para sua análise fazendo uso do método dos aproximantes d-log Padé. Este método, em geral, se mostra mais confiável do que o método da razão, mesmo que a singularidade correspondente ao ponto crítico não seja a mais próxima da origem.

Calculamos diversos aproximantes, sempre tomando valores cujas ordens L e M se relacionassem como $L = M - 1, M, M + 1$, pois usualmente esta escolha proporciona

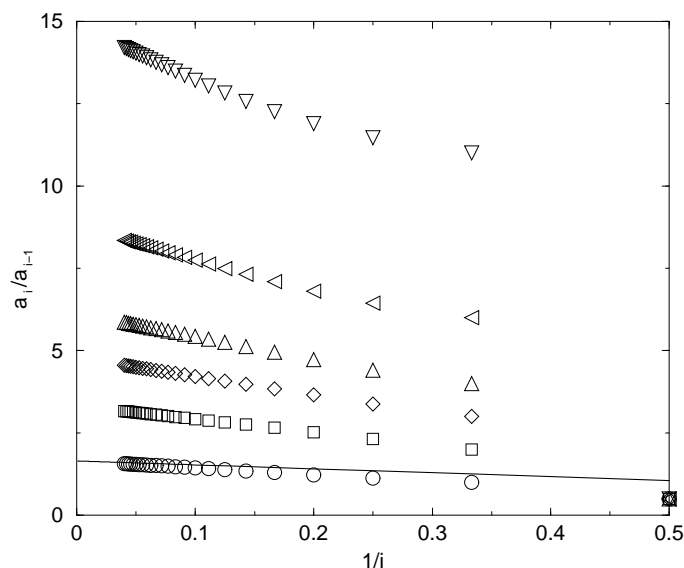


Figura 7.1: Estimativa feita através do método da razão para diferentes valores do parâmetro α . Os resultados mostrados são para $\alpha = 0$ (círculos) e, sucessivamente de baixo para cima, $\alpha = 1, 2, 3, 5$ e $\alpha = 10$. A linha sólida mostra o comportamento assintótico esperado para o limite em que este modelo equivale ao PC.

menores flutuações para as grandezas de interesse. Como o número de termos de nossa série nos permitia varia estas ordens, mantendo o vínculo $L + M \leq 24$, efetuamos a construção de aproximantes a partir de $M = 9$ indo até $M = 12$. Além disso, variamos α desde $\alpha = 0$ até $\alpha = 40$. Os valores do ponto crítico para os aproximantes calculados possuem uma dispersão extremamente pequena, especialmente para valores de $\alpha \approx 0$. Também os expoentes, nesta região, são comparáveis com aqueles calculados em [57]. No entanto, para valores maiores de α , em que $p_c \rightarrow 0$, a construção de aproximantes de algumas ordens, proporcionam sistemas lineares com um determinante principal muito próximo de zero. Isto gera erros numéricos para a determinação dos coeficientes dos polinômios.

Aproximantes tendenciosos e inomogêneos também foram testados, sem resultarem em mudanças drásticas nos valores obtidos para a linha crítica. Já relativamente aos expoentes, o aproximante tendencioso se mostrou mais sensível à aproximação do ponto multicrítico, $\alpha \rightarrow \infty$, do que o método usual, como mostra a figura (7.2).

Comparando o resultado com as simulações vemos, através da figura (7.3), que a linha crítica obtida via os aproximantes sem tendência coincide perfeitamente com aquela obtida pelo método computacional.

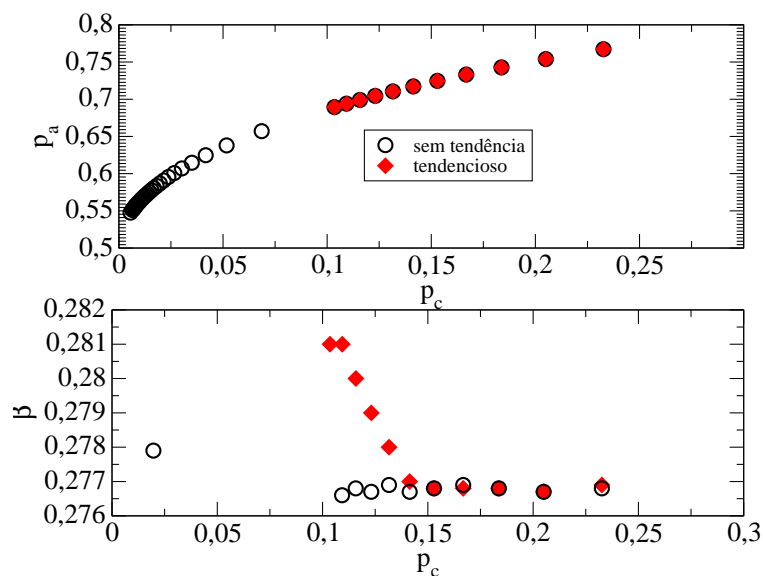


Figura 7.2: Linha crítica e expoente crítico obtidos através dos aproximantes d-log Padé com e sem tendência.

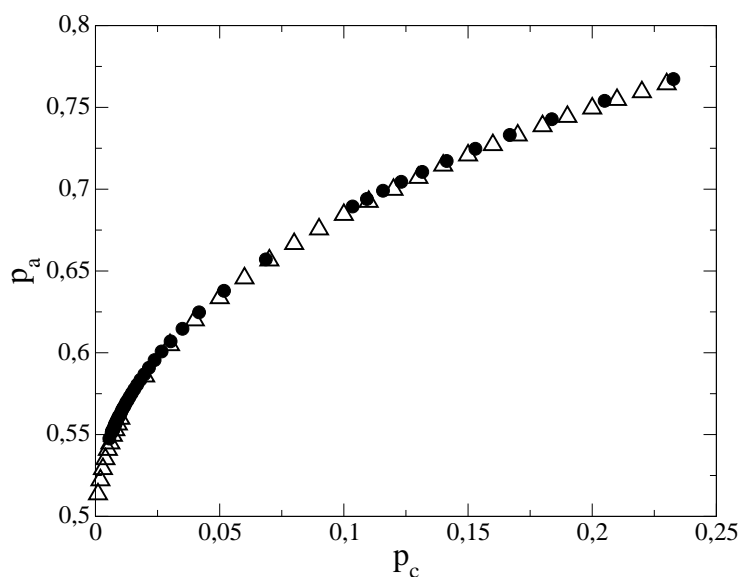


Figura 7.3: Linha crítica do modelo calculada por simulações (triângulos) e pelos aproximantes de Padé (círculos).

Da estimativa da linha crítica através deste método também podemos inferir o expoente de “crossover” ϕ . Fazemos isso usando o comportamento assintótico esperado para a linha crítica, nas proximidades do ponto multicrítico, $p_c \sim (p_a - 1/2)^\phi$. Os valores obtidos por esta estimativa, como são mostrados na figura (7.4), exibem grande dispersão na vizinhança do ponto multicrítico, o que não permite inferirmos um valor preciso para este expoente. Porém, é perceptível que esta flutuação ocorre em volta de $\phi = 2$, valor que se desenhou como o mais provável em nossa análise até aqui.

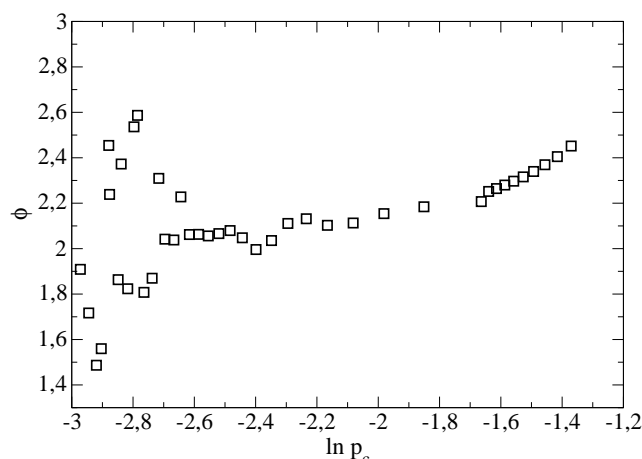


Figura 7.4: Estimativa do expoente ϕ feita através da linha crítica determinada pelos aproximantes de Padé.

Realmente, o aumento da dispersão das estimativas com a diminuição do parâmetro $p_c \rightarrow 0$ não é surpreendente, pois este limite corresponde à passagem da classe de universalidade PD para a PDC, cujos expoentes são distintos. É conhecido que em situações assim, a redução de uma série de duas variáveis para uma leva a estimativas mais pobres [78]. Então se faz necessário abordarmos o problema sem esse tipo de simplificação, o que é feito com o uso dos aproximantes diferenciais parciais.

7.5.3 Resultados da série supercrítica a partir dos aproximantes diferenciais parciais

Para proceder a esta análise é apropriado realizar uma mudança de variáveis, para que o ponto multicrítico possa ser localizado num valor finito das novas variáveis. Uma mudança possível é

$$x = \lambda = \frac{2p_c}{p_a} \quad y = \alpha\lambda = \frac{1 - p_a - p_c}{p_a}. \quad (7.57)$$

Nestas novas variáveis, o ponto multicrítico se localiza em $x = 0$ e $y = 1$, e a probabilidade de sobrevivência pode ser escrita como

$$P =_{\infty} = 1 - \frac{1}{2}x - y - xF(x, y), \quad (7.58)$$

onde

$$F(x, y) = \sum_{i=1}^{24} \sum_{j=0}^i b_{i+1,j} x^{i-j} y^j. \quad (7.59)$$

Note que a forma desta série é triangular, que é convenientemente tratada usando-se os PDAs. O número de aproximantes que podem ser obtidos é muito grande, então nos restringimos aos aproximantes em que $M \approx N$. Todos os polinômios, usados como entrada para a subrotina que calcula as quantidades de interesse em nosso modelo, possuem a simetria triangular. A ordem destes polinômios é variada de maneira a se gerar um grande número de dados. Os valores obtidos tiveram baixa flutuação, mesmo quando comparamos os valores obtidos de ordens altas ou baixas.

