UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

TRANSIÇÕES DE FASE
EM MODELOS IRREVERSÍVEIS
COM SIMETRIA DE INVERSÃO E ESTADO
ABSORVENTE

Geraldine Góes Bosco

Dissertação apresentada ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Ciências

Banca Examinadora:

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

Profa. Dra. Vera Henriques Bohomoletz Henriques (IFUSP)

Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)

Orientadora: Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3557 ex.1

São Paulo
2001

SBI-IFUSP

305M810T3557

Prof. A. Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

Defesa: 03/07/2001

53d.1350
B742+
M
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Bosco, Geraldine Goés

Transições de Fase em Modelos Irreversíveis com
Simetria de Inversão e Estado Absorvente. São Paulo,
2001.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física Geral

Orientador: Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de
Castro

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Mecânica Estatística de Não Equilíbrio;
2. Sistemas de Partículas Interagentes; 3. Processos
Estocástico; 4. Transições de Fase; 5. Irreversibilidade.

USP/IF/SBI-046/2001

Agradecimentos

Agradeço à Professora Tânia Tomé pela orientação .

Agradeço a todos que me ajudaram durante o período de elaboração deste trabalho. Em especial ao Tommy pelo apoio e principalmente pelos questionamentos que ajudaram muito a enriquecer o meu trabalho. Ao meu amigo Nelson, que me apoiou e ajudou em todos os momentos que precisei. Ao meu amiguinho Masayuki pela generosidade e paciência com as quais me ajudou sempre que necessitei.

Agradeço também ao Roberto Alamino e ao Cláudio que cederam seus computadores para as minhas simulações ; ao Leonardo, à Nara, ao Fabiano, ao Josué e ao Mário Tamashiro por responderam prontamente às minhas perguntas sobre linux e latex; aos meus colegas Carlos, Kelly, Cristiane, Ivan, Henrique, Evaldo, Neli, Nestor, Munir, Roberto da Silva e Chiappin pelo companheirismo de todos os dias. Ao meu amigo e professor Said pela amizade e pelos conselhos tão oportunos. Aos professores Mário de Oliveira e Vera Henriques pela atenção e interesse que sempre demonstraram ao responder as minhas dúvidas.

Agradeço à Silvana, à Dirce, à Ivone, ao Alexandre, ao Jairo, ao Marcos, ao Sílvio, ao "seu" Wilson e ao João pela solicitude e carinho com as quais sempre me trataram.

Agradeço ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Resumo

Neste trabalho propusemos modelos irreversíveis com simetria *up-down* e um estado absorvente. O nosso objetivo foi estudar propriedades universais e transições de fases. Os modelos foram estudados mediante aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo cujos resultados foram analisados a partir da teoria de escala finita. O primeiro modelo proposto foi o modelo A com simetria *up-down*, definido em cadeias lineares e redes quadradas. O modelo apresenta uma transição de fase contínua, pertencente à classe de universalidade da percolação direcionada, entre um estado absorvente e um estado estacionário ativo de caráter ferromagnético. O segundo modelo proposto foi o modelo do votante majoritário com estado absorvente, elaborado a partir das dinâmicas dos modelos de contato e do votante majoritário isotrópico. Embora possamos construir diversas prescrições através dessas dinâmicas, focalizamos a nossa atenção em dois modelos definidos em redes quadradas. Observamos três tipos de estados estacionários: estado absorvente, estados ativos ferromagnéticos e paramagnéticos. Os modelos apresentam transições de fases contínuas pertencentes às classes de universalidade do modelo de Ising (de equilíbrio) e da percolação direcionada.

Abstract

In this work, we propose irreversible models with up-down symmetry and an absorbing state. Our aim was to analyse universal critical behavior and phase transitions. The models have been studied by mean field approximations and Monte Carlo simulations whose results have been analysed by finite-size scaling theory. The first proposed model was A model with up-down symmetry defined on linear chains and square lattices. It presented a continuous phase transition which belongs to the universality class of directed percolation from an absorbing state to an active steady-state which is ferromagnetic. The other model was the isotropic majority-vote model with absorbing state devised from the dynamics of the contact model and the isotropic majority-vote model. Although many dynamics satisfy these conditions we focused our attention on two models defined on regular square lattices and observed three kinds of steady-states: absorbing, ferromagnetic active and paramagnetic active. The models present continuous phase transitions of different kinds: one is in the universality class of the equilibrium Ising model and the other is in the universality class of directed percolation.

Sumário

1	Introdução	7
1.1	Estrutura da Dissertação	8
2	Formalismo	10
2.1	Definições Iniciais	10
2.2	Dinâmica de um sítio	11
2.3	Reversibilidade	16
2.4	Métodos	19
3	Modelos Irreversíveis: Modelos com simetria <i>up-down</i> e modelos com estado absorvente	26
3.1	Modelo do Votante	26
3.2	Modelo do Votante Majoritário Isotrópico	27
3.3	Modelo de Contato	29
3.4	Modelo A	32
4	Modelo A com simetria <i>up-down</i>	34
4.1	Descrição do modelo	34
4.2	Construção das equações de evolução	37
4.3	Aproximação de campo médio simples	40
4.4	Aproximação de campo médio de pares	42
4.5	Simulações de Monte Carlo	44
4.6	Análise de resultados baseada na relação entre o modelo A com simetria <i>up-down</i> e o modelo do votante	48
5	Modelo do votante majoritário com estado absorvente	52
5.1	Apresentação do modelo 1	53
5.2	Aproximação de campo médio simples para o modelo 1	60
5.3	Simulações de Monte Carlo do modelo 1	68
5.4	Apresentação do modelo 2	83

5.5	Aproximação de campo médio simples para o modelo 2	85
5.6	Simulações de Monte Carlo do modelo 2	90
5.7	Relação entre os modelos 1 e 2	98
6	Conclusões	100

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos irreversíveis aparecem com bastante frequência na natureza. Um grande desafio é o modelamento e análise desses fenômenos. Pode-se dizer que a sua origem microscópica seria resultante de interações reversíveis. No entanto, raramente podemos ter acesso a todas as informações concernentes a essas interações. Muitas vezes temos sistemas, como na área de matéria condensada, com um número de partículas da ordem de 10^{23} . É impraticável levar em conta toda essa informação, pois seria necessário descrever as trajetórias de 10^{23} partículas. Por outro lado, não podemos perder de vista que o escopo é modelar sistemas macroscópicos irreversíveis e estaríamos nos fundamentando em leis microscópicas reversíveis. Portanto, essa estrutura não seria a mais adequada para a construção de uma teoria sistemática dos fenômenos irreversíveis. Dentro do formalismo da mecânica estatística de não-equilíbrio, há uma abordagem na qual esses sistemas são analisados mediante uma descrição microscópica que contém em si mesma a irreversibilidade. Nesse sentido, são construídas dinâmicas estocásticas irreversíveis em espaços de configurações microscópicas, nos quais a irreversibilidade é explicitamente introduzida e verificada. Na prática, são considerados sistemas de partículas interagentes residindo em redes e evoluindo no tempo segundo dinâmicas estocásticas irreversíveis aplicadas localmente.

Diferentemente dos sistemas da mecânica estatística de equilíbrio, descritos por uma hamiltoniana, os sistemas irreversíveis, ou da mecânica estatística de não-equilíbrio, ficam definidos por dinâmicas estocásticas locais e irreversíveis. Decorre que as probabilidades de transição entre estados desses sistemas não obedecem o balanceamento detalhado e portanto, para tempos suficientemente longos, os processos não convergem para estados estacionários descritos pela distribuição de equilíbrio de Gibbs, mas sim para estados estacionários de não-equilíbrio descritos por uma distribuição estacionária não conhecida a priori.

Dentro da estrutura geral descrita acima, um determinado fenômeno pode ser idealiza-

do matematicamente por autômatos celulares ou por modelos estocásticos de gás de rede. A escolha depende de características intrínsecas de um fenômeno específico. A diferença entre as duas abordagens reside na forma da evolução temporal, a tempo discreto ou a tempo contínuo, e na maneira como os sítios são atualizados. Um autômato celular evolui temporalmente segundo uma cadeia de Markov e todos os sítios são atualizados de forma simultânea, isto é, todos os sítios mudam de estado a cada passo discreto de tempo. Por outro lado, a evolução temporal dos modelos estocásticos de gás de rede é descrita através de um processo markoviano a tempo contínuo onde os sítios são atualizados de maneira sequencial, isto é, apenas um sítio pode mudar de estado a cada instante de tempo.

Assim como os sistemas da mecânica estatística de equilíbrio, alguns sistemas irreversíveis, ao variarmos seus parâmetros de controle, passam por transições de fase denominadas transições de fase cinéticas. Essas transições ocorrem entre diferentes estados estacionários de não-equilíbrio, caracterizados por parâmetros de ordem bem definidos, apresentando um comportamento crítico universal descrito por um conjunto de expoentes críticos [1]. A classificação do comportamento crítico desses sistemas é, em muitos casos, baseada na sua dimensão, na dimensão do parâmetro de ordem, e nas simetrias das regras de transição, em contraste com a mecânica estatística de equilíbrio, que considera as simetrias da hamiltoniana do sistema.

Nesse sentido, algumas conjecturas foram propostas e verificadas em inúmeros modelos. No contexto desta dissertação se inserem a conjectura *up-down* de Grinstein e colaboradores [3]:

Transições de fase contínuas entre estados estacionários em modelos de rede estocásticos com regras que possuem simetria up-down, reversíveis ou não, pertencem à classe de universalidade do modelo de Ising (de equilíbrio).

e a conjectura da percolação direcionada de Janssen [2] e Grassberger [4]:

Se um modelo de uma única componente exibe uma transição de fase contínua para um único estado absorvente, então o comportamento crítico do modelo pertence à classe de universalidade da percolação direcionada.

1.1 Estrutura da Dissertação

Nesta dissertação estudamos modelos estocásticos de gás de rede com evolução temporal descrita por dinâmicas estocásticas irreversíveis. Propusemos modelos que apresentam conjuntamente simetria *up-down* e um estado absorvente. O principal objetivo foi verificar

se tais modelos apresentariam transições de fase contínuas tanto da classe de universalidade do modelo de Ising (de equilíbrio), segundo indica a conjectura *up-down*, como da classe de universalidade da percolação direcionada, de acordo com a conjectura de Grassberger e Janssen.

Vale ressaltar que na terminologia dos modelos citados e propostos neste trabalho, usamos, muitas vezes, termos relacionados a fenômenos de propagação de infecções e de sistemas de votação. Contudo, o trabalho não tem a finalidade de reproduzir ou prever comportamentos desses fenômenos. Os termos são apenas alegorias que visam facilitar o entendimento dos modelos.

A dissertação foi dividida em seis capítulos. No capítulo 2 apresentamos uma breve revisão do formalismo baseado na descrição de processos estocásticos em termos de equações mestras. Além disso, com o objetivo de estabelecer os métodos seguidos neste trabalho, apresentamos uma revisão de aproximações de campo médio, simulações de Monte Carlo e teoria de escala finita.

No capítulo 3 fizemos uma breve revisão de modelos irreversíveis, os quais foram fonte de elaboração e análise dos modelos que propusemos. Dentro do conjunto dos modelos irreversíveis com simetria *up-down* consideramos os modelos do votante e votante majoritário isotrópico. E dentre os modelos irreversíveis com um estado absorvente, os protótipos foram os modelos de contato e A.

No capítulo 4 introduzimos o modelo A com simetria *up-down*, o primeiro modelo proposto neste trabalho. Neste capítulo vamos expor a descrição da dinâmica e em seguida os resultados das aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo.

No capítulo 5 introduzimos o segundo modelo proposto, o modelo do votante majoritário com estado absorvente. Descrevemos a dinâmica, propusemos variantes a suas regras e apresentamos os resultados gerados por aproximações de campo médio simples e simulações de Monte Carlo cujos resultados são analisados através da teoria de escala finita.

