

SBI-IFUSP



305M810T3188

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

COMPORTAMENTO CRÍTICO E
TRANSIÇÕES DE FASE DINÂMICAS
EM AUTÔMATOS CELULARES PROBABILÍSTICOS

Adriana Brunstein

Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de
São Paulo para a obtenção do
título de Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro (IFUSP)

Prof. Dr. Adalberto Fazzio (IFUSP)

Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício (FFCLRP/USP)

Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)

Profa. Dra. Suzana Maria Moss de Oliveira (UFF)

Orientadora: Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro

Sylvio Camargo
Prof. Sylvio Roberto Accioly Camargo
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

defina 2/99

São Paulo

1999



530.13

B899c

D

ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Brunstein, Adriana

Comportamento Crítico e Transições de Fase Dinâmicas
em Autômatos Celulares Probabilísticos. São Paulo, 1999.

Tese (Doutoramento) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física - Departamento de Física Geral.

Orientador: Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Unitermos: 1. Mecânica Estatística;
2. Autômatos Celulares; 3. Processos Estocásticos;
4. Transições de Fase; 5. Irreversibilidade.

USP/IF/SBI-035/99

*Dedico esta tese
e meu amor infinito
a meus pais e a minha irmã.*

Agradecimentos

Gostaria de agradecer todos aqueles que participaram da minha vivência e aprendizado durante o período de elaboração desta tese:

Professora Doutora Tânia Tomé, sob cuja orientação iniciei meu trabalho na área de Mecânica Estatística. Agradeço a dedicação, a paciência e sobretudo a experiência que me foi passada tornando possível a elaboração e conclusão desta tese.

Professor Doutor Mário José de Oliveira, pelas discussões sempre construtivas e pela clareza nas exposições que me ajudaram muito a incorporar os conceitos da Mecânica Estatística.

Professor Doutor José Carlos Sartorelli, por quem tenho grande admiração e que se tornou indispensável no dia a dia; por seu senso de humor e acima de tudo pelo companheirismo. A ele atribuo o conceito A+.

Gisele, uma grande amiga que tem participado de grandes momentos da minha vida. Sem ela certamente esses anos todos não teriam o mesmo valor.

Ana Rita, Andréa e Samira, pelos momentos indispensáveis de companheirismo e diversão que tornaram esses últimos meses muito mais agradáveis.

Felícia, pelo exemplo de vida e de carreira que sempre serviram como um guia em todas as minhas decisões.

Suani e Thierry, por se tornarem grandes amigos e confidentes. A dedicação deles à carreira acadêmica sempre me estimulou muito. E, além de tudo, agradeço pelas futuras estadias em Salvador!

Maurício, um grande amigo que me ajudou muito no início do meu doutorado e sempre foi capaz de passar horas me ouvindo nas nossas sessões diárias de análise!

Cristiano, por sua alegria contagiante e pela amizade com a qual eu sempre pude contar.

Josué, pela amizade que eu valorizo muito e por toda a ajuda com a Mecânica Estatística de Equilíbrio. E também pela tentativa frustrada de me tornar uma pessoa mais organizada!

Kaline, que é um exemplo de pesquisadora e uma grande companheira de sala. Fora isso, proporcionou a todos o conhecimento do inigualável vatapá pernambucano!

Chiappin, pela ótima convivência, pela filosofia e pelo interesse demonstrado por meu trabalho.

Marcelo, Thiago e Tufaile, pelas horas de descontração e gargalhadas.

Júlio, Dirce, Silvana e Alexandre, que foram sempre muito prestativos me ajudando com toda a burocracia.

FAPESP, pelo auxílio financeiro concedido neste período, com seriedade e competência, tornando possível a realização desse projeto.

Resumo

Estudamos o comportamento crítico e transições de fase em modelos estocásticos irreversíveis, através de simulações numéricas, análise de campo médio e séries perturbativas. Na primeira parte do trabalho, analisamos o comportamento crítico de autômatos celulares irreversíveis, cujas regras dinâmicas são invariantes sob as operações de simetria do grupo C_{3n} . Estudamos as transições de fase dinâmicas que ocorrem nos modelos e obtemos, através de simulações de Monte Carlo, expoentes críticos estáticos e dinâmicos. Nossos resultados indicam que os modelos pertencem a mesma classe de universalidade do modelo de Potts de três estados. Essa conjectura também foi desenvolvida considerando expansões análogas às utilizadas na teoria de Landau de transições de fase. Na segunda parte do trabalho utilizamos o formalismo de operadores como uma forma de abordar problemas de sistemas de não-equilíbrio. Aplicamos o formalismo para construir séries perturbativas para modelos irreversíveis de dois estados.

Abstract

We study the critical behavior and phase transitions that take place in irreversible stochastic models through numerical simulations, mean field analysis and perturbative series. In the first part of this work we analyze the critical behavior of irreversible cellular automata whose dynamic rules are invariant under the symmetry operations of the point group C_{3n} . We study the dynamical phase transitions that occur in the models and we obtain the static and dynamic critical exponents by the use of Monte Carlo simulations. Our results indicate that these models are in the same universality class as the three-state Potts model. This conjecture is also developed by considering expansions that are similar to those used in the Landau theory of phase transitions. In the second part of this work we use the operator formalism as a way to approach non-equilibrium systems. We apply this formalism in order to build perturbative series for two-state irreversible models.

Índice

1	Introdução	9
2	Grupo de Simetria C_{3v} e Modelo de Potts de 3 Estados	13
2.1	Grupo de Simetria C_{3v}	13
2.2	Modelo de Potts de Equilíbrio	17
2.3	Cálculo de Invariantes	18
3	Modelos Irreversíveis	22
3.1	Autômatos Celulares	22
3.1.1	Formulação Analítica	23
3.1.2	Aproximação de Campo Médio Simples	24
3.2	Modelos	25
3.3	Modelo Simétrico	26
3.4	Modelo de Quatro Estados	30
3.5	Aproximação de Campo Médio - Aplicação	33
3.5.1	Modelo Simétrico	33
3.5.2	Modelo de Quatro Estados	36
4	Análise Numérica	39
4.1	Transições de fase cinéticas	39
4.2	Teoria de Escala Finita	39
4.3	Método de Monte Carlo	42
4.3.1	Cadeias de Markov	43
4.3.2	Modelos de Equilíbrio	44
4.3.3	Modelos de Não-Equilíbrio	46
5	Análise numérica - Resultados	49
5.1	Modelo Simétrico	49

5.2	Modelo de Quatro Estados	52
6	Análise de Tempos Curtos	57
6.1	Introdução	57
6.2	Formalismo	60
6.3	Aplicação - Modelo simétrico	62
6.4	Aplicação - Modelo de Quatro Estados	65
7	Conjectura	69
7.1	Equações de movimento	69
7.2	Expansão no parâmetro de ordem	70
7.3	Expansão de Landau do modelo de Potts de três estados	74
8	Formalismo de Operadores	77
8.1	Aplicação: Votante Majoritário	82
8.2	Aplicação: Modelo de Glauber linear	85
8.2.1	Introdução ao modelo	85
8.2.2	Caso unidimensional	86
8.2.3	Caso bidimensional	88
9	Conclusão	92
	Bibliografia	94

Capítulo 1

Introdução

A irreversibilidade está presente em inúmeros fenômenos observados na natureza. Em contrapartida, as forças físicas fundamentais que atuam no nível das interações microscópicas são caracterizadas pela reversibilidade. Com base nesse fato, poderíamos a priori tentar descrever fenômenos macroscópicos irreversíveis através de interações microscópicas irreversíveis. Tal nível de descrição envolveria um conhecimento detalhado de todas as interações microscópicas resultantes de cada força atuante num determinado sistema. Certamente jamais teríamos acesso a todos os passos necessários para a descrição de um sistema. Resta-nos então determinar o nível de descrição no qual devemos estabelecer a análise dos fenômenos irreversíveis. Para essa finalidade, podemos centralizar a análise num patamar superior ao patamar microscópico fundamental, que podemos denominar patamar mesoscópico, onde seja possível uma descrição microscópica que contenha em si mesma a irreversibilidade. Em outras palavras, no nível mesoscópico podemos verificar explicitamente se a condição de balanceamento detalhado é ou não obedecida.

Estabelecido o ponto de vista sob o qual trabalharemos, temos como principais objetivos a descrição e fundamentação dos processos irreversíveis, bem como a correta disposição das ferramentas fornecidas pela mecânica estatística de não-equilíbrio. Dentro desse formalismo, atentamo-nos à construção de dinâmicas estocásticas irreversíveis definidas em espaços de configurações microscópicas, onde a irreversibilidade pode ser explicitamente introduzida e verificada. Na prática, definimos sistemas de partículas interagentes residindo em redes, cuja evolução temporal dá-se segundo uma dinâmica estocástica irreversível aplicada localmente [1]. Dentre os modelos

utilizados nesse contexto destacamos modelos cujo tratamento pode ser efetuado segundo uma matemática simples mas rica na descrição microscópica de um sistema, como modelos estocásticos de gás de rede e autômatos celulares. Uma vez escolhido o modelo apropriado para o estudo de um sistema, um importante ponto a ser estabelecido é a caracterização das transições de fase cinéticas que ocorrem entre estados estacionários de não-equilíbrio.

Nesse ponto, é interessante traçarmos um rápido panorama referente à mecânica estatística de equilíbrio, para que possamos ter uma melhor visualização dos métodos empregados na mecânica estatística de não-equilíbrio. Na mecânica estatística de equilíbrio já estão fundamentadas diversas ferramentas para o estudo e compreensão de sistemas em equilíbrio. Ressaltamos que, dentro desse formalismo, os sistemas são descritos por hamiltonianas que englobam todas as suas simetrias. Assim, as probabilidades de transição entre estados obedecem o balanceamento detalhado e, para tempos suficientemente longos, o sistema é descrito por uma distribuição (de equilíbrio) de Gibbs correspondente a hamiltoniana fundamental. Nas transições de fase que ocorrem entre esses estados estacionários de equilíbrio, o comportamento crítico é classificado de acordo com a simetria da hamiltoniana, a dimensionalidade do sistema (ou da rede onde está definido) e o número de componentes do parâmetro de ordem. Assim, a classe de universalidade de um determinado modelo é caracterizada por um conjunto de expoentes críticos que caracterizam a transição. A base teórica para o estabelecimento das diferentes classes de universalidade é estabelecida pela teoria de escala e pela teoria do grupo de renormalização [2, 3].

Quando tratamos de um problema de não-equilíbrio, o primeiro ponto que devemos considerar é a não existência de uma hamiltoniana, ou seja, devemos encontrar uma alternativa para a implementação da simetria. Tanto para modelos de gás de rede como para autômatos celulares, a construção da dinâmica deve englobar praticamente toda informação necessária para a definição do modelo. É justamente na dinâmica que a simetria do modelo deve ser explicitada. Segundo a dinâmica, o sistema evolui no tempo e, para tempos suficientemente longos, atinge estados estacionários de não-equilíbrio, cuja distribuição não é conhecida a priori. No entanto, também nesse caso podemos determinar os expoentes críticos que caracterizam as transições entre os estados estacionários de não-equilíbrio.

Embora modelos reversíveis e irreversíveis sejam completamente distintos tanto na definição como na abordagem, algumas conjecturas têm sido propostas considerando a classe de universalidade de modelos de rede defi-

nidos por dinâmicas irreversíveis. Uma dessas conjecturas foi proposta por Grinstein *et al* [4], a qual estabelece que transições ferromagnéticas contínuas que ocorrem em autômatos celulares probabilísticos com simetria *up – down* e dinâmica caracterizada por regras irreversíveis, estão na mesma classe de universalidade dos modelos de Ising cinéticos. Uma outra conjectura importante é a conjectura de Janssen [5] e Grassberger [6], na qual estabelece-se que se um modelo de uma única componente exibe uma transição de fase contínua para um único estado absorvente, esta pertence a classe de universalidade da percolação direcionada. Cálculos numéricos têm corroborado essas conjecturas.

Nossa proposta de trabalho, descrita na primeira parte desta tese, tem como objetivo fundamental a extensão da conjectura de Grinstein *et al* para modelos que contenham as mesmas simetrias do modelo de Potts de três estados bidimensional [7]. Visando esse objetivo, estabelecemos uma metodologia de estudo e tratamento de sistemas irreversíveis. Assim, em cada capítulo fazemos uma pequena revisão contendo os principais pontos de interesse mesmo que estes já tenham sido descritos, de uma forma mais genérica, nessa introdução.

Na segunda parte desta tese também estudamos modelos irreversíveis, mas nosso objetivo está focalizado no formalismo de operadores associado à equação mestra e à expansão em séries perturbativas.

No capítulo 2 descrevemos o grupo C_{3v} , que contém as operações de simetria do modelo de Potts de três estados. Definimos, conseqüentemente, o modelo de Potts, e construímos termos invariantes sob o grupo. Através dos invariantes definimos grandezas físicas de interesse.

No capítulo 3 introduzimos o conceito de autômatos celulares, que utilizamos para a construção de nossos modelos, também descritos nesse capítulo. Apresentamos ainda a aproximação de campo médio no contexto de autômatos celulares.

No capítulo 4 descrevemos as metodologias empregadas no estudo numérico (simulação) dos modelos, onde incluímos a determinação dos expoentes críticos estáticos dos mesmos. Os resultados obtidos estão no capítulo 5.

No capítulo 6, analisamos os modelos propostos sob a abordagem da dinâmica de tempos curtos, que nos permite o cálculo dos expoentes críticos dinâmicos dos modelos propostos.

No capítulo 7 apresentamos a conjectura proposta para modelos irreversíveis com simetria de Potts.

No capítulo 8 apresentamos o formalismo de operadores como um método

alternativo utilizado no estudo de sistemas de não-equilíbrio. Aplicamos o método para modelos de dois estados.

Capítulo 2

Grupo de Simetria C_{3v} e Modelo de Potts de 3 Estados

2.1 Grupo de Simetria C_{3v}

Analisemos a figura (2.1) onde um triângulo equilátero com extremidades 123 está fixo e sobre ele um triângulo congruente $\alpha\beta\gamma$ pode realizar rotações caracterizadas pelo ângulo ϕ . Denominamos essa operação $R(\phi)$. Procuremos agora as posições onde os dois triângulos se superpõem exatamente. A primeira delas caracteriza-se por $R(2\pi/3)$, ou seja, corresponde à uma simetria do grupo C_3 [8, 9] (2.1(a)).

Outra opção consiste em tomarmos $\phi = 4\pi/3$, o que leva à

$$C_3^2 = R\left(\frac{4\pi}{3}\right), \quad (2.1)$$

conforme a figura (2.1(b)). O efeito da operação acima também pode ser obtido por uma rotação de $\phi = -2\pi/3$, e podemos então escrever

$$C_3^2 = R\left(-\frac{2\pi}{3}\right) = C_3^{-1}. \quad (2.2)$$

Incrementando ϕ de $2\pi/3$, partindo da segunda posição (figura (2.1(b))) obtemos

$$C_3^3 = R(2\pi) = R(0), \quad (2.3)$$

ou seja,

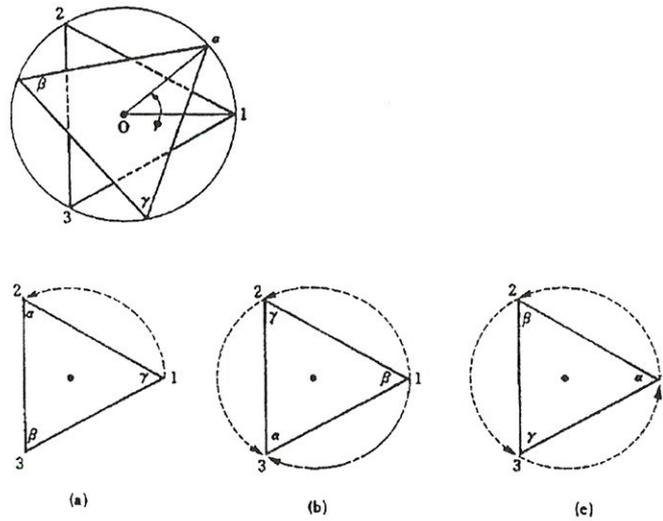


Figura 2.1: Efeitos das rotações (a) C_3 , (b) C_3^2 e (c) C_3^3 no triângulo $\alpha\beta\gamma$.

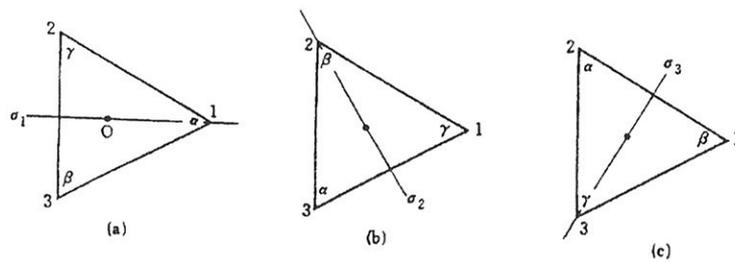


Figura 2.2: Efeitos das reflexões (a) σ_1 , (b) σ_2 e (c) σ_3 no triângulo $\alpha\beta\gamma$.

$$C_3 \cdot C_3^2 = C_3^3 = I, \quad (2.4)$$

onde I é a operação identidade (figura 2.1(c)).

Incluindo a operação identidade $I = R(0)$, temos o conjunto das operações do grupo C_3 dado por

$$G = \{I, C_3, C_3^{-1}\}.$$

Se considerarmos a multiplicação como significando sucessivas operações, temos um conjunto fechado contendo o elemento unidade I , o elemento gerador C_3 e seu elemento inverso C_3^{-1} .

Um triângulo equilátero tem outro tipo de simetria. Considere na figura (2.2 a) o plano espelho vertical σ_1 através da linha $O1$. Uma reflexão nesse espelho superpõe o triângulo $\alpha\beta\gamma$ ao triângulo 123. Temos ainda mais duas reflexões desse tipo dadas por σ_2 e σ_3 (figuras (2.2 b) e (2.2 c)). Assim, se acrescentarmos essas operações ao grupo C_3 descrito acima caracterizaremos o grupo C_{3v} :

$$C_{3v} = \{I, C_3, C_3^{-1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\},$$

consistindo também um conjunto fechado, onde o produto de cada duas dessas operações pertence ao conjunto. Na tabela abaixo temos todas as operações possíveis descritas.

G_j	G_t	I	C_3	C_3^{-1}	σ_1	σ_2	σ_3
I	I	I	C_3	C_3^{-1}	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	C_3	C_3^{-1}	I	σ_3	σ_1	σ_2
C_3^{-1}	C_3^{-1}	C_3^{-1}	I	C_3	σ_2	σ_3	σ_1
σ_1	σ_1	σ_1	σ_2	σ_3	I	C_3	C_3^{-1}
σ_2	σ_2	σ_2	σ_3	σ_1	C_3^{-1}	I	C_3
σ_3	σ_3	σ_3	σ_1	σ_2	C_3	C_3^{-1}	I

Partimos agora para uma abordagem analítica das operações do grupo C_{3v} . Consideremos a transformação de coordenadas cartesianas x e y por σ_1 . Nesse caso, um ponto $P(x, y)$ é transformado em $P(x', y')$ onde

$$\begin{aligned}x' &= x, \\y' &= -y.\end{aligned}$$

Essa transformação pode ser escrita na forma matricial

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

ou seja, σ_1 pode ser representado pela matriz

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Em coordenadas polares podemos reescrever x e y como

$$\begin{aligned}x &= r \cos \alpha, \\y &= r \sin \alpha.\end{aligned}$$

Dessa forma, as coordenadas transformadas x' e y' passam a ser escritas como

$$\begin{aligned}x &= r \cos(\alpha + \phi), \\y &= r \sin(\alpha + \phi).\end{aligned}$$

e, na forma matricial teremos

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \hat{R}(\phi) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

onde

$$\hat{R}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Todas as operações do grupo C_{3v} podem ser escritas na forma matricial conforme mostramos abaixo:

$$\begin{aligned} \hat{I} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \hat{C}_3 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ \hat{C}_3^{-1} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, & \hat{\sigma}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_2 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, & \hat{\sigma}_3 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Os subgrupos próprios de C_{3^n} são $\{I, \sigma_1\}$, $\{I, \sigma_2\}$, $\{I, \sigma_3\}$ e $\{I, C_3, C_3^{-1}\}$.

2.2 Modelo de Potts de Equilíbrio

O modelo de Potts foi introduzido em 1952 por R. B. Potts [7], como uma generalização do modelo de Ising. Uma revisão bastante completa do modelo pode ser encontrada em [10].