Para a estimativa destes valores foram usados cerca de 42 aproximantes que usaram os coeficientes da série para a probabilidade de sobrevivência, aproveitando ordens de 15 a 24 para esta série. Alguns aproximantes que geraram valores muito distintos da média, foram descartados, restando ainda 36 aproximantes para usarmos na obtenção das estimativas.

Na figura (7.5) mostramos as estimativas para a localização do ponto multicrítico. Notamos que estas estimativas estão muito próximas do valor exatamente conhecido, $x = 0$ e $y = 1$. A estimativa para x_c e y_c é $x_c = (0.4 \pm 1.8) \times 10^{-6}$ e $y = 1.0000 \pm 0.0003$. O expoente $-\gamma$ na forma de escala multicrítica (7.50) tem um valor estimado igual a 1.00 ± 0.01 , que está em acordo com o valor exato $\beta' = 1$ [7] e que corresponde ao expoente crítico da classe PDC. Finalmente, o expoente de “crossover” foi estimado como $\phi = 2.01 \pm 0.03$, compatíveis então com o valor de campo médio ($\phi = 2$ [67]). As estimativas para estes expoentes são mostradas na figura (7.5).

Também obtivemos aproximantes tendenciosos fixando parâmetros como o ponto multicrítico, o expoente $-\gamma$ e os eixos de escala, deixando livre o expoente de “crossover”. Este procedimento resulta numa melhora da estimativa deste expoente, resultando em $\phi = 2.00 \pm 0.02$. Nossas estimativas nos levam a concluir que, de fato, o expoente ϕ possui seu valor clássico. Estes resultados também mostraram coerência quanto à determinação das outras quantidades. Os eixos de escala exibiram uma forte dispersão, mas uma maioria significativa apontou para valores muito altos para o eixo e_1 , enquanto e_2 é tipicamente muito menor. Isto sugere que $\Delta\tilde{y} = x$ e que é razoável

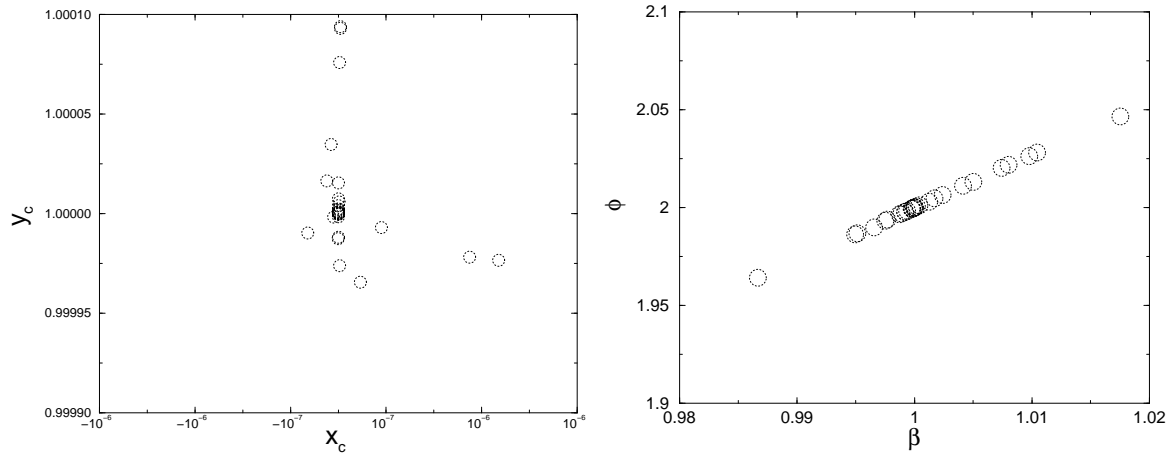


Figura 7.5: Resultados dos aproximantes diferenciais parciais para o ponto multicrítico e para os expoente β e ϕ . Cada círculo corresponde a um aproximante distinto.

escolher $\Delta\tilde{x} = 1 - y$, pois esta corresponde à direção fraca, paralela à linha crítica no ponto multicrítico. Além disso, no limite do modelo do votante ($x = 0$), notamos que a série se reduz ao resultado exato $P_\infty = 1 - y$.

Através do método das características determinamos a linha crítica do modelo, integrando as equações (7.54), tendo como condição inicial o ponto do espaço de parâmetros do modelo em que este é equivalente ao PC. A figura (7.6) compara estes resultados com aqueles obtidos através das simulações numéricas, exibindo grande coincidência. Esta linha foi construída a partir de um aproximante cujos polinômios são caracterizados pelas seguintes ordens: $K = 300$, $L = 171$ e $M = N = 65$.

Como podemos ver no apêndice B todos os coeficientes $b_{i,i-1}$ são iguais a $1/2$. Isto pode ser mostrado facilmente a partir da álgebra de operadores que define esta série. Sendo assim, podemos somar exatamente estes termos, de modo que P_∞ passa a ter a forma

$$P_\infty = (1 - y) \left[1 - \frac{1}{2} \frac{x}{(1 - y)^2} - \dots \right]. \quad (7.60)$$

Se compararmos esta expressão com a forma de multiescala 7.50, podemos reconhecer, entre os colchetes, os dois primeiros termos da expansão em série de Taylor da função $Z(z)$, onde a variável z é identificada como $\frac{x}{(1-y)^2}$. Além disso, lembrando que para $y = 0$ a série representa o modelo PC, a função $Z(z)$ pode ser identificada como sua probabilidade de sobrevivência, cuja série foi estudada em grande detalhe em [57] e exibe uma singularidade em $z_0 = 0.6064$ com expoente $\beta' = \beta = 0.276486$. Como é

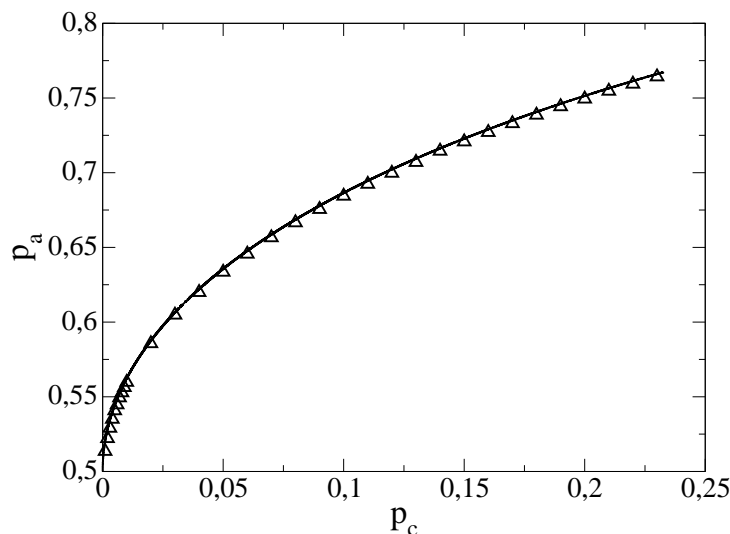


Figura 7.6: Comparação entre a linha crítica obtida via simulação (triângulos) com a curva característica gerada pelos aproximantes diferenciais parciais.

o esperado, a linha crítica exibe um comportamento universal do tipo PD, possuindo assim seus expoentes críticos. Esta linha pode ser obtida fazendo $z = z_0$, isto é,

$$x = z_0(1 - y)^2, \tag{7.61}$$

e esta curva é mostrada na figura 7.7. Note como a curva obtida pela função de escala $Z(z)$, coincide quase que perfeitamente com a característica extraída dos aproximantes. Esta coincidência não ocorre somente numa região próxima ao ponto multicrítico, como seria lícito esperar, mas se propaga ao longo de toda a curva com uma diferença relativa diminuta, não ultrapassando 0.25%.

Como já mencionamos anteriormente, o autômato celular probabilístico DK guarda semelhanças com o modelo AB. Assim como este, uma linha crítica da classe PD é encerrada em um ponto limite que pertence à classe PDC. Com isso um “crossover” entre estas duas classes ocorre, como no modelo AB. Algumas estimativas para o comportamento da linha crítica nas proximidades deste ponto são apresentadas na referência [80]. Embora Ligget [81] tenha inferido um comportamento assintótico para a linha crítica, tomando dois limites para alcançar este ponto, não há concordância entre os valores alcançados. Analisando a partir de um limite superior, um comportamento quadrático é observado vizinho ao ponto da classe PDC. Por outro lado, o limite inferior indica um comportamento linear da linha crítica incidente neste ponto.