No capítulo 6 apresentamos nossas conclusões e comentários finais.

Capítulo 2

Formalismo

2.1 Definições Iniciais

Definimos uma rede com N sítios, aos quais associamos uma variável σ_i , que assume um número finito K de valores. Então, o conjunto de K^N configurações desse sistema é o espaço de estados dos modelos que vamos considerar. Cada estado é representado pela variável σ , definida por:

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N) \quad (2.1)$$

Os modelos estudados são processos de Markov a tempo contínuo, descritos por taxas características que determinam a transição do sistema de um estado a outro. As mudanças são geralmente locais e dependentes das interações entre primeiros vizinhos. Vamos definir $W(\sigma|\sigma') \geq 0$ como a taxa de transição do estado σ' para o estado σ , e $P(\sigma, t)$ como a probabilidade do sistema estar no estado σ no instante t . A evolução temporal de $P(\sigma, t)$ é governada por uma equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) = \sum_{\sigma'} \{P(\sigma', t)W(\sigma|\sigma') - P(\sigma, t)W(\sigma'|\sigma)\}, \quad (2.2)$$

onde a soma é sobre os K^N estados do sistema.

A equação mestra é uma forma equivalente da equação de Chapman-Kolmogorov para processos Markovianos [5]. Não somente é mais conveniente em operações matemáticas, como também tem uma interpretação física mais direta que a equação original de Chapman-Kolmogorov. É uma equação de perda e ganho para a probabilidade de cada estado σ : o primeiro termo corresponde ao ganho devido a transições de outros estados σ'

para σ ; enquanto o segundo termo é a perda devido a transições de σ para outros estados σ' .

2.2 Dinâmica de um sítio

Neste trabalho estudamos apenas as dinâmicas nas quais ocorrem a mudança de um único sítio a cada instante de tempo, permanecendo os demais sítios inalterados. Estas dinâmicas são conhecidas como dinâmicas de um sítio. Neste caso, $W(\sigma|\sigma')$ é dada por

$$W(\sigma|\sigma') = \sum_{i=1}^N \delta(\sigma_1, \sigma'_1) \delta(\sigma_2, \sigma'_2) \dots \delta(\sigma_i, T(\sigma'_i)) \dots \delta(\sigma_N, \sigma'_N) w_i(\sigma'), \quad (2.3)$$

onde $w_i(\sigma')$ é a taxa de transição do sítio σ_i do estado σ' ; $T(\sigma'_i)$ é uma função que depende da dinâmica escolhida, atuante no sítio que sofreu a transição. No caso dos modelos de Ising e Contato (seções 2.3 e 3.3), a função $T(\sigma'_i)$ fica definida, respectivamente, por

$$T(\sigma'_i) = -\sigma'_i \quad (2.4)$$

e

$$T(\sigma'_i) = 1 - \sigma'_i. \quad (2.5)$$

Substituindo a equação (2.3) em (2.2), temos que o primeiro termo fica

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\sigma'} \delta(\sigma_1, \sigma'_1) \delta(\sigma_2, \sigma'_2) \dots \delta(\sigma_i, T(\sigma'_i)) \dots \delta(\sigma_N, \sigma'_N) \cdot w_i(\sigma') \cdot P(\sigma', t) =$$

$$\sum_{i=1}^N w_i(\sigma_1, \sigma_2, \dots, T(\sigma'_i), \dots, \sigma_N) \cdot P(\sigma^i, t) = \sum_{i=1}^N w_i(\sigma^i) \cdot P(\sigma^i, t),$$

com

$$\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, T(\sigma_i), \dots, \sigma_N).$$

Enquanto o segundo termo fica

$$\sum_{i=1}^N P(\sigma, t) \sum_{\sigma'} \delta(\sigma'_1, \sigma_1) \delta(\sigma'_2, \sigma_2), \dots, \delta(\sigma'_i, T(\sigma_i)), \dots, \delta(\sigma'_N, \sigma_N) \cdot w_i(\sigma) =$$

$$\sum_{i=1}^N w_i(\sigma) \cdot P(\sigma, t) .$$

Logo,

$$\frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{i=1}^N w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - \sum_{i=1}^N w_i(\sigma) P(\sigma, t), \quad (2.6)$$

que é a equação mestra para a dinâmica de um sítio.

Valor esperado de uma função de estado

Através de $P(\sigma, t)$, podemos calcular o valor esperado de uma função de estado $f(\sigma)$:

$$\langle f(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} f(\sigma) P(\sigma, t) . \quad (2.7)$$

A equação de evolução temporal de $\langle f(\sigma) \rangle$ é encontrada se derivarmos (2.7) em relação ao tempo

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

e em seguida substituímos (2.2) e (2.3), ou seja,

$$\frac{d}{dt} \langle f(\sigma) \rangle = \sum_{j=1}^N \langle \{f(\sigma^j) - f(\sigma)\} w_j(\sigma) \rangle . \quad (2.8)$$

Através de (2.8), encontramos a equação de evolução da média da função de correlação de um sítio, $\langle \sigma_k \rangle$. Então

$$f(\sigma) = \sigma_k$$

e

$$f(\sigma^j) = \begin{cases} T(\sigma_k) & , \text{ se } k = j \\ \sigma_k & , \text{ se } k \neq j \end{cases} .$$

Logo

$$\{f(\sigma^j) - f(\sigma)\} = \{T(\sigma_k) - \sigma_k\} \cdot \delta_{k,j},$$

cujas substituições em (2.8), fornece

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = \sum_{j=1}^N \langle \{T(\sigma_k) - \sigma_k\} \cdot \delta_{k,j} \cdot w_j(\sigma) \rangle .$$

E finalmente:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = \langle \{T(\sigma_k) - \sigma_k\} \cdot w_k(\sigma) \rangle . \quad (2.9)$$

A equação de evolução da média de correlação de pares, $\langle \sigma_k \cdot \sigma_{k+1} \rangle$ é encontrada da seguinte forma:

$$f(\sigma) = \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}$$

e

$$f(\sigma^j) = \begin{cases} T(\sigma_k) \cdot \sigma_{k+1}, & \text{ se } k = j, \quad k+1 \neq j \\ \sigma_k \cdot T(\sigma_{k+1}), & \text{ se } k \neq j, \quad k+1 = j \\ \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}, & \text{ se } k \neq j, \quad k+1 \neq j . \end{cases}$$

Então

$$f(\sigma^j) - f(\sigma) = \{T(\sigma_k) \cdot \sigma_{k+1} - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot \delta_{j,k} \\ + \{\sigma_k \cdot T(\sigma_{k+1}) - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot \delta_{j,k+1} ,$$

cuja substituição em (2.8) resulta em

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \cdot \sigma_{k+1} \rangle = \sum_{j=1}^N \langle \{T(\sigma_k) \cdot \sigma_{k+1} - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot w_j(\sigma) \cdot \delta_{j,k} \\ + \{\sigma_k \cdot T(\sigma_{k+1}) - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot w_j(\sigma) \cdot \delta_{j,k+1} \rangle .$$

E finalmente temos

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \cdot \sigma_{k+1} \rangle = \langle \{T(\sigma_k) \cdot \sigma_{k+1} - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot w_k(\sigma) \\ + \{\sigma_k \cdot T(\sigma_{k+1}) - \sigma_k \cdot \sigma_{k+1}\} \cdot w_{k+1}(\sigma) \rangle . \quad (2.10)$$

A partir de (2.8) também podemos encontrar a equação de evolução da densidade média, $P(\alpha) = \langle \delta(\alpha, \sigma_k) \rangle$, de sítios nos quais σ_k assume um valor determinado α . A função $f(\sigma)$ assume a seguinte forma:

$$f(\sigma) = \delta(\alpha, \sigma_k)$$

e

$$f(\sigma^j) = \begin{cases} \delta(T(\alpha), \sigma_k) & , \text{ se } k = j \\ \delta(\alpha, \sigma_k) & , \text{ se } k \neq j . \end{cases}$$

Então

$$\{f(\sigma^j) - f(\sigma)\} = \{ \delta(T(\alpha), \sigma_k) - \delta(\alpha, \sigma_k) \} \cdot \delta_{k,j} ,$$

que substituindo em (2.8) resulta na seguinte expressão:

$$\frac{d}{dt} P(\alpha) = \sum_{j=1}^N \langle \{ \delta(T(\alpha), \sigma_k) - \delta(\alpha, \sigma_k) \} \cdot \delta_{k,j} \cdot w_j(\sigma) \rangle .$$

E finalmente temos

$$\frac{d}{dt}P(\alpha) = \langle \{ \delta(T(\alpha), \sigma_k) - \delta(\alpha, \sigma_k) \} \cdot w_k(\sigma) \rangle . \quad (2.11)$$

Por outro lado, a equação de evolução da média de pares vizinhos k e $k+1$,

$$P(\alpha_1, \alpha_2) = \langle \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \rangle , \quad (2.12)$$

nos quais σ_k e σ_{k+1} assumem os valores α_1 e α_2 , é encontrada da seguinte forma:

$$f(\sigma) = \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1})$$

e

$$f(\sigma^j) = \begin{cases} \delta(T(\alpha_1), \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}), & \text{se } k = j, \quad k+1 \neq j \\ \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(T(\alpha_2), \sigma_{k+1}), & \text{se } k \neq j, \quad k+1 = j \\ \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}), & \text{se } k \neq j, \quad k+1 \neq j. \end{cases}$$

Então

$$\begin{aligned} f(\sigma^j) - f(\sigma) = & \{ \delta(T(\alpha_1), \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot \delta_{j,k} \\ & + \{ \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(T(\alpha_2), \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot \delta_{j,k+1}, \end{aligned}$$

cujas substituições em (2.8) leva a expressão:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\alpha_1, \alpha_2) = & \sum_{j=1}^N \langle \{ \delta(T(\alpha_1), \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot w_j(\sigma) \cdot \delta_{j,k} \\ & + \{ \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(T(\alpha_2), \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot w_j(\sigma) \cdot \delta_{j,k+1} \rangle . \end{aligned}$$

E finalmente temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\alpha_1, \alpha_2) = & \langle \{ \delta(T(\alpha_1), \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot w_k(\sigma) \\ & + \{ \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(T(\alpha_2), \sigma_{k+1}) - \delta(\alpha_1, \sigma_k) \cdot \delta(\alpha_2, \sigma_{k+1}) \} \cdot w_{k+1}(\sigma) \rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

2.3 Reversibilidade

Vamos estabelecer critérios para determinarmos se um processo estocástico Markoviano é ou não reversível e apresentaremos o modelo de Ising cinético como um exemplo de modelo com dinâmica reversível.

Critérios de Reversibilidade

Seja um processo Markoviano qualquer que tenha uma única distribuição estacionária $P_{est}(\sigma)$, dizemos que o processo é reversível se, e somente se, está satisfeita a seguinte condição :

$$P_{est}(\sigma') \cdot W(\sigma|\sigma') = P_{est}(\sigma) \cdot W(\sigma'|\sigma), \quad (2.14)$$

chamada de condição de balanceamento detalhado.

Porém, nem sempre conhecemos P_{est} , mas somente $W(\sigma|\sigma')$. Podemos usar então, um critério ([6] e [7]) que diz que um processo de Markov estacionário é reversível se, e só se,

$$\begin{aligned} W(2|1) \cdot W(3|2) \dots W(n|n-1) \cdot W(1|n) = \\ W(n|1) \cdot W(n-1|n) \dots W(2|3) \cdot W(1|2), \end{aligned} \quad (2.15)$$

para qualquer seqüência finita de estados $1, 2, \dots, n$ pertencentes ao espaço de estados. Esse critério estabelece que, para qualquer trajetória fechada, a probabilidade da sua realização é a mesma, não importando a direção do movimento. Na verdade, o critério é muito mais usado para uma rápida verificação da não reversibilidade de um processo. Isto é feito escolhendo-se trajetórias críticas, ou seja, trajetórias nas quais o critério falha.