O modelo de Potts é definido como um sistema de N spins dispostos numa rede de forma que cada spin pode assumir q valores ou estados. Os vizinhos mais próximos na rede têm uma energia de interação $-J$ se os spins estão no mesmo estado e energia nula caso estejam em estados diferentes. Assim, a hamiltoniana do modelo é dada pela forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j), \quad (2.7)$$

onde $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$ e a soma é realizada sobre todos os pares de vizinhos mais próximos na rede e $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ é o delta de Kronecker.

O modelo de Potts tem q estados fundamentais equivalentes onde todos os spins da rede estão em um mesmo estado q . Conforme a temperatura aumenta, existe uma transição para uma fase paramagnética. A ordem da transição depende do número de estados q e da dimensionalidade d e nesse fato reside um dos maiores interesses no estudo do modelo. Diversas abordagens foram empregadas a fim de estabelecer relações entre q , d e a ordem da transição. Descreveremos algumas delas como exemplo. A teoria de Landau [11] prevê que a transição é de primeira ordem para $q \geq 3$ independentemente da dimensão. Técnicas de grupo de renormalização através de expansões em ϵ [12, 13] confirmam a previsão de campo médio desde que a dimensão seja maior que a dimensão crítica superior. Para $q \leq 4$ e $d = 2$ é conhecido [14] que a transição é de segunda ordem. Outras abordagens envolvendo

expansões em séries de altas temperaturas, métodos de renormalização e simulação de Monte Carlo podem ser encontradas na literatura [15, 16, 17].

O modelo de Potts também é aplicado no estudo de sistemas físicos experimentais ¹. Destacamos o processo de adsorção de criptônio pelo grafite que pode ser mapeado pelo modelo de Potts de três estados em duas dimensões [18].

O parâmetro de ordem do modelo de Potts de q estados é dado comumente pela expressão

$$M = \frac{q \sum_{i=1}^N \delta(\sigma_i, 1) - 1}{q - 1}, \quad (2.8)$$

onde $\delta(\sigma_i, 1)$ é o delta de Kronecker.

Faremos a seguir algumas considerações sobre a simetria do modelo de três estados ($q = 3$) explicando o porquê desta pertencer ao grupo C_{3n} . Interpretamos a simetria de um modelo de equilíbrio como operações pertencentes a determinado grupo que podem ser aplicadas mantendo o hamiltoniano invariante. Como existe a função delta no hamiltoniano de Potts, vemos que operações de reflexão e rotação entre estados de fato o mantêm inalterado. No modelo de três estados podemos escrever $\sigma_i = 1, 2$ ou 3 . Aplicando, por exemplo, a operação de reflexão $1 \rightleftharpoons 2$ em todos os sítios da rede, mantendo aqueles no estado 3 inalterados, vemos que o hamiltoniano não se altera. O mesmo ocorre para a operação de rotação $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$. Podemos generalizar os exemplos acima para todas as operações de reflexão e rotação possíveis entre os estados. Essas simetrias são exatamente aquelas pertencentes ao grupo C_{3n} , descrito na seção anterior.

2.3 Cálculo de Invariantes

Dada a simetria de um modelo, é interessante construirmos termos naturalmente invariantes pelas simetrias do grupo. A partir desses invariantes definimos então as grandezas observáveis, como magnetização, susceptibilidade, cumulante, etc., que se aplicam a todos os modelos pertencentes ao grupo de simetria.

No caso de um modelo de três estados em duas dimensões, seja ele de equilíbrio ou não, uma dada configuração é caracterizada por sítios numa

¹Vide [10] e referências citadas

rede que por sua vez podem assumir os estados 1, 2 ou 3. Denominamos N_i o número de sítios no estado i e N o número total de sítios na rede. Uma grandeza prontamente introduzida é a densidade ρ_i , definida como a média da razão N_i/N . Assim, podemos associar um estado totalmente ordenado ao conjunto de valores $\{\rho_1, \rho_2, \rho_3\} = \{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ e o estado desordenado ao conjunto $\{\rho_1, \rho_2, \rho_3\} = \{(1/3, 1/3, 1/3)\}$. Esse conjunto de estados pode ser representado num plano conforme vemos na figura (2.3).

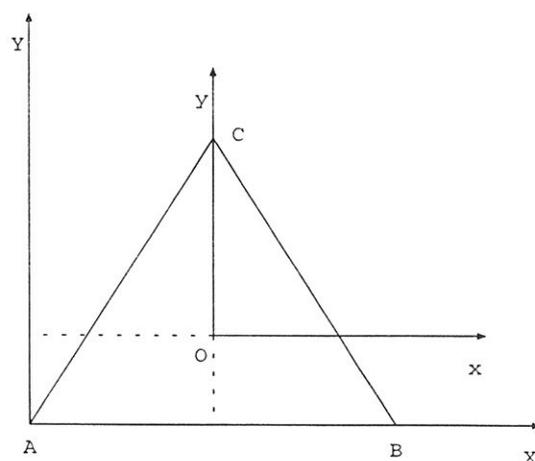


Figura 2.3: Representação no plano da transformação de coordenadas.

No plano XY traçamos um triângulo equilátero em cujo centro está a origem de um outro sistema de coordenadas xy . Na tabela abaixo associamos os pontos A , B , C e O aos valores correspondentes de configurações de ρ_i e ao ponto correspondente no plano XY .

ponto	ρ_1	ρ_2	ρ_3	X	Y
A	1	0	0	0	0
B	0	1	0	$\frac{2}{\sqrt{3}}$	0
C	0	0	1	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	1
O	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{3}$

Obtemos, conseqüentemente, as relações

$$X = \frac{2}{\sqrt{3}}\rho_2 + \frac{1}{\sqrt{3}}\rho_3, \quad (2.9)$$

$$Y = \rho_3, \quad (2.10)$$

e

$$x = X - \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (2.11)$$

$$y = Y - \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (2.12)$$

Chegamos então a

$$\rho_1 = 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}X - \frac{1}{2}Y, \quad (2.13)$$

$$\rho_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}X - \frac{1}{2}Y, \quad (2.14)$$

$$\rho_3 = Y. \quad (2.15)$$

Finalmente,

$$\rho_1 = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y, \quad (2.16)$$

$$\rho_2 = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y, \quad (2.17)$$

$$\rho_3 = \frac{1}{3} + y. \quad (2.18)$$

Obtivemos assim um mapeamento $(\rho_1, \rho_2, \rho_3) \Rightarrow (x, y)$. As variáveis (x, y) são ortogonais entre si e, através delas, os invariantes podem ser construídos.

Para cada ordem, o invariante deve ser primeiramente construído da forma mais geral possível e, então, aplicamos as operações de simetria do grupo para determinarmos que termos são mantidos. Ressaltamos aqui que, na figura (2.2 (a)), a reflexão no plano σ_1 corresponde, num plano ortogonal xy , às operações $x \Rightarrow x$ e $y \Rightarrow -y$. Essa é a definição usual advinda da teoria de grupos. Na nossa construção, essa mesma operação de reflexão (vide figura (2.3)) é dada por $x \Rightarrow -x$ e $y \Rightarrow y$. Dessa forma, utilizamos, em vez de $\hat{\sigma}_1$ a matriz que denominamos $\hat{\sigma}'_1$ dada por

$$\hat{\sigma}'_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Construímos, assim, os invariantes de ordem n , representados por $I_n(x, y)$. Como exemplo escrevemos

$$I_2(x, y) = \frac{1}{2} (x^2 + y^2) , \quad (2.19)$$

$$I_3(x, y) = \frac{1}{2} y \left(x^2 - \frac{1}{3} y^2 \right) , \quad (2.20)$$

$$I_4(x, y) = (I_2(x, y))^2 = \frac{1}{4} (x^2 + y^2)^2 , \quad (2.21)$$

$$I_5(x, y) = I_2(x, y) \cdot I_3(x, y) = \frac{1}{2} (x^2 + y^2) \left(x^2 y - \frac{1}{3} y^3 \right) . \quad (2.22)$$

Para cada ordem n existe um único invariante I_n . A partir dos invariantes podemos definir grandezas físicas que serão utilizadas na análise das transições de fase. O parâmetro de ordem m é definido por

$$m = \left\langle \sqrt{I_2} \right\rangle , \quad (2.23)$$

a susceptibilidade χ é dada por

$$\chi = N \{ \langle I_2 \rangle - m^2 \} , \quad (2.24)$$

e o cumulante de quarta ordem reduzido por

$$U = 1 - \frac{\langle I_4 \rangle}{3 \langle I_2 \rangle^2} . \quad (2.25)$$

Capítulo 3

Modelos Irreversíveis

Na primeira parte deste trabalho estudaremos modelos com dinâmicas estocásticas irreversíveis que contenham as mesmas simetrias do modelo de Potts de três estados, construindo dessa forma, os modelos mais genéricos possíveis compatíveis com as simetrias do grupo C_{3n} . Antes de descrevermos os modelos propostos, destacaremos algumas seções que serão úteis na concepção e desenvolvimento dos modelos.

3.1 Autômatos Celulares

Autômatos celulares são modelos matemáticos utilizados no estudo de uma grande variedade de sistemas caracterizados por interações locais, com aplicações nas áreas de física, química e biologia entre outras. Podemos definir um autômato celular como um conjunto de variáveis discretas dispostas sobre sítios de uma rede, caracterizando assim um espaço também discreto. A evolução temporal de um autômato dá-se através de uma dinâmica imposta, que atua sobre cada variável da rede levando em conta apenas a vizinhança mais próxima do sítio no qual está localizada essa variável. A dinâmica pode ser dada por regras locais probabilísticas ou determinísticas. Todos os sítios da rede são atualizados simultaneamente, e cada atualização corresponde a um passo de tempo. Assim, o tempo também é definido de forma discreta.

Uma importante aplicação de autômatos celulares está no estudo de sistemas físicos de não-equilíbrio, porque podemos implementar uma dinâmica não restrita à condição de balanceamento detalhado, que explicaremos na próxima seção .

3.1.1 Formulação Analítica

Consideremos uma rede composta por N sítios, onde a cada sítio associamos uma variável dinâmica σ_i . O sub-índice i denota a posição do sítio na rede. Podemos caracterizar uma configuração de variáveis na rede através de um conjunto $\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$.

Definimos a probabilidade de uma certa configuração σ de um sistema num instante de tempo $(l + 1)$ de acordo com

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma | \sigma') P_l(\sigma'), \quad (3.1)$$

onde σ' é o estado do sistema no instante de tempo anterior l e $W(\sigma | \sigma')$ a probabilidade de transição de σ' para σ . Sendo $W(\sigma | \sigma')$ uma probabilidade condicional (em σ), deve obedecer os vínculos

$$W(\sigma | \sigma') \geq 0 \quad e \quad \sum_{\sigma} W(\sigma | \sigma') = 1. \quad (3.2)$$

Num autômato celular os sítios são atualizados simultaneamente, e portanto podemos escrever

$$W(\sigma | \sigma') = \prod_{i=1}^N w_i(\sigma_i | \sigma'), \quad (3.3)$$

onde w_i é a probabilidade de transição para cada sítio e tem a propriedade

$$\sum_{\sigma_i} w_i(\sigma_i | \sigma') = 1. \quad (3.4)$$

Dessa forma, reescrevemos (3.1) como

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} \left[\prod_{i=1}^N w_i(\sigma_i | \sigma') \right] P_l(\sigma'). \quad (3.5)$$

As probabilidades de transição $w_i(\sigma_i | \sigma')$, juntamente com a condição de atualização síncrona, englobam toda a dinâmica do sistema em estudo, uma vez que a cada sítio é fornecida a regra de evolução temporal e todos evoluem juntos a cada unidade de tempo.

Temos, assim, uma equação iterativa no tempo, cuja evolução pode levar a um regime estacionário. Os chamados estados estacionários são descritos

por uma distribuição de probabilidades também estacionária $P_{est}(\sigma)$. Assim, nesse regime,

$$P_{est}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma | \sigma') P_{est}(\sigma'). \quad (3.6)$$

Como o lado esquerdo da equação acima depende somente de σ , podemos multiplicá-lo por

$$\sum_{\sigma'} W(\sigma' | \sigma),$$

que é igual a 1 como vimos na equação (3.2). Assim, (3.6) pode ser reescrita como

$$\sum_{\sigma'} W(\sigma' | \sigma) P_{est}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma | \sigma') P_{est}(\sigma'). \quad (3.7)$$

O estado estacionário atingido é um estado de equilíbrio se a condição

$$P_{est}(\sigma) W(\sigma' | \sigma) = P_{est}(\sigma') W(\sigma | \sigma') \quad (3.8)$$

é verificada. No formalismo de sistemas estocásticos, (3.8) é a *condição de balanceamento detalhado*, que caracteriza sistemas com dinâmicas reversíveis.

3.1.2 Aproximação de Campo Médio Simples

Como num autômato celular podemos associar probabilidades de transição a cada sítio individualmente, é interessante analisarmos a chamada correlação de um sítio, dada pela forma

$$P_{l+1}(\sigma_i) = \sum_{\sigma'} w_i(\sigma_i | \sigma') P_l(\sigma') \quad (3.9)$$

$$= \langle w_i(\sigma_i | \sigma') \rangle_l. \quad (3.10)$$

Consideremos o caso em que as regras locais incluem só interações entre primeiros vizinhos na rede. Se tomarmos uma rede quadrada regular e numerarmos um dado sítio central e seus vizinhos de 0 a 4, podemos representar uma dada configuração σ' da seguinte forma

$$\begin{array}{ccc} & \sigma'_2 & \\ \sigma'_1 & \sigma'_0 & \sigma'_3 \\ & \sigma'_4 & \end{array}$$

Dessa forma, procedemos analisando apenas o sítio $i = 0$, reescrevendo (3.5) como

$$P_{l+1}(\sigma_0) = \sum_{\sigma'} w_o \left(\sigma_0 \mid \begin{array}{ccc} \sigma'_2 & & \\ \sigma'_1 & \sigma'_0 & \sigma'_3 \\ \sigma'_4 & & \end{array} \right) P_l \left(\begin{array}{ccc} \sigma'_2 & & \\ \sigma'_1 & \sigma'_0 & \sigma'_3 \\ \sigma'_4 & & \end{array} \right), \quad (3.11)$$

sendo que na soma em σ' estão implícitas as somas em $\sigma'_0, \sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3$ e σ'_4 .

Na chamada aproximação de campo médio simples, a probabilidade de um dado aglomerado é dada pelo produto das probabilidades de cada sítio, ou seja,

$$P \left(\begin{array}{ccc} \sigma'_2 & & \\ \sigma'_1 & \sigma'_0 & \sigma'_3 \\ \sigma'_4 & & \end{array} \right) = P(\sigma'_0)P(\sigma'_1)P(\sigma'_2)P(\sigma'_3)P(\sigma'_4). \quad (3.12)$$

Nessa aproximação são desprezadas todas as correlações entre os sítios da rede. Embora essa aproximação não seja satisfatória sob o ponto de vista quantitativo, qualitativamente pode oferecer resultados não muito distintos de resultados esperados, uma vez que a aproximação é feita diretamente na probabilidade de transição permitindo que a simetria do modelo seja incorporada.

3.2 Modelos

Modelos utilizados para descrever fenômenos fora do equilíbrio não possuem uma hamiltoniana associada. Assim, a simetria do modelo não mais é implementada como operações que mantêm a hamiltoniana invariante e sim aplicada diretamente nas regras dinâmicas de transição. Veremos a seguir como é realizada essa aplicação.

Denominamos S o conjunto de operações de simetria pertencentes ao grupo C_{3v} , σ uma configuração genérica de estados e $W(\sigma|\sigma')$ a probabilidade de transição de uma configuração σ' para uma configuração σ . Seguindo o

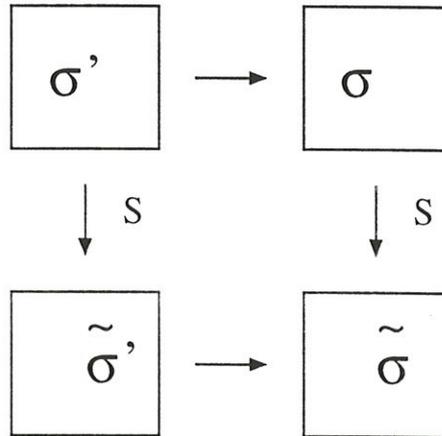


Figura 3.1: Esquema das operações representadas por S atuando em configurações representadas por σ

diagrama representativo da figura (3.1), vemos que a aplicação de S em σ' e em σ gera, respectivamente, novas configurações $\tilde{\sigma}'$ e $\tilde{\sigma}$.

As regras de transição são invariantes pela simetria S se a condição

$$W(\sigma|\sigma') = W(\tilde{\sigma}|\tilde{\sigma}') \quad (3.13)$$

é obedecida.

3.3 Modelo Simétrico

No primeiro modelo proposto [19], denotado no que segue por *modelo simétrico*, definimos um autômato celular probabilístico numa rede quadrada, nos moldes da seção anterior, associando a cada sítio na rede uma variável aleatória σ_i que pode assumir os valores 1, 2 ou 3. As possíveis transições entre os estados podem ser visualizadas na figura (3.2).

A probabilidade de transição, por sítio, de um determinado estado para outro é dada por um parâmetro p , onde, de forma análoga aos modelos de votante majoritário [20], leva-se em conta o estado em que está a maioria

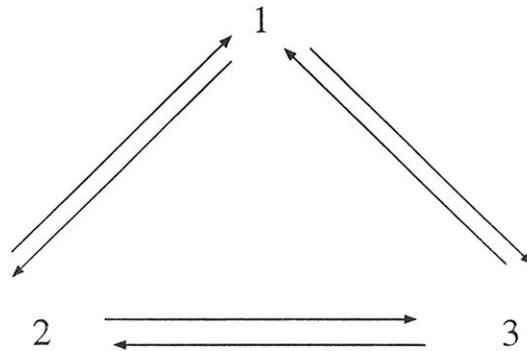


Figura 3.2: Transições possíveis no modelo simétrico.

dos vizinhos do sítio escolhido. Assim, o estado do sítio escolhido será o mesmo da maioria de seus vizinhos com probabilidade p ou será qualquer um dos outros estados com probabilidade $(1 - p)/2$. Caso haja empate nos estados dos sítios vizinhos, o estado do sítio escolhido será qualquer um dos três estados com probabilidade $1/3$. Assim, para $p = 1/3$ os três estados são igualmente favorecidos.

Na figura (3.3) destacamos um exemplo onde a configuração σ' é transformada na configuração σ quando o sítio central (destacado) tem seu estado alterado de 1 para 3.

Seguindo as regras de transição definidas acima, vemos que a probabilidade para essa transição é $w(\sigma|\sigma') = (1 - p)/2$. Se aplicamos agora uma das operações de S , por exemplo a reflexão entre estados $1 \leftrightarrow 2$ nas configurações σ' e σ , obtemos as novas configurações $\tilde{\sigma}'$ e $\tilde{\sigma}$. Naturalmente vemos que $w(\tilde{\sigma}|\tilde{\sigma}') = (1 - p)/2$, correspondente à probabilidade do sítio central de $\tilde{\sigma}'$, que está no estado 2, passar a ocupar o estado 3, que caracteriza a configuração $\tilde{\sigma}$. Vemos que de fato a probabilidade de transição se mantém inalterada. Podemos generalizar esse cálculo a todas as configurações e transições possíveis. Se representarmos agora a probabilidade de transição de um dado sítio σ_0 por $w(\sigma_0|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$, onde estão explicitados também os primeiros

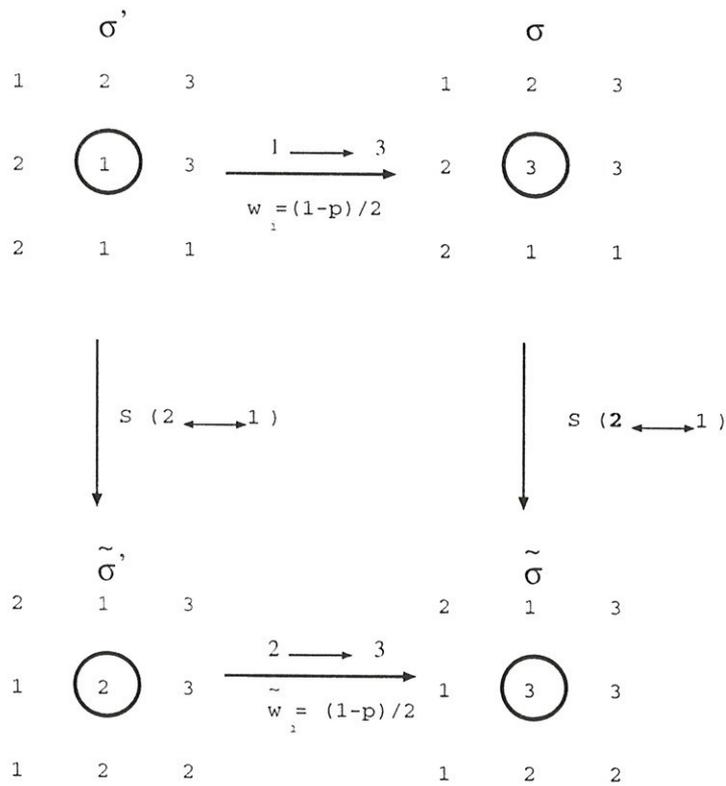


Figura 3.3: Exemplo de transições e aplicação da simetria $S(2 \leftrightarrow 1)$ numa rede, para a dinâmica do modelo simétrico.

vizinhos $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ e σ_4 temos

$$w(1|1111) = w(1|1112) = w(1|1113) = w(1|1123) = p, \quad (3.14)$$

$$w(1|1222) = w(1|1223) = w(1|1233) = w(1|1333) \quad (3.15)$$

$$= w(1|2222) = w(1|3333) = \frac{1-p}{2},$$

$$w(1|1122) = w(1|1133) = w(1|2233) = \frac{1}{3}. \quad (3.16)$$

As permutações entre os sítios vizinhos mantêm a regra inalterada, assim como as operações de reflexão e rotação entre estados, caracterizando dessa forma as simetrias do grupo C_{3v} aplicadas diretamente nas regras de transição. Ressaltamos que as operações devem ser aplicadas a todos os sítios, inclusive ao sítio central escolhido.