Apesar disso, resultados de simulações numéricas e expansões em séries [82] para este autômato, apontam para um comportamento quadrático da linha crítica na viz-

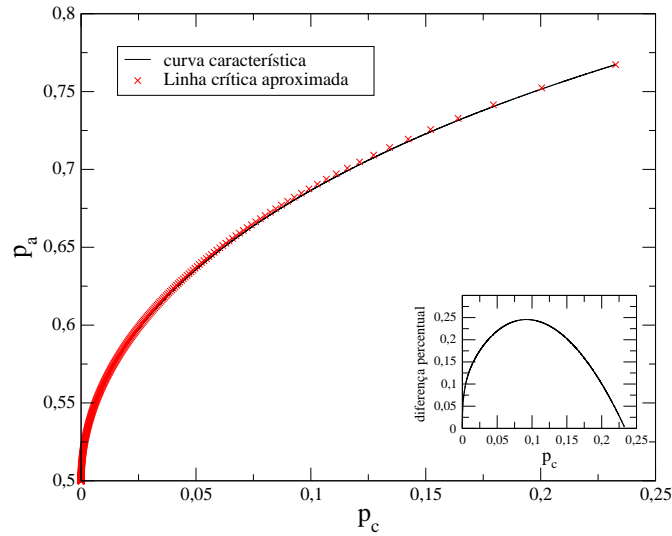


Figura 7.7: Comparação entre a linha crítica obtida pelos aproximantes (linha cheia) e a aproximação de linha crítica derivada da função universal $Z(z)$.

inhança do ponto PDC. Este comportamento é consistente com um expoente de “crossover” de $\phi = 2$, como o que encontramos para o modelo AB. Finalmente uma outra análise de séries é feita em [83], porém com o uso de aproximantes de Padé com uma variável. Por isso, os resultados na região próximas ao ponto multicrítico são inconclusivos.

Neste cenário, há indicações de que o expoente ϕ tem o mesmo valor em ambos os modelos e, sendo assim, constataríamos que, assim como ocorre com as outras propriedades críticas, a regra de atualização (assíncrona para o modelo AB e síncrona para o DK) não altera também o expoente de “crossover”.

7.6 Expansão supercrítica para o modelo AB com difusão

Para incluir o processo de difusão no modelo AB, o operador de evolução temporal deste modelo, dado pela equação (7.27), deve ser somado à seguinte parcela,

$$\hat{S}_d = \sum_i [(1 - \mathbb{A}_{i-1}^\dagger \mathbb{A}_i) \mathbb{A}_{i-1} \mathbb{A}_i^\dagger + (1 - \mathbb{A}_{i+1}^\dagger \mathbb{A}_i) \mathbb{A}_{i+1} \mathbb{A}_i^\dagger]. \quad (7.62)$$

Sendo que o operador completo é escrito como

$$\begin{aligned}
 \hat{S} &= \lambda \hat{W} + \hat{V} + D \hat{S}_d \\
 &= \lambda \left[\hat{W} + \tilde{D} \hat{S}_d \right] + \hat{V} \\
 &= \lambda \hat{R} + \hat{V},
 \end{aligned} \tag{7.63}$$

onde $\hat{R} = \hat{W} + \tilde{D} \hat{S}_d$, \tilde{D}/λ e D é a constante de difusão.

O operador de difusão é incluído juntamente ao de aniquilação, pois este conserva o número de partículas. Se fosse colocado juntamente ao de criação, o truncamento exigido na ação do operador $(z - \hat{V})^{-1}(\mathcal{C})$ seria dúbio. Por isso, definiremos apenas a ação do operador \hat{R} sobre uma configuração genérica dos sítios, (\mathcal{C}) ,

$$\begin{aligned}
 \hat{R}(\mathcal{C}) &= \alpha \sum_{i=1}^{r_1} (\mathcal{C}'_i) + 2\alpha \sum_{i=1}^{r_2} (\mathcal{C}'_i) + \sum_{i=1}^r (\mathcal{C}'_i) + \\
 &+ \tilde{D} \left[\sum_{i=1}^{t_1} (\mathcal{C}'''_i) + \sum_{i=1}^{t_2} (\mathcal{C}'''_i{}^d) + \sum_{i=1}^{t_2} (\mathcal{C}'''_i{}^e) \right],
 \end{aligned} \tag{7.64}$$

onde t_1 é o número de sítios vazios com um vizinho ocupado, t_2 é o mesmo número com dois vizinhos ocupados, (\mathcal{C}'''_i) é a configuração em que o sítio i fica ocupado com dois vizinhos vazios, $(\mathcal{C}'''_i{}^d)$ é a configuração em que o sítio i fica ocupado com o vizinho à direita vazio e $(\mathcal{C}'''_i{}^e)$ é uma configuração similar, mas com o vizinho à esquerda vazio.

A inclusão da difusão provoca um aumento no número de coeficientes, o que provoca uma limitação maior do gasto de memória. Se no caso sem difusão pudemos calcular 25 termos, neste só chegamos a calcular 23 termos. Nossa análise, por hora, limita-se às estimativas feitas por aproximantes d-log Padé, fixando-se duas variáveis, notadamente α e D .

7.6.1 Análise da série com difusão através de aproximantes d-log Padé

Nesta análise utilizaremos o método não tendencioso para estimar os pontos críticos e o método com tendência para chegarmos aos expoentes críticos.

Esta para a probabilidade de sobrevivência série possui três variáveis independentes, α , λ e D , de modo que sua forma geral é dada por

$$P_\infty = 1 - \sum_{i,j,k} a_{i,j,k} \lambda^i \alpha^j D^k. \tag{7.65}$$

Para procedermos à análise através do uso dos d-log Padés fixamos os valores de α e D , extraindo dos diversos aproximantes estudados, estimativas para o ponto crítico $\lambda_c(\alpha, D)$ e para o expoente $\beta(\alpha, D)$.

Assim como no caso do modelo sem difusão nos concentramos em calcular aproximantes das maiores ordens, mantendo a relação $L = M - 1, M, M + 1$. Fixado o valor da constante de difusão, calculamos λ_c para valores do parâmetro α variando desde $\alpha = 0$ até $\alpha = 75$. Em alguns casos, os aproximantes não são bem-condicionados. Isso ocorre principalmente para valores de α mais próximos do limite do modelo do votante. Como os aproximantes, talvez devido à própria dinâmica ou ao menor número de termos, apresentassem maiores flutuações do que aqueles do caso sem difusão, resolvemos adotar um valor médio com pesos iguais para todos os aproximantes calculados e um desvio padrão desta média como erro associado.

A figura (7.8) mostra as linhas críticas do modelo para valores distintos da constante de difusão, variando de $D = 0$ (o caso original) a $D = 10$. Notamos que à medida que a linha se aproxima do ponto multicrítico os erros aumentam. Outra característica é que o aumento da difusão provoca um aumento na região supercrítica.

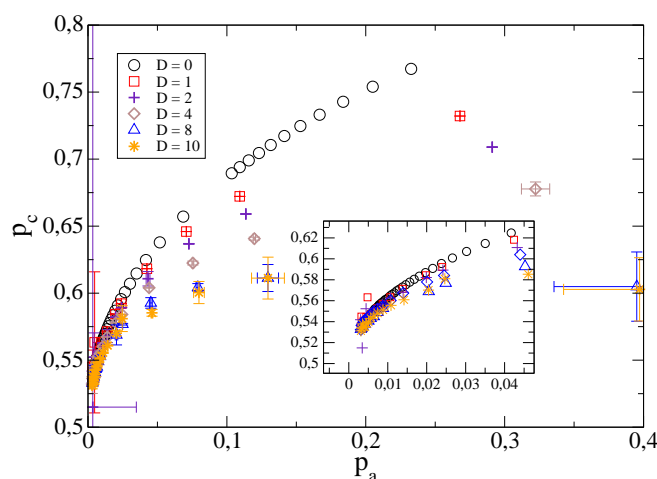


Figura 7.8: Linhas críticas do modelo AB para diferentes valores da constante de difusão. Cada ponto possui uma barra de erro associada ao desvio do valor médio dos aproximantes.

Note que, apesar das curvaturas diminuírem para valores próximos de $\alpha = 0$, alcançando quase um patamar em $D = 10$, a maneira como a linha crítica incide sobre o ponto multicrítico parece não ser sensível ao valor da difusão, como sugere a janela da figura (7.8).

Através da linha crítica é possível estimar o valor do expoente de “crossover” como

função da difusão, atestando que de fato este valor parece não se alterar sensivelmente, como mostra a tabela (7.1). É interessante lembrar que no capítulo 4 os resultados apontam para uma mudança no expoente de $\phi = 2$ para $\phi = 1$ mesmo com qualquer valor finito da constante de difusão, anulando-se para difusão infinita.

Valor da constante de difusão	Expoente ϕ
1	2.28 ± 0.08
2	2.33 ± 0.04
4	2.50 ± 0.08
8	2.19 ± 0.20
10	2.63 ± 0.04

Tabela 7.1: Estimativas do expoente de “crossover” do modelo AB com difusão

Apesar da indicação proporcionada pelos aproximantes de Padé, afirmar que uma difusão finita não altera o expoente ϕ pode parecer precipitado. Esta sentença pode ser melhor apoiada através de conclusões feitas a partir de valores advindos da aplicação dos PDAs. No entanto, esta tarefa ainda está por ser cumprida.

Para finalizar, examinamos o comportamento do expoente crítico β ao longo da linha crítica para diferentes valores de D , como mostrado na figura (7.9). Como no caso sem difusão, os resultados evidenciam uma boa concordância deste expoente com aquele da classe PD, principalmente para valores próximos a $\alpha = 0$, onde o modelo AB coincide com o PC. Porém, mesmo para valores maiores deste parâmetro, os expoentes não distam muito do seu valor PD, apesar de exibirem flutuações maiores.