Exemplo: O Modelo de Ising Cinético

O modelo de Ising Cinético é definido numa rede de N sítios, aos quais são associadas variáveis de spin σ_i , que assumem os valores $+1$ e -1 . A energia de uma configuração σ qualquer é definida por:

$$E(\sigma) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.16)$$

onde a soma é sobre os primeiros vizinhos dos sítios i, j e J é a integral de troca. Assim definido, o sistema no equilíbrio apresenta seus estados descritos pela distribuição de Gibbs,

$$P_{eq} = \frac{\exp(-\beta E(\sigma))}{Z}, \quad (2.17)$$

onde $\beta = J/kT$ e Z é a função de partição .

Para estudar a evolução temporal deste sistema, é considerado um processo estocástico no mesmo espaço de estados cuja dinâmica evolui para a distribuição de equilíbrio de Gibbs. Por ter um caráter estocástico, este modelo é conhecido como modelo de Ising cinético.

Para descrever o processo, vamos considerar que a evolução temporal ocorra segundo uma dinâmica de um sítio, onde $T(\sigma'_i) = -\sigma'_i$. A equação mestra para essa dinâmica é dada por (2.6), enquanto as equações de evolução das médias das funções de correlação de um e dois sítios decorrem da substituição de (2.4) em (2.9) e (2.10), respectivamente:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_j \rangle = - \langle 2 \cdot \sigma_j \cdot w_j(\sigma) \rangle \quad (2.18)$$

e

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_j \cdot \sigma_{j+1} \rangle = \langle -2 \cdot \sigma_j \cdot \sigma_{j+1} \cdot [w_j(\sigma) + w_{j+1}(\sigma)] \rangle, \quad (2.19)$$

onde $w_j(\sigma')$ deve satisfazer a condição de balanceamento detalhado

$$\frac{w_j(\sigma)}{w_j(\sigma')} = \exp[-\beta \Delta E(\sigma)], \quad (2.20)$$

com $\Delta E(\sigma) = E(\sigma') - E(\sigma)$.

Existem várias dinâmicas que satisfazem (2.20), dentre elas podemos citar a prescrição de Metrópolis [8],

$$w_j(\sigma) = \min\{1, \exp(-\beta \Delta E_j)\}, \quad (2.21)$$

com $\Delta E_j = E(\sigma^j) - E(\sigma)$.

A título de exemplo, vamos mostrar que (2.21) satisfaz (2.20). Considerando a situação na qual a energia da configuração σ^j é maior que a energia da configuração σ , temos:

$$w_j(\sigma) = \exp[-\beta \Delta E_j] \quad (2.22)$$

e

$$w_j(\sigma') = 1. \quad (2.23)$$

Então,

$$\frac{w_j(\sigma)}{w_j(\sigma')} = \exp[-\beta \Delta E_j(\sigma)]. \quad (2.24)$$

Por outro lado, se $E(\sigma) > E(\sigma_j)$, temos:

$$w_j(\sigma) = 1 \quad (2.25)$$

e

$$w_j(\sigma') = \exp[-\beta \Delta E'_j], \quad (2.26)$$

onde $\Delta E'_j = E(\sigma) - E(\sigma^j) = -\Delta E_j(\sigma)$. Portanto:

$$\frac{w_j(\sigma)}{w_j(\sigma')} = \exp[-\beta \Delta E_j(\sigma)]. \quad (2.27)$$

2.4 Métodos

Aproximação de Campo Médio

As funções de estado que nos interessam são geralmente correlações de n sítios ($n = 1, 2, \dots, N$). Quando construímos as equações de evolução para a média dessas funções, surge a dependência de correlações de m sítios, $m > n$. Temos então, um conjunto de equações diferenciais acopladas, bastante difícil de solucionar. Um dos métodos ([9] e [10]) de solução usado em vários trabalhos ([11], [12] e [13]) e chamado de campo médio dinâmico [14], consiste em truncar esse conjunto de equações.

Na aproximação de ordem mais baixa, chamada de aproximação de campo médio simples, a probabilidade de um dado aglomerado de sítios é aproximada pelo produto das probabilidades de cada sítio. Todas as correlações entre sítios do aglomerado são desprezadas, ou seja:

$$P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N) = \prod_{i=1}^n P(\sigma_i).$$

No caso unidimensional, temos

$$P(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) = P(\sigma_{i-1}) \cdot P(\sigma_i) \cdot P(\sigma_{i+1}),$$

e no caso da rede quadrada temos, por exemplo,

$$\begin{pmatrix} & \sigma_4 & \\ \sigma_3 & \sigma_0 & \sigma_1 \\ & \sigma_2 & \end{pmatrix} = P(\sigma_0) \cdot P(\sigma_1) \cdot P(\sigma_2) \cdot P(\sigma_3) \cdot P(\sigma_4).$$

Nas aproximações de ordens superiores, são consideradas algumas flutuações, e um truncamento de ordem n consistirá em aproximarmos correlações de ordem $n+1$ em termos de correlações de ordem n . Vamos supor que os aglomerados de sítios (C) sobre os quais calculamos as correlações tenham um núcleo (A) e uma fronteira (B). A probabilidade de encontrarmos a configuração $\sigma_C = \{\sigma_i, i \in C\}$ é:

$$P(\sigma_C) = P(\sigma_A, \sigma_B) = P(\sigma_B | \sigma_A) \cdot P(\sigma_A),$$

onde $\sigma_B = \{\sigma_i, i \in B\}$ e $\sigma_A = \{\sigma_i, i \in A\}$. A aproximação de campo médio dinâmico consiste em desprezarmos as correlações entre os sítios de B na probabilidade condicional, ou seja,

$$P(\sigma_B|\sigma_A) = \prod_{i \in B} P(\sigma_i|\sigma_A).$$

No entanto,

$$P(\sigma_i|\sigma_A) = \frac{P(\sigma_i, \sigma_A)}{P(\sigma_A)},$$

então

$$P(\sigma_C) = P(\sigma_A) \cdot \prod_{i \in B} \frac{P(\sigma_i, \sigma_A)}{P(\sigma_A)}, \quad (2.28)$$

onde a produtória é sobre os sítios da fronteira, que na maioria das vezes é formada pelos primeiros vizinhos dos sítios do núcleo.

No caso $n = 2$, temos a aproximação de campo médio dinâmico de pares. Na rede unidimensional, considere a situação onde A contém um único sítio k e a fronteira contém os primeiros vizinhos de k , então:

$$P(\sigma_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}) = P(\sigma_k) \cdot \prod_{\delta=\pm 1} \frac{P(\sigma_{k+\delta}, \sigma_k)}{P(\sigma_k)} = \frac{P(\sigma_{k-1}, \sigma_k) \cdot P(\sigma_{k+1}, \sigma_k)}{P(\sigma_k)}.$$

E no caso, por exemplo, da rede quadrada, temos situação similar,

$$\Rightarrow P \begin{pmatrix} & \sigma_4 & \\ \sigma_3 & \sigma_0 & \sigma_1 \\ & \sigma_2 & \end{pmatrix} = \frac{P(\sigma_0, \sigma_1) \cdot P(\sigma_0, \sigma_2) \cdot P(\sigma_0, \sigma_3) \cdot P(\sigma_0, \sigma_4)}{P(\sigma_0)^3}.$$

O Método de Monte Carlo

No estudo de modelos de equilíbrio e não-equilíbrio, o que se objetiva em geral, são cálculos de médias de uma função de estado f no espaço de fase. Se o espaço de fase é discreto e o sistema tem uma distribuição estacionária $P_{est}(\sigma)$, então

$$\langle f(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} f(\sigma) P_{est}(\sigma). \quad (2.29)$$

Para modelos de equilíbrio, P_{est} é a distribuição de Gibbs, enquanto para modelos de não equilíbrio, P_{est} existe mas não é, em geral, conhecida. O método de Monte-Carlo ([15], [16] e [17]) estabelece que podemos estimar $\langle f(\sigma) \rangle$ por:

$$\langle f(\sigma) \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M f(\sigma_{(l)}), \quad (2.30)$$

onde $\sigma_{(l)}$ é o l -ésimo estado assumido pelo sistema e M é o número de estados gerados via simulação. O algoritmo geral do método de Monte Carlo pode ser esquematizado da seguinte forma:

1. *Condição Inicial*: inicialização dos sítios da rede com uma condição inicial;
2. *Sorteio de um sítio*: escolha aleatória de um sítio i ;
3. *Bloco de Transição*: aplicação das regras locais de um modelo específico, podendo acarretar ou não em uma nova configuração;
4. Os itens (2) e (3) são repetidos um número de vezes igual ao número de sítios do sistema. Esse número é chamado de passo de Monte Carlo (PMC);
5. *Armazenamento de Informações*: a cada PMC são armazenadas as informações contidas na rede, necessárias para calcular a média de funções de estado interessantes ao modelo.
6. Repetição dos itens (4) e (5) um número $M = Max$ de PMC's;
7. *Cálculo das médias*: a partir das informações armazenadas em (5) é efetuado o cálculo das médias sobre um número $(Max - M_0)$ de PMC's, onde M_0 PMC's são desconsiderados. Procedese assim em razão dos primeiros estados estarem fortemente correlacionados à condição inicial;
8. *Cálculo do Erro Estatístico*: o erro estatístico é calculado através da seguinte expressão:

$$\delta f = \left\{ \frac{k \sum_l f^2(\sigma_{(l)}) - (\sum_l f(\sigma_{(l)}))^2}{k^2(k-1)} \right\}^{1/2} \quad (2.31)$$

onde $k = Max - M_0$.

Teoria de Escala Finita

Nos sistemas magnéticos, o comprimento de correlação, ξ , é o tamanho típico de aglomerados de spins correlacionados, e diverge na temperatura crítica, T_c . No entanto, em sistemas finitos, onde se realizam as simulações de Monte Carlo, ξ não diverge, atingindo, no máximo, o comprimento linear, L , do sistema. As hipóteses de escala estabelecem que

a divergência de ξ é responsável pelo comportamento singular das grandezas físicas em relação a $T - T_c$.

A teoria de escala finita [18] possibilita a transição entre as escalas microscópica e macroscópica, fornecendo um meio para extrapolar para o limite termodinâmico, resultados provenientes de sistemas finitos. 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 .

Apesar da teoria de escala finita ter sido estabelecida para o estudo de transições de fase em modelos com reversibilidade microscópica, o método tem sido aplicado com sucesso a modelos de não-equilíbrio ([19], [20] e [21]).

Seja um sistema que apresenta transição de fase contínua em α_c , onde α é um parâmetro externo. Então, o comprimento de correlação, ξ , em sistemas infinitos diverge de acordo com

$$\xi \propto |\alpha_c - \alpha|^{-\nu}, \quad (2.32)$$

onde ν é o expoente crítico do comprimento de correlação.