Da forma como foi construída a dinâmica do modelo, esperamos que para $p = 1/3$ exista um estado desordenado caracterizado por uma igual densidade de sítios nos estados 1, 2 e 3. À medida que aumentamos o valor de p , favorecemos cada sítio a assumir o estado da maioria de vizinhos, ou seja, para valores altos de p esperamos um ordenamento dos sítios onde a maioria esteja num determinado estado. Conjecturamos, então, a existência de uma transição de fase que será confirmada através de simulações. Na figura abaixo representamos uma configuração correspondente a $p = 1/3$ sofrendo uma transição para uma configuração correspondente a $p = 1$, conforme p aumenta. Podemos traçar um paralelo entre o parâmetro p do modelo simétrico e a temperatura no modelo de Potts, onde $p = 1/3$ corresponde a temperatura infinita e $p = 1$ corresponde a temperatura zero.

$$\begin{array}{ccccc}
 1 & 2 & 3 & 2 & 3 \\
 3 & 2 & 3 & 1 & 1 \\
 2 & 2 & 1 & 3 & 1 \\
 2 & 1 & 3 & 3 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 2 & 3
 \end{array}
 \quad \xRightarrow{\text{aumento de } p} \quad
 \begin{array}{ccccc}
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 1
 \end{array}$$

$$p = \frac{1}{3} \qquad \qquad \qquad p = 1$$

3.4 Modelo de Quatro Estados

O segundo modelo, denominado *modelo de quatro estados* [21], associa a cada sítio da rede a variável dinâmica σ_i que pode assumir agora os valores 0, 1, 2 ou 3. No entanto, o estado 0 não se encontra no mesmo *status* que os outros três, equivalentes entre si. As transições para esse modelo estão representadas na figura (3.4).

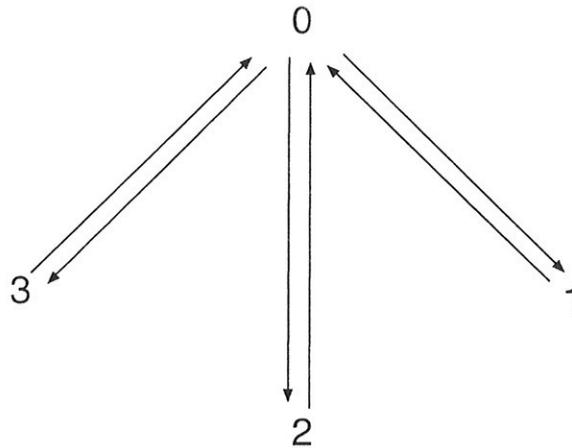


Figura 3.4: Transições possíveis para o modelo de quatro estados.

A dinâmica, nesse caso, foi implementada da seguinte maneira: se um sítio estiver no estado 1, 2 ou 3, com probabilidade q ele passa a ser 0, independentemente da vizinhança, caracterizando então um processo espontâneo. Caso o sítio esteja no estado 0, vale a regra da maioria de vizinhos e caracterizamos um processo catalítico. Representaremos então a probabilidade de transição por $w(\sigma_0|\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$ e destacamos

$$w(0|1 \otimes \otimes \otimes \otimes) = q, \quad (3.17)$$

$$w(1|1 \otimes \otimes \otimes \otimes) = 1 - q, \quad (3.18)$$

$$w(2|1 \otimes \otimes \otimes \otimes) = w(3|1 \otimes \otimes \otimes \otimes) = 0, \quad (3.19)$$

onde o símbolo \otimes foi introduzido para representar a independência da probabilidade com relação aos vizinhos. Outras probabilidades são

$$w(0|00000) = 1 - p, \quad (3.20)$$

$$w(1|00000) = \frac{p}{3}, \quad (3.21)$$

$$w(2|00000) = \frac{p}{3}, \quad (3.22)$$

$$w(3|00000) = \frac{p}{3}. \quad (3.23)$$

$$(3.24)$$

As demais probabilidades para o sítio central igual a 0 seguem a regra da maioria, onde definimos

$$w(0|01111) = w(0|01112) = w(0|01123) = 1 - p, \quad (3.25)$$

$$w(1|01111) = w(1|01112) = w(1|01123) = p, \quad (3.26)$$

$$w(0|00012) = w(0|01122) = 1 - p, \quad (3.27)$$

$$w(1|00012) = w(1|01122) = w(2|00012) = w(2|01122) = \frac{p}{2}. \quad (3.28)$$

Mais uma vez as regras são invariantes para permutações $1 \rightleftharpoons 2$, $1 \rightleftharpoons 3$ e $2 \rightleftharpoons 3$ e permutações cíclicas entre vizinhos, além de ser a mesma quando da aplicação das simetrias do grupo. Podemos novamente expor um exemplo (figura(3.5)) onde $w(\sigma|\sigma') = p$ quando o estado do sítio central sofre uma transição $0 \rightarrow 2$. Se aplicarmos a simetria de reflexão $2 \leftrightarrow 3$ às configurações σ' e σ obtemos as novas configurações $\bar{\sigma}'$ e $\bar{\sigma}$, onde $w(\bar{\sigma}|\bar{\sigma}') = p$, correspondendo a uma transição $0 \rightarrow 3$ do estado do sítio central. Mais uma vez vemos que a regra se mantém inalterada após a aplicação da simetria, propriedade válida para todas as configurações e operações possíveis.

Nesse caso, para um determinado valor de p , vemos que o aumento do parâmetro q favorece o estado 0. Dessa forma, esperamos uma transição de fase de um estado ordenado (baixos valores de q), onde existe uma maioria de sítios no estado 1, 2 ou 3, para um estado desordenado composto por uma maioria de sítios no estado 0 (altos valores de q). Conforme demonstraremos na próxima seção, existe uma expressão exata relacionando a distribuição estacionária de sítios no estado 0 com a distribuição estacionária de sítios nos

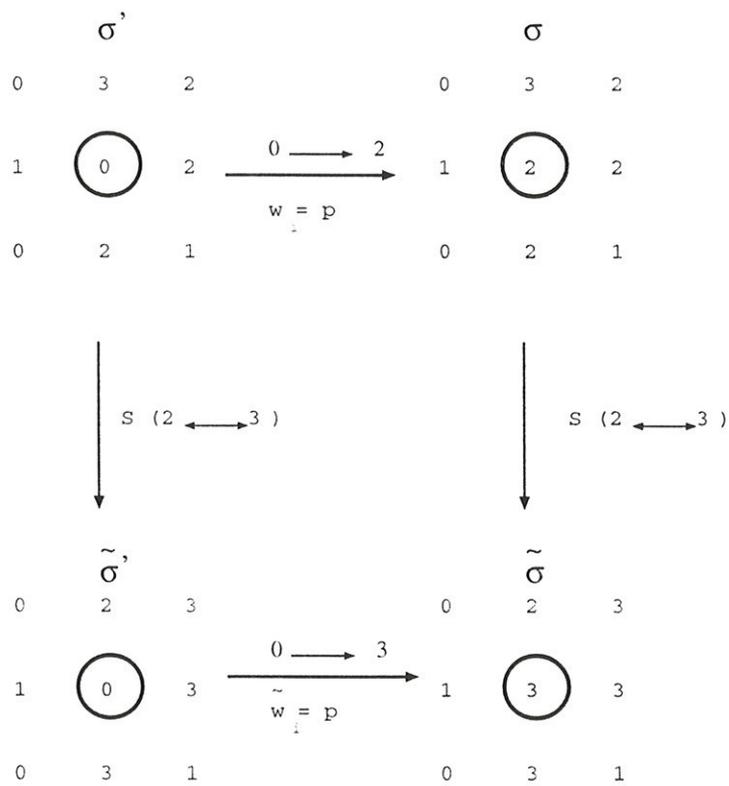


Figura 3.5: Exemplo de transições e aplicação da simetria $S(2 \leftrightarrow 3)$ numa rede, para a dinâmica do modelo de quatro estados.

estados 1, 2 e 3. Teríamos então, para cada valor de p , um valor crítico de q caracterizando a transição. Também essa conjectura poderá ser confirmada com as simulações .

O modelo de quatro estados é uma generalização do modelo TD [22, 23] introduzido para descrever uma parte do sistema imunológico [24]. Nesse modelo, estados 1 e 2 correspondem a um sítio da rede sendo ocupado por uma célula T_H1 ou T_H2 e o estado 0 a um sítio sendo ocupado por uma célula T_H0 . Se for possível fazer uma correspondência entre o modelo de quatro estados e respostas imunológicas, o estado 3 poderia corresponder a um sítio sendo ocupado por um outro tipo de célula.

Propusemos dois modelos distintos com simetria C_{3v} , cujas análises procederão com abordagem de campo médio (próxima seção) e simulação computacional (capítulos 4 e 5).

3.5 Aproximação de Campo Médio - Aplicação

Na primeira abordagem dos modelos propostos, fizemos uma análise de campo médio simples, conforme explicado na seção (2.1.2). Essa abordagem permite-nos encontrar uma expressão analítica para a equação de evolução de $P_l(\sigma_i)$, densidade de sítios no estado σ_i (ou correlação de um sítio), dada na equação (3.9) e encontrar o valor estacionário dessa grandeza.

3.5.1 Modelo Simétrico

No modelo simétrico, definido na seção (2.2.1), temos $\sigma_i = 1, 2$ ou 3 . Assim, devemos encontrar as expressões para $P_{l+1}(1)$, $P_{l+1}(2)$ e $P_{l+1}(3)$ como funções de $P_l(1)$, $P_l(2)$, $P_l(3)$ e do parâmetro p . Na prática, consideramos um dado sítio e escrevemos todas as configurações possíveis dos seus primeiros vizinhos, uma vez que a probabilidade de transição independe do sítio a ser atualizado e, para cada uma, consideramos o número de permutações entre os sítios e a probabilidade do sítio central assumir, no instante de tempo posterior, os valores 1, 2 ou 3, segundo as regras impostas. Se, por exemplo, tomamos a configuração de vizinhos

$$\begin{array}{c} 3 \\ 3 \quad 1, \\ 2 \end{array}$$

vemos que existem 12 configurações equivalentes e, segundo a dinâmica, temos ainda

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) &= \frac{1-p}{2}, \\ P_{l+1}(2) &= \frac{1-p}{2}, \\ P_{l+1}(3) &= p. \end{aligned}$$

Se essa fosse a única configuração existente, teríamos, na aproximação de campo médio simples.

$$\begin{aligned} P_{l+1}(1) &= 12 \frac{1-p}{2} P_l(1) P_l(2) P_l(3)^2, \\ P_{l+1}(2) &= 12 \frac{1-p}{2} P_l(1) P_l(2) P_l(3)^2, \\ P_{l+1}(3) &= 12 p P_l(1) P_l(2) P_l(3)^2. \end{aligned}$$

Assim, considerando todas as configurações e utilizando a notação simplificada

$$\begin{aligned} P_l(3) &= x_l, \\ P_l(1) &= y_l, \\ P_l(2) &= z_l, \end{aligned}$$

encontramos as expressões

$$\begin{aligned} x_{l+1} &= p(x_l^4 + 4x_l^3 y_l + 4x_l^3 z_l + 12x_l^2 y_l z_l) + \frac{1}{3}(6x_l^2 z_l^2 + 6x_l^2 y_l^2 + 6y_l^2 z_l^2) \\ &\quad + \frac{1-p}{2}(4x_l z_l^3 + 12x_l z_l^2 y_l + 12x_l y_l^2 z_l + 4x_l y_l^3 + y_l^4 + 4y_l^3 z_l + 4y_l z_l^3 + z_l^4) \\ y_{l+1} &= p(12x_l y_l^2 z_l + 4x_l y_l^3 + y_l^4 + 4y_l^3 z_l) + \frac{1}{3}(6y_l^2 z_l^2 + 6x_l^2 y_l^2 + 6x_l^2 z_l^2) \\ &\quad + \frac{1-p}{2}(x_l^4 + 4x_l^3 y_l + 4x_l^3 z_l + 12x_l^2 y_l z_l + 4x_l z_l^3 + 12x_l y_l z_l^2 + 4y_l z_l^3 + z_l^4) \\ z_{l+1} &= p(4x_l z_l^3 + 12x_l y_l z_l^2 + 4y_l z_l^3 + z_l^4) + \frac{1}{3}(6x_l^2 z_l^2 + 6y_l^2 z_l^2 + 6x_l^2 y_l^2) \\ &\quad + \frac{1-p}{2}(x_l^4 + 4x_l^3 z_l + 4x_l^3 y_l + 12x_l^2 y_l z_l + 12x_l y_l^2 z_l + 4x_l z_l^3 + y_l^4 + 4y_l^3 z_l). \end{aligned}$$

Estudamos então os estados estacionários desse modelo tomando $x_{l+1} = x_l = x$, $y_{l+1} = y_l = y$ e $z_{l+1} = z_l = z$. Encontramos um estado estacionário trivial dado por $x = y = z = 1/3$, caracterizando o estado estacionário desordenado. Para encontrarmos a outra solução estacionária fazemos a hipótese $y = z$ e escrevemos o parâmetro de ordem como

$$\begin{aligned} m &= P(3) - P(1) \\ &= x - y, \end{aligned} \quad (3.29)$$

com o vínculo

$$x + y + z = x + 2y = 1. \quad (3.30)$$

Reescrevemos x e y como função de m ,

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{3} (1 + 2m), \\ y &= \frac{1}{3} (1 - m), \end{aligned} \quad (3.31)$$

de forma a mantermos o vínculo (3.30). Assim, encontramos uma expressão para m_{l+1} em função de m_l ,

$$\begin{aligned} m_{l+1} &= \left(-\frac{2}{3} + 2p\right) m_l + \left(-\frac{1}{3} + p\right) m_l^2 + \left(\frac{2}{3} - 2p\right) m_l^3 \\ &\quad + \left(-\frac{1}{6} + \frac{p}{2}\right) m_l^4. \end{aligned} \quad (3.32)$$

A partir da própria expressão (3.32), vemos que m_{l+1} tem uma dependência quadrática em m_l , evidenciando a existência de uma transição de primeira ordem, característica da aproximação de campo médio para o modelo de Potts de três estados. Se construirmos um gráfico do parâmetro de ordem estacionário m em função da probabilidade p (figura (3.6)) vemos claramente essa transição, já que para uma determinada região de valores de p , existe mais de uma solução para a magnetização, caracterizando uma coexistência de fases.

A fase desordenada, $m = 0$, fica instável para $p = 0.833$. Esse valor é obtido através do coeficiente do termo linear em m da expressão (3.32) no estado estacionário.

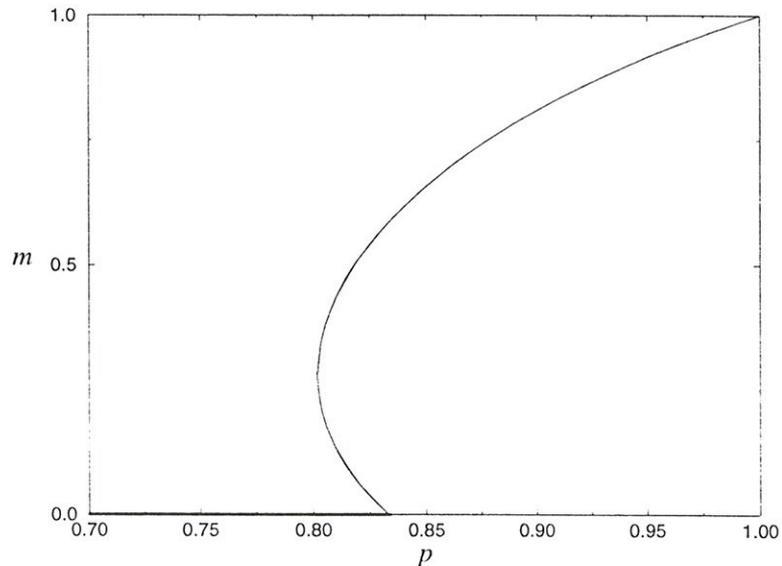


Figura 3.6: $m \times p$ para o modelo simétrico.

No presente caso, apesar da aproximação de campo médio simples prever a transição de fase, não prevê corretamente a ordem da transição. A aproximação de campo médio simples é muito rudimentar pois despreza todas as correlações. Poderíamos proceder com uma aproximação de ordem superior, levando em conta correlações de pares, mas estas sempre irão prever transições de primeira ordem, devido aos termos quadráticos.

3.5.2 Modelo de Quatro Estados

No modelo de quatro estados, existe um ponto interessante que consiste em podermos encontrar, para a probabilidade estacionária $P(0)$, densidade de sítios no estado 0, uma expressão exata. Isso ocorre porque, recordando a dinâmica desse modelo, a probabilidade de um sítio no estado 0 continuar sendo 0 é $(1 - p)$ e se o sítio estiver em alguns dos estados 1, 2 ou 3, a probabilidade de tornar-se 0 é sempre q . Assim se denominarmos $P_l(0)$ a probabilidade de um estado ser igual a 0 no instante l e $P_{l+1}(0)$ a probabilidade dele ser 0 no instante $l + 1$, podemos escrever

$$P_{l+1}(0) = (1 - p) P_l(0) + q (P_l(1) + P_l(2) + P_l(3))$$

$$= (1 - p) P_l(0) + q(1 - P_l(0)) ,$$

onde utilizamos a condição de normalização $P_l(0) + P_l(1) + P_l(2) + P_l(3) = 1$. A solução estacionária é dada por $P_{l+1}(\alpha) = P_l(\alpha) \equiv P(\alpha)$, para $\alpha = 0, 1, 2, 3$, resultando em

$$P(0) = \frac{q}{p+q} . \quad (3.33)$$

Esse resultado é exato. Na aproximação de campo médio simples, mais uma vez utilizamos para o parâmetro de ordem $m = P(3) - P(1)$ e encontramos, para a solução estacionária,

$$\begin{aligned} -mq + \frac{14}{9} \frac{mp^4q}{(p+q)^4} + \frac{16}{3} \frac{mp^3q^2}{(p+q)^4} + 6 \frac{mp^2q^3}{(p+q)^4} + 4 \frac{mpq^4}{(p+q)^4} + \frac{1}{3} \frac{m^2p^3q}{(p+q)^3} \\ + \frac{4}{3} \frac{m^2p^2q^2}{(p+q)^3} - \frac{4}{3} \frac{m^3p^2q}{(p+q)^2} - \frac{8}{3} \frac{m^3pq^2}{(p+q)^2} + \frac{4}{9} \frac{m^4pq}{(p+q)} = 0 . \end{aligned} \quad (3.34)$$

A linha de transição para essa solução está no diagrama de fases da figura (3.7), onde novamente temos transição de primeira ordem devido ao termo quadrático em m (equação (3.34)). O ponto $p = q = 0$ não está definido. Vemos que para $p > 0,75$ a fase é sempre ordenada independentemente do valor de q .