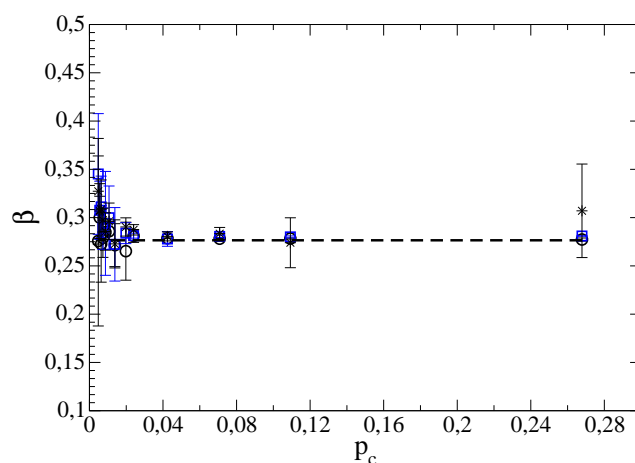


Figura 7.9: Expoente crítico β calculado ao longo da linha crítica para diferentes valores da constante de difusão. As barras de erro correspondem ao desvio da média.

Capítulo 8

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho discutimos técnicas e modelos para o estudo das transições de fases fora-do-equilíbrio termodinâmico. Os sistemas descritos por estes modelos possuem um ou mais estados absorventes, que impossibilitam que estes satisfaçam o balanço detalhado. Por outro lado, estes sistemas também podem alcançar um outro estado estacionário, que não o absorvente, numa certa região do espaço de seus parâmetros. Com isso, mesmo desprovidos dos conceitos de termodinâmica, podemos observar, nestes modelos, uma transição entre uma fase ativa e outra absorvente. Estas transições, assim como no equilíbrio, são caracterizadas por um comportamento coletivo de longo alcance das partes constituintes do sistema, bem como pela definição de propriedades universais como expoentes críticos.

Pelo fato de tais casos não pertencerem ao regime de equilíbrio, não existem ferramentas adequadas para determinar se um determinado modelo possui expoentes críticos característicos de uma classe de universalidade específica. Por isso, é necessário analisar distintos modelos e tentar captar quais ingredientes básicos entre eles determinam um certo comportamento crítico. Tal coisa já foi feita para uma grande classe de modelos, cujos expoentes são idênticos. As características comuns a estes foram escolhidas como premissas para forjar a chamada conjectura PD [26, 27] que estabelece os ingredientes básicos que um certo sistema deve exibir para pertencer à classe de universalidade PD.

Esta classe de universalidade abrange um grande número de exemplos dos processos de reação-difusão. Entretanto, outras classes têm sido evidenciadas a partir da determinação de expoentes críticos para modelos que não satisfaçam alguns pré-requisitos da conjectura. Uma destas possíveis novas classes de expoentes críticos pode ser encontrada nas pilhas de areia com energia fixa [46, 51]. Entretanto, ainda existem discussões a respeito da autenticidade destas novas classes, visto que muitos resultados, para estas, são baseados apenas em dados extraídos das simulações numéricas. À falta de outras técnicas que ponham uma palavra final sobre esta polêmica, parece

necessário o estudo de modelos que compartilhem de algumas das características de sistemas como estas pilhas de areia. Com isso, mais exemplos poderiam ser encontrados e formulações distintas de modelos poderiam levar à uma “triagem” das propriedades relevantes para que estes sistemas distinguissem seu comportamento crítico da vasta gama de exemplos da classe PD.

Nos capítulos precedentes estudamos modelos cujas características eram próprias desta duas vertentes: a classe PD e as possíveis outras. Analisando tais sistemas através de técnicas distintas, tentamos pôr luz na questão de seu comportamento crítico e das vantagens e desvantagens de uma determinada técnica de estudo para implementar esta tarefa. Em geral, as simulações discutidas no capítulo 5, são vastamente utilizadas para o estudo destes problemas. De fato, simulações numéricas quase sempre levam a um cenário confiável. Entretanto, dificuldades numéricas ou computacionais podem pôr em xeque seus resultados. Além disso, diferentemente do cálculo de campo médio, por exemplo, onde temos acessos às equações para a dinâmica das quantidades desejadas. Estas equações não limitam a análise a um conjunto específico de parâmetros, como o faz a simulação. Por outro lado, para obtermos resultados de uma descrição de campo médio, se faz necessário desprezar todas as correlações ou parte delas. Mas, esta escolha é fundamental para que os resultados desta técnica não possuam fidelidade numérica, mas apenas sirvam como um retrato qualitativo daquilo que observaremos ao levar em conta estas correlações.

Uma técnica mais poderosa foi estudada no capítulo 7. Trata-se da expansão em séries, temporal ou perturbativa. Em nosso estudo nos centramos na última escolha para analisar dois modelos presumivelmente da classe PD. Nestes casos, esta técnica se mostrou de grande utilidade, mas nem sempre é assim. Em determinados modelos, expansões em séries podem ser uma “armadilha” e não proporcionam melhores resultados que as simulações [72]. Mesmo assim, quando funcionam, as séries podem fornecer estimativas de grande precisão para as grandezas universais destes modelos.

Por último, uma técnica menos utilizada na literatura, mas que pode gerar resultados razoáveis em alguns modelos, é a solução de sistemas finitos através da diagonalização do operador de evolução temporal destes. Sua aplicação em dois modelos (com e sem conservação de partículas), como foi feita no capítulo 6, mostrou efeitos distintos. Enquanto para o modelo AB, seus resultados foram bons, especialmente na região mais afastada do ponto multicrítico, o mesmo não ocorreu para o modelo da pilha de areia restrita. Apesar de qualitativamente satisfatória, os erros numéricos e a dependência dos valores com o tamanho do sistema, fazem acreditar que este estudo precisa ser melhorado para que suas estimativas possam ser levadas em conta.

No que diz respeito aos modelos apresentados no capítulo 3, estudamos alguns deles com mais de uma técnica, mas nos concentramos em dois casos específicos: o modelo AB (que não conserva partículas) e o modelo da pilha de areia (que conserva). No caso

do modelo AB, o interesse em nosso estudo era comprovar que, mesmo com a adição de um parâmetro extra, a taxa p_b , as propriedades críticas deste modelo seriam idênticas às do PC, visto que as simetrias eram idênticas. Apenas uma exceção era esperada, o limite em que o modelo AB tornava-se idêntico ao modelo do votante ($p_c = 0$). Neste ponto, a classe de universalidade era a PDC. Desta forma, o modelo AB deveria apresentar uma interseção destas classes de universalidade na vizinhança do ponto $p_c = 0$, caracterizando este ponto como multicrítico. O estudo desta escala multicrítica foi levado a cabo mais fortemente pela análise das séries supercríticas deste modelo com o uso dos aproximantes diferenciais parciais. Tal análise levou a um expoente de “crossover” $\phi \approx 2$ que coincidiu com o valor de campo médio para este mesmo expoente. Além disso, estimativas da linha crítica para o autômato de Domany-Kinzel sinalizam para um comportamento quadrático desta linha na vizinhança do ponto em que o autômato possui semelhanças com a PDC [80, 82, 83]. Sendo assim, teríamos uma evidência de que, assim como ocorre com outras propriedades críticas, a escolha da dinâmica como síncrona ou assíncrona não altera a universalidade de um sistema [75].

Já no caso das pilhas de areia com energia fixa, estudamos o modelo de Manna com restrição de altura [51, 70], adicionando um parâmetro λ , cujo o papel era modular a intensidade das probabilidades para as duas possíveis transições que definem sua dinâmica. Este modelo foi estudado por simulações numéricas comuns e aquelas que usavam o algoritmo de determinação do estado quase-estacionário [65]. Os resultados apontam para uma grande dependência dos expoentes críticos em relação a λ . Apesar de surpreendentes, conclusões como essa não são inteiramente novas, como sugerem os resultados dos trabalhos [84, 85] para sistemas semelhantes a esta pilha de areia. Sendo assim, poderíamos conjecturar que sistemas como estes, diferentemente do que ocorre nos modelos de reação-difusão da classe PD, não possuem grande robustez na sua universalidade, com respeito a mudanças de suas regras microscópicas. Interessante para este trabalho seria uma melhor estimativa do expoente crítico β que, por sofrer grande flutuação numérica, torna sua estimativa bem mais difícil que os demais. Outra conclusão que deve ser melhor entendida é o porquê dos expoentes não tenderem para seu valor clássico quando $\lambda \rightarrow -1$, onde a dinâmica é dominada pela difusão. Difusão que também teve seu papel alterado para testar a sensibilidade das propriedades críticas. Numa variação do modelo original, executamos um processo em que pares de partículas saltavam para seus segundos vizinhos e não para os primeiros. O resultado desta mudança mostra uma diminuição no valor do ponto crítico e um sensível aumento em um dos expoentes. Novamente, isto sugere uma grande sensibilidade do modelo às regras microscópicas.

O modelo de três estados apresentado no capítulo 3 ainda está sendo estudado através de simulações para determinação de propriedades estáticas e dinâmicas. Os

primeiros resultados apontam para expoentes críticos dinâmicos da classe PD. No entanto, os expoentes estáticos não parecem pertencer a esta classe e mostram uma dependência com os valores das taxas β_1 e β_2 . Porém, seria mais correto realizar simulações para redes maiores com o intuito de diminuir os efeitos de tamanho finito e, com isso, restringir os erros numéricos.