Em um sistema infinito, uma grandeza Q se comporta, próximo a α_c , da seguinte forma:

$$Q(\alpha) \propto |\alpha_c - \alpha|^\theta.$$

De acordo com a teoria de escala finita ([22] e [23]), a correspondente grandeza, em sistema finito, apresenta o seguinte comportamento:

$$Q_L(\alpha) \propto L^{-y} \cdot \tilde{Q}\left(\frac{L}{\xi}\right),$$

onde $\tilde{Q}(x)$ é uma função de escala, suave e analítica na origem. Tomando-se o limite $L/\xi \rightarrow \infty$, temos

$$\tilde{Q}\left(\frac{L}{\xi}\right) \approx \left(\frac{L}{\xi}\right)^y,$$

e

$$Q_L(\alpha) \propto \xi^{-y} \propto |\alpha_c - \alpha|^{\nu y}.$$

Para recuperarmos (2.32), quando $\alpha = \alpha_c$, temos que ter $y = \theta/\nu$, o que implica em:

$$Q_L(\alpha) \sim \xi^{-\theta/\nu} \sim L^{-\theta/\nu},$$

já que $\xi \approx L$ em $\alpha = \alpha_c$. Então,

$$Q_L(\alpha) = L^{-\theta/\nu} \cdot \tilde{Q} \left(\frac{L}{\xi} \right). \quad (2.33)$$

É conveniente reescrevermos (2.33) de uma forma alternativa:

$$Q_L(\alpha) = L^{-\theta/\nu} \cdot \tilde{Q} (L^{1/\nu} |\alpha_c - \alpha|).$$

Assim, para $\alpha = \alpha_c$, temos

$$Q_L(\alpha_c) \sim L^{-\theta/\nu}.$$

Vamos considerar o parâmetro de ordem m que se comporta no limite termodinâmico e nas proximidades de α_c de acordo com

$$m(\alpha) \propto |\alpha_c - \alpha|^\beta. \quad (2.34)$$

Por outro lado, em um sistema finito de tamanho L , vamos definir m por

$$m_L = \langle |\eta| \rangle \quad (2.35)$$

onde $\eta = (\sum_i \sigma_i)/N$ e seu comportamento segue de acordo com as relações de escala finita descritas acima, ou seja,

$$m_L(\alpha) = L^{-\beta/\nu} \cdot \tilde{m} (L^{1/\nu} |\alpha_c - \alpha|),$$

onde $\tilde{m}(x)$ é uma função universal. Quando $\alpha = \alpha_c$, temos

$$m_L(\alpha_c) = L^{-\beta/\nu} \cdot \tilde{m}(0) \quad (2.36)$$

e

$$m_L(\alpha_c) \sim L^{-\beta/\nu}.$$

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

$$\chi_L = N \cdot (\langle \eta^2 \rangle_L - \langle \eta \rangle_L^2).$$

Em $\alpha = \alpha_c$, no sistema infinito, χ diverge segundo a expressão

$$\chi(\alpha) \propto |\alpha_c - \alpha|^{-\gamma}.$$

Já no sistema finito, o comportamento de χ segue de acordo com

$$\chi_L(\alpha) = L^{\gamma/\nu} \cdot \tilde{\chi}(L^{1/\nu} |\alpha_c - \alpha|),$$

onde $\tilde{\chi}(x)$ é uma função universal. Em $\alpha = \alpha_c$, $\chi_L(x)$ apenas atinge valores máximos proporcionais ao tamanho da rede

$$\chi_L(\alpha_c) = L^{\gamma/\nu} \cdot \tilde{\chi}(0). \quad (2.37)$$

e

$$(\chi_L)_{max} \sim L^{\gamma/\nu}.$$

Para determinarmos o valor de α_c nas simulações, torna-se conveniente usar o cumulante de quarta ordem reduzido

$$U_L = 1 - \frac{\langle \eta^4 \rangle_L}{3 \langle \eta^2 \rangle_L^2}. \quad (2.38)$$

Para $\alpha > \alpha_c$, $U_L = 0$; enquanto $U_L \approx 2/3$ para $\alpha < \alpha_c$. Em $\alpha = \alpha_c$, U_L converge para um ponto fixo U^* , ou seja, um valor universal independente do tamanho do sistema. Portanto, U_L escala da seguinte forma:

$$U_L(\alpha) = \tilde{U}(L^{1/\nu} |\alpha_c - \alpha|) \rightarrow U_L(\alpha = \alpha_c) = \tilde{U}(0) = U^* .$$

Se construirmos U_L em função de α para diferentes valores de L , as curvas originárias se interceptam em um único ponto, U^* , correspondente a α_c . Uma vez determinado α_c , para se obter β/ν e γ/ν tomamos o logaritmo de ambos os lados das equações (2.36) e (2.37):

$$\ln(m_L(\alpha_c)) = \ln \tilde{m}(0) - \frac{\beta}{\nu} \ln L \quad (2.39)$$

e

$$\ln(\chi_L(\alpha_c)) = \ln \tilde{\chi}(0) + \frac{\gamma}{\nu} \ln L, \quad (2.40)$$

e contruímos os gráficos de $\ln(m_L(\alpha_c))$ e $\ln(\chi_L(\alpha_c))$ versus $\ln L$. Por conseguinte, os coeficientes angulares das retas ajustadas aos pontos dos gráficos são uma estimativa para os expoentes β/ν e γ/ν .

No caso do modelo de Ising em duas dimensões, $U^* = 0.611$ [23], $\gamma = 1,75$, $\beta = 0,125$ e $\nu = 1$ [24]. Esses valores também foram encontrados em modelos de não-equilíbrio com simetria *up-down* em duas dimensões, tais como o votante majoritário isotrópico [19] e o autômato celular para descrição do sistema imunológico [21], dentre outros. Para esses modelos, o parâmetro de ordem é a grandeza m definida acima.

O parâmetro de ordem de modelos com estado absorvente, tais como o processo de contato [25], é dado por

$$\rho = \left\langle \frac{(\sum_i \sigma_i)}{N} \right\rangle. \quad (2.41)$$

Os valores do expoente crítico β para uma e duas dimensões são: $\beta \cong 0,277$ ([27] e [28]) $\beta \cong 0,585$ [27], e caracterizam os modelos da classe de universalidade da percolação direcionada nessas dimensões. A estimativa de β segue da aplicação da função logaritmo na equação (2.34):

$$\ln(\rho(\alpha)) = cte + \beta \ln(|\alpha_c - \alpha|). \quad (2.42)$$

O coeficiente angular da reta ajustada aos pontos do gráfico $\ln(\rho(\alpha))$ versus $\ln(|\alpha_c - \alpha|)$ é uma estimativa para o expoente β .

Capítulo 3

Modelos Irreversíveis: Modelos com simetria *up-down* e modelos com estado absorvente

Apresentamos neste capítulo quatro modelos com dinâmicas irreversíveis, fundamentais para o entendimento dos modelos propostos nos capítulos 4 e 5. Os modelos do votante e votante majoritário isotrópico são exemplos de modelos irreversíveis com simetria *up-down*, e são apresentados nas seções (3.1) e (3.2), respectivamente. Na sequência, nas seções (3.3) e (3.4), introduzimos os modelos de contato e A, exemplos de modelos irreversíveis com um estado absorvente.

3.1 Modelo do Votante

O modelo do votante foi introduzido independentemente por Clifford e Sudbury [29] e por Holley e Liggett [30]. Para definir o modelo, vamos considerar uma rede arbitrária e assumir que cada sítio esteja ocupado por um votante que pode assumir uma de duas opiniões, denotadas por $+1$ e -1 ($\sigma_i = \pm 1$). Segundo as regras do modelo, cada sítio mantém sua opinião durante um certo intervalo de tempo, após o qual assume a opinião de um de seus primeiros vizinhos de maneira aleatória. Se os sítios vizinhos têm todos a mesma opinião, o votante não muda de idéia. A evolução temporal do processo é regido por uma dinâmica de um sítio que apresenta simetria *up-down*, definida por

$$w_i(\sigma) = \frac{1}{2d} \sum_{\delta} |\sigma_{i+\delta}|, \quad (3.1)$$

onde d é a dimensão do sistema e a somatória é sobre os primeiros vizinhos com opinião contrária à opinião de i . Por exemplo, se $d = 1$, $\sigma_i = +1$, $\sigma_{i+1} = +1$ e $\sigma_{i-1} = -1$, então o sítio i pode mudar de opinião com probabilidade $1/2$, pois há apenas um sítio primeiro vizinho com opinião contrária a i .

Para exemplificarmos as regras do modelo, vamos considerar um aglomerado unidimensional $(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$, onde o sítio σ_i , assinalado em negrito, sofre a transição :

$$(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \xrightarrow{w_i(\sigma)} (\sigma_{i-1}, \sigma'_i, \sigma_{i+1})$$

$$(+1, +1, -1) \xrightarrow{1/2} (+1, -1, -1)$$

$$(-1, +1, -1) \xrightarrow{1} (-1, -1, -1)$$

$$(-1, -1, +1) \xrightarrow{1/2} (-1, +1, +1)$$

$$(+1, -1, +1) \xrightarrow{1} (+1, +1, +1).$$

Segundo ([14] e [25]), para $d \leq 2$ o processo descrito converge para dois estados estacionários absorventes. Um deles caracterizado pelo domínio completo de votantes com opinião $+1$ e o outro, pelo domínio completo de votantes com opinião -1 . Para $d \geq 3$, pode haver outros estados estacionários cujas características dependem da condição inicial.

3.2 Modelo do Votante Majoritário Isotrópico

O modelo do votante majoritário isotrópico ([25] e [26]) é definido em uma rede de N sítios que assumem os valores $+1$ e -1 ($\sigma_i = \pm 1$). Podemos interpretar uma configuração σ como um conjunto de variáveis de spin ou de indivíduos votantes cujas opiniões são descritas pelos valores $+1$ e -1 . A evolução temporal do sistema é regida por uma dinâmica de um sítio, definida pela probabilidade de transição $w_i(\sigma)$:

$$w_i(\sigma) = \frac{1}{2} \cdot [1 - \sigma_i(1 - 2q) \cdot S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})], \quad (3.2)$$

onde a soma é feita sobre os primeiros vizinhos do sítio i . A função $S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$ fornece o sinal de $a = \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}$. Se, por exemplo, a maioria dos primeiros vizinhos de um sítio i estão ocupados por -1 , então $S(a) = -1$. Se, por outro lado, a maioria dos primeiros vizinhos de i estão ocupados por $+1$, então $S(a) = +1$. Se $a = 0$, então $S(0) = 0$. O parâmetro q é a probabilidade de um dado votante decidir-se por opinião contrária à opinião da maioria de seus primeiros vizinhos. Em contrapartida, com probabilidade $1 - q$, o mesmo votante se alinha com a opinião majoritária. O parâmetro q pode ser confinado ao intervalo $0 \leq q \leq 1/2$, no qual existe a tendência das variáveis σ_i assumirem o mesmo valor, da mesma forma que em sistemas ferromagnéticos.

O parâmetro de ordem do sistema é a grandeza m apresentada na seção 2.4. Em duas dimensões, este modelo, no regime estacionário, tem uma fase ferromagnética, caracterizada por $m \neq 0$ para $0 \leq q \leq q_c$, sofrendo uma transição de fase contínua para uma fase paramagnética caracterizada por $m = 0$, em $q = q_c$. Além disso, para $q \geq 1 - q_c$ ocorre uma terceira fase, antiferromagnética. O estudo do modelo através da aproximação de campo médio dinâmico de pares resultou em $q_c = 5/37 \approx 0,135$ [11], uma quota superior para o valor real. As simulações de Monte Carlo do modelo em rede quadrada, aliadas à análise de teoria de escala finita, forneceram o valor numérico $q_c = 0,075 \pm 0,001$ [19], além de alcançar expoentes críticos em consonância aos do modelo de Ising de equilíbrio em duas dimensões, como argumenta a conjectura *up-down*, citada na introdução.