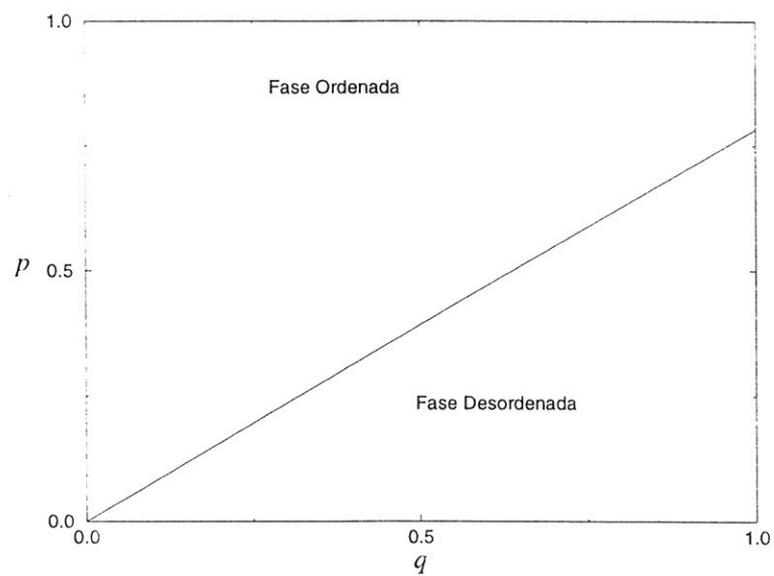


Figura 3.7: Linha crítica para o modelo de quatro estados (campo médio).

Capítulo 4

Análise Numérica

4.1 Transições de fase cinéticas

Estados estacionários de não-equilíbrio emergem e são mantidos como consequência da evolução temporal de um sistema desde que sejam mantidos os vínculos externos de não-equilíbrio que controlam o sistema [25, 26, 27]. Conforme esses vínculos são variados, ocorrem transições de fase fora do equilíbrio, ou seja, transições de fase cinéticas, entre estados estacionários de não-equilíbrio caracterizados por parâmetros de ordem bem definidos.

Às transições de fase cinéticas também está associado, no ponto crítico, um comportamento universal caracterizado por expoentes críticos característicos. No entanto, diferentemente de modelos de equilíbrio, onde o comportamento crítico está diretamente associado às simetrias das hamiltonianas (além da dimensão do sistema e do parâmetro de ordem), o comportamento crítico associado a estados estacionários de não-equilíbrio deve ser analisado sob nova abordagem.

Nas próximas seções deste capítulo descreveremos alguns métodos e formalismos da mecânica estatística de não-equilíbrio.

4.2 Teoria de Escala Finita

A teoria de escala finita foi introduzida em [28] e fornece uma análise do comportamento de escala para transições contínuas em modelos de tamanho finito em equilíbrio termodinâmico, reversíveis microscopicamente. Uma revisão bastante completa pode ser encontrada em [29]. Simulações efetua-

das em sistemas de diferentes tamanhos permitem, a partir da teoria de escala finita, a obtenção de resultados para sistemas infinitos, ou seja, no limite termodinâmico. Recordemos que a teoria de escala finita descreve as propriedades volumétricas de um sistema finito de dimensão linear L com condições de contorno periódicas em termos do tamanho relativo entre o comprimento de correlação ξ e L . Nas proximidades da temperatura crítica, T_c , $\xi \sim |T_c - T|^{-\nu}$. Consequentemente, efeitos de tamanho finito aparecem quando $\xi \sim L$.

No presente trabalho, tratamos sistemas microscopicamente irreversíveis e assumimos que uma análise de escala finita possa ser empregada no estudo de propriedades críticas desses modelos. Este procedimento, análogo ao utilizado para modelos de equilíbrio, tem sido aplicado com sucesso a modelos de não-equilíbrio [19, 20, 30, 31, 32].

Como numa transição de segunda ordem regular, assumimos que a transição em nosso sistema apresenta uma escala de comprimento característico ξ que, no sistema infinito, diverge de acordo com

$$\xi \sim |p_c - p|^{-\nu}, \quad (4.1)$$

sendo ν o expoente crítico do comprimento de correlação. Esperamos então que efeitos relativos ao tamanho finito do sistema devam aparecer quando ξ for da ordem do comprimento linear da rede, L . Como L tem a mesma forma de escala que ξ , podemos considerar uma função genérica $Q_L(p)$, relacionada ao sistema finito, como uma função homogênea de L e ξ ,

$$Q_L(p) = L^{\frac{h}{\nu}} \tilde{Q}(x), \quad (4.2)$$

onde

$$x = \left(\frac{L}{\xi} \right),$$

sendo $\tilde{Q}(x)$ uma função universal. Para $x \rightarrow \infty$ temos

$$\tilde{Q}(x) \sim x^{-\frac{h}{\nu}}.$$

Consequentemente, nesse limite,

$$Q_\infty(p) \sim |p_c - p|^{-\theta} . \quad (4.3)$$

Podemos escrever a expressão (4.2) da forma alternativa

$$Q_L(p) = L^{\frac{\theta}{\nu}} \tilde{Q} \left(L^{\frac{1}{\nu}} |p_c - p| \right) . \quad (4.4)$$

Assim, para $p = p_c$,

$$Q_L(p_c) \sim L^{\frac{\theta}{\nu}} .$$

Notamos que, na criticalidade, a função $Q_L(p_c)$ exibe um comportamento de lei de potência, como função de L , determinado exclusivamente pelos expoentes críticos do sistema infinito.

Para o parâmetro de ordem m , esperamos que, no sistema infinito e nas proximidades de p_c , o comportamento seja

$$m \sim |p_c - p|^\beta . \quad (4.5)$$

Utilizando a função generalizada $Q_L(p)$, tomamos $\theta = -\beta$, o que nos permite escrever, para o parâmetro de ordem da rede finita,

$$m_L(p) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m} \left(L^{\frac{1}{\nu}} |p_c - p| \right) , \quad (4.6)$$

sendo \tilde{m} uma função universal.

A susceptibilidade por partícula é definida como a variância do parâmetro de ordem m , ou seja,

$$\chi_m = N \cdot \left(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \right) , \quad (4.7)$$

sendo N o número de sítios da rede ($N = L \times L$). Num sistema infinito, a susceptibilidade no ponto crítico diverge com

$$\chi \sim |p_c - p|^{-\gamma} . \quad (4.8)$$

No sistema finito, em vez de divergir, a susceptibilidade no ponto crítico apresenta picos cujas forma e posição variam com o tamanho linear da rede. Escrevemos, para $\chi_L(p)$ a forma de escala (tomamos $\theta = \gamma$ na expressão (4.4))

$$\chi_L(p) = L^{\frac{1}{\nu}} \tilde{\chi} \left(L^{\frac{1}{\nu}} |p_c - p| \right) , \quad (4.9)$$

onde novamente $\tilde{\chi}$ é uma função universal.

O cumulante de quarta ordem não apresenta uma forma de escala com L , ou seja, podemos escrever para essa grandeza a forma geral

$$U_L(p) = L^0 \tilde{U} \left(L^{\frac{1}{\nu}} |p_c - p| \right) . \quad (4.10)$$

No ponto crítico, o cumulante atinge um valor universal, independentemente do tamanho do sistema.

Definimos ainda uma probabilidade efetiva de transição para cada tamanho de rede, cuja relação com a probabilidade crítica p_c da rede infinita é

$$p_c(L) = p_c + \kappa L^{-\frac{1}{\nu}} , \quad (4.11)$$

sendo κ uma constante.

4.3 Método de Monte Carlo

A física estatística lida com sistemas com muitos graus de liberdade, e dentro dessa abordagem um problema usual consiste na estimativa de médias de funções de estado $F(\sigma)$ dadas através de somas do tipo

$$\langle F(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} F(\sigma) P(\sigma) , \quad (4.12)$$

onde σ representa todos os estados acessíveis ao sistema dentro do espaço de fases e $P(\sigma)$ é uma distribuição de probabilidades definida *a priori* com as propriedades

$$\sum_{\sigma} P(\sigma) = 1 \quad (4.13)$$

e

$$P(\sigma) \geq 0 . \quad (4.14)$$

O método de Monte Carlo [33, 34] reduz os estados necessários para o cálculo de (4.12) a uma amostra com um número finito M de estados σ_i

($i = 1, 2, \dots, M$), cada um gerado com uma probabilidade $P(\sigma_i)$, de forma que a estimativa de $\langle F(\sigma) \rangle$ passa a ser dada pela média aritmética

$$\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M F(\sigma_i) . \quad (4.15)$$

Assim, o principal ponto do método de Monte Carlo está na elaboração de um algoritmo que gere estados com probabilidades definidas *a priori* a partir de números aleatórios distribuídos uniformemente entre 0 e 1.

4.3.1 Cadeias de Markov

A descrição do método de Monte Carlo tem como pré-requisito a introdução do conceito de cadeias de Markov. Uma cadeia de Markov é definida por uma matriz estocástica \mathcal{M} , onde cada elemento da matriz, que denotaremos $\mathcal{M}(\sigma, \sigma')$, representa a probabilidade de transição de uma configuração (estado) σ' para uma configuração σ . Por ser uma probabilidade, devemos ter necessariamente

$$\mathcal{M}(\sigma, \sigma') \geq 0 . \quad (4.16)$$

Além disso, se considerarmos todos as configurações σ possíveis, temos

$$\sum_{\sigma} \mathcal{M}(\sigma, \sigma') = 1 . \quad (4.17)$$

A probabilidade $P_l(\sigma)$ de um determinado estado σ , num instante de tempo l , evolui de acordo com

$$P_{l+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} \mathcal{M}(\sigma, \sigma') P_l(\sigma') . \quad (4.18)$$

A evolução temporal dá-se até que seja atingida uma solução estacionária $P(\sigma)$ caracterizada pela equação

$$P(\sigma) = \sum_{\sigma'} \mathcal{M}(\sigma, \sigma') P(\sigma') . \quad (4.19)$$

Utilizando a propriedade (4.16), reescrevemos a equação (4.19) como

$$\sum_{\sigma'} \mathcal{M}(\sigma, \sigma') P(\sigma') = \sum_{\sigma'} \mathcal{M}(\sigma', \sigma) P(\sigma) . \quad (4.20)$$

A condição de balanceamento detalhado (ou reversibilidade microscópica) é verificada se a condição

$$\mathcal{M}(\sigma', \sigma)P(\sigma) = \mathcal{M}(\sigma, \sigma')P(\sigma') \quad (4.21)$$

é satisfeita. É importante notar que se a condição de balanceamento detalhado é satisfeita então as equações (4.20) e (4.19) ficam automaticamente satisfeitas.

4.3.2 Modelos de Equilíbrio

Em modelos de equilíbrio existe uma hamiltoniana $\mathcal{H}(\sigma)$, de forma que os estados estacionários atingidos obedecem à distribuição de Gibbs

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z}, \quad (4.22)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e Z é uma constante de normalização. Utilizando essa distribuição, reescrevemos a equação (4.21) como

$$\mathcal{M}(\sigma, \sigma')e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)} = \mathcal{M}(\sigma, \sigma')e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma')}. \quad (4.23)$$

O próximo passo a ser seguido consiste em encontrarmos uma forma para a matriz \mathcal{M} que satisfaça (4.23). Um dos algoritmos mais utilizados para esse fim é o conhecido algoritmo de Metropolis [35], onde

$$\mathcal{M}(\sigma', \sigma) = \begin{cases} 1 & \text{se } E(\sigma') \leq E(\sigma) \\ e^{-\beta(E(\sigma') - E(\sigma))} & \text{se } E(\sigma') > E(\sigma), \end{cases} \quad (4.24)$$

sendo $E(\sigma)$ ($E(\sigma')$) a energia da configuração σ (σ').

Uma vez que estamos tratando de um modelo de equilíbrio, é interessante ressaltarmos que, de fato, a condição de balanceamento detalhado

$$\mathcal{M}(\sigma', \sigma)e^{-\beta E(\sigma)} = \mathcal{M}(\sigma, \sigma')e^{-\beta E(\sigma')} \quad (4.25)$$

é verificada.

Notemos ainda que existe uma probabilidade não nula de que configurações de energia mais alta sejam aceitas, ou seja, simulamos flutuações térmicas evitando que o sistema vá para o estado fundamental.

Para simularmos o modelo de Potts de três estados numa rede quadrada utilizando o algoritmo de Metropolis, tomamos uma configuração inicial σ na rede, cuja energia é dada por

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j), \quad (4.26)$$

onde a soma é realizada sobre os vizinhos mais próximos do sítio (i, j) e σ_i e σ_j podem assumir os valores 1, 2 e 3.

Partimos de uma configuração inicial ordenada (dada, por exemplo, por todos os sítios no estado $\sigma_i = 1$) para evitarmos a formação de domínios que aumentam consideravelmente o tempo de relaxação do sistema, e seguimos as seguintes etapas

- Tomamos um sítio aleatoriamente.
- Calculamos o valor da energia da configuração composta por este sítio e seus vizinhos mais próximos (utilizamos condições de contorno periódicas).
- Geramos um número aleatório η distribuído uniformemente entre 0 e 1. Se $\eta < 1/2$, o sítio muda para um dos dois estados que não seja aquele em que ele se encontra. Se, por exemplo, ao sítio escolhido estiver associada a variável aleatória $\sigma_i = 1$ e o número sorteado for menor que $1/2$, ele assume a variável $\sigma_i = 2$, caso contrário assume $\sigma_i = 3$.
- Escolhido o novo valor, calculamos a energia da nova configuração (com o sítio central alterado).
- Calculamos a probabilidade de transição $e^{-\beta\Delta E}$, onde $\Delta E = E(\sigma') - E(\sigma)$.
- Sorteamos um novo número aleatório η' também com distribuição uniforme entre 0 e 1.

- Se $\eta' < e^{-\beta\Delta E}$ aceitamos o novo valor do sítio, caso contrário mantemos o original.

Repetimos um número suficiente de vezes essas etapas para termos uma boa estatística, pois, de acordo com a equação (4.15), as médias serão mais precisas quanto maior for o número de estados escolhidos (passos de Monte Carlo).

As médias são obtidas tomando-se valores cada vez que percorremos a rede. Se usássemos os valores cada vez que tentássemos alterar um sítio, as configurações obtidas estariam bastante correlacionadas, já que difiririam apenas por esse sítio. Assim, um passo de Monte Carlo corresponde a uma varredura da rede.

4.3.3 Modelos de Não-Equilíbrio

Os modelos de não-equilíbrio que nos referimos nessa tese são modelos estocásticos definidos em reticulados. Estes podem ter atualização sequencial, os chamados modelos de gás de rede [27] ou possuir uma dinâmica onde a atualização é síncrona, os chamados autômatos celulares. Em particular, nessa primeira parte da tese, só consideramos autômatos celulares.

Para os modelos de não-equilíbrio, não temos uma hamiltoniana a partir da qual podemos construir uma dinâmica. Temos, entretanto, em vez disso, um conjunto de regras locais que regem a atualização simultânea de sítios caracterizando um autômato celular. No entanto, cremos que também nesse caso podemos falar em simulação de Monte Carlo uma vez que a estocasticidade também é empregada, embora de uma forma diferente, imposta de acordo com a dinâmica irreversível proposta.

Descreveremos a seguir o procedimento adotado para os dois modelos propostos, sendo que nos dois utilizaremos a notação η para um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1.

- Modelo simétrico

– Associamos um valor ao parâmetro p .

- No caso de existir uma maioria de estados vizinhos em um determinado estado α e $\eta \leq p$, o estado do sítio central será também α . Se, no entanto, $\eta > p$, sorteamos um outro número aleatório η' e o comparamos com $1/2$ para determinarmos em qual dos outros dois estados possíveis o sítio central estará.
 - Se houver empate entre os vizinhos, ou seja, se dois vizinhos estiverem no estado α e dois no estado β e $\eta \leq 1/3$ o sítio central assume o estado α . Se $1/3 < \eta \leq 2/3$ o sítio assume o estado β e se $\eta > 2/3$ o sítio assume o terceiro valor γ .
 - Varremos toda a rede aplicando essas regras e atualizamos todos os sítios simultaneamente.
- Modelo de quatro estados
 - Associamos valores aos parâmetros p e q (definidos na seção (2.2)).
 - Se o sítio central estiver no estado α ($\alpha = 1, 2$ ou 3) e $\eta > q$ ele assume o estado 0 . Caso contrário ele mantém-se no estado original.
 - Se o sítio central estiver no estado 0 e seus vizinhos constituírem os conjuntos de valores $\{0, 0, 0, 0\}$ ou $\{0, 1, 2, 3\}$ em qualquer ordem, e $\eta > p$ ele assume o valor 0 . Se $\eta \leq p$ sorteamos um novo número η' e definimos se o sítio central assume os estados $1, 2$ ou 3 de acordo com os intervalos $\eta' \leq 1/3$, $1/3 < \eta' \leq 2/3$ e $\eta' > 2/3$.
 - Se o sítio central estiver no estado 0 , seus vizinhos constituirão os conjuntos de valores $\{0, 0, 0, \alpha\}$, $\{0, 0, \alpha, \alpha\}$, $\{0, \alpha, \alpha, \alpha\}$ ou $\{\alpha, \alpha, \alpha, \alpha\}$ ($\alpha=1, 2$ ou 3) e $\eta < p$, o sítio central assume o estado α . Se $\eta \geq p$ ele mantém-se no estado 0 .
 - Se o sítio central estiver no estado 0 , os vizinhos em um conjunto de valores do tipo $\{0, 0, \alpha, \beta\}$, $\{\alpha, \alpha, \beta, \beta\}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$, $\alpha \neq \beta$) e $\eta < p$ ele mantém-se no estado 0 . Se $\eta \geq p$ sorteamos um novo número η' e o comparamos com $1/2$ para definir se o sítio assume o estado α ou o estado β .

-
- Se o sítio central estiver no estado 0, os vizinhos em um conjunto de valores do tipo $\{\alpha, \alpha, \alpha, \beta\}$ ou $\{\alpha, \alpha, \beta, \gamma\}$ ($\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$) e $\eta < p$, o sítio central assume o estado α . Se $\eta \geq p$ ele mantém-se no estado 0.

Capítulo 5

Análise numérica - Resultados

5.1 Modelo Simétrico

Para o modelo simétrico utilizamos redes quadradas regulares de lados $L = 10, 20$ e 40 , condições de contorno periódicas e configuração inicial ordenada, com todos os sítios no estado $\sigma_i = 1$. Após descartarmos as primeiras configurações geradas, as médias foram estimadas para 10^6 passos de Monte Carlo.

Uma maneira conveniente de analisarmos o modelo envolve o uso das variáveis

$$x_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\delta(\sigma_i, \alpha) - \frac{1}{3} \right), \quad (5.1)$$

para $\alpha=1, 2$ e 3 . Essas variáveis têm a propriedade

$$x_1 + x_2 + x_3 = 0,$$

de forma que apenas duas delas são independentes. Em termos dessas novas variáveis, podemos reescrever os invariantes de segunda e quarta ordem, respectivamente, como

$$I_2(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{3} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \quad (5.2)$$

e

$$I_4(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{3} (x_1^4 + x_2^4 + x_3^4) . \quad (5.3)$$

Assim, as grandezas de interesse medidas são o parâmetro de ordem m , a susceptibilidade χ e o cumulante de quarta ordem reduzido U_L definidos respectivamente nas equações (2.23), (2.24) e (2.25).

Os dados são analisados sob o referencial da teoria de escala finita. O cumulante $U_L(p)$, definido na equação (2.25), atinge um valor universal no ponto crítico, independente do tamanho da rede. Dessa forma, se traçarmos as curvas de U_L em função de p , para $L=10, 20$ e 40 , elas se cruzam no valor correspondente a p_c , conforme podemos ver na figura (5.1).

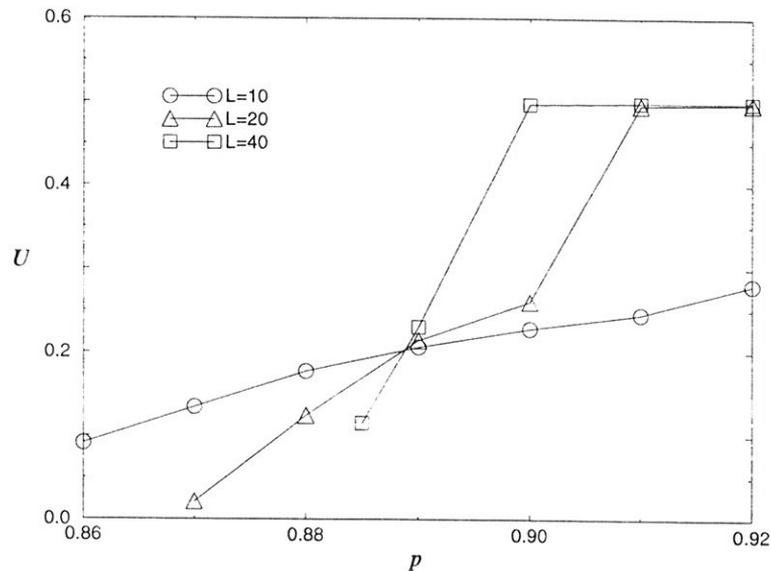


Figura 5.1: Cumulantes $U_L \times p$ para redes quadradas de lados $L = 10$, $L = 20$ e $L = 40$.