8.1 Perspectivas

Entre os trabalhos delineados aqui alguns carecem de complementação como as simulações para o modelo de três estados e o uso dos aproximantes diferenciais parciais para a série supercrítica do modelo AB com difusão. No entanto, outras possibilidades se desenrolam a partir do que foi discutido aqui. Variações do processo de contato, com criação por pares e trincas, associadas à difusão, sugerem a existência de um ponto tricrítico [38, 86]. Este tipo de comportamento parece solo fértil para a aplicação da técnica de séries associada com a análise por PDAs. Este resultado elucidaria a possibilidade de um modelo da classe PD possuir um ponto tricrítico, em que sua transição passa a ser descontínua, sem que hajam estados absorventes simétricos, como ocorre na PDC. Apesar de extensivas simulações terem sido usadas para descortinar esta questão, ainda não é claro, ao menos para o caso com criação por pares, se este ponto realmente existe.

Além disso, uma vertente interessante para as pilhas conservativas, seria verificar como se comportam seus expoentes críticos quando introduzimos uma perturbação não-conservativa no sistema que mantenha, em média, o mesmo número de partículas da condição inicial, mas que não respeite, em todo instante, a conservação. Desta forma, estaríamos testando um dos possíveis mecanismos que produz expoentes distintos neste modelo daqueles da classe PDC, a existência de um campo conservado.

Apêndice A

Modelo de Glauber linear à temperatura nula

O modelo de Glauber linear à temperatura nula, também chamado de modelo do Votante é um exemplo simples de modelo de reações na rede com interações de primeiros vizinhos. O chamado caso linear se refere ao problema unidimensional, onde podemos imaginar uma linha de “spins” sem campo externo interagindo da seguinte maneira: se um dado “spin” tem uma orientação oposta ao de seus vizinhos então ele pode passar a ter a mesma orientação com probabilidade $1/2$. Como vimos no capítulo 3, uma solução homogênea é facilmente obtida para este problema e indica que o modelo descrito acima é conservativo, ou seja, a densidade de sítios com um certa orientação permanece inalterada, dependendo apenas da condição inicial. Veremos, neste apêndice, que esta solução não se trata de um artefato da condição de homogeneidade da rede, mas ainda se realiza mesmo quando não considerarmos esta homogeneidade. Esta discussão pode ser encontrada de uma maneira distinta e mais completa em [87].

Para verificarmos isso, começamos reescrevendo a taxa de transição para este modelo, em sua versão unidimensional,

$$w_i(\sigma) = \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \right\}. \quad (\text{A.1})$$

Enquanto isso, no caso de uma variável de Ising, temos que a equação da evolução temporal da média de uma função $f(\sigma)$ qualquer é dada por

$$\frac{d}{dt} \langle f(\sigma) \rangle = -2 \langle f(\sigma) w_i(\sigma) \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Como estamos interessados em calcular a evolução da média da função σ_i , lembrando que $\sigma_i = \pm 1$ então, substituindo em (A.2) teremos,

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_i\rangle = -\alpha\langle\sigma_i\rangle + \frac{\alpha}{2}[\langle\sigma_{i-1}\rangle + \langle\sigma_{i+1}\rangle]. \quad (\text{A.3})$$

Definindo a seguinte função geratriz,

$$G(x, t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} x^j \langle\sigma_j\rangle, \quad (\text{A.4})$$

derivando-a com respeito a t e usando (A.3), obtemos

$$\frac{d}{dt}G(x, t) = \alpha \left\{ -\sum_j x^j \langle\sigma_j\rangle + \frac{1}{2} \sum_j x^j \langle\sigma_{j-1}\rangle + \frac{1}{2} \sum_j x^j \langle\sigma_{j+1}\rangle \right\}. \quad (\text{A.5})$$

Se fizermos $k = j - 1$ no primeiro somatório e $\ell = j + 1$, no segundo, a expressão acima pode ser sintetizada na forma

$$\frac{d}{dt}G(x, t) = \alpha \left[\frac{1}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) - 1 \right] G(x, t), \quad (\text{A.6})$$

e integrando esta última entre 0 e t , obtemos a função geratriz $G(x, t)$,

$$G(x, t) = G_0 \exp \left[\frac{\alpha}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) t \right] e^{-\alpha t}, \quad (\text{A.7})$$

onde $G_0 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} x^j \sigma_j^0$. Realizando a transformação inversa para obtermos $\langle\sigma_j\rangle$ como função de geratriz,

$$\begin{aligned} \sum_k x^{-k} G(x, t) &= \sum_{k,j} x^{-(k-j)} \langle\sigma_j\rangle \\ &= \sum_j \langle\sigma_j\rangle \sum_k x^{-(k-j)} \\ &= \sum_j \langle\sigma_j\rangle \delta_{k,j} = \langle\sigma_k\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

e usando (A.7) teremos,

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_j \rangle &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} G(x, t) x^{-j} \\
 &= \sum_j x^{-j} G_0 e^{-\alpha t} e^{\alpha t/2(x+x^{-1})} \\
 &= e^{-\alpha t} \sum_{j,k} x^{-j} x^k \sigma_k^0 e^{\alpha t/2(x+x^{-1})}.
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

Por outro lado, a função de Bessel modificada $I_n(t)$ é definida como $e^{t/2(x+x^{-1})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(t) x^n$, de forma que a equação (A.9) pode ser expressa em termos desta função como

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_j \rangle &= e^{-\alpha t} \sum_{j,k,n} x^{-(j-k-n)} \sigma_k^0 I_n(\alpha t) \\
 &= e^{-\alpha t} \sum_{k,n} \sigma_k^0 I_n(\alpha t) \sum_j x^{-(j-k-n)} \\
 &= e^{-\alpha t} \sigma_k^0 I_n(\alpha t) \delta_{n,j-k} \\
 &= e^{-\alpha t} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sigma_k^0 I_{j-k}(\alpha t).
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Vamos examinar esta solução formal usando alguns casos particulares de condições iniciais, tais como:

1. Uma condição inicial homogênea: $\sigma_k^0 = m_0$.

Usando a equação (A.10), teremos

$$\langle \sigma_j \rangle = e^{-\alpha t} m_0 \sum_{k=-\infty}^{\infty} I_{j-k}(\alpha t). \tag{A.11}$$

Reescrevendo a soma como $\ell = j - k$, então

$$\langle \sigma_j \rangle = e^{-\alpha t} m_0 \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} I_{\ell}(\alpha t), \tag{A.12}$$

e separando o somatório em três partes,

$$\langle \sigma_j \rangle = e^{-\alpha t} m_0 [I_0(\alpha t) + \sum_{\ell=-\infty}^{-1} I_\ell(\alpha t) + \sum_{\ell=1}^{\infty} I_\ell(\alpha t)], \quad (\text{A.13})$$

podemos usar a identidade para a função de Bessel modificada, $I_\ell(x) = I_{-\ell}(x)$, para $\ell = 1, 2, \dots$, então

$$\langle \sigma_j \rangle = e^{-\alpha t} m_0 [I_0(\alpha t) + 2 \sum_{\ell=1}^{\infty} I_\ell(\alpha t)]. \quad (\text{A.14})$$

Por sua vez, a expressão entre colchetes é uma série que converge para $e^{\alpha t}$ [88], o que nos leva à conhecida solução conservativa, $\langle \sigma_j \rangle = m_0$ para o caso homogêneo que já foi obtida no capítulo 3.

2. Condição inicial alternada: $\sigma_j^0 = (-1)^j$.

Vale salientar que esta condição inicial é, na linguagem de um sistema magnético, um caso antiferromagnético, pois o ordenamento dos “spins” é feita da seguinte forma,

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots$$

levando a uma média inicial nula.

Para esta condição inicial, teremos que a forma da solução (A.10) é

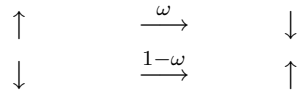
$$\langle \sigma_j \rangle = e^{-\alpha t} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k I_{j-k}(\alpha t) \quad (\text{A.15})$$

e, novamente, usando a troca de variável na soma, $\ell = j - k$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j \rangle &= e^{-\alpha t} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} (-1)^{j-\ell} I_\ell(\alpha t) \\ &= e^{-\alpha t} (-1)^j \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} (-1)^\ell I_\ell(\alpha t) \\ &= e^{-\alpha t} (-1)^j \underbrace{[I_0(\alpha t) + 2 \sum_{\ell=1}^{\infty} (-1)^\ell I_\ell(\alpha t)]}_{e^{-\alpha t}} \\ &= (-1)^j e^{-2\alpha t}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Com isto, no estado estacionário, $t \rightarrow \infty$, a média $\langle \sigma_j \rangle \rightarrow 0$, como havíamos previsto. Isto mostra que o modelo linear de Glauber à temperatura nula possui uma solução estacionária que depende da condição inicial do sistema, conservando-a em média.

Uma interessante modificação neste modelo é o de considerarmos uma espécie de “campo efetivo” agindo sobre os “spins” que formam a rede. Isso pode ser implementado considerando que, se um certo spin tem uma orientação oposta ao de seu vizinho, ele assumirá a mesma orientação que este não com uma taxa $1/2$, mas com a dinâmica sugerida pela ilustração abaixo.