Irreversibilidade

A irreversibilidade do modelo do votante majoritário isotrópico pode ser verificada através do critério descrito na seção 2.3. Consideramos um aglomerado de sítios, que evolui seqüencialmente na trajetória fechada

$$A \longrightarrow B \longrightarrow C \longrightarrow D \longrightarrow A. \quad (3.3)$$

Seja A o estado inicial:

$$A = \begin{pmatrix} & +1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ & -1 & +1 \end{pmatrix},$$

onde o sítio assinalado em negrito é aquele que sofre a transição que dá origem ao estado B :

$$B = \begin{pmatrix} & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & +1 \\ & -1 & +1 \end{pmatrix}.$$

Da mesma forma, chegamos em C:

$$C = \begin{pmatrix} & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ & -1 & +1 \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

e em D:

$$D = \begin{pmatrix} & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \\ & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

A taxa com que o aglomerado sai de A e volta a A pelo caminho descrito em (3.3) é

$$\gamma_1 = w(B|A) \cdot w(C|B) \cdot w(D|C) \cdot w(A|D) = \frac{1}{2} \cdot q \cdot (1 - q)^2.$$

Enquanto que se o aglomerado faz o caminho inverso

$$A \longrightarrow D \longrightarrow C \longrightarrow B \longrightarrow A,$$

a taxa é

$$\gamma_2 = w(D|A) \cdot w(C|D) \cdot w(B|C) \cdot w(A|B) = \frac{1}{2} \cdot q^2 \cdot (1 - q)$$

dá qual se conclui que

$$\gamma_1 \neq \gamma_2.$$

Então, encontramos uma trajetória onde a condição (2.15) não é verificada. Portanto, o processo do votante majoritário não é reversível.

3.3 Modelo de Contato

O modelo de contato foi introduzido por Harris em 1974 [31] e pode ser interpretado como um modelo para uma epidemia. É um processo a tempo contínuo, definido numa rede de

N sítios, com $\sigma_i = 0, +1$. O valor 0 (zero) representa um sítio vazio ou um indivíduo saudável, enquanto o valor +1 (um) está associado ao sítio ocupado ou ao indivíduo infectado. Um indivíduo saudável fica doente com uma taxa proporcional ao número n de primeiros vizinhos doentes, ou seja, $n\lambda/2d$, onde $\lambda \geq 0$ e d é a dimensão do sistema. Por outro lado, um indivíduo doente se torna saudável espontaneamente com taxa igual a 1. Para exemplificarmos essas regras, vamos considerar um aglomerado unidimensional, $(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$, no qual o sítio assinalado em negrito é o que sofre a transição :

$$(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \xrightarrow{w_i(\sigma)} (\sigma_{i-1}, \sigma'_i, \sigma_{i+1})$$

$$(+1, \mathbf{0}, 0) \xrightarrow{\frac{\lambda}{2}} (+1, +1, 0)$$

$$(0, \mathbf{0}, +1) \xrightarrow{\frac{\lambda}{2}} (0, +1, +1)$$

$$(+1, \mathbf{0}, +1) \xrightarrow{\lambda} (+1, +1, +1)$$

$$(*, +1, *) \xrightarrow{1} (*, \mathbf{0}, *).$$

A dinâmica assim definida gera um processo irreversível com parâmetro de ordem igual à densidade de sítios ocupados, $\rho = \langle \sigma_k \rangle = P(+1)$, apresentando transição de fase em λ_c para $d \geq 1$. É uma transição de fase contínua que pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. Para $\lambda \leq \lambda_c$, o processo converge para um estado absorvente de zero; enquanto que para $\lambda > \lambda_c$, converge para um estado ativo, no qual ρ é diferente de zero.

O processo evolui segundo a equação mestra (2.6) e as equações de evolução de $\langle \sigma_k \rangle$ e $\langle \sigma_k \cdot \sigma_j \rangle$ são obtidas substituindo $T(\sigma_k) = 1 - \sigma_k$ em (2.9) e (2.10), respectivamente:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = \langle (1 - 2\sigma_k) \cdot w_j(\sigma) \rangle \quad (3.5)$$

e

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_j \cdot \sigma_{j+1} \rangle = \langle \sigma_{j+1} \cdot (1 - 2\sigma_j) \cdot w_j(\sigma) + \sigma_j \cdot (1 - 2\sigma_{j+1}) \cdot w_{j+1}(\sigma) \rangle, \quad (3.6)$$

com:

$$w_i(\sigma) = \sigma_i + \frac{\lambda}{2} \cdot (1 - \sigma_i) \cdot \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}, \quad (3.7)$$

onde a soma se estende sobre os primeiros vizinhos do sítio i .

A partir de (3.5), podemos obter a equação de evolução de $P(+1)$

$$\frac{dP(+1)}{dt} = \lambda \cdot P(+10) - P(+1),$$

onde $P(+10) = \langle \delta(\sigma_j, +1) \cdot \delta(\sigma_{j+1}, 0) \rangle$. Usando a aproximação de campo médio simples, definida na seção 2.4:

$$P(+10) = P(+1) \cdot P(0),$$

junto ao fato de

$$P(+1) + P(0) = 1 \Rightarrow P(0) = 1 - \rho, \quad (3.8)$$

alcançamos

$$\frac{d\rho}{dt} = \lambda \cdot \rho(1 - \rho) - \rho. \quad (3.9)$$

As soluções estacionárias de (3.9) são $\rho = 0$ e $\rho = (\lambda - 1)/\lambda$. A primeira solução é estável para $\lambda < \lambda_c$ e caracteriza o estado absorvente. A segunda solução caracteriza o estado ativo e é estável para $\lambda > \lambda_c$. A análise de estabilidade fornece $\lambda_c = 1$, uma quota inferior para o valor real para $d = 1$ e $d = 2$.

A aproximação de campo médio de pares [1] forneceu $\lambda_c = 2$ para cadeia linear, com número de coordenação ($z = 2$), e $\lambda_c = 4/3 \approx 1,33$ para a rede quadrada com z igual a 4. Expansões em séries temporais [28] alcançaram $\lambda_c = 3,298$ para a cadeia linear. Por outro lado, expansões em séries temporais e simulações ([27] e [28]) forneceram $\lambda_c = 1,647$ para rede quadrada.

3.4 Modelo A

Modelos para reações em superfícies catalíticas foram intensivamente estudados nas últimas décadas. Um desses modelos, idealizado por Ziff, Gulari e Barshad (modelo ZGB, [33]) descreve alguns aspectos cinéticos da reação de oxidação do monóxido de carbono em superfícies catalíticas ($CO + O \rightarrow CO_2$). O modelo ZGB apresenta duas transições de fase, uma contínua e outra descontínua. A transição de fase contínua ocorre entre um estado ativo, caracterizado por reações freqüentes, e um estado absorvente, caracterizado pela ocupação total e permanente da rede por uma única espécie de partícula, o oxigênio. Para estudar o ponto crítico do sistema, Dickman e Burshka [34] idealizaram um modelo simplificado, em uma dimensão, análogo ao modelo de contato e o chamaram de modelo A. Porém, vamos introduzir o modelo A sem entrarmos em maiores detalhes do modelo ZGB. Para tanto, é interessante considerar uma abordagem ([35], [36]) que considera o modelo A como um modelo simplificado para a evolução de uma infecção. Similar ao processo de contato, no modelo A a variável σ_i assume os valores +1 e 0 e um indivíduo infectado ($\sigma_i = 1$) fica saudável espontaneamente com taxa 1. Contudo, em contraste com o modelo de contato, um indivíduo saudável ($\sigma_i = 0$) fica infectado com taxa λ , se houver pelo menos um indivíduo doente dentre os sítios primeiros vizinhos. Se considerarmos o mesmo aglomerado unidimensional, $(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$, os casos citados acima ficam exemplificados por

$$(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \xrightarrow{w_i(\sigma)} (\sigma_{i-1}, \sigma'_i, \sigma_{i+1})$$

$$(+1, 0, 0) \xrightarrow{\lambda} (+1, +1, 0)$$

$$(0, 0, +1) \xrightarrow{\lambda} (0, +1, +1)$$

$$(+1, 0, +1) \xrightarrow{\lambda} (+1, +1, +1)$$

$$(*, +1, *) \xrightarrow{1} (*, 0, *).$$

O parâmetro de ordem do sistema é a densidade, ρ , de sítios ocupados por +1. A densidade está associada à transição de fase contínua pela qual passa o sistema em λ_c .

Assim como no modelo de contato, essa transição de fase se dá entre um estado ativo, no qual os sítios são continuamente contaminados, para um estado absorvente de 0 (zero), onde $\sigma_i = 0$ para qualquer sítio da rede.

No trabalho de Dickman e Burschka [34], o modelo A em uma dimensão foi estudado a partir de aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo. A aproximação de campo médio simples forneceu $\lambda_c = 0,5$, enquanto a aproximação de pares chegou a $\lambda_c = 1,0$, e finalmente a aproximação de trincas forneceu $\lambda_c = 1,25$. As simulações de Monte Carlo alcançaram $\lambda_c \approx 1,739$ e $\beta \approx 0,28$, mostrando que o modelo pertence à classe de universalidade da percolação direcionada.

Capítulo 4

Modelo A com simetria *up-down*

Neste capítulo, descrevemos a primeira dinâmica que propusemos com o intuito de explorarmos modelos com simetria *up-down* e um estado absorvente. A dinâmica é descrita na seção 4.1, enquanto na seção 4.2 contruímos as equações de evolução em cadeias lineares. A essas equações aplicamos aproximação de campo médio simples e de pares cujos resultados se encontram nas seções 4.3 e 4.4. Na sequência, na seção 4.5, apresentamos os resultados das simulações de Monte Carlo do modelo. Na seção 4.6 apresentamos a relação entre o modelo A com simetria *up-down* e o modelo do votante, conjuntamente aos resultados das simulações de Monte Carlo do modelo em redes quadradas.

4.1 Descrição do modelo

O modelo foi idealizado a partir do autômato celular criado por Tomé e Drugowich de Felício [37] para descrever o sistema imunológico. No entanto, a evolução temporal do modelo segue um processo a tempo contínuo com mudança de um único sítio a cada transição, ao contrário de um autômato celular que evolui segundo um processo a tempo discreto com atualização simultânea das variáveis σ_i . E diferentemente do autômato de Tomé e Drugowich de Felício [37], através da dinâmica proposta, o sistema pode evoluir para um estado estacionário absorvente.

A variável σ_i pode assumir três valores: $+1$ e -1 , correspondente às situações em que o sítio está ocupado, e 0 , quando o sítio está vazio. De acordo com as regras deste modelo, um sítio vazio ($\sigma_i = 0$) recebe $+1$ (-1) com taxa λ , se os primeiros vizinhos contiverem uma maioria de $+1$ (-1). Porém, se os últimos forem formados por um número igual de $+1$ e -1 , então o sítio vazio recebe $+1$ com taxa $\lambda/2$ e -1 com taxa $\lambda/2$. Por outro lado, um sítio contendo $+1$ e -1 fica desocupado com taxa 1 . Para exemplificarmos as regras, vamos considerar um aglomerado unidimensional de três sítios, $(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$, com transições ocorrendo no sítio σ_i , assinalado em negrito. As situações descritas acima

ficam explicitadas por

$$(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \xrightarrow{w_i(\sigma)} (\sigma_{i-1}, \sigma'_i, \sigma_{i+1})$$

$$(+1, 0, +1) \xrightarrow{\lambda} (+1, +1, +1)$$

$$(0, 0, +1) \xrightarrow{\lambda} (0, +1, +1)$$

$$(-1, 0, -1) \xrightarrow{\lambda} (-1, -1, -1)$$

$$(0, 0, -1) \xrightarrow{\lambda} (0, -1, -1)$$

$$(+1, 0, -1) \longrightarrow \begin{cases} \xrightarrow{\lambda/2} (+1, +1, -1) \\ \xrightarrow{\lambda/2} (+1, -1, -1) \end{cases}$$

$$(*, +1, *) \xrightarrow{1} (*, 0, *)$$

$$(*, -1, *) \xrightarrow{1} (*, 0, *).$$

No autômato celular de Tomé e Drugowich de Felício [37], um sítio contendo 0 recebe +1 (-1) com uma certa probabilidade, mesmo que todos os primeiros vizinhos estejam desocupados. No modelo novo, se um sítio vazio ($\sigma_i = 0$) não tem vizinhos ocupados, não há mudança, gerando um estado absorvente de zero para $\lambda < \lambda_c$. A partir de uma observação mais detalhada da dinâmica, percebe-se que o modelo novo se baseia numa espécie de mapeamento do valor +1 do modelo A [34] nos valores +1 e -1. Como vamos ver adiante, as regras do modelo possuem simetria *up-down* e esperaríamos que além de transição ativo-absorvente, houvesse transição de fase contínua da classe de universalidade do modelo de Ising, como indica a conjectura *up-down*.