Estimamos, então ,

$$p_c = 0,888 \pm 0,002 . \quad (5.4)$$

Relembrando as formas de escala de $m_L(p)$ e $\chi_L(p)$ introduzidas nas equações (4.6) e (4.9), vemos que se traçarmos em gráficos log-log $m_L(p_c)$

e $\chi_L(p_c)$ como funções de L , podemos extrair as razões entre os expoentes críticos estáticos β/ν e γ/ν através dos coeficientes angulares das retas. Esses gráficos podem ser visualizados nas figuras (5.2) e (5.3) e fornecem as razões

$$\beta/\nu = 0.135 \pm 0.002, \quad (5.5)$$

$$\gamma/\nu = 1.74 \pm 0.03, \quad (5.6)$$

que estão em boa concordância com o modelo de Potts de três estados de equilíbrio.

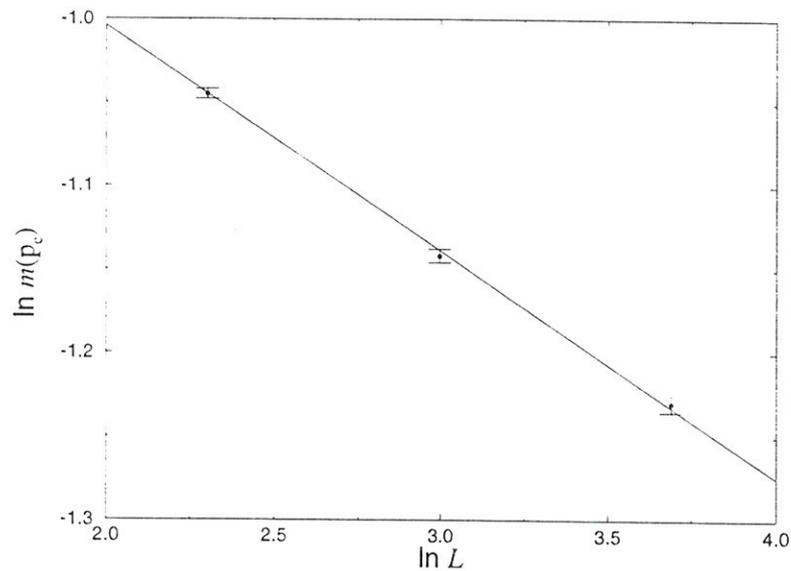


Figura 5.2: $\ln m_L(p_c) \times \ln L$ para redes quadradas de lados $L = 10$, $L = 20$ e $L = 40$.

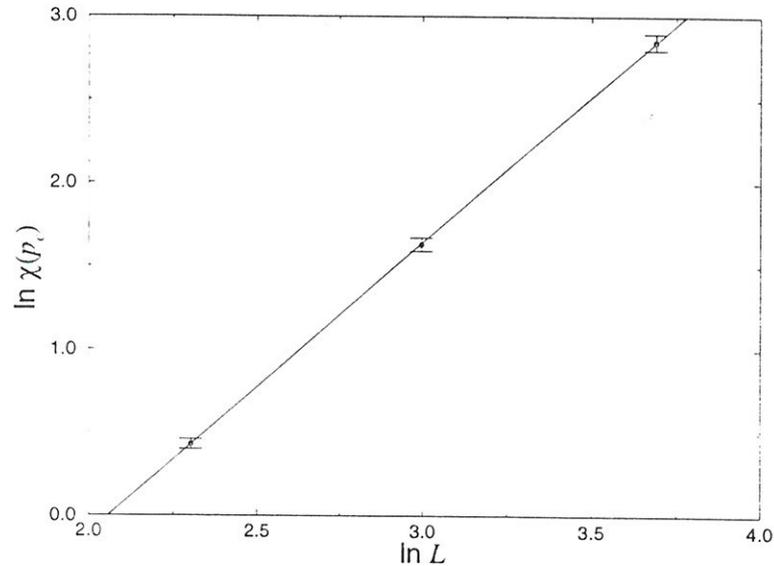


Figura 5.3: $\ln \chi_L(p_c) \times \ln L$ para redes quadradas de lados $L = 10$, $L = 20$ e $L = 40$.

5.2 Modelo de Quatro Estados

Para a análise numérica do modelo de quatro estados, utilizamos mais uma vez redes quadradas de lados $L = 10$, 20 e 40 com condições de contorno periódicas. Escolhemos configurações iniciais geradas aleatoriamente, uma vez que, contrariamente ao que ocorre no modelo anterior, o sistema passa de ordenado para desordenado conforme aumentamos o valor do parâmetro q . Em todos os modelos escolhemos configurações iniciais que evitassem a formação de domínios que levassem a um aumento considerável do tempo de relaxação. Baseamos essa escolha verificando se, no modelo em estudo, a transição dá-se de um estado desordenado para um estado ordenado ou se ocorre o comportamento oposto. Assim, evitamos configurações iniciais que correspondam a configurações finais esperadas conforme variamos os parâmetros externos e conseqüentemente diminuimos o tempo que o sistema leva para relaxar.

Lembramos que no modelo de quatro estados a distribuição de probabilidades para o número de contagens, N_0 , de sítios tipo 0, apresenta uma forma exata (3.33). Assim, se tomarmos, por exemplo, $p = 0, 1$ e uma rede 10×10

($N = 100$), observamos a presença de picos nas posições correspondentes a $Nq/(q + p)$ para diversos valores de q (figura (5.4)).

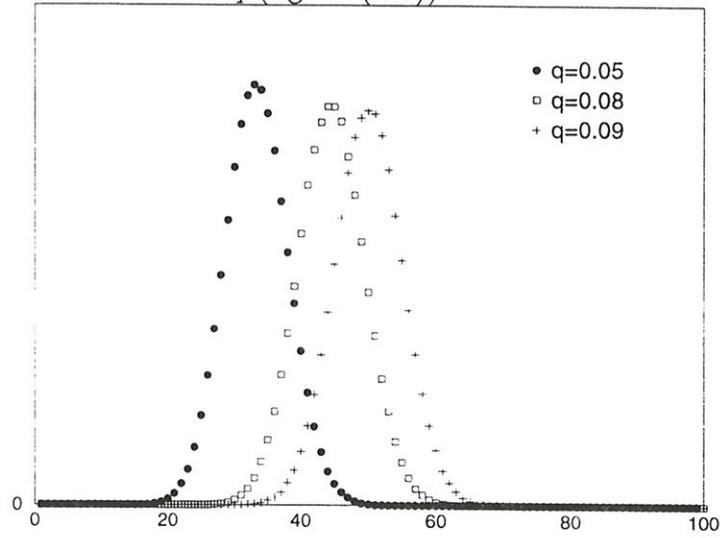


Figura 5.4: Distribuição de probabilidades de N_0 para rede de aresta $L = 10$.

Prosseguimos a simulação calculando as grandezas $U_L(q)$, $m_L(q)$ e $\chi_L(q)$ fixando o valor de p e variando q , também baseados nos invariantes do modelo que exibem a mesma forma definida em (5.2) e (5.3), mas com a definição

$$x_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\delta(\sigma_i, \alpha) + \frac{1}{3} \delta(\sigma_i, 0) - \frac{1}{3} \right), \quad (5.7)$$

para $\alpha = 1, 2$ ou 3 .

Através do método dos cumulantes obtemos um conjunto de pontos (p_c, q_c) que nos permite construir o diagrama de fases $p \times q$ (figura(5.5)). Notamos que agora o diagrama apresenta uma forma curva e consiste em uma linha transição contínua.

Para cada par (p_c, q_c) podemos encontrar as razões β/ν e γ/ν da mesma forma que foi empregada no modelo simétrico. Explicitaremos o cálculo para $p = 0,9$. Na figura (5.6) está o cumulante $U_L(q)$ como função de q , de

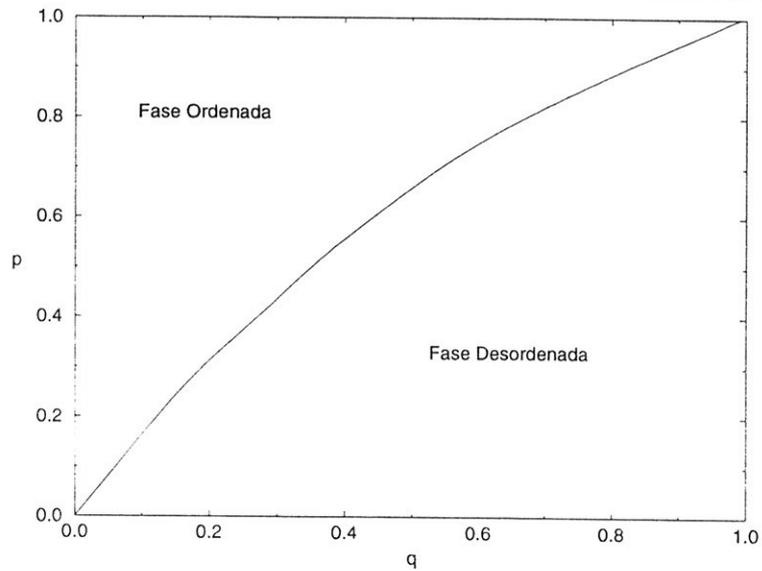


Figura 5.5: Diagrama de fase $p \times q$.

onde extraímos $q_c = 0,832 \pm 0,005$. Extraímos então $m_L(q_c)$ e $\chi_L(q_c)$ como funções de L , cujos gráficos em escala log-log podem ser vistos nas figuras (5.7) e (5.8).

Encontramos, conseqüentemente,

$$\beta/\nu = 0,131 \pm 0,003, \quad (5.8)$$

$$\gamma/\nu = 1,73 \pm 0,03, \quad (5.9)$$

que também estão em boa concordância com o modelo de Potts de três estados de equilíbrio.

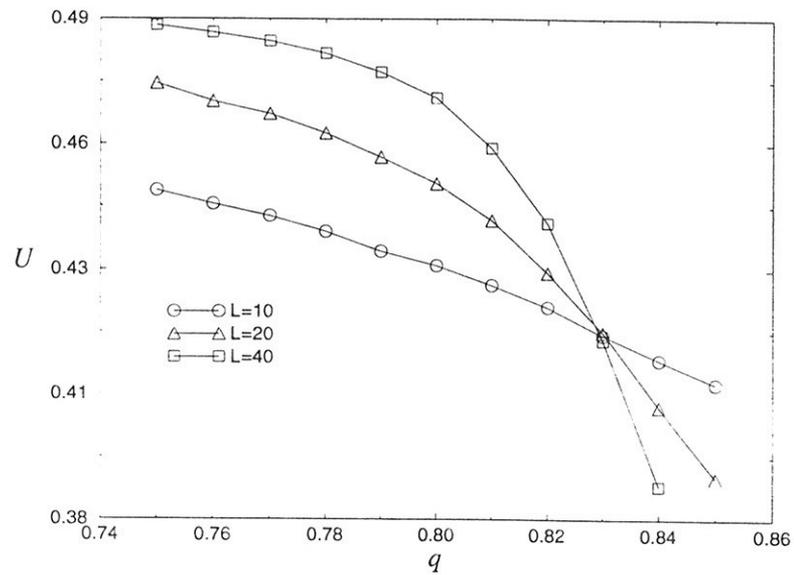


Figura 5.6: Cumulantes $U_L \times q$ para redes de lados $L = 10, 20$ e 40 e $p = 0,9$.

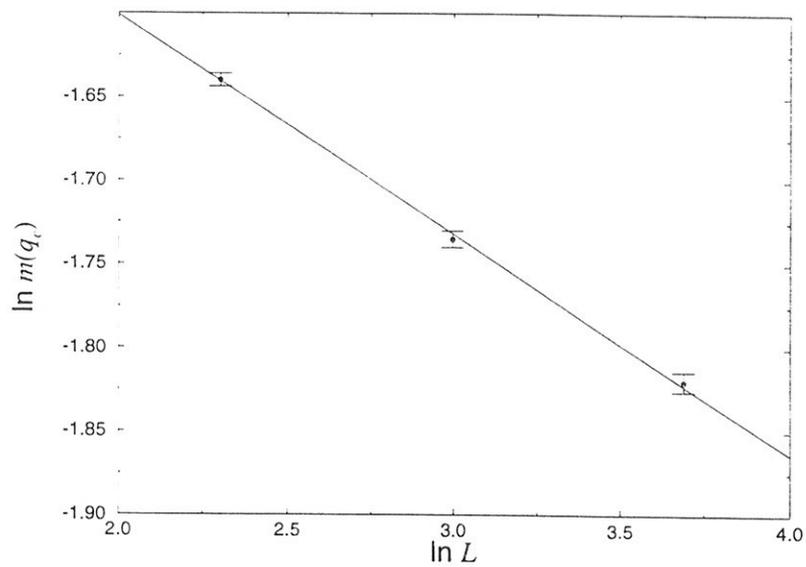


Figura 5.7: $\ln m_L(q_c) \times \ln L$ para redes quadradas de lados $L = 10, L = 20$ e $L = 40$

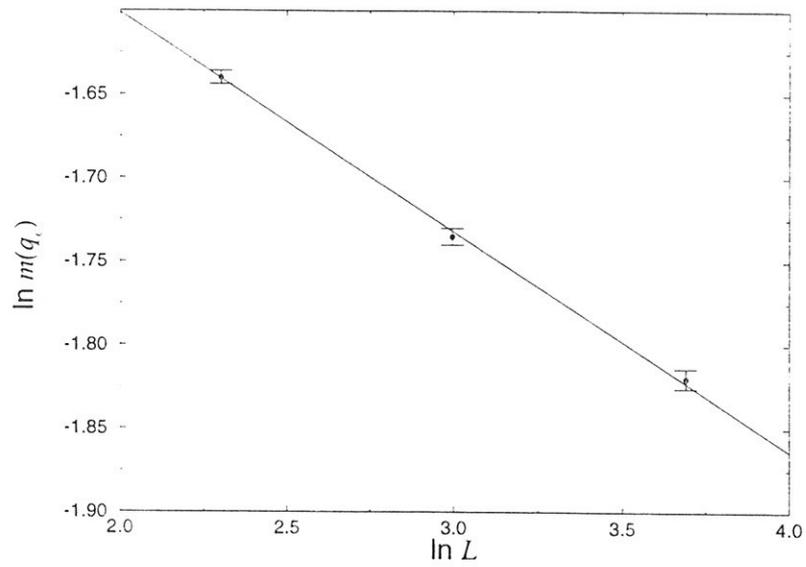


Figura 5.8: $\ln \chi_L(q_c) \times \ln L$ para redes quadradas de lados $L = 10$, $L = 20$ e $L = 40$

Capítulo 6

Análise de Tempos Curtos

6.1 Introdução

Recordemos que para um sistema estatístico em equilíbrio, o comprimento de correlação na criticalidade é divergente e portanto detalhes microscópicos do sistema não são importantes. Consequentemente, o sistema exhibe um comportamento universal com uma forma de escala caracterizada por expoentes críticos estáticos. Modelos numa mesma classe de universalidade possuem os mesmos valores de expoentes críticos. O estudo desses sistemas envolve a determinação dos expoentes críticos bem como das funções de escala para os observáveis físicos, seja de forma analítica ou numérica [12, 33].

Para um sistema crítico dinâmico no regime de tempos longos, também é conhecido que existe uma forma de escala dinâmica universal. Isso ocorre basicamente devido ao fato do comprimento de correlação temporal ser divergente e o comprimento de correlação espacial ainda ser bastante grande no regime de tempos longos. A forma de escala dinâmica para um observável \mathcal{O} [36] é

$$\mathcal{O}(t, \tau, L) = b^{-x} \mathcal{O}(b^{-z}t, b^{\frac{1}{\nu}}\tau, b^{-1}L) , \quad (6.1)$$

onde t é a variável dinâmica de tempo, $\tau = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida, L o tamanho linear do sistema, b um fator de escala, x e ν são expoentes estáticos e z o expoente dinâmico. Notemos que a forma de escala dinâmica independe das condições iniciais do sistema, ou seja, o sistema perde a memória referente a seu estado inicial.

Restringiremo-nos nesse trabalho a sistemas dinâmicos representados por

algoritmos de Monte Carlo.

Consideremos a auto correlação para um sistema finito na temperatura crítica definida como

$$A(t, t') = \frac{1}{L^d} \left\langle \sum_i \sigma_i(t') \sigma_i(t + t') \right\rangle, \quad (6.2)$$

onde σ_i é uma variável de spin. Para tempos suficientemente longos, $A(t, t')$ decai exponencialmente sob a forma

$$A(t, t') \sim e^{-t/\xi_t}. \quad (6.3)$$

Esse decaimento não depende de t' . Utilizando relação de escala dinâmica (6.1), vemos que o comprimento de correlação temporal ξ_t escala com

$$\xi_t \approx L^z. \quad (6.4)$$

Nesse cenário, a relaxação temporal da magnetização é caracterizada pela forma

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (6.5)$$

Para a maioria dos algoritmos de Monte Carlo, $z \approx 2$, o que mostra que o comprimento de correlação cresce rapidamente com o tamanho da rede L . Conseqüentemente, em simulações de Monte Carlo a geração de uma nova configuração independente é bastante difícil. Esse efeito é conhecido como desaceleração crítica [18].

A desaceleração crítica afeta não apenas medidas no equilíbrio, mas também medidas de observáveis dinâmicos. Em particular, o valor do expoente z é extremamente difícil de ser determinado.

No trabalho realizado por Janssen *et al* [37], foi demonstrado que existe um outro regime com comportamento universal, onde a existência de uma magnetização inicial $m_0 > 0$ introduz uma nova escala de tempo t_0 que se comporta como

$$t_0 \sim [m_0]^{-z/x_0}, \quad (6.6)$$

para grandes escalas, onde x_0 , a dimensão de escala de m_0 , é um novo expoente crítico. Dessa maneira, para uma magnetização inicial pequena e uma temperatura reduzida nula, temos $t_{mic} \ll t_0 \ll t_\tau$, onde t_τ é o tempo de

relaxação do sistema infinito. Conseqüentemente, existe um regime temporal caracterizado pelo intervalo $t_{mic} \ll t < t_0$ que dita uma dependência universal da magnetização nas condições iniciais. Esse estágio universal é caracterizado por um crescimento da magnetização sob a forma

$$M(t) \sim m_0 t^\theta, \quad (6.7)$$

onde $\theta > 0$. Esse fenômeno pode ser compreendido através de uma análise da dependência da magnetização nas condições iniciais e do seu comportamento sob transformações do grupo de renormalização. A razão fundamental baseia-se no argumento de que m_0 tem uma dimensão de escala independente conhecida como dimensão anômala, x_0 , que difere bastante da dimensão de escala do parâmetro de ordem em equilíbrio térmico (com a qual a magnetização escala em tempos longos) dada por β/ν . Nesse ponto, podemos fazer uma analogia entre o fenômeno que ocorre no regime de tempos curtos com fenômenos críticos em superfícies [38]. A singularidade de tempos curtos ($M(t) \sim t^\theta$) é análoga à singularidade de curtas distâncias do parâmetro de ordem próximo à superfície de um sistema semi-infinito, onde as densidades de magnetização na superfície e longe dela têm dimensões de escala diferentes.

Para uma melhor compreensão do comportamento universal da dinâmica de tempos curtos, devemos ressaltar a distinção entre duas escalas de tempo diferentes a serem consideradas, a escala de tempo macroscópica e a escala de tempo microscópica. Somente após um tempo t_{mic} suficientemente longo em termos microscópicos aparece o comportamento universal. Em [39, 40] as simulações numéricas mostram que t_{mic} é realmente pequeno quando comparado com a escala macroscópica. Se isso não ocorresse de fato não haveria sentido algum falarmos em dinâmica e universalidade de tempos curtos.

O comportamento universal para tempos curtos foi verificado em modelos de Ising cinéticos [39, 41, 42, 43, 44, 45] e modelos de Potts cinéticos [39, 46, 47].

Na figura (6.1) [37] mostramos o que seria o comportamento qualitativo genérico da evolução temporal da magnetização, partindo de um estado com uma magnetização inicial não nula e $T = T_c$.

Vemos que nos primeiros passos da evolução, para $t > t_{mic}$, a magnetização sofre um crescimento $M(t) \sim t^\theta$ seguido de um “crossover” para $t^{-\beta/\nu z}$ válido em tempos longos.