Com estas regras, a taxa de transição do modelo muda da forma (A.1) para a seguinte expressão

$$w_i(\sigma) = \frac{1}{4} \left[1 + (1 - 2\omega)\sigma_i + \frac{1}{2} \left\{ [(2\omega - 1) - \sigma_i] \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \right\} \right], \quad (\text{A.17})$$

cujos caso particular (A.1) pode ser recuperado adotando-se $\omega = 1/2$.

Fazendo uso, novamente, da equação (A.2) para calcular $m_j \equiv \langle \sigma_j \rangle$, temos

$$\frac{d}{dt} m_j = -\frac{1}{2} \left\{ (1 - 2\omega) + \frac{2\omega - 1}{2} \sum_{\delta} \phi_{j+\delta} - \frac{1}{2} \sum_{\delta} m_{j+\delta} + m_j \right\}, \quad (\text{A.18})$$

onde $\phi_{\delta} \equiv \langle \sigma_j \sigma_{j+\delta} \rangle$.

Graças ao termo de correlação $\phi_{j+\delta}$ não é óbvio adotar o mesmo procedimento do caso em que $\omega = 1/2$, pois não parece simples definir uma função geratriz apropriada que nos permitisse tratar este termo corretamente. Com isso, não exporemos uma solução exata como aquela alcançada para o problema original, mas apenas uma solução aproximada obtida através de campo médio. Para isso, simplificaremos ainda mais o problema, nos limitando ao caso homogêneo, onde $m = m_j$ e $\phi = \phi_{j+\delta}$, $\forall j$. Usando isto, a equação (A.18) fica

$$\frac{d}{dt} m = \frac{(2\omega - 1)}{2} (1 - \phi). \quad (\text{A.19})$$

Agora, aplicaremos a aproximação de campo médio para um sítio, onde desprezamos as correlações, de forma que $\phi \approx m^2$ e, portanto, o parâmetro de ordem tem sua evolução dinâmica governada pela seguinte equação

$$\frac{d}{dt}m = \beta m^2, \quad (\text{A.20})$$

onde $\beta = \omega - 1/2$ e cuja solução formal é

$$m(t) = \frac{e^{2\beta t}/\lambda - 1}{e^{2\beta t}/\lambda + 1}, \quad (\text{A.21})$$

onde $\lambda \equiv (1 - m_0)/(1 + m_0)$.

Por fim, o estado estacionário do modelo, nesta aproximação de campo médio, é obtido se tomarmos o limite em que $t \rightarrow \infty$ na equação (A.21). Sendo portanto,

$$m_\infty = \begin{cases} 1, & \text{se } \omega > 1/2 \\ -1, & \text{se } \omega < 1/2. \end{cases}$$

Esta solução demonstra que a transição entre os dois estados absorventes simétricos deste modelo, quais sejam, todos os “spins” com a mesma orientação se dá de forma descontínua, ao menos na aproximação de campo médio. De fato, este resultado não é um artefato da aproximação.

Apêndice B

Termos da série supercrítica do modelo AB

Abaixo seguem os termos da série supercrítica gerada para o modelo AB com seus coeficientes $b_{i,j}$, tal que

$$P =_{\infty} = 1 - \frac{1}{2}x - y - xF(x, y), \quad (\text{B.1})$$

onde

$$F(x, y) = \sum_{i=1}^{24} \sum_{j=0}^i b_{i+1,j} x^{i-j} y^j. \quad (\text{B.2})$$

Note dois aspectos interessantes a respeito desta série: sua forma triangular e o termo $1/2$ que é idêntico para todos aqueles coeficientes $b_{i,i-1}$, o que torna possível somá-los e encontrar uma forma de escala para a função $Z(z)$ prevista pela expressão de escala (7.50).

Tabela B.1: Coeficientes $b_{i,j}$ da série supercrítica para a probabilidade de sobrevivência de partículas A.

i	j	$b_{i,j}$	i	j	$b(i,j)$
1	1	0.1	9	8	0.5
	1	0.5		7	0.9×10^1
				6	$0.48670531988143883594 \times 10^2$
2	1	0.5		5	$0.11948751342296599631 \times 10^3$
	0	0.25		4	$0.15729669463192959 \times 10^3$
				3	$0.11890031438403647712 \times 10^3$
3	2	0.5		2	$0.51820946525644346891 \times 10^2$
	1	0.75		1	$0.12126680864228140954 \times 10^2$
	0	0.25		0	$0.11814667913648822050 \times 10^1$
4	3	0.5	10	9	0.5
	2	0.15×10^1		8	0.1125×10^2
	1	0.11875×10^1		7	$0.76407402418553784784 \times 10^2$
	0	0.28125		6	$0.23825064151361545761 \times 10^3$
				5	$0.40643453331768384373 \times 10^3$
5	4	0.5		4	$0.41173626079900831342 \times 10^3$
	3	0.25×10^1		3	$0.25488795003760951196 \times 10^3$
	2	0.35234375×10^1		2	$0.94770005067848632762 \times 10^2$
	1	0.188671875×10^1		1	$0.19463028091937289332 \times 10^2$
	0	0.34375		0	$0.16988672076919923981 \times 10^1$
6	5	0.5	11	10	0.5
	4	0.375×10^1		9	0.1375×10^2
	3	$0.81665039062499928945 \times 10^1$		8	$0.11453289534710346941 \times 10^3$
	2	$0.73991699218749946709 \times 10^1$		7	$0.4415045910766343344 \times 10^3$
	1	$0.29899902343749985789 \times 10^1$		6	$0.9439571306508234727 \times 10^3$
	0	0.44726562499999982236		5	$0.12251638531684152511 \times 10^4$
				4	$0.10067004627495166335 \times 10^4$
7	6	0.5		3	$0.52744546391776081506 \times 10^3$
	5	0.525×10^1		2	$0.171024907381531861 \times 10^3$
	4	$0.162806396484375 \times 10^2$		1	$0.31313301122887615690 \times 10^2$
	3	$0.21964294433593751776 \times 10^2$		0	$0.24775957118665874467 \times 10^1$
	2	$0.14622192382812501776 \times 10^2$			
	1	$0.47470703125000008881 \times 10^1$	12	11	0.5
	0	0.60223388671874964472		10	0.165×10^2
				9	$0.16534952380310286024 \times 10^3$
8	7	0.5		8	$0.77136775289458459070 \times 10^3$
	6	0.7×10^1		7	$0.20158736418235778664 \times 10^4$
	5	$0.29241512298583977269 \times 10^2$		6	$0.32476491678046719435 \times 10^4$
	4	$0.54546823501586914062 \times 10^2$		5	$0.33907974883298468427 \times 10^4$
	3	$0.52912919998168961299 \times 10^2$		4	$0.23413097838386356386 \times 10^4$
	2	$0.27873636245727544391 \times 10^2$		3	$0.10630662385637921207 \times 10^4$
	1	$0.75799846649169939638 \times 10^1$		2	$0.30555868520944353683 \times 10^3$
	0	0.83485031127929723027		1	$0.50452588505226367843 \times 10^2$
				0	$0.36488812342264482779 \times 10^1$

i	j	$b_{i,j}$	i	j	$b(i,j)$
13	12	0.5	16	15	0.5
	11	0.195×10^2		14	0.3×10^2
	10	$0.23139824792517162954 \times 10^3$		13	$0.54975682655068318638 \times 10^3$
	9	$0.12840079302994218402 \times 10^4$		12	$0.47510546519798584341 \times 10^4$
	8	$0.40209683861219263079 \times 10^4$		11	$0.2349388204588838569 \times 10^5$
	7	$0.78496665288886928735 \times 10^4$		10	$0.73897182789227748855 \times 10^5$
	6	$0.10096110998534653102 \times 10^5$		9	$0.15755031904987298219 \times 10^6$
	5	$0.88003157466952828258 \times 10^4$		8	$0.23687090513090347521 \times 10^6$
	4	$0.52368347467192908339 \times 10^4$		7	$0.25718644037330271601 \times 10^6$
	3	$0.20980007339714172864 \times 10^4$		6	$0.20406058122209760341 \times 10^6$
	2	$0.54172526170510240106 \times 10^3$		5	$0.11843376024372214061 \times 10^6$
	1	$0.81489527352144666139 \times 10^2$		4	$0.49739262723985895320 \times 10^5$
	0	$0.54293656084851633636 \times 10^1$		3	$0.14718788444797093362 \times 10^5$
14	13	0.5		2	$0.29113789219292591781 \times 10^4$
	12	0.22749997384846243342		1	$0.34558659823607458250 \times 10^3$
	11	$0.31544379761375296311 \times 10^3$		0	$0.18620961415130533822 \times 10^2$
	10	$0.20523899291719041038 \times 10^4$	17	16	0.5
	9	$0.75794568674053097723 \times 10^4$		15	0.34×10^2
	8	$0.17597122905598574504 \times 10^5$		14	$0.70671335354464535072 \times 10^3$
	7	$0.27244155488205645809 \times 10^5$		13	$0.69402158602317101099 \times 10^4$
	6	$0.29082737294330742727 \times 10^5$		12	$0.39112396145099372901 \times 10^5$
	5	$0.21732772717178829857 \times 10^5$		11	$0.14079076808597497105 \times 10^6$
	4	$0.11357034171626549934 \times 10^5$		10	$0.34548310262719810204 \times 10^6$
	3	$0.40697753516544512564 \times 10^4$		9	$0.60241714803092252239 \times 10^6$
	2	$0.95363664836240946698 \times 10^3$		8	$0.76636402935447742734 \times 10^6$
	1	$0.13169793741584487900 \times 10^3$		7	$0.72224826262886052674 \times 10^6$
	0	$0.81325422193071297272 \times 10^1$		6	$0.50729839736110484693 \times 10^6$
15	14	0.5		5	$0.26473279696452087783 \times 10^6$
	13	$0.26249998256564137655 \times 10^2$		4	$0.10122975226631107936 \times 10^6$
	12	$0.42048775894871077696 \times 10^3$		3	$0.27555943803143052583 \times 10^5$
	11	$0.31693914938186833474 \times 10^4$		2	$0.50567133817482794455 \times 10^4$
	10	$0.13620079986016961903 \times 10^5$		1	$0.56084260997641584012 \times 10^3$
	9	$0.37037632746719575393 \times 10^5$		0	$0.28405733950687368505 \times 10^2$
	8	$0.67783286393305548500 \times 10^5$			
	7	$0.86632679492839894663 \times 10^5$			
	6	$0.78910368357158162666 \times 10^5$			
	5	$0.51571902934753062197 \times 10^5$			
	4	$0.24020987390678723016 \times 10^5$			
	3	$0.77874939092949517771 \times 10^4$			
	2	$0.16707029021016392533 \times 10^4$			
	1	$0.21330513440327356633 \times 10^3$			
	0	$0.12275012836144905126 \times 10^2$			