Definição formal do modelo

Para definirmos formalmente a dinâmica do modelo em cadeias lineares com número de coordenação igual a 2, tomamos a função s_i aplicada nos primeiros vizinhos do sítio i , que sofre transição. Vamos introduzir a grandeza s_i da seguinte forma:

$$s_i(\sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\sigma'_{i+1} + \sigma'_{i-1}| > 0 \\ 0, & \text{se } \sigma'_{i+1} + \sigma'_{i-1} = 0 \quad \text{e } |\sigma'_{i+1}| = |\sigma'_{i-1}| \neq 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Então a taxa de transição segue a seguinte expressão:

$$w_i(\sigma') = \lambda \cdot \delta(\sigma'_i, 0) \left[\delta(s_i, 1) + \frac{1}{2} \cdot \delta(s_i, 0) \right] + \delta(|\sigma'_i|, 1) \quad (4.2)$$

Se efetuarmos a transformação $\sigma_j \rightarrow -\sigma_j$, $\forall j$, então

$$s_i(-\sigma'_{i+1}, -\sigma'_{i-1}) = s_i(\sigma'_{i+1}, \sigma'_{i-1}) \quad (4.3)$$

e

$$w_i(\sigma')_{(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i)} = \lambda \cdot \delta(-\sigma'_i, 0) \left[\delta(s_i, 1) + \frac{1}{2} \cdot \delta(s_i, 0) \right] + \delta(|-\sigma'_i|, 1) = w_i(\sigma'),$$

mostrando que as regras do modelo apresentam simetria *up-down*. Por outro lado, a irreversibilidade do processo pode ser constatada se tomarmos a seguinte trajetória fechada, onde o sítio assinalado em negrito é aquele que sofre a transição :

$$\begin{aligned} A = (-1 \ 0 \ -1 \ +1) &\rightarrow B = (-1 \ 0 \ 0 \ +1) \rightarrow \\ \rightarrow C = (-1 \ -1 \ 0 \ +1) &\rightarrow D = (-1 \ -1 \ -1 \ +1) \rightarrow \\ \rightarrow A = (-1 \ 0 \ -1 \ +1), & \end{aligned} \quad (4.4)$$

que ocorre com taxa

$$\gamma_1 = w(B|A) \cdot w(C|B) \cdot w(D|C) \cdot w(A|D) = \lambda \cdot \frac{\lambda}{2}. \quad (4.5)$$

Contudo, o sentido inverso da trajetória

$$A \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow A$$

ocorre com taxa

$$\gamma_2 = w(D|A) \cdot w(C|D) \cdot w(B|C) \cdot w(A|B) = \lambda \cdot 1 \cdot 1 \cdot 0 = 0. \quad (4.6)$$

Portanto, $\gamma_1 \neq \gamma_2$ e pelo critério da seção 2.3 o processo é irreversível.

4.2 Construção das equações de evolução

O processo evolui segundo uma dinâmica de um sítio e portanto $P(\sigma, t)$ se desenvolve segundo a equação mestra (2.6), desenvolvida na seção 2.1. Dado que $T(\alpha) = 1 - |\alpha|$ e utilizando as equações (2.11) e (2.13), vamos construir as equações de evolução das densidades médias de $+1$ e -1 na rede, assim como de médias de funções de correlação de dois sítios.

- Densidade média de sítios no estado $+1$: $P(+1) = \langle \delta(\sigma_k, +1) \rangle$.

Substituindo $\alpha = 1$ e $T(\alpha) = 0$ em (2.11), temos

$$\frac{dP(+1)}{dt} = \langle [\delta(\sigma_k, 0) - \delta(\sigma_k, +1)] \cdot w_k(\sigma) \rangle.$$

Considerando todas as configurações possíveis do sistema e a dinâmica descrita na equação (4.2), chegamos finalmente a:

$$\frac{dP(+1)}{dt} = \lambda \cdot P(+10) + \frac{\lambda}{2} \cdot P(+1 \ 0 \ 0) + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0 \ 0 \ +1) - P(+1) \quad (4.7)$$

- Densidade média de sítios no estado -1 : $P(-1) = \langle \delta(\sigma_k, -1) \rangle$

Da mesma forma que no caso anterior

$$\frac{dP(-1)}{dt} = \langle [\delta(\sigma_k, 0) - \delta(\sigma_k, -1)] \cdot w_k(\sigma) \rangle.$$

Então

$$\frac{dP(-1)}{dt} = \lambda \cdot P(-1 \ 0) + \frac{\lambda}{2} \cdot P(-1 \ 0 \ 0) + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0 \ 0 \ -1) - P(-1) . \quad (4.8)$$

- Densidade média de sítios vizinhos no mesmo estado, +1:

$$P(+1 \ +1) = \langle \delta(\sigma_k, +1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, +1) \rangle$$

Substituindo $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ e $T(\alpha_1) = T(\alpha_2) = 0$ em (2.13), alcançamos:

$$\begin{aligned} \frac{dP(+1 \ +1)}{dt} = & \langle [\delta(\sigma_k, 0) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, +1) - \delta(\sigma_k, 1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, +1)] \cdot w_k(\sigma) + \\ & [\delta(\sigma_k, +1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, 0) - \delta(\sigma_k, +1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, +1)] \cdot w_{k+1}(\sigma) \rangle . \end{aligned}$$

Então

$$\frac{dP(+1 \ +1)}{dt} = \lambda P(+1 \ 0) + \lambda P(+1 \ 0 \ 0) + \lambda P(+1 \ 0 \ +1) - 2P(+1 \ +1) . \quad (4.9)$$

- Densidade média de sítios vizinhos no mesmo estado, -1:

$$P(-1 \ -1) = \langle \delta(\sigma_k, -1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1) \rangle .$$

Fazendo a substituição de $\alpha_1 = \alpha_2 = -1$ e $T(\alpha_1) = T(\alpha_2) = 0$ em (2.13), encontramos:

$$\begin{aligned} \frac{dP(-1 \ -1)}{dt} = & \langle [\delta(\sigma_k, 0) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1) - \delta(\sigma_k, -1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1)] \cdot w_k(\sigma) + \\ & [\delta(\sigma_k, -1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, 0) - \delta(\sigma_k, -1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1)] \cdot w_{k+1}(\sigma) \rangle . \end{aligned}$$

Então

$$\frac{dP(-1 \ -1)}{dt} = \lambda P(-1 \ 0) + \lambda P(-1 \ 0 \ 0) + \lambda P(-1 \ 0 \ -1) - 2P(-1 \ -1) . \quad (4.10)$$

- Densidade média de sítios vizinhos nos estados +1 e -1:

$$P(-1+1) = \langle \delta(\sigma_k, +1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1) \rangle.$$

Efetuada a substituição de $\alpha_1 = -1$, $\alpha_2 = 1$ e $T(\alpha_1) = T(\alpha_2) = 0$ em (2.13), temos

$$\frac{dP(+1-1)}{dt} = \langle [\delta(\sigma_k, 0) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1) - \delta(\sigma_k, +1) \cdot \delta(\sigma_{k+1}, -1)] \cdot w_k(\sigma) \rangle.$$

Então,

$$\frac{dP(+1-1)}{dt} = \frac{\lambda}{2} P(+1 0 -1) - P(+1 -1). \quad (4.11)$$

- Densidade média total de sítios nos estados +1 e -1:

$$\rho = P(+1) + P(-1).$$

Temos assim

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{dP(+1)}{dt} + \frac{dP(-1)}{dt},$$

e desta forma

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & \lambda[P(+1 0) + P(-1 0)] + \frac{\lambda}{2} \cdot [P(+1 00) + P(-1 0 0)] \\ & + \frac{\lambda}{2} \cdot [P(0 0 +1) + P(0 0 -1)] - [P(+1) + P(-1)] \end{aligned} \quad (4.12)$$

- Magnetização : $m = P(+1) - P(-1)$.

Temos

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dP(+1)}{dt} - \frac{dP(-1)}{dt},$$

portanto

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} = & \lambda[P(+10) - P(-10)] + \frac{\lambda}{2} \cdot [P(+100) - P(-100)] \\ & + \frac{\lambda}{2} \cdot [P(0 0 +1) - P(0 0 -1)] - [P(+1) - P(-1)] \end{aligned} \quad (4.13)$$

4.3 Aproximação de campo médio simples

Aplicando a aproximação de campo médio simples descrita na seção 2.4 às equações (4.12) e (4.13), temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & \lambda \cdot P(0) \cdot [P(+1) + P(-1)] + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0)^2 \cdot [P(+1) + P(-1)] \\ & + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0)^2 \cdot [P(+1) + P(-1)] - [P(+1) + P(-1)] \end{aligned} \quad (4.14)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} = & \lambda \cdot P(0) \cdot [P(+1) - P(-1)] + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0)^2 \cdot [P(+1) - P(-1)] \\ & + \frac{\lambda}{2} \cdot P(0)^2 \cdot [P(+1) - P(-1)] - [P(+1) - P(-1)], \end{aligned} \quad (4.15)$$

mas

$$P(+1) + P(-1) + P(0) = 1 \Rightarrow P(0) = 1 - \rho ,$$

então

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho \cdot [\lambda \cdot (1 - \rho) \cdot (2 - \rho) - 1] \quad (4.16)$$

$$\frac{dm}{dt} = m \cdot [\lambda \cdot (1 - \rho) \cdot (2 - \rho) - 1] . \quad (4.17)$$

Análise de Estabilidade:

Os pontos fixos (soluções estacionárias) de (4.16) são dados por

$$\begin{cases} \rho_1 = 0, \text{ ou} \\ \rho_2 = \frac{(3 \cdot \lambda - \sqrt{\lambda^2 + 4\lambda})}{2\lambda} \end{cases}$$

A análise de estabilidade linear das soluções mostrou ρ_1 ser estável para $\lambda \leq 0,5$, ρ_2 estável para $\lambda \geq 0,5$ e portanto $\lambda_c = 0,5$, em consonância com o valor encontrado na

literatura [34] através da aproximação de campo médio simples. A figura 4.1 mostra o gráfico ρ versus λ .

Por outro lado, de (4.17) temos

$$\frac{dm}{dt} = 0 \Leftrightarrow m = 0$$

e não temos como tirar informações sobre a região de estabilidade de m .

Figura 4.1: Gráfico da densidade (ρ) versus λ obtido através da aproximação de campo médio simples.