Uma questão a ser formulada é o porquê do crescimento inicial da mag-

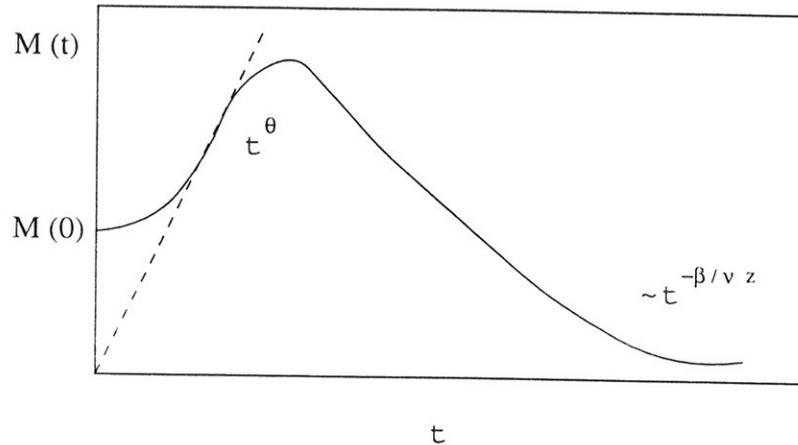


Figura 6.1: Comportamento qualitativo da evolução temporal da magnetização partindo de um valor não nulo na criticalidade.

netização. Segundo [48], o crescimento acontece devido ao pequeno comprimento de correlação espacial. Para tempos $t > t_{mic}$ existe no sistema uma competição entre o crescimento de domínios e a flutuação. O tamanho de domínio médio representa o comprimento de correlação inicial. No estágio inicial da evolução temporal, o tamanho do domínio é pequeno e irá crescer, enquanto que o efeito da flutuação é pequeno. Uma magnetização inicial nula não altera essa situação, mas uma magnetização inicial não nula faz com que existam mais sementes para domínios de determinado tipo de spin. Como resultado, esses domínios crescem mais rapidamente originando então o crescimento inicial da magnetização. Depois de algum tempo, esses domínios saturam e as flutuações tornam-se mais fortes. Assim, a magnetização atinge seu máximo e começa a decrescer.

6.2 Formalismo

Em [49] encontramos uma abordagem da universalidade de tempos curtos para sistemas finitos, onde o k -ésimo momento do parâmetro de ordem de um sistema finito, na criticalidade, tem a forma de escala

$$M_k(t, \tau, L, m_0) = b^{-\frac{k\beta}{\nu}} M_k(b^{-z}t, b^{-\frac{1}{\nu}}\tau, bL, b^{x_0}m_0), \quad (6.8)$$

onde $\tau = (T - T_c)/T_c$, b é o fator de escala espacial, x_0 é a dimensão anômala da magnetização inicial m_0 e z é o expoente dinâmico. Tomando $\tau = 0$ e $b = t^{1/z}$, temos, para a magnetização,

$$M(t, L, m_0) \sim t^{-\frac{\beta}{\nu z}} \mathcal{M}\left(\frac{t}{t_L}, \frac{t}{t_0}\right) \quad (6.9)$$

onde $t_L \sim L^z$ é o tempo de relaxação do sistema finito, $t_0 \sim m_0^{-z/x_0}$ e $\mathcal{M}(x, y)$ é uma função universal. Ainda na referência [49] é demonstrado que o crescimento inicial do parâmetro de ordem descrito em (6.7) é válido para sistemas finitos desde que t, t_0, t_L e m_0 sejam pequenos. A relação entre θ e x_0 é dada por

$$\theta = \frac{\left(x_0 - \frac{\beta}{\nu}\right)}{z}. \quad (6.10)$$

Análises de escala [50] mostram ainda que a auto correlação $A(t)$ (6.2) para um sistema finito, na temperatura crítica, decai segundo a lei de potência

$$A(t) \sim t^{-\frac{d}{z} + \theta}. \quad (6.11)$$

Vemos, então, que o expoente dinâmico θ também entra na auto correlação.

Como o comprimento de correlação espacial no início da evolução temporal é pequeno, para o sistema finito, $M_2(t, L) \sim L^{-d}$. Das relações de escala finita deduzimos o crescimento sob a forma de lei de potência

$$M_2(t) \sim t^{\frac{(d-2\frac{\beta}{\nu})}{z}}. \quad (6.12)$$

Utilizando relações de escala para os momentos da magnetização apropriados, vemos que o cumulante de Binder dependente do tempo [33]

$$U(t, \tau, L) \equiv 1 - \frac{\langle M_4 \rangle}{3 \langle M_2 \rangle^2}, \quad (6.13)$$

medido em dois tamanhos de rede diferentes L e L' , obedece a relação

$$U(t, 0, L') = U(b^{-z}t, 0, L), \quad (6.14)$$

lembrando que $b = L'/L$. Se rescalarmos o tempo por um fator b^{-z} , as curvas referentes aos cumulantes de diferentes tamanhos de rede devem colapsar. Assim, uma outra maneira de determinarmos o expoente z é através do colapso das curvas dos cumulantes.

Os trabalhos referentes à dinâmica de tempos curtos citados até o momento caracterizam-se por modelos que evoluem para estados estacionários que obedecem a condição de balanceamento detalhado. No entanto, em [51], a dinâmica de tempos curtos foi aplicada a modelos cujos estados estacionários não apresentam balanceamento detalhado contendo as mesmas simetrias do modelo de Ising cinético. Os expoentes dinâmicos encontrados estão em ótima concordância com aqueles referentes à classe de universalidade do modelo de Ising cinético. Assim, a conjectura proposta por Grinstein *et al* [4] pôde ser estendida para o caso da universalidade de tempos curtos. Tendo como objetivo a generalização desse resultado para modelos microscopicamente irreversíveis com outras simetrias, aplicamos a dinâmica de tempos curtos ao *modelo simétrico* e ao *modelo de quatro estados* como veremos nas seções a seguir.

6.3 Aplicação - Modelo simétrico

Em [39], o expoente dinâmico θ foi medido pelo crescimento, em forma de lei de potência, da magnetização, onde o estado inicial era preparado com uma magnetização bastante pequena mas não nula m_0 . Dessa forma, os valores de θ eram encontrados para diferentes valores de m_0 e extrapolados para $m_0 = 0$. Para evitarmos essa preparação do estado inicial, empregamos aqui uma metodologia diferente, apresentada em [52] e estudamos a evolução temporal (uma unidade de tempo corresponde a um passo de Monte Carlo) da seguinte função de correlação temporal

$$Q(t) = \langle x_1(t)x_1(0) \rangle, \quad (6.15)$$

onde

$$x_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\delta(\sigma_i, 1) - \frac{1}{3} \right), \quad (6.16)$$

como já utilizado em (5.1).

A função $Q(t)$ também obedece o crescimento em forma de lei de potência

$$Q(t) \sim t^\theta, \quad (6.17)$$

onde o estado inicial é uma configuração gerada aleatoriamente com comprimento de correlação nulo e o valor médio de m_0 , calculado sobre diferentes configurações, é igual a zero.

Assim, no presente trabalho, o cálculo de θ é realizado a partir do estudo da evolução temporal da grandeza $Q(t)$.

Para a determinação do expoente θ , utilizamos 160000 configurações iniciais independentes para redes de lado $L = 9$ e 320000 configurações para redes de lados $L = 18, 36$ e 72 , procedendo então à análise temporal da quantidade $Q(t)$ definida em (6.15). O algoritmo computacional foi implementado da seguinte maneira:

- Para cada tamanho de rede fixamos o valor de p no valor crítico, $p_c = 0,888$, e geramos uma configuração inicial aleatória, sorteando para cada sítio os estados 1, 2 e 3 com igual probabilidade (1/3).
- Calculamos e guardamos o valor de $x_1(0)$ e, para cada passo de Monte Carlo (correspondente a atualização dos sítios da rede), calculamos $x_1(0)x_1(t)$.
- Calculamos a grandeza $Q(t)$ tomando a média, sobre o total de configurações geradas, de $x_1(0)x_1(t)$ para cada passo de Monte Carlo. Utilizamos no total 500 passos de Monte Carlo.

A figura (6.2) mostra o gráfico de $Q(t)/Q(0) \times t$ em uma escala log-log para $L = 9, 18, 36$ e 72 . Notamos que o comportamento de lei de potência da magnetização pode ser visto desde o início da evolução mesmo para as redes menores. Concluímos que, para a medida de θ , efeitos de tamanho finito não são importantes. Para determinarmos o valor de θ , demarcamos uma região no gráfico $20 < t < 55$ e calculamos os coeficientes das retas pertencentes à região. O valor de θ é estimado então pela média entre os valores de $\theta(L)$ e é dado por

$$\theta = 0,093 \pm 0,004. \quad (6.18)$$

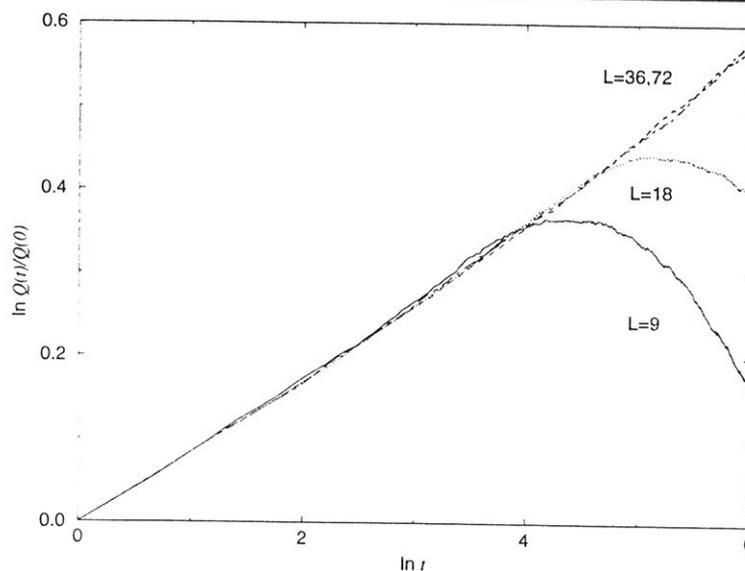


Figura 6.2: $Q(t)/Q(0) \times t$ em escala log-log para o modelo simétrico.

Utilizando o invariante de segunda ordem definido em (5.2), o segundo momento do parâmetro de ordem, M_2 , é definido como

$$M_2 = \frac{9}{4} \langle I_2 \rangle . \quad (6.19)$$

O cálculo de M_2 é implementado no algoritmo descrito acima através da média de $I_2 = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$ tomada, a cada passo de Monte Carlo, sobre todas as configurações .

Conforme vimos na seção anterior, esperamos, no ponto crítico, $M_2(t) \sim t^\zeta$, para

$$\zeta = \frac{1}{z} \left(d - \frac{2\beta}{\nu} \right) . \quad (6.20)$$

e podemos ver na figura (6.3) $M_2(t)/M_2(0) \times t$ em escala log-log para $L = 9, 18, 36$ e 72 .

Vemos que nesse caso existe um comportamento não universal nos primeiros passos da evolução , mas se descartarmos esses pontos e considerarmos o intervalo $10 < t < 55$, vemos que $M_2(t)$ apresenta um comportamento de lei de potência, sendo que a média entre os coeficientes angulares das linhas retas

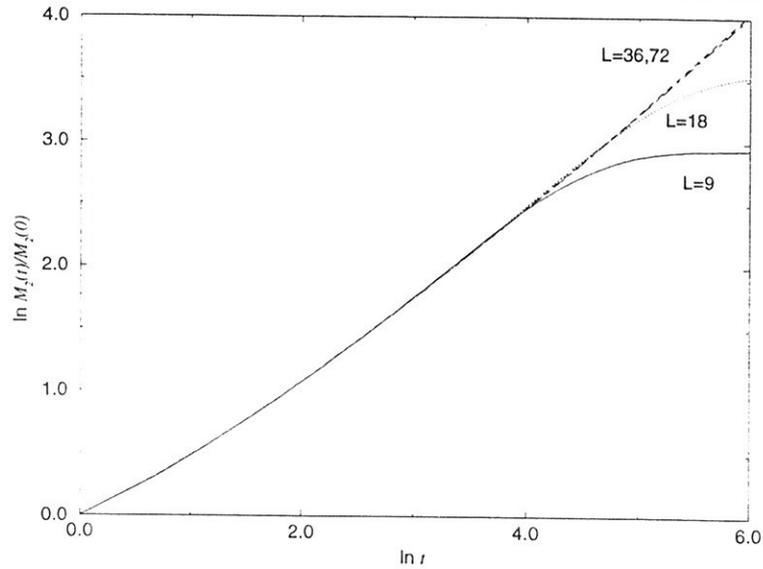


Figura 6.3: $M_2(t)/M_2(0) \times t$ em escala log-log para o modelo simétrico.

ajustadas para cada tamanho de rede fornece o expoente $\zeta = 0,76 \pm 0,01$. Utilizando o valor de β/ν obtido em (5.5), o expoente z pode ser obtido através da relação $z = (d - 2\beta/\nu)/\zeta$ e vale

$$z = 2,28 \pm 0,04. \quad (6.21)$$

6.4 Aplicação - Modelo de Quatro Estados

O procedimento adotado na análise de tempos curtos para o modelo de quatro estados é análogo ao empregado no modelo simétrico, sendo a grandeza $Q(t)$ dada por

$$Q(t) = \langle x_1(t)x_1(0) \rangle, \quad (6.22)$$

onde $x_1(t)$ é agora definido, conforme a equação (5.7), como

$$x_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\delta(\sigma_i, 1) + \frac{1}{3} \delta(\sigma_i, 0) - \frac{1}{3} \right). \quad (6.23)$$

Novamente utilizamos 320000 configurações iniciais independentes para $L = 18, 36, 72$ e 160000 para $L = 9$.

O mesmo procedimento descrito para o modelo simétrico foi usado para a realização da simulação e avaliação das grandezas $Q(t)$ e $M_2(t)$. Nesse caso, os parâmetros p e q foram fixos nos seus valores críticos 0,9 e 0,832 respectivamente.

Na figura (6.4) vemos o gráfico de $Q(t)/Q(0) \times t$ em escala log-log para redes quadradas de lados $L = 9, 18, 36$ e 72.

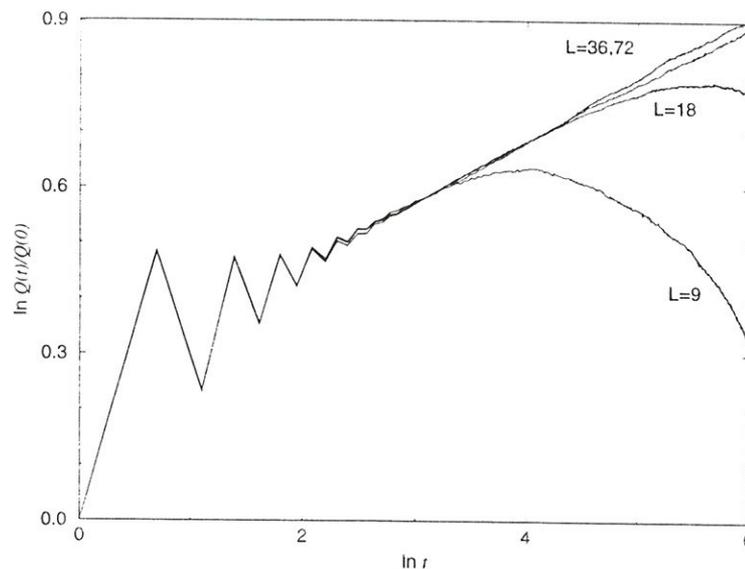


Figura 6.4: $Q(t)/Q(0) \times t$ em escala log-log para o modelo de quatro estados.

Notamos que para todos os tamanhos de rede existe uma flutuação inicial em $Q(t)$ e que, logo após essa flutuação, podemos verificar o comportamento de lei de potência. Selecionamos nesse caso a região $15 < t < 30$ onde são calculados os coeficientes angulares das retas $\theta(L)$ cuja média fornece

$$\theta = 0,108 \pm 0,001 . \quad (6.24)$$

A evolução temporal de $M_2(t)/M_2(0)$ pode ser vista na figura (6.5) em escala log-log para os quatro tamanhos de rede.

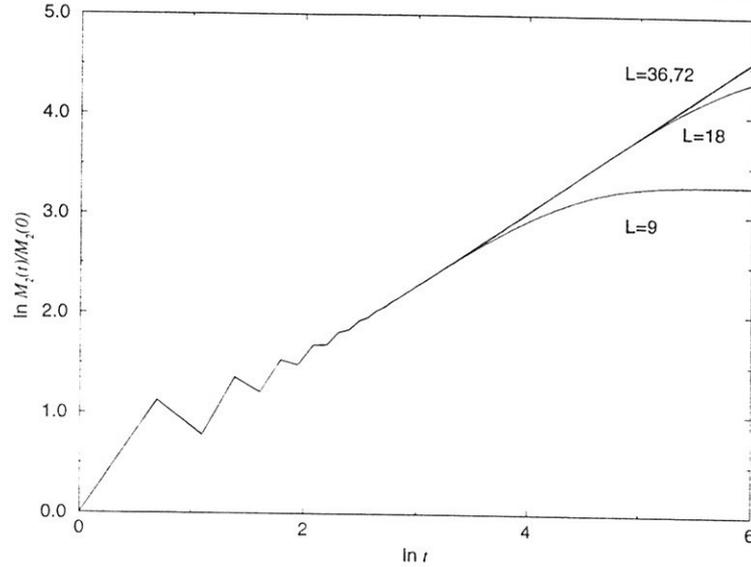


Figura 6.5: $M_2(t)/M_2(0) \times t$ em escala log-log para o modelo de quatro estados.

Novamente notamos a existência de uma flutuação inicial seguida pelo comportamento de lei de potência. Na região $15 < t < 25$ encontramos o coeficiente angular $\zeta = 0,73 \pm 0,01$ dado como a média dos valores $\zeta(L)$. Consequentemente, utilizando o valor de β/ν dado em (5.8) obtemos

$$z = 2,38 \pm 0,03. \quad (6.25)$$

Em [39] os valores encontrados para o expoente θ do modelo de Potts de equilíbrio foram determinados através de duas metodologias diferentes. A primeira delas emprega o algoritmo de banho térmico e fornece $\theta = 0,075 \pm 0,003$. A segunda utiliza o algoritmo de Metrópolis e, por sua vez, fornece $\theta = 0,070 \pm 0,002$. Esses resultados foram obtidos para uma rede de lado $L = 72$, sendo que o valor de θ foi calculado para diferentes valores de magnetização inicial e extrapolado para $m_0 = 0$. Vemos que nossos resultados diferem um pouco dos encontrados em [39], uma vez que em nosso trabalho, os valores dos parâmetros críticos externos (p_c no modelo simétrico e p_c e q_c no modelo de quatro estados) são determinados numericamente, diferentemente do modelo de equilíbrio onde a temperatura crítica é conhecida exatamente. Dessa forma, temos uma fonte de erro maior que dificulta a obtenção de

resultados melhores e mais precisos.

Os valores encontrados para z (equações (6.21) e (6.25)) nesse trabalho corroboram com aqueles existentes na literatura, obtidos através de diferentes análises numéricas [47, 53, 54, 55] e distribuídos entre 2,17 e 2,7.

Capítulo 7

Conjectura

Os resultados obtidos até agora mostram que modelos irreversíveis definidos por dinâmicas que possuam as simetrias do grupo C_{3v} estão na mesma classe de universalidade do modelo de Potts de três estados. Tal indicação é originada pela boa concordância entre expoentes críticos obtidos para os modelos propostos e aqueles do modelo de equilíbrio. Neste capítulo fazemos uma análise do modelo simétrico baseada em abordagem semelhante a usada na teoria de Landau. A partir dessa análise apresentamos argumentos a favor dos resultados obtidos por simulação numérica.

7.1 Equações de movimento

No capítulo 1 introduzimos as variáveis (x, y) como ferramentas básicas na construção dos invariantes. Dessa forma, podemos escrever as equações de campo médio do modelo simétrico com relação a essas variáveis. Utilizando as equações (2.16)-(2.18) escrevemos a evolução temporal das variáveis x e y como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho_1}{\partial t} \right), \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\partial \rho_1}{\partial t} - \frac{\partial \rho_2}{\partial t}. \quad (7.2)$$

Chegamos, então, a

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= -x + 2\left(p - \frac{1}{3}\right)x - (3p - 1)xy - \frac{3}{2}(3p - 1)xy^2 \\ &\quad - \frac{3}{2}(3p - 1)x^3 - \frac{9}{4}(3p - 1)x^3y + \frac{9}{4}(3p - 1)xy^3 \end{aligned} \quad (7.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial t} &= -y + 2\left(p - \frac{1}{3}\right)y - \frac{1}{2}(3p - 1)x^2 + \frac{1}{2}(3p - 1)y^2 \\ &\quad - \frac{3}{2}(3p - 1)x^2y - \frac{3}{2}(3p - 1)y^3 - \frac{27}{8}(3p - 1)x^2y^2 \\ &\quad + \frac{9}{16}(3p - 1)x^4 + \frac{9}{16}(3p - 1)y^4 . \end{aligned} \quad (7.4)$$

Quando escrevemos as equações em termos de (x, y) estabelecemos uma consistência nas equações de campo médio e na verificação da condição de balanceamento detalhado.