i	j	$b_{i,j}$	i	j	$b(i,j)$
18	17	0.5	20	19	0.5
	16	$0.38249999329447760487 \times 10^2$		18	$0.47499999329447701867 \times 10^2$
	15	$0.89504578674400576687 \times 10^3$		17	$0.13817585309510260671 \times 10^4$
	14	$0.99102626626136949283 \times 10^4$		16	$0.19064302620655780629 \times 10^5$
	13	$0.63122994123535232091 \times 10^5$		15	$0.15187519641466302289 \times 10^6$
	12	$0.25768737165396164989 \times 10^6$		14	$0.77950921221482092349 \times 10^6$
	11	$0.72043302015833452500 \times 10^6$		13	$0.27591465361185987248 \times 10^7$
	10	$0.14399790608479312581 \times 10^7$		12	$0.70457626117426288558 \times 10^7$
	9	$0.21166673049189457245 \times 10^7$		11	$0.13386942665323722234 \times 10^8$
	8	$0.23292641415436174945 \times 10^7$		10	$0.19328829379718762027 \times 10^8$
	7	$0.19371723268429082764 \times 10^7$		9	$0.21502873943167273296 \times 10^8$
	6	$0.12198708033512473125 \times 10^7$		8	$0.18574978781954090578 \times 10^8$
	5	$0.57806709777733367161 \times 10^6$		7	$0.12487211289613961984 \times 10^8$
	4	$0.20284284513882400169 \times 10^6$		6	$0.65099543472194438820 \times 10^7$
	3	$0.51115204972041548003 \times 10^5$		5	$0.26049731385271019945 \times 10^7$
	2	$0.87477997069442139377 \times 10^4$		4	$0.78478644916613982118 \times 10^6$
	1	$0.91057218719788650673 \times 10^3$		3	$0.17219353528307646428 \times 10^6$
	0	$0.43520782874229171355 \times 10^2$		2	$0.25969733685492251140 \times 10^5$
				1	$0.24071073326750083154 \times 10^4$
				0	$0.10337399908888862398 \times 10^3$
19	18	0.5	21	20	0.5
	17	$0.42749999329447687657 \times 10^2$		19	$0.52499999329447701867 \times 10^2$
	16	$0.11186774875974003773 \times 10^4$		18	$0.16886733349218010502 \times 10^4$
	15	$0.13869278218084735243 \times 10^5$		17	$0.25785991340403939808 \times 10^5$
	14	$0.99114912109387987015 \times 10^5$		16	$0.22768166104993685650 \times 10^6$
	13	$0.45525829782828974856 \times 10^6$		15	$0.12978288769859755902 \times 10^7$
	12	$0.14375483791065075678 \times 10^7$		14	$0.51154797613905129693 \times 10^7$
	11	$0.32614349098596422393 \times 10^7$		13	$0.14596468511940512868 \times 10^8$
	10	$0.54767322733604206774 \times 10^7$		12	$0.31124330624461475913 \times 10^8$
	9	$0.69423928844342714938 \times 10^7$		11	$0.50710951504426553526 \times 10^8$
	8	$0.67230154917519895363 \times 10^7$		10	$0.64100799162967723177 \times 10^8$
	7	$0.50002124204980198385 \times 10^7$		9	$0.63467922470529245515 \times 10^8$
	6	$0.28527370161475179344 \times 10^7$		8	$0.49453964458225394551 \times 10^8$
	5	$0.12379379646484691690 \times 10^7$		7	$0.30321310892616786247 \times 10^8$
	4	$0.40134571279240418562 \times 10^6$		6	$0.14550387399195248150 \times 10^8$
	3	$0.94145168822797273833 \times 10^5$		5	$0.54012506504483805969 \times 10^7$
	2	$0.15093606456186623887 \times 10^5$		4	$0.15195548211633345125 \times 10^7$
	1	$0.14798263077956907984 \times 10^4$		3	$0.31313135707735888502 \times 10^6$
	0	$0.66930218067927942371 \times 10^2$		2	$0.44571407092920996007 \times 10^5$
				1	$0.39157750249797601327 \times 10^4$
				0	$0.15998830271630990473 \times 10^3$

i	j	$b_{i,j}$	i	j	$b(i,j)$
22	21	0.5	24	23	0.5
	20	$0.57749999329447438967 \times 10^2$		22	$0.69000000457884933524 \times 10^2$
	19	$0.20440335494663091076 \times 10^4$		21	$0.29197000139992891121 \times 10^4$
	18	$0.34373382551268485407 \times 10^5$		20	$0.58774468615505739421 \times 10^5$
	17	$0.33466104195644446051 \times 10^6$		19	$0.68638127471201864082 \times 10^6$
	16	$0.21070967788898307126 \times 10^7$		18	$0.51981592602471167197 \times 10^7$
	15	$0.91945254038400960894 \times 10^7$		17	$0.27383018956536124832 \times 10^8$
	14	$0.29128975460417066756 \times 10^8$		16	$0.10521292804690998146 \times 10^9$
	13	$0.69213935104954478205 \times 10^8$		15	$0.30494730611982263646 \times 10^9$
	12	$0.12623609387336516274 \times 10^9$		14	$0.68324606257180731105 \times 10^9$
	11	$0.17963375603295976823 \times 10^9$		13	$0.12048047382312678799 \times 10^{10}$
	10	$0.20164422581600076611 \times 10^9$		12	$0.16938688975594596186 \times 10^{10}$
	9	$0.17971976143434213568 \times 10^9$		11	$0.19158522496513690214 \times 10^{10}$
	8	$0.12747436997852454876 \times 10^9$		10	$0.17528882189096098187 \times 10^{10}$
	7	$0.71815965145384188517 \times 10^8$		9	$0.13003099701647686803 \times 10^{10}$
	6	$0.31918963164481914951 \times 10^8$		8	$0.78129739240902704722 \times 10^9$
	5	$0.11049035068083481458 \times 10^8$		7	$0.37851359502279247060 \times 10^9$
	4	$0.29157961094487756525 \times 10^7$		6	$0.14654979817717892487 \times 10^9$
	3	$0.56650954312689849601 \times 10^6$		5	$0.44688725216130675832 \times 10^8$
	2	$0.76372602458216514165 \times 10^5$		4	$0.10490868838890698988 \times 10^8$
	1	$0.63802269924577696968 \times 10^4$		3	$0.18288174674782467832 \times 10^7$
	0	$0.24876519640924477094 \times 10^3$		2	$0.22289668577994086184 \times 10^6$
23	22	0.5		1	$0.16948463518651144532 \times 10^5$
	21	$0.63250003986086227314 \times 10^2$		0	$0.60509199550607846163 \times 10^3$
	20	$0.24526847667386335594 \times 10^4$			
	19	$0.45219068649736344767 \times 10^5$	25	24	0.5
	18	$0.48319032233047343183 \times 10^6$	25	23	0.75×10^2
	17	$0.33439431430492136954 \times 10^7$	25	22	$0.34503863852011384949 \times 10^4$
	16	$0.16069927289546637183 \times 10^8$	25	21	$0.75555516468201169288 \times 10^5$
	15	$0.56208076057486060506 \times 10^8$	25	20	$0.96061396122189321999 \times 10^6$
	14	$0.14791153728125157051 \times 10^9$	25	19	$0.79292390146647733217 \times 10^7$
	13	$0.29990967758279261090 \times 10^9$	25	18	$0.45593449242937929000 \times 10^8$
	12	$0.47669571268868358160 \times 10^9$	25	17	$0.19157385641492643557 \times 10^9$
	11	$0.60118669013109657939 \times 10^9$	25	16	$0.60860240979789494986 \times 10^9$
	10	$0.60634053785517059154 \times 10^9$	25	15	$0.14987944522389162749 \times 10^{10}$
	9	$0.49107989528314268667 \times 10^9$	25	14	$0.29148047590757961700 \times 10^{10}$
	8	$0.31953776898326688993 \times 10^9$	25	13	$0.45381694251898121450 \times 10^{10}$
	7	$0.16647521279074794620 \times 10^9$	25	12	$0.57125179306761664221 \times 10^{10}$
	6	$0.68894669993720274447 \times 10^8$	25	11	$0.58520654724976619576 \times 10^{10}$
	5	$0.22337519908203442575 \times 10^8$	25	10	$0.48967910880832077324 \times 10^{10}$
	4	$0.55496488699702037905 \times 10^7$	25	9	$0.33495648941633358042 \times 10^{10}$
	3	$0.10196528668928661609 \times 10^7$	25	8	$0.18689764057712466183 \times 10^{10}$
	2	$0.13050250676997474652 \times 10^6$	25	7	$0.84597759965914463009 \times 10^9$
	1	$0.10386065610378922841 \times 10^5$	25	6	$0.30764609873623349756 \times 10^9$
	0	$0.38696067609363534955 \times 10^3$	25	5	$0.88524517163033653588 \times 10^8$

i	j	$b_{i,j}$
4		$0.19689926825686265843 \times 10^8$
3		$0.32638605561858318182 \times 10^7$
2		$0.37947216762104512000 \times 10^6$
1		$0.27603268426234146559 \times 10^5$
0		$0.94519638900755200694 \times 10^3$