4.4 Aproximação de campo médio de pares

Aplicar a aproximação de campo médio de pares implica na solução de um sistema de equações diferenciais envolvendo funções de correlações de 1 e 2 sítios. Considerando os vínculos entre essas funções, dados por

$$\begin{aligned} P(+1) &= P(+1+1) + P(+1-1) + P(+10) \\ P(-1) &= P(-1-1) + P(-1+1) + P(-10) \\ P(0) &= P(0+1) + P(0-1) + P(00), \end{aligned} \quad (4.18)$$

concluimos que um conjunto de cinco funções é suficiente para descrever o sistema. Escolhemos o conjunto formado por $P(+1)$, $P(-1)$, $P(+1+1)$, $P(-1-1)$ e $P(-1+1)$, cujas equações de evolução são dadas respectivamente por (4.7), (4.8), (4.9), (4.10) e (4.11). Aplicando finalmente a aproximação de campo médio de pares nessas equações, chegamos a

$$\frac{dP(+1)}{dt} = \lambda \cdot P(+10) + \lambda \cdot \frac{P(+10)P(00)}{P(0)} - P(+1), \quad (4.19)$$

$$\frac{dP(-1)}{dt} = \lambda \cdot P(-10) + \lambda \cdot \frac{P(-10)P(00)}{P(0)} - P(-1), \quad (4.20)$$

$$\frac{dP(+1+1)}{dt} = \lambda P(+10) + \lambda \cdot P(+10) \cdot \left[\frac{P(00) + P(+10)}{P(0)} \right] - 2P(+1+1), \quad (4.21)$$

$$\frac{dP(-1-1)}{dt} = \lambda P(-10) + \lambda \cdot P(-10) \cdot \left[\frac{P(00) + P(-10)}{P(0)} \right] - 2P(-1-1) \quad (4.22)$$

e

$$\frac{dP(+1-1)}{dt} = \frac{\lambda}{2} \cdot \frac{P(+10)P(-10)}{P(0)} - P(+1-1). \quad (4.23)$$

Usando os vínculos (4.18), fizemos a integração numérica das equações acima e encontramos apenas a transição ativo-absorvente. Essa transição fica clara a partir da expressão analítica que encontramos para ρ , mediante análise de estabilidade, ou seja,

$$\rho = \begin{cases} 0, & \text{estável se } \lambda < 1 \\ \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 + \lambda - 1}, & \text{estável se } \lambda > 1, \end{cases} \quad (4.24)$$

portanto $\lambda_c=1$, de acordo com o valor encontrado na literatura para aproximação de campo médio de pares do modelo A unidimensional [34]. A figura 4.2 mostra ρ versus λ .

Figura 4.2: Gráfico da densidade (ρ) versus λ obtido através de aproximação de campo médio de pares para dimensão 1.

4.5 Simulações de Monte Carlo

O algoritmo

Na simulação do modelo A com simetria *up-down* utilizamos o fato de $w_i(\sigma) \Delta t$ ser a probabilidade de ocorrer uma transição num intervalo de tempo pequeno Δt [5]. Nesse sentido, na construção do bloco de transição do modelo consideramos $\lambda \cdot \Delta t = p$ e $1 \cdot \Delta t = r$, com $\lambda = p/r$. Fazendo uso novamente do aglomerado $(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$, os casos que temos que levar em conta na elaboração do algoritmo são os seguintes:

$$(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \xrightarrow{w_i(\sigma) \cdot \Delta t} (\sigma_{i-1}, \sigma'_i, \sigma_{i+1})$$

$$(+1, 0, +1) \xrightarrow{\lambda \Delta t = p} (+1, +1, +1)$$

$$(0, 0, +1) \xrightarrow{\lambda \Delta t = p} (0, +1, +1)$$

$$(-1, 0, -1) \xrightarrow{\lambda \Delta t = p} (-1, -1, -1)$$

$$(0, 0, -1) \xrightarrow{\lambda \Delta t = p} (0, -1, -1)$$

$$(+1, 0, -1) \rightarrow \begin{cases} \xrightarrow{\frac{\lambda \Delta t = r}{2}} (0, +1, -1) \\ \xrightarrow{\frac{\lambda \Delta t = r}{2}} (0, -1, -1) \end{cases}$$

$$(*, +1, *) \xrightarrow{1 \Delta t = r} (*, 0, *)$$

Para explicitarmos o algoritmo, vamos considerar as seguintes variáveis:

- ξ , um número aleatório gerado uniformemente no intervalo $[0,1]$;
- i , um sítio escolhido aleatoriamente;

- $vz = \sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}$, tal que:
 - * se $vz > 0$ ($vz < 0$), então i tem uma maioria de sítios primeiros vizinhos com $+1$ (-1);
 - * se $vz = 0$, então i tem igual número de sítios com $+1$ e -1 .
- e $v = |\sigma_{i+1}| + |\sigma_{i-1}|$, que conta o número de sítios primeiros vizinhos que assumem valores diferentes de zero. Então:
 - * $v \neq 0$ significa que i tem pelo menos um primeiro vizinho ocupado,
 - * e $v = 0$ significa que os primeiros vizinhos de i estão desocupados.

Portanto, o bloco de transição do modelo se estrutura da seguinte forma:

- ★ se o sítio i não está ocupado ($\sigma_i = 0$), ($v \neq 0$) e ($\xi < p$) podem acontecer três casos:

1. se ($vz > 0$), então o sítio i recebe $+1$ ($\sigma_i = +1$)
2. caso contrário, se ($vz < 0$), então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)
3. ou ainda se, ($vz = 0$), temos duas situações :

- se ($\xi < p/2$), então o sítio i recebe $+1$ ($\sigma_i = +1$);

- caso contrário, se ($p/2 \leq \xi \leq p$), então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

- ★ caso contrário se o sítio i está ocupado por $+1$ ou -1 ($\sigma_i = \pm 1$) temos :

- se ($\xi < r$), então o sítio i recebe 0 ($\sigma_i = 0$).

Resultados

Simulamos o processo em cadeias unidimensionais de tamanho N , $10^4 \leq N \leq 4 \cdot 10^4$ com condições periódicas de contorno e usando diferentes condições iniciais. Fixamos $p = 1,0$ e deixamos $r = 1/\lambda$ variar. Verificamos o comportamento das médias amostrais da densidade (ρ), da magnetização (m_L), da susceptibilidade (χ_L) e do cumulante reduzido de quarta ordem (U_L). A densidade atingiu o estado estacionário relativamente rápido e o número de passos de Monte Carlo, necessários para uma boa amostragem, cresceu na medida que nos aproximávamos do estado absorvente. Verificamos que o tempo de correlação entre amostragens pode ser tomado igual a 1 PMC para $\lambda > \lambda_c$, sem nenhuma alteração nos erros. Contudo, próximo a λ_c o tempo de correlação usado foi da ordem de 50 PMC's, região em que o processo é muito sensível em relação a mudanças nessa grandeza.

A transição do estado absorvente para o estado ativo ocorreu em $r_c \approx 0,575$ ($\lambda_c \approx 1,739$), de acordo com o resultado encontrado na literatura [34]. A figura 4.3 mostra o gráfico ρ versus λ . Encontramos $\beta \approx 0,29$ a partir de regressão linear dos pontos do gráfico $-\ln \rho$ versus $\ln |r - r_c|$ que pode ser visto na figura 4.4.

O estado estacionário ativo ($\lambda \geq \lambda_c$) ficou caracterizado por domínios formados por um único tipo de partícula. Ou seja, no regime estacionário temos $m = P(+1)$, isto é, m é igual à densidade de $+1$ na rede; ou $m = P(-1)$, isto é, m é igual à densidade de -1 na rede, implicando em $m = \rho$. Portanto, podemos dizer, em última instância, que o modelo A com simetria *up-down* apresenta um estado ativo de caráter ferromagnético. Estes resultados foram encontrados a partir de simulações em redes de tamanho entre 1000 e 10.000, usando da ordem de $2 \cdot 10^6$ PMC's, para valores de λ entre 5 e 10 e com cadeias inicialmente completas por $+1$'s e -1 's, distribuídos igualmente de maneira aleatória. Cadeias desse tamanho ficam sempre na iminência de caírem no estado absorvente por isso não conseguimos verificar o comportamento ferromagnético próximo a λ_c . Para tanto teríamos que usar cadeias maiores acarretando em um aumento sensível no número de PMC's. Por outro lado, para valores de $\lambda > 10$ com a condição inicial descrita, o tempo de simulação necessário para que o processo alcançasse o estado estacionário era da ordem da 10^7 . No entanto, para condições iniciais com uma densidade razoável de 0's, o tempo de convergência foi relativamente menor. A análise da dependência do modelo em relação a esses fatores é uma questão em aberto neste trabalho, sendo que a próxima seção, que relaciona este modelo ao modelo do votante, pode elucidar alguns dos resultados fornecidos pelas simulações.

Figura 4.3: Gráfico da densidade (ρ) versus λ obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo A com simetria *up-down* em uma dimensão.

Figura 4.4: Gráfico de $-\ln(\rho)$ versus $-\ln(|r - r_c|)$ construído para determinação do expoente crítico β , para o caso unidimensional.

4.6 Análise de resultados baseada na relação entre o modelo A com simetria *up-down* e o modelo do votante

Os resultados das simulações numéricas nos levaram a suspeitar que a dinâmica do modelo A com simetria *up-down* poderia estar relacionada à dinâmica do modelo do votante (seção 3.1), já que este, no regime estacionário e para $d \leq 2$, somente apresenta estados absorventes de $+1$ ou de -1 . Poderíamos dizer que na prescrição do modelo A com simetria *up-down*, subjaz a dinâmica do modelo do votante. Essa afirmação pode ficar mais clara através da seguinte tabela comparativa.

	Modelo do Votante unidimensional	Modelo A com simetria up-down unidimensional
1	$(+1, +1, +1)$ $\sigma_i = +1$ não pode mudar para -1	$(+1, +1, +1)$ $\sigma_i = +1$ não pode $(+1, +1, 0)$ mudar para -1 $(0, +1, +1)$
2	$(-1, +1, -1) \xrightarrow{1} (-1, -1, -1)$	$(-1, +1, -1) \xrightarrow{1} (-1, 0, -1) \xrightarrow{1, \lambda} (-1, -1, -1)$ $(-1, +1, 0) \xrightarrow{1} (-1, 0, 0) \xrightarrow{1, \lambda} (-1, -1, 0)$
3	$(-1, +1, +1) \xrightarrow{1, \frac{1}{2}} (-1, -1, +1)$ $(+1, -1, -1) \xrightarrow{1, \frac{1}{2}} (+1, +1, -1)$	$(-1, +1, +1) \xrightarrow{1} (-1, 0, +1) \xrightarrow{\lambda, \frac{1}{2}} (-1, -1, +1)$ $(+1, -1, -1) \xrightarrow{1} (+1, 0, -1) \xrightarrow{\lambda, \frac{1}{2}} (+1, +1, -1)$
4	$(-1, -1, -1)$ $\sigma_i = -1$ não pode mudar para $+1$	$(-1, -1, -1)$ $\sigma_i = -1$ não pode $(-1, -1, 0)$ mudar para $+1$ $(0, -1, -1)$
5	$(+1, -1, +1) \xrightarrow{1} (+1, +1, +1)$	$(+1, -1, +1) \xrightarrow{1} (+1, 0, +1) \xrightarrow{1, \lambda} (+1, +1, +1)$ $(+1, -1, 0) \xrightarrow{1} (+1, 0, 0) \xrightarrow{1, \lambda} (+1, +1, 0)$

Quadro comparativo: modelo do votante e modelo A com simetria *up-down*, em dimensão 1.