As variáveis x e y obedecem equações do tipo

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= f(x, y) , \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= g(x, y) . \end{aligned}$$

Se aplicarmos as simetrias representadas pelo grupo C_{3v} às variáveis (x, y) obtemos variáveis transformadas (x', y') que por sua vez devem obedecer as formas análogas

$$\begin{aligned} \frac{\partial x'}{\partial t} &= f(x', y') , \\ \frac{\partial y'}{\partial t} &= g(x', y') . \end{aligned}$$

O desenvolvimento desse tópico será feito na próxima seção .

7.2 Expansão no parâmetro de ordem

Desenvolveremos nesta seção uma abordagem semelhante à utilizada na Teoria de Landau, na qual identifica-se o parâmetro de ordem da transição e

expande-se a energia livre apropriada em uma série de Taylor neste parâmetro. No nosso caso, a expansão será realizada nas equações de movimento para as variáveis x e y , uma vez que não temos um análogo à energia livre.

A seguir escrevemos, para cada ordem da expansão, a forma mais geral possível para as equações de movimento de x e y . Aplicamos então as simetrias do grupo C_{3v} obtendo as equações para x' e y' . Uma vez que devemos obter formas consistentes para as equações em (x, y) e (x', y') , é trivial a obtenção da forma final de cada termo da expansão.

Iniciamos com o termo de primeira ordem, onde a forma mais geral para as equações de movimento de x e y é

$$\frac{\partial x}{\partial t} = ax + by, \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = cx + dy, \quad (7.6)$$

onde a , b , c e d são constantes. Após a aplicação das simetrias representadas pelas matrizes \hat{C}_3 e $\hat{\sigma}'_1$ (definidas no capítulo 1), chegamos à forma

$$\frac{\partial x}{\partial t} = ax, \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = ay, \quad (7.8)$$

onde constatamos que a condição de balanceamento detalhado

$$\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial y}{\partial t} \quad (7.9)$$

pode ser verificada para qualquer valor de a . Sem perda de generalidade tomamos $a = -1$ e vemos que as formas de $\partial x/\partial t$ e $\partial y/\partial t$ são geradas a partir do invariante de segunda ordem $I_2(x, y)$ (equação (2.19)) através das relações

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\partial I_2}{\partial x}, \quad (7.10)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\partial I_2}{\partial y}. \quad (7.11)$$

Utilizando o mesmo raciocínio exposto acima, encontramos para os termos de segunda ordem na expansão as equações

$$\frac{\partial x}{\partial t} = axy, \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{a}{2}x^2 - \frac{a}{2}y^2, \quad (7.13)$$

onde novamente a condição de balanceamento detalhado é verificada. Se tomarmos agora $a = 1$, vemos que as formas de $\partial x/\partial t$ e $\partial y/\partial t$ são geradas pelo invariante de terceira ordem (2.20).

Para os termos de terceira ordem na expansão encontramos

$$\frac{\partial x}{\partial t} = ax^3 + axy^2, \quad (7.14)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = ax^2y + ay^3. \quad (7.15)$$

Mais uma vez temos balanceamento detalhado e as equações de movimento, para $a = -1$ geradas pelo invariante de quarta ordem (2.21).

Para os termos de quarta ordem na expansão faremos uma análise mais detalhada. Os termos gerais da expansão, aplicando a simetria σ'_1 , podem ser escritos como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = ax^3y + bxy^3, \quad (7.16)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = cx^4 + dy^4 + ex^2y^2, \quad (7.17)$$

onde a , b , c , d e e são constantes quaisquer. Aplicando agora a simetria representada por C_3 , chegamos às condições sobre os coeficientes dadas pelo conjunto de equações

$$\begin{aligned} -a - 3b - c - 9d - 3e &= 0, \\ -3a + 3b - 9c - 9d + e &= 0, \\ 3a + b - 9c - d - 3e &= 0, \\ 2a - c + 3d - e &= 0, \\ 2b - 3c + d + e &= 0, \end{aligned}$$

cujas soluções possíveis são dadas pelas relações

$$a = -2d + \frac{e}{3}, \quad b = -2d - 2, \quad c = -d - \frac{e}{3}.$$

A solução geral compatível com as duas simetrias é

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \left(-2d + \frac{e}{3}\right) x^3 y + (-2d - e) x y^3, \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \left(-d - \frac{e}{3}\right) x^4 + d y^4 + e x^2 y^2. \quad (7.19)$$

Temos, para as equações acima, duas soluções independentes. A primeira é dada pela condição $e = 0$ e exibe a forma

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -2d x^3 y - 2d x y^3, \quad (7.20)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -d x^4 + d y^4, \quad (7.21)$$

e a segunda, dada pela condição $c = 0$, é escrita como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = e x^3 y - \frac{e}{3} x y^3, \quad (7.22)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{e}{3} y^4 + e x^2 y^2. \quad (7.23)$$

Cada solução independente é irreversível, ou seja, não obedece a condição de balanceamento detalhado. Podemos ver explicitamente que, para a primeira solução

$$\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial x}{\partial t} = -2d x^3 - 6d x y^2, \quad (7.24)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial y}{\partial t} = -4d x^3, \quad (7.25)$$

e, para a segunda,

$$\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial x}{\partial t} = ex^3 - exy^2, \quad (7.26)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial y}{\partial t} = 2exy^2. \quad (7.27)$$

Podemos, no entanto, construir uma combinação linear das duas soluções multiplicando a primeira por uma constante α e somando com a segunda multiplicada por uma constante β . Impondo a condição de reversibilidade a essa solução combinada, encontramos $\alpha = -\beta/2$, o que nos permite escrever a forma geral reversível dos termos de quarta ordem como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = 2\beta x^3 y + \frac{2\beta}{3} xy^3, \quad (7.28)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\beta}{2} x^4 - \frac{5\beta}{6} y^4 + \beta x^2 y^2. \quad (7.29)$$

Podemos tomar $\beta = -1$. Assim, os termos de quarta ordem reversíveis são gerados pelo invariante de quinta ordem (2.22). A solução irreversível não tem um invariante associado, em analogia à mecânica clássica onde termos de força dissipativos não têm um potencial associado.

7.3 Expansão de Landau do modelo de Potts de três estados

Reproduzimos nesta seção a expansão de Landau para o modelo de Potts de três estados, obtida em [56].

Definindo n_i ($i = 1, 2, 3$) como a fração de sítios da rede no estado i , a energia livre $A(n_1, n_2, n_3, T)$ é expandida ao redor do eixo de simetria $n_1 = n_2 = n_3 = 1/3$. Os desvios

$$m_i = n_i - \frac{1}{3}, \quad (7.30)$$

que obedecem o vínculo

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0 \quad (7.31)$$

são introduzidos. Sendo a energia livre A simétrica com relação às permutações $m_j \leftrightarrow m_k$, sua expansão, até quarta ordem, deve ter a forma

$$A = A_0(T) + r \sum m_i^2 + v m_1 m_2 m_3 + u \left(\sum m_i^2 \right)^2. \quad (7.32)$$

Quaisquer outros termos cúbicos são proporcionais a $m_1 m_2 m_3$ devido ao vínculo (7.31). Os coeficientes r , v e u são funções analíticas da temperatura T .

Para a análise de (7.32), é conveniente a introdução das variáveis

$$M = \frac{1}{2} \sqrt{3} m_1, \quad Q = \frac{1}{2} (m_2 - m_3), \quad v' = 2 \cdot 3^{-3/2} v. \quad (7.33)$$

Com essas novas definições, a energia livre passa a ser escrita como

$$A = A_0 + r (M^2 + Q^2) - v' M (M^2 - 3Q^2) + u (M^2 + Q^2)^2, \quad (7.34)$$

onde M e Q são variáveis ortogonais independentes.

A partir da expressão (7.34), encontramos as seguintes equações

$$\frac{\partial A}{\partial M} = 2rM + 3v'M^2 - 3v'Q^2 - 4uM^3 - 4uMQ^2, \quad (7.35)$$

e

$$\frac{\partial A}{\partial Q} = -2rQ + 6v'MQ - 4uM^2Q - 4uQ^3. \quad (7.36)$$

Se reescrevermos as equações obtidas em nossa expansão, até terceira ordem, através das formas gerais

$$\frac{\partial x}{\partial t} = a_1 x + a_2 xy + a_3 xy^2 + a_3 x^3, \quad (7.37)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = a_1 y + \frac{a_2}{2} x^2 - \frac{a_2}{2} y^2 + a_3 x^2 y + a_3 y^3, \quad (7.38)$$

notamos uma analogia entre as equações (7.35) e (7.38) e as equações (7.36) e (7.37)

. Vemos que, de fato, até terceira ordem nosso modelo reproduz o modelo de Potts de equilíbrio e concluimos que as características irreversíveis de

modelos com simetria C_{3v} que não obedecem a condição de balanceamento detalhado só se manifestarão a partir dos termos de quarta ordem.

Como a criticalidade se obtém com base nos primeiros termos da expansão, concluímos que os dois modelos devem ter o mesmo comportamento crítico.

Capítulo 8

Formalismo de Operadores

Uma das principais dificuldades relativas ao estudo de estados estacionários de não equilíbrio reside no desconhecimento da distribuição estacionária de probabilidades. Dentre os métodos para o estudo de sistemas de não equilíbrio destaca-se o formalismo de operadores [57, 58, 59, 60], onde uma vez encontrada a expressão para a equação mestra em termos de um operador de evolução, podemos obter, por exemplo, séries perturbativas para grandezas que descrevem os estados estacionários do sistema em estudo. Apresentamos em seguida a base do formalismo.

Consideremos uma rede com N sítios aos quais estão associadas variáveis dinâmicas η_i . Por simplicidade assumimos $\eta_i = 0, 1$. Definimos o estado do sistema no instante de tempo t como

$$|\Psi(t)\rangle \equiv \sum_{\eta} P(\eta, t) |\eta\rangle, \quad (8.1)$$

onde $P(\eta, t)$ é a distribuição temporal de probabilidades para as respectivas configurações microscópicas $|\eta\rangle$. Observemos que $|\eta\rangle$ está associada a um vetor no espaço de configurações,

$$|\eta\rangle = |\eta_1 \eta_2 \dots \eta_i \dots \eta_N\rangle. \quad (8.2)$$

Nesse mesmo espaço, definimos os operadores A e A^\dagger , que, aplicados ao i -ésimo sítio, fornecem

$$\begin{aligned} A_i |\eta\rangle &= \eta_i |\eta_1 \eta_2 \dots 1 - \eta_i \dots \eta_N\rangle, \\ A_i^\dagger |\eta\rangle &= (1 - \eta_i) |\eta_1 \eta_2 \dots 1 - \eta_i \dots \eta_N\rangle. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Chamamos de operador número o operador $\mathcal{N}_i = A_i^\dagger A_i$, uma vez que

$$\mathcal{N}_i |\eta\rangle = \eta_i |\eta\rangle, \quad (8.4)$$

e definimos ainda o operador “spin-flip” $\mathcal{F}_i = A_i^\dagger + A_i$, de forma que

$$\mathcal{F}_i |\eta\rangle = |\eta_1 \eta_2 \dots 1 - \eta_i \dots \eta_N\rangle. \quad (8.5)$$

Notemos que

$$A_i^\dagger A_i + A_i A_i^\dagger = 1. \quad (8.6)$$

A equação mestra pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} P(\eta, t) = \sum_{\eta'} \{W(\eta, \eta') P(\eta', t) - W(\eta', \eta) P(\eta, t)\}, \quad (8.7)$$

onde $W(\eta, \eta')$ é a probabilidade de transição da configuração η' para a configuração η . Partindo de (8.1), escrevemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= \frac{d}{dt} \sum_{\eta} P(\eta, t) |\eta\rangle \\ &= \sum_{\eta} \left(\frac{d}{dt} P(\eta, t) \right) |\eta\rangle. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Introduzindo a forma acima na equação mestra chegamos a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{\eta} \sum_{\eta'} \{W(\eta, \eta') P(\eta', t) - W(\eta', \eta) P(\eta, t)\} |\eta\rangle \\ &= \sum_{\eta} \sum_{\eta'} W(\eta', \eta) P(\eta, t) \{|\eta'\rangle - |\eta\rangle\}. \end{aligned} \quad (8.9)$$

Definido o operador de evolução

$$S |\eta\rangle = \sum_{\eta'} \{W(\eta', \eta) (|\eta'\rangle - |\eta\rangle)\} \quad (8.10)$$

temos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{\eta} P(\eta, t) S |\eta\rangle \\
&= S \sum_{\eta} P(\eta, t) |\eta\rangle \\
&= S |\Psi(t)\rangle .
\end{aligned} \tag{8.11}$$

Dessa forma, escrevemos a equação mestra como

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = S |\Psi(t)\rangle . \tag{8.12}$$

Notemos que $|\eta'_i\rangle$ e $|\eta_i\rangle$ estão relacionados através de

$$|\eta'_i\rangle = |1 - \eta_i\rangle , \tag{8.13}$$

o que nos permite fazer uso do operador \mathcal{F}_i para modelos evoluindo por regras que só compreendem operação de um “spin-flip”, como descrito em (8.5) e reescrever a equação (8.9) como

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \sum_{\eta} \sum_i P(\eta, t) w_i(\eta) [\mathcal{F}_i - 1] |\eta\rangle , \tag{8.14}$$

onde $w_i(\eta)$ é a probabilidade de transição por sítio. Definimos ainda um outro operador \mathcal{W}_i , que englobe a dinâmica do processo,

$$\mathcal{W}_i |\eta\rangle = w_i(\eta) |\eta\rangle , \tag{8.15}$$

e que, introduzido em (8.14) fornece

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{\eta} \sum_i P(\eta, t) [\mathcal{F}_i - 1] \mathcal{W}_i |\eta\rangle \\
&= \sum_i [\mathcal{F}_i - 1] \mathcal{W}_i \sum_{\eta} P(\eta, t) |\eta\rangle \\
&= \sum_i [\mathcal{F}_i - 1] \mathcal{W}_i |\Psi(t)\rangle
\end{aligned} \tag{8.16}$$

onde identificamos

$$S = \sum_i [\mathcal{F}_i - 1] \mathcal{W}_i . \quad (8.17)$$

Obtivemos então uma forma para a equação mestra para modelos com regras que compreendem a operação de “spin-flip” dentro do formalismo de operadores. Neste, o valor esperado de um observável \mathcal{O} é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\Psi = \langle \bullet | \mathcal{O} | \Psi \rangle , \quad (8.18)$$

onde

$$\langle \bullet | \equiv \sum_\eta \langle \eta | , \quad (8.19)$$

onde a soma é realizada sobre todas as configurações possíveis. Propriedades interessantes do vetor $\langle \bullet |$ são

$$\begin{aligned} \langle \bullet | S &= 0 , \\ \langle \bullet | \eta &= 1 . \end{aligned} \quad (8.20)$$

A solução estacionária é aquela que satisfaz

$$S | \Psi \rangle = 0 , \quad (8.21)$$

ou seja, é identificada com o auto estado de S associado a um auto valor nulo. Denominaremos esse estado de $|\Phi_0 \rangle$.

Podemos separar o operador S em duas partes, uma contendo apenas termos livres, que denominaremos S^0 e outra contendo as interações que denominaremos V ,

$$S = S^0 + \lambda V . \quad (8.22)$$

Denominando $|\Phi_n \rangle$ os auto-estados à direita de S^0 e $\langle \Phi_n |$ os auto-estados à esquerda de S^0 , com auto valores Λ_n temos

$$S^0 |\Phi_n \rangle = \Lambda_n |\Phi_n \rangle \quad \text{e} \quad \langle \Phi_n | S^0 = \Lambda_n \langle \Phi_n | \quad (8.23)$$

Escolhemos $\Lambda_0 = 0$ de modo que $S^0 |\Phi_0 \rangle = 0$. Os auto valores Λ_n são tais que $\Lambda_n < 0$. Também temos

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{nm} . \quad (8.24)$$

Expandimos a solução estacionária numa série perturbativa no parâmetro λ ,

$$|\Phi_0 \rangle = |\Phi_0^{(0)} \rangle + \lambda |\Phi_0^{(1)} \rangle + \lambda^2 |\Phi_0^{(2)} \rangle + \dots$$

Aplicando o operador $S = S^0 + \lambda V$ na expansão acima e lembrando que $S|\Phi_0 \rangle = 0$, temos que as contribuições em todas as ordens em λ devem anular-se. Assim,

$$S^0 |\Phi_0^{(0)} \rangle = 0, \quad (8.25)$$

$$S^0 |\Phi_0^{(1)} \rangle + V |\Phi_0^{(0)} \rangle = 0, \quad (8.26)$$

$$S^0 |\Phi_0^{(2)} \rangle + V |\Phi_0^{(1)} \rangle = 0, \quad (8.27)$$

e assim por diante, de maneira que escrevemos a forma genérica

$$S^0 |\Phi_0^{(l)} \rangle = -V |\Phi_0^{(l-1)} \rangle. \quad (8.28)$$

Multiplicando a equação acima por $\langle \Phi_n |$,

$$\langle \Phi_n | S^0 |\Phi_0^{(l)} \rangle = - \langle \Phi_n | V |\Phi_0^{(l-1)} \rangle, \quad (8.29)$$

e lembrando que $\langle \Phi_n | S^0 = \langle \Phi_n | \Lambda_n$, chegamos a

$$\langle \Phi_n | \Phi_0^{(l)} \rangle = - \frac{\langle \Phi_n | V |\Phi_0^{(l-1)} \rangle}{\Lambda_n}, \quad (8.30)$$

e, finalmente,

$$|\Phi_0^{(l)} \rangle = \sum_{n \neq 0} |\Phi_n \rangle \frac{\langle \Phi_n | V |\Phi_0^{(l-1)} \rangle}{-\Lambda_n}. \quad (8.31)$$

O operador S^0 pode ser escrito em termos de sua decomposição espectral

$$S^0 = \sum_n |\Phi_n \rangle \Lambda_n \langle \Phi_n|. \quad (8.32)$$

Definimos ainda $[S^0]^{-1}$, o “operador inverso de S^0 ”, através da forma

$$[S^0]^{-1} = \sum_{n(\neq 0)} |\Phi_n \rangle \frac{1}{\Lambda_n} \langle \Phi_n|, \quad (8.33)$$

notando a relação

$$S^0[S^0]^{-1} = 1 - |\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|.$$

Assim, a partir de (8.31) escrevemos

$$\begin{aligned} |\Phi_0^{(l)}\rangle &= -[S^0]^{-1}V|\Phi_0^{(l-1)}\rangle \\ &= (-[S^0]^{-1}V)^l|\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (8.34)$$

Com esse formalismo, os observáveis de interesse podem ser escritos como uma expansão perturbativa em torno do parâmetro relevante, possibilitando o estudo dos estados estacionários e do comportamento crítico de modelos estocásticos definidos em reticulados.

8.1 Aplicação: Votante Majoritário

Para implementarmos a seção anterior, vamos aplicar o formalismo de operadores ao modelo do Votante Majoritário em duas dimensões [20]. Neste modelo, $\eta_{ij} = \pm 1$ e a probabilidade de transição por sítio é dada pela expressão

$$w_{ij}(\eta) = \frac{1}{2} \left[1 - (1 - 2q)\eta_{ij}\theta \left(\sum_{\delta} \eta_{ij+\delta} \right) \right], \quad (8.35)$$

onde a somatória é sobre os primeiros vizinhos do sítio ij e $\theta(\sum_{\delta} \eta_{ij+\delta})$ é uma função que assume o valor 1 (-1) se $\sum_{\delta} \eta_{ij+\delta}$ for maior (menor) do que zero e o valor 0 se $\sum_{\delta} \eta_{ij+\delta}$ for nula. Desse modo, se um determinado sítio ij é escolhido e se sua vizinhança for na maioria constituída por spins cujas variáveis dinâmicas assumem o valor +1, então, no instante de tempo posterior, a variável dinâmica associada ao spin ij assumirá o valor +1 com probabilidade $p = 1 - q$ e o valor -1 com probabilidade q .