Bibliografia

- [1] J.W. Gibbs, *The elementary principles in statistical mechanics*, Scribner, Nova Iorque, 1902.
- [2] A.J. Guttmann, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, volume 13, Academic Press, Londres, 1989.
- [3] D.J. Amit, *Field theory, the renormalization group and critical phenomena*, World Scientific, Singapura, 1984.
- [4] B.M. McCoy e T. Wu, *The two-dimensional Ising model*, Harvard University Press, Cambridge, 1973.
- [5] A.L. Barabási e H. Stanley, *Fractal concepts in surface growth*, Cambridge University Press, Reino Unido, 1995.
- [6] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [7] H. Hinrichsen, *Adv. Phys.* **48**, 815 (2000).
- [8] P. Grassberger e A. de La Torre, *Ann. Phys.* **122**, 373 (1979).
- [9] R. Dickman, *Phys. Rev. E* **66**, 036122 (2002).
- [10] I. Jensen e R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **71**, 89 (1993).
- [11] E. Carlon, M. Henkel, e U. Schollwöck, *Euro. Phys. J. B* **12**, 99 (1999).
- [12] T. Tomé e M.J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Edusp, São Paulo, 2001.
- [13] E.C. da Costa e W. Figueiredo, *Braz. J. Phys.* **33**, 487 (2003).
- [14] F.C. Alcaraz *et al*, *Ann. Phys.* **230**, 250 (1994).

- [15] G. M. Schütz, *Habilitationsschrift : Integrable stochastic many-body systems*, Universität Bonn, 1998.
- [16] B. Derrida e M. Evans, *The asymmetric exclusion model: exact results through a matrix approach em "Nonequilibrium statistical in mechanics in one dimension"*, University Press, UK, 1997.
- [17] T. E. Harris, *Ann. Probab.* **2**, 969 (1974).
- [18] P. Grassberger, *J. Phys. A* **22**, 3673 (1989).
- [19] I. Jensen, *Phys. Rev. E* **45**, R563 (1992).
- [20] L. Landau e E.M. Lifshitz, *Statistical Mechanics*, Pergamon Press, 1977.
- [21] S.R. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Edusp, São Paulo, 1997.
- [22] M. N. Barber, *Phase Transition and Critical Phenomena* 81461983.
- [23] J. W. Essam, *Rep. Prog. Phys.* **43**, 833 (1980).
- [24] D. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, Londres, 1992.
- [25] S. R. Broadbent e J.M. Hammersley, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **53**, 629 (1957).
- [26] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **42**, 151 (1981).
- [27] P. Grassberger, *Z. Phys. B* **47**, 365 (1982).
- [28] I. Jensen, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1465 (1993).
- [29] R. M. Ziff, E. Gulari e Y. Barshad, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553 (1986).
- [30] M. Ehsasi *et al.*, *J. Chem. Phys.* **91**, 4949 (1989); G. Ertl e J. Koch, *Proceedings of the 5th International Congress on Catalysis*(Palm Beach, Flórida)1972; K. Christmann e G. Ertl, *Z. Naturforsch Teil. A* **28**, 1144 (1973); A. Golchet e J.M.White, *J. Catal.* **53**, 266 (1978); T. Matsushima, H. Hashimoto e I. Toyoshima, *J. Catal.* **58**, 303 (1979).
- [31] R. M. Ziff e C.A. Voigt, *Phys. Rev. E* **56**, R6241 (1997).
- [32] I. Jensen, H. Fogedby e R.Dickman, *Phys. Rev. A* **41**, 3411 (1990).
- [33] S. Wolfram, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 601 (1983).
- [34] E. Domany e W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 311 (1984).

- [35] W. Kinzel, *Z. Phys. B* **58**, 229 (1985).
- [36] P. Grassberger, Directed percolation: results and open problems, in *Nonlinearities in complex systems, proceedings of the 1995 Shimla conference on complex systems*, edited by S. Puri *et al.*, Narosa Publishing, New Dehli, 1997.
- [37] M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **67**, 066101 (2003).
- [38] C.E. Fiore e M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **70**, 046131 (2004).
- [39] H. Hinrichsen, *Physica A* **361**, 457 (2006).
- [40] P. Bak, C. Tang e K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [41] L. P. Kadanoff, S. R. Nagel, L. Wu e S. Zhu, *Phys. Rev. A* **39**, 6524 (1989).
- [42] S. Lübeck e K. D. Usadel, *Phys. Rev. A* **55**, 4095 (1997).
- [43] P. Bak, in *How Nature Works*, Springer, New York, 1996.
- [44] S. S. Manna, *J. Phys. A* **24**, L363 (1991).
- [45] D. Dhar, *Physica A* **263**, 4 (1999).
- [46] R. Dickman, A. Vespignani e S. Zapperi, *Phys. Rev. E* **57**, 5095 (1998).
- [47] A. Vespignani and S. Zapperi, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4793 (1997).
- [48] R. Dickman *et al.*, *Phys. Rev. E* **64**, 056104 (2001).
- [49] M. Rossi, R. Pastor-Satorras e A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1803 (2000).
- [50] R. Pastor-Satorras e A. Vespignani, *Phys. Rev. E* **62**, R5875 (2000).
- [51] R. Dickman, T. Tomé e M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **66**, 016111 (2002).
- [52] J.D. Walecka, *Ann. Phys.* **83**, 491 (1974).
- [53] P. Hohenberg e W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [54] R. Kroon e R. Sprik, *Phys. Rev. E* **47**, 26462 (1993).
- [55] V. Privman, *Nonequilibrium statistical mechanics in one dimensions*, Cambridge University Press, U.K., 1997.
- [56] I. Jensen, *J. Phys. A* **32**, 5233 (1999).

- [57] R. Dickman and I. Jensen, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2391 (1991); I. Jensen and R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **71**, 89 (1993).
- [58] J.B. Bronzan and J.W. Dash, *Phys. Lett. B* **51**, 496 (1974).
- [59] N. Konno e M. Katori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 1581 (1990).
- [60] E. Ben-Naim e P.L. Krapivsky, *J. Phys. A* **27**, L481 (1994).
- [61] R.M. Corless *et al.*, *Adv. Computational Math.* **5**, 329 (1996).
- [62] Numerical Recipes Software *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, UK.
- [63] R. Dickman e M. Muñoz, *Phys. Rev. E* **62**, 7632 (2000).
- [64] S. Lübeck e P.C. Heger, *Phys. Rev. E* **68**, 056102 (2003).
- [65] R. Dickman e M.M. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **71**, 016129 (2005).
- [66] R. Dickman e M.M. de Oliveira, *Physica A* **357**, 134 (2005).
- [67] W.G. Dantas, A. Ticona e J.F. Stilck, *Braz. J. Phys.* **35**, 536 (2005).
- [68] R. Dickman e A.Y. Tretyakov, *Phys. Rev. E* **52**, 3218 (1995).
- [69] R. Dickman, eprint cond-mat/0601415
- [70] W.G. Dantas e J.F. Stilck, eprint cond-mat/0509813
- [71] R. Burlisch e J. Stoer, *Num. Math.* **6**, 413 (1964).
- [72] J.F. Stilck, R. Dickman e R. Vidigal, *J. Phys. A* **37**, 1145 (2004).
- [73] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992); *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [74] M.J. de Oliveira, não publicado.
- [75] W.G. Dantas e J.F. Stilck, *J. Phys. A* **38**, 5841 (2005).
- [76] G.A. Baker Jr., in *Essentials of Padé approximants*, Academic Press, New York, 1975.
- [77] F.D.A. Aarão Reis e R. Rieira, *Phys. Rev. E* **49**, 2579 (1994).
- [78] M.E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 667 (1977).
- [79] D.F. Styer, *Comput. Phys. Commun.* **61**, 374 (1990).

- [80] M. Katori and H. Tsukahara, *J. Phys. A* **28**, 395 (1995).
- [81] T. M. Liggett, preprint (1994).
- [82] A. Yu. Tretyakov, N. Inui, M. Katori, and H. Tsukahara, *cond-mat/9509061* (1995).
- [83] N. Inui, M. Katori and F. M. Bhatti, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 359 (2001).
- [84] K. Jain, *Europhys. Lett.* **71**, 8 (2005).
- [85] K. Jain, *Phys. Rev. E* **72**, 017105 (2005).
- [86] R. Dickman e T. Tomé, *Phys. Rev. A* **44**, 4833 (1991).
- [87] R.J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [88] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, New York, 1970.