Lembrando que

$$S = \sum_{ij} [\mathcal{F}_{ij} - 1] \mathcal{W}_{ij}, \quad (8.36)$$

e que ainda

$$S = S^0 + V , \quad (8.37)$$

podemos identificar

$$S^0 = \sum_{ij} \frac{1}{2} (\mathcal{F}_{ij} - 1) , \quad (8.38)$$

$$V = - \sum_{ij} \frac{1}{2} (\mathcal{F}_{ij} - 1) (1 - 2q) \eta_{ij} \theta \left(\sum_{\delta} \eta_{ij+\delta} \right) . \quad (8.39)$$

Aqui, o parâmetro da expansão já está incluído em V . A solução estacionária para S^0 é obtida através de $S^0 |\Phi_0\rangle = 0$, ou seja, devemos tomar como o auto vetor $|\Phi_0\rangle$ aquele correspondente ao auto valor nulo de S^0 . Para um único sítio, vemos que esse auto vetor é

$$|0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) , \quad (8.40)$$

onde $|+\rangle$ ($|-\rangle$) representa o estado $\eta_{ij} = +1$ ($\eta_{ij} = -1$). Assim, podemos escrever para o estado $|\Phi_0\rangle$ a forma compacta

$$|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}^N} |0\ 0\ 0\ \dots\ 0\rangle , \quad (8.41)$$

onde no vetor estão representados N sítios. Utilizando as propriedades descritas em (8.20) obtemos ainda

$$\langle \bullet | = \sqrt{2}^N \langle 0\ 0\ \dots\ 0 | . \quad (8.42)$$

Calculamos, como exemplo, a susceptibilidade χ , definida como

$$\chi = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{ij} (\eta_{ij})^2 \right\rangle . \quad (8.43)$$

Definimos o operador B_{ij} tal que

$$B_{ij} |\eta_{ij}\rangle = \eta_{ij} |\eta_{ij}\rangle . \quad (8.44)$$

Em ordem 0, escrevemos, então,

$$\chi_0 = \sum_{ij} \langle \bullet | B_{ij}^2 | \Phi_0 \rangle . \quad (8.45)$$

Aplicando B_{ij} em $|\Phi_0\rangle$, temos

$$B_{ij}|0\rangle = 1, \quad (8.46)$$

$$B_{ij}|1\rangle = |0\rangle. \quad (8.47)$$

De posse desses resultados chegamos facilmente à

$$\chi_0 = 1. \quad (8.48)$$

Os termos de ordem l são dados por

$$\chi_l = \sum_{ij} (-1)^l \langle \bullet | B_{ij}^2 ([S^0]^{-1} V)^l | \Phi_0 \rangle, \quad (8.49)$$

portanto,

$$\chi = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \langle \bullet | B_{ij}^2 ([S^0]^{-1} V)^l | \Phi_0 \rangle. \quad (8.50)$$

Calculamos inicialmente χ_1 . Devemos agora encontrar para V uma expressão em termos de operadores. Começamos por escrever a forma de operadores para a dinâmica, que consiste na determinação do operador \mathcal{W}_{ij} descrito anteriormente. Após alguma manipulação algébrica podemos chegar à

$$\mathcal{W}_{ij} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1-2q}{8} B_{ij} \mathcal{S}_{ij} (3 - \mathcal{P}_{ij}) \right], \quad (8.51)$$

onde definimos os operadores

$$\mathcal{S}_{ij} = B_{i-1,j} + B_{i+1,j} + B_{i,j-1} + B_{i,j+1}, \quad (8.52)$$

$$\mathcal{P}_{ij} = B_{i-1,j} \cdot B_{i+1,j} \cdot B_{i,j-1} \cdot B_{i,j+1} \quad (8.53)$$

Podemos inserir na expressão para χ_1 o termo

$$\sum_{\xi \neq 0} |\xi\rangle \langle \xi|, \quad (8.54)$$

que vale 1 para um conjunto completo de vetores da base $|\xi\rangle$, resultando em

$$\chi_1 = - \sum_{ij} \sum_{\xi \neq 0} \langle \bullet | B_{ij}^2 [S^0]^{-1} | \xi \rangle \langle \xi | V | \Phi_0 \rangle \quad (8.55)$$

$$= - \sum_{ij} \sum_{\xi \neq 0} \langle \bullet | B_{ij}^2 | \xi \rangle \frac{1}{\Lambda_\xi} \langle \xi | V | \Phi_0 \rangle, \quad (8.56)$$

onde usamos

$$[S^0]^{-1} | \xi \rangle = \frac{1}{\Lambda_\xi} | \xi \rangle .$$

Obtemos, finalmente

$$\chi_1 = \frac{3}{2} (1 - 2q) . \quad (8.57)$$

Prosseguindo o cálculo, obtemos os coeficientes da expansão analiticamente até terceira ordem, o que nos permite escrever, para a susceptibilidade, a expressão

$$\chi = 1 + \frac{3}{2} (1 - 2q) + \frac{27}{64} (1 - 2q)^2 + \frac{1119}{4096} (1 - 2q)^3 . \quad (8.58)$$

O prosseguimento desse cálculo é bastante trabalhoso e extenso e o mesmo ocorre para um programa computacional, uma vez que conforme avançamos na ordem de perturbação encontramos configurações com aglomerados cada vez maiores que devem ser tratados um a um. Este problema está ainda sendo considerado por nós.

8.2 Aplicação: Modelo de Glauber linear

8.2.1 Introdução ao modelo

O processo estocástico introduzido por Glauber [61] consiste em um processo de um “spin-flip” associado ao modelo de Ising cinético em uma dimensão. O processo considera uma dinâmica governada por uma equação mestra cuja solução estacionária é dada pela distribuição de probabilidades de Gibbs associada à hamiltoniana de Ising. Em geral, a probabilidade de transição de um “spin-flip”, w_i , associada ao i -ésimo sítio de uma rede regular, pode ser escrita como [62] $w_i(\sigma) = a + \sigma_i g(\sigma)$ onde σ denota as variáveis de spin de

Ising, a é uma constante e $g(\sigma)$ é uma função linear das variáveis de spin de Ising. Devido à linearidade da taxa de um “spin-flip”, as propriedades dinâmicas do modelo de Glauber podem ser calculadas exatamente. Para dimensões maiores que um, o modelo de Glauber linear não possui balanceamento detalhado e portanto a probabilidade estacionária não é conhecida a priori.

A denominação processo de Glauber passou a ser utilizada para qualquer processo estocástico de um “spin-flip” em qualquer dimensão, e utilizaremos a denominação modelo de Glauber linear no texto que segue, embora o processo unidimensional seja o único linear de fato.

Numa rede hipercúbica d -dimensional, a probabilidade de um “spin-flip” para o modelo de Glauber linear é dada por

$$w_r(\sigma) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{x}{2d} \sigma_r \sum_{\delta} \sigma_{r+\delta} \right\}, \quad (8.59)$$

onde x é um parâmetro no intervalo $0 < x \leq 1$ e a soma é realizada sobre os $2d$ vizinhos mais próximos do sítio r .

8.2.2 Caso unidimensional

Em uma dimensão, a dinâmica que compreende a operação de um “spin-flip” é representada pela probabilidade de transição $w_l(\sigma)$ associada ao l -ésimo sítio, obtida a partir de (8.59) para $d = 1$,

$$w_l(\sigma) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{x}{2} \sigma_l \sum_{\delta} \sigma_{l+\delta} \right\}. \quad (8.60)$$

Em termos de operadores, a dinâmica é dada por

$$\mathcal{W}_l = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{x}{2} B_l S_l \right], \quad (8.61)$$

onde

$$S_l = B_{l-1} + B_{l+1}, \quad (8.62)$$

onde o efeito dos operadores B_l é análogo ao do modelo do Votante descrito na seção (7.1). Para o potencial identificamos a forma

$$V_l = -\frac{x}{4} (\mathcal{F}_l - 1) = B_l \cdot S_l, \quad (8.63)$$

onde novamente \mathcal{F}_l é o operador “spin-flip”.

Desenvolvemos um programa computacional para a obtenção dos coeficientes da expansão perturbativa da susceptibilidade χ . Obtivemos, até ordem 40, a série

$$\chi_l = \sum_l a_l x^l, \quad (8.64)$$

onde os coeficientes a_l são dados na tabela abaixo (os coeficientes a_l e a_{l+1} são idênticos, portanto escreveremos apenas os coeficientes correspondentes a l par):

l	a_l
0	1
2	0,5
4	0,375
6	0,3125
8	0,2734
10	0,2461
12	0,2256
14	0,2095
16	0,1964
18	0,1855
20	0,1762
22	0,1682
24	0,1612
26	0,1550
28	0,1494
30	0,1445
32	0,1399
34	0,1358
36	0,1321
38	0,1286
40	0,1254

A série obtida corresponde exatamente à série esperada teoricamente [62],

$$\chi = \left(\frac{1+x}{1-x} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (8.65)$$

8.2.3 Caso bidimensional

No caso de duas dimensões, a dinâmica que compreende a operação de um “spin-flip” é implementada pela probabilidade de transição $w_{ij}(\sigma)$ associada ao sítio ij , obtida de (8.59) para $d = 2$,

$$w_{ij}(\sigma) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{x}{4} \sigma_{ij} \sum_{\delta} \sigma_{ij+\delta} \right\}. \quad (8.66)$$

A dinâmica em termos de operadores é dada por

$$\mathcal{W}_{ij} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{x}{4} B_{ij} \mathcal{S}_{ij} \right], \quad (8.67)$$

onde

$$\mathcal{S}_{ij} = B_{i-1,j} + B_{i+1,j} + B_{i,j-1} + B_{i,j+1}. \quad (8.68)$$

Notemos que na dinâmica deste modelo não existe mais o termo de produto entre os operadores B_{ij} , como ocorre no modelo do Votante, o que simplifica muito o problema.

Identificamos para o potencial a forma

$$V_{ij} = -\frac{x}{8} (\mathcal{F}_{ij} - 1) \cdot B_{ij} \cdot \mathcal{S}_{ij}. \quad (8.69)$$

Tendo em mãos a série para a susceptibilidade, resta-nos saber se ela exhibe o comportamento esperado. No caso bidimensional, o comportamento da susceptibilidade exhibe a forma [62]

$$\chi \sim \frac{(1-x)^{-1}}{\ln(1-x)}, \quad (8.70)$$

onde a correção logarítmica é necessária uma vez que a dimensão crítica superior do modelo é igual a 2. Temos, portanto, para o inverso da susceptibilidade, o comportamento

$$\frac{1}{\chi} \sim (1-x) \ln(1-x), \quad (8.71)$$

consistindo de uma série de fácil expansão e análise. Expandindo $1/\chi$ temos

$$\frac{1}{\chi} \sim -x + \sum_{l>1} A_l x^l, \quad (8.72)$$

onde os coeficientes A_l têm a forma fechada

$$A_l = \frac{1}{l(l-1)}. \quad (8.73)$$

Assim, podemos encontrar também uma forma fechada para a razão r_l entre coeficientes consecutivos, o que é interessante já que não precisamos nos preocupar com eventuais constantes multiplicativas na forma exata de $1/\chi$. Temos, assim,

$$\begin{aligned} r_l &\equiv \frac{A_l}{A_{l-1}}, \\ &= 1 - \frac{2}{l}. \end{aligned} \quad (8.74)$$

Se fizermos um gráfico de $r_l \times 2/l$, encontramos uma linha reta com coeficiente linear igual a 1. Assim, temos o comportamento assintótico esperado para $1/\chi$ e verificaremos a seguir se a série obtida apresenta um comportamento semelhante.

O programa desenvolvido fornece os coeficientes de χ , que pode ser escrita como

$$\chi = \sum_l b_l x^l. \quad (8.75)$$

Os coeficientes b_l , até ordem 40, são dados na tabela abaixo (novamente temos $b_l = b_{l+1}$, e portanto escrevemos apenas os coeficientes relacionados a l par):

l	b_l
0	1
2	0,75
4	0,6719
6	0,6289
8	0,6003
10	0,5792
12	0,5628
14	0,5495
16	0,5383
18	0,5287
20	0,5204
22	0,5131
24	0,5065
26	0,5006
28	0,4952
30	0,4903
32	0,4858
34	0,4816
36	0,4777
38	0,4741
40	0,4707

Construímos um algoritmo para inverter a série obtida. Na figura (8.1) está o gráfico de $r_l \times 2/l$ para a série invertida calculada.

Vemos que seu comportamento é análogo ao esperado teoricamente, já que se extrapolarmos a reta obtida teremos o coeficiente linear igual a 1.

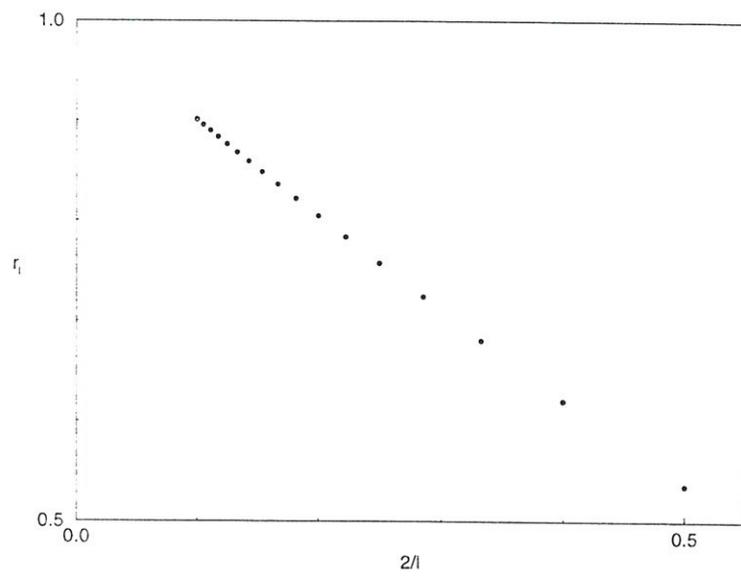


Figura 8.1: $r_l \times 2/l$ para modelo com dinâmica tipo Glauber linear em duas dimensões.

Capítulo 9

Conclusão

Na primeira parte do trabalho, investigamos o comportamento crítico de dois autômatos celulares probabilísticos que não possuem reversibilidade microscópica e são definidos por dinâmicas invariantes sob as operações do grupo de simetria C_{3v} . Introduzimos um conjunto de funções homogêneas invariantes pelas operações de simetria do grupo C_{3v} e, através dessas funções, definimos grandezas físicas como o parâmetro de ordem, susceptibilidade e cumulante de quarta ordem, ou seja, obtivemos grandezas-padrão que podem ser aplicadas a qualquer modelo com simetria C_{3v} , reversível ou não. Estabelecemos, dessa forma, uma consistência nas definições que ainda não havia sido encontrada na literatura.

Através do método de Monte Carlo e da utilização da teoria de escala finita determinamos, para ambos os modelos, os expoentes críticos estáticos referentes a transições de segunda ordem que ocorrem entre estados estacionários quando os parâmetros externos são variados. Aplicamos também a dinâmica de tempos curtos para a determinação dos expoentes críticos dinâmicos. Os valores encontrados para os expoentes críticos estáticos e dinâmicos nos dois modelos são consistentes com os expoentes do modelo de Potts de três estados.

Os resultados numéricos confirmam que modelos irreversíveis definidos em redes regulares, cujas dinâmicas são invariantes sob as operações do grupo de simetria C_{3v} , estão na mesma classe de universalidade do modelo de Potts de três estados definido em redes equivalentes. Essa conjectura foi também desenvolvida com a utilização de expansões análogas às expansões da teoria de Landau das transições de fase. Concluimos que a irreversibilidade local tem um papel irrelevante, no nível macroscópico, no comportamento crítico

e não é uma propriedade que deva alterar a classe de universalidade de um modelo. Técnicas de grupo de renormalização podem ser empregadas na demonstração desse princípio geral.

Na segunda parte do trabalho, descrevemos e aplicamos em dois modelos distintos o formalismo de operadores como um método de abordagem de sistemas de não-equilíbrio. Esse formalismo é bastante interessante uma vez que possibilita a obtenção de séries perturbativas para grandezas que descrevem os estados estacionários de não-equilíbrio, que não são conhecidos a priori, a partir de uma equação mestra que contém toda a dinâmica do modelo.

Bibliografia

- [1] T. M. Ligget, *Interacting Particle Systems*, Springer-Verlag, New York, 1985.
- [2] Shang-Keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin, Reading, 1976.
- [3] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore, 1984.
- [4] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Y. He, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 2527.
- [5] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **42** (1981) 151.
- [6] P. Grassberger, *Z. Phys. B* **47** (1982) 365.
- [7] R. B. Potts, *Proc. Camb. phil. Soc* **48** (1952) 106.
- [8] T. Inui, Y. Tanabe e Y. Onodera, *Group Theory and Its Applications in Physics*, Springer-Verlag, 1976.
- [9] A. Fazzio e K. Watari, *Introdução a Teoria de Grupos com Aplicações em Moléculas e Sólidos*, Editora da Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 1998.
- [10] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54** (1982) 325.
- [11] J. P. Straley e M. E. Fisher, *J. Phys. A* **6** (1973) 1310.
- [12] D. J. Amit e A. Sherbakov, *J. Phys. C* **7** (1974) L96.
- [13] R. K. P. Zia e D. J. Wallace, *J. Phys. A* **8** (1977) 1495.

-
- [14] R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6** (1973) L445.
- [15] R. V. Ditzian e L. P. Kadanoff, *J. Phys. A* **12** (1979) L229.
- [16] H. W. J. Blote e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979) 799.
- [17] K. Binder *J. Stat. Phys.* **24** (1981) 69.
- [18] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford Clarendon Press, 1992.
- [19] A. Brunstein and T. Tomé, *Phys. Rev. E* **60** (1999) 1.
- [20] M. J. de Oliveira, *J. Stat. Phys.* **66** (1992) 273.
- [21] A. Brunstein and T. Tomé, aceito para publicação na *Modern Physics Letters B*.
- [22] T. Tomé and J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* **53** (1996) 3976.
- [23] T. Tomé and J. R. Drugowich de Felício, *Modern Physics Letters B* **21** (1998) 873.
- [24] A. Brass, A. J. Bancroft, M. E. Clamp, R. K. Grencis and K. J. Else, *Phys. Rev. E* **50** (1994) 1589.
- [25] G. Nicolis e I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, Wiley, New York, 1977.
- [26] H. Haken, *Synergetics: an Introduction*, Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- [27] T. Tomé, *Irreversibilidade: Modelos de Rede com Dinâmicas Estocásticas*, Tese de Livre Docência, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 1996.
- [28] A. E. Ferdinand e M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **185** (1969) 832.
- [29] M. N. Barber, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic NY, 145 (1983).
- [30] T. Aukrust, D. A. Browne and I. Webman, *Phys. Rev. A* **41** (1990) 5294.
- [31] T. Tomé and R. Dickman, *Phys. Rev. E* **47** (1993) 948.

-
- [32] A. Brunstein and T. Tomé, *Physica A* **257** (1998) 334.
- [33] K. Binder and D. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [34] M. J. de Oliveira, *Int. J. Mod. Phys. B* **10** (1996) 1313.
- [35] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087.
- [36] P. C. Honenberg e B. I. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49** (1977) 435.
- [37] H. K. Janssen, B. Schaub and B. Schmittman, *Z. Phys. B* **73** (1989) 539.
- [38] H. W. Diehl, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 10, C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press, London, 1986.
- [39] K. Okano, L. Schulke, K. Yamagishi and B. Zheng, *Nuclear Physics B* **485** (1997) 727.
- [40] U. Ritschel e P. Czerner, *Phys. Rev. E* **55** (1997) 3958.
- [41] D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 304.
- [42] Z. B. Li, U. Ritschel and B. Zheng, *J. Phys. A* **27** (1994) L837.
- [43] Z. B. Li, L. Schulke and B. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3396.
- [44] L. Schulke and B. Zheng, *Phys. Lett. A* **204** (1995) 295.
- [45] C. S. Simões e J. R. Drugowich de Felício, *J. Phys. A* **31** (1998) 7265.
- [46] B. Zheng *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 679.
- [47] S. Tang e D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 567.
- [48] B. Zheng, *Monte Carlo Simulations of the Short-time Critical Dynamics*.
- [49] H. W. Diehl and U. Ritschel, *J. Stat. Phys.* **73** (1993) 1.
- [50] H. K. Janssen, *Topics in Modern Statistical Physics*, World Scientific, Singapore, 1992.

-
- [51] J. F. F. Mendes and M. A. Santos, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 107.
- [52] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **58** (1998) 4242.
- [53] M. Aydin and M. C. Yalabik, *J. Phys. A* **18** (1985) 1741.
- [54] K. Binder, *J. Stat. Phys.* **24** (1981) 69.
- [55] M. Aydin and M. C. Yalabik, *J. Phys. A* **21** (1988) 769.
- [56] J. P. Straley e M. E. Fisher, *J. Phys. A* **6** (1973) 1310.
- [57] P. Grassberger and A. de la Torre, *Ann. Phys.* **122** (1979) 373.
- [58] R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **55** (1989) 997.
- [59] R. Dickman, J.-S. Wang and I. Jensen, *J. Chem. Phys.* **94** (1991) 8252.
- [60] M. J. de Oliveira, T. Tomé and R. Dickman, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 6294.
- [61] R. Glauber, *J. Math. Phys.* **4** (1963) 234.
- [62] T. Tomé e M. J. de Oliveira, em preparação.