Para exemplificarmos as situações descritas no quadro acima, vamos considerar um sítio i contendo $+1$ (-1). Se tomarmos a seguinte configuração

$$(+1, +1, \underline{+1}, -1), \quad (4.25)$$

onde i está em negrito e o sítio assinalado sofre uma transição para -1 . Temos então, a

seguinte sequência de transições :

$$(+1 , +1 , \underline{+1} , -1) \xrightarrow{1/2} (+1 , +1 , -1 , -1) \xrightarrow{1/2} (+1 , -1 , -1 , -1) .$$

A transição do sítio assinalado exemplifica a situação 3 do quadro comparativo, no caso do modelo do votante. Na situação correspondente para o modelo A com simetria *up-down*, vamos tomar a mesma configuração acima (4.25). Para que i venha a conter -1 , pelo menos quatro transições devem ocorrer: um dos primeiros vizinhos (sublinhado) sofre uma transição para 0 e em seguida outra para -1 ; na sequência, i sofre uma transição para 0 e em seguida outra para -1 :

$$\begin{aligned} (+1 , +1 , \underline{+1} , -1) &\xrightarrow{1} (+1 , +1 , \underline{0} , -1) \xrightarrow{\lambda/2} (+1 , +1 , \underline{-1} , -1) \xrightarrow{1} \\ &\xrightarrow{1} (+1 , 0 , -1 , -1) \xrightarrow{\lambda/2} (+1 , -1 , -1 , -1) . \end{aligned}$$

As transições do sítio sublinhado exemplificam, por sua vez, a situação 3 do quadro comparativo no caso do modelo A com simetria *up-down*. Tanto para um modelo como para o outro, o sistema sai de uma configuração, idêntica para ambos, e por etapas diferentes, alcança outra configuração, também idêntica para ambos. A diferença nas etapas reside na necessidade da intermediação do 0 (zero) no caso do modelo A com simetria *up-down*. O 0 (zero) atua como intermediário na transição de estado do sítio i , de $+1$ para -1 ou vice-versa. É através do 0 (zero) que a dinâmica do votante pode agir. Contudo, as taxas de transição são diferentes, induzindo contrastes no tempo médio de permanência num estado e na frequência das mudanças.

Baseados na relação entre os modelos, exposta acima, podemos inferir que o modelo A com simetria *up-down* também pode convergir para estados estacionários absorventes de $+1$ ou de -1 para $\lambda > \lambda_c$, de maneira semelhante ao que ocorre para o modelo do votante. Essa inferência explicaria os resultados, para dimensão um, encontrados nas simulações de Monte Carlo que não foram, por sua vez, previstos pelas aproximações de campo médio simples e de pares.

Para dimensão dois, estudamos o modelo A com simetria *up-down* apenas através de simulações de Monte Carlo, usando redes quadradas regulares de tamanho L , $10 \leq L \leq 80$ e algoritmo similar ao descrito na seção 4.5. Da mesma forma que no caso unidimensional, encontramos apenas estados absorventes de $+1$ e -1 para $\lambda \geq \lambda_c$. Ou seja, encontramos apenas um estado ativo de caráter ferromagnético e analogamente, m assumiu a mesma forma da densidade, ρ .

A figura 4.5 mostra ρ versus λ . Uma estimativa para o valor real de λ_c para o modelo A em duas dimensões não é conhecida. O valor de λ a partir do qual ρ deixa de ser nulo, ou seja $\lambda_c = 0,48$, é apenas um valor aproximado desse parâmetro.

Figura 4.5: Gráfico da densidade (ρ) versus λ obtido através das simulações de Monte-Carlo, para rede quadrada.

Capítulo 5

Modelo do votante majoritário com estado absorvente

O modelo do votante majoritário isotrópico com estado absorvente foi o segundo modelo proposto neste trabalho. Da mesma forma que no capítulo 4, definimos um modelo por dinâmicas estocásticas com simetria *up-down* e um estado absorvente. Alcançamos esse objetivo construindo uma dinâmica que evolui conjuntamente através das taxas dos modelos de contato e votante majoritário isotrópico. Contudo, a construção não resulta em um único processo estocástico. Essa constatação nos levou a explorar duas prescrições e diferenciar o modelo do votante majoritário isotrópico com estado absorvente em modelo 1 e modelo 2. Ambos os modelos foram estudados em rede quadrada regular, onde cada sítio i tem quatro primeiros vizinhos.

Além de assumir os valores ± 1 , como ocorre no modelo do votante majoritário isotrópico, agora a variável σ_i pode assumir um terceiro valor, 0 (zero), que interpretamos como um votante neutro. Como vamos ver adiante as regras do modelo determinam um estado absorvente, herdado do modelo de contato, e estados estacionários de caráter ferromagnético, paramagnético e antiferromagnético, herdados do votante majoritário isotrópico. Verificamos que os parâmetros de ordem dos sistemas são a densidade de partículas (ρ), o mesmo parâmetro de ordem do modelo de contato, e a magnetização (m), o mesmo parâmetro de ordem do modelo do votante majoritário isotrópico.

O modelo 1 é apresentado na seção 5.1. Nessa versão um votante neutro ($\sigma_i = 0$) torna-se opinativo ($\sigma_i = \pm 1$) através de uma regra que chamamos regra da maioria. Esse votante assume, com probabilidade advinda do processo de contato, a opinião da maioria de seus primeiros vizinhos, não podendo assumir a opinião minoritária. Um votante participante ($\sigma_i = \pm 1$) pode tornar-se neutro espontaneamente ou mudar de opinião segundo as regras do modelo do votante majoritário isotrópico. Porém, esse votante não pode mudar de opinião se todos os seus primeiros vizinhos forem neutros. Nas seções 5.2

e 5.3 mostramos os resultados da aproximação de campo médio simples e simulações de Monte Carlo, respectivamente.

O modelo 2 é apresentado na seção 5.4. Nesta versão trocamos a regra da maioria por outra na qual o votante neutro muda de opinião com probabilidade proporcional ao número de votantes primeiros vizinhos com opinião +1 (-1). Por outro lado, o votante opinativo pode tornar-se neutro espontaneamente ou mudar de opinião de acordo com as regras do votante majoritário isotrópico, de forma similar às regras do modelo 1. Contudo, nesta versão acrescentamos uma certa probabilidade desse votante mudar de opinião mesmo com todos os primeiros vizinhos neutros. Nas seções 5.5 e 5.6 mostramos os resultados da aproximação de campo médio simples e simulações de Monte Carlo, respectivamente.

Na seção 5.7 apresentamos uma generalização da probabilidade do votante opinativo, com primeiros vizinhos neutros, mudar de opinião. Introduzimos, tanto nas regras do modelo 1 como nas do modelo 2, um novo parâmetro, α , que controla essa probabilidade. Nessa seção mostramos a relação dessa nova abordagem com os modelos estudados, usando apenas aproximação de campo médio simples.

5.1 Apresentação do modelo 1

Descrição do Modelo

Consideramos uma rede quadrada regular onde cada sítio i tem quatro primeiros vizinhos. A todo sítio i associamos uma variável σ_i que pode assumir três valores: -1, 0 e +1.

Um votante opinativo i ($\sigma_i = \pm 1$) pode tornar-se neutro ou mudar de opinião. Com probabilidade r ($0 \leq r \leq 1$), o votante i torna-se neutro espontaneamente. Se o votante i tiver a maioria de seus primeiros vizinhos com opinião favorável à sua, ele pode assumir com probabilidade q a opinião diversa a deles. Por outro lado, se o votante i tiver primeiros vizinhos com opinião contrária à sua, ele pode assumir com probabilidade $1 - r - q$, a mesma opinião deles. O parâmetro q , da mesma forma que na seção 3.2 corresponde à probabilidade de i discordar da opinião majoritária de seus primeiros vizinhos. Há ainda a situação em que i tem igual número de primeiros vizinhos com opinião +1 e -1, na qual o sítio i assume com igual probabilidade, $(1 - r)/2$, as opiniões +1 ou -1.

Um votante neutro i ($\sigma_i = 0$) com um número n_0 de primeiros vizinhos neutros assume a opinião +1 (-1) com probabilidade igual a

$$(4 - n_0) \cdot \frac{p}{4} \quad (0 \leq p \leq 1),$$

se a maioria de seus primeiros vizinhos tiver a opinião +1 (-1). Por exemplo, um votante neutro assume com probabilidade p a opinião +1 (-1) se os quatro primeiros vizinhos

tiverem opinião +1 (-1). Se os primeiros vizinhos forem neutros ($n_0 = 4$), então o votante neutro não pode mudar de estado, originando o estado absorvente de 0 (zero).

Para sintetizarmos todas as regras descritas, vamos considerar novamente a função $S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) = \text{sgn}(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$, onde a soma é sobre os sítios primeiros vizinhos e construir as tabelas 1, 2 que contabilizam todas as situações possíveis. Para simplificar, denotamos por $n_{\pm 1} = 4 - n_0$, ou seja, o número de primeiros vizinhos do sítio i que são votantes participantes.

σ_i	$n_{\pm 1}$	$S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$	$p_{(\pm 1) \rightarrow +1}$	$p_{(\pm 1) \rightarrow -1}$	$p_{(\pm 1) \rightarrow 0}$
± 1	≥ 1	> 0	$1 - r - q$	q	r
		< 0	q	$1 - r - q$	
		0	$(1 - r)/2$	$(1 - r)/2$	
	$= 0$	0	0	0	

Tabela 1: Casos para $\sigma_i = \pm 1$ para o modelo 1.

Para exemplificarmos algumas situações da tabela 1, vamos considerar um aglomerado bidimensional formado por um sítio central σ_0 em negrito, que sofre a transição, e seus quatro primeiros vizinhos, $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ e σ_4 :

$$\begin{pmatrix} & \sigma_1 & \\ \sigma_2 & \sigma_0 & \sigma_3 \\ & \sigma_4 & \end{pmatrix}$$

Para $n_{\pm 1} = 4$ e $S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) = S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) > 0$, temos duas situações possíveis nas quais podem ocorrer transição:

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & \pm 1 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array}$$

e

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & \pm 1 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array},$$

ou seja, com probabilidade q , σ_0 pode assumir o valor -1, contrariando a opinião dos primeiros vizinhos. Ou, com probabilidade $1 - r - q$, pode assumir o valor +1, ficando

em acordo com a opinião dos primeiros vizinhos. Ou ainda, com probabilidade r , σ_0 pode assumir o valor 0. Para $n_{\pm 1} = 4$ e $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) < 0$, temos

$$\begin{pmatrix} & -1 & \\ -1 & \pm 1 & -1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array},$$

ou seja, com probabilidade $(1-q-r)$, σ_0 assume o valor -1 , concordando com os primeiros vizinhos. Ou, com probabilidade q , pode assumir o valor $+1$, contrariando a opinião dos primeiros vizinhos. Ou ainda, σ_0 pode assumir o valor 0, com probabilidade r . Para $n_{\pm 1} = 4$ e $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) = 0$, temos

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ -1 & \pm 1 & -1 \\ & +1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{(1-r)/2} \\ \xrightarrow{(1-r)/2} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array}.$$

Para $n_{\pm 1} = 3$ e $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) > 0$ temos:

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & \pm 1 & +1 \\ & 0 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array}$$

ou

$$\begin{pmatrix} & -1 & \\ +1 & \pm 1 & +1 \\ & 0 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array},$$

e para $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) < 0$ temos:

$$\begin{pmatrix} & -1 & \\ -1 & \pm 1 & -1 \\ & 0 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array},$$

ou

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ -1 & \pm 1 & -1 \\ & 0 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{1-r-q} \\ \xrightarrow{q} \\ \xrightarrow{r} \end{array} \begin{array}{l} \sigma_0 = -1 \\ \sigma_0 = +1 \\ \sigma_0 = 0 \end{array}.$$

E para o caso $n_{\pm 1} = 0$, ou seja

$$\begin{pmatrix} & 0 & \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix},$$

σ_0 não pode mudar de estado. Esta é uma das diferenças em relação à proposta do modelo 2, como veremos na seção 5.4. Na prescrição do modelo 2, vamos permitir que nesta configuração σ_0 mude de estado.

σ_i	$n_{\pm 1}$	$S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$	Probabilidade de assumir opinião +1	Probabilidade de assumir opinião -1
0	4	> 0	p	0
		< 0	0	p
		0	$p/2$	$p/2$
	3	> 0	$3p/4$	0
		< 0	0	$3p/4$
		0	$p/2$	0
	2	< 0	0	$p/2$
		0	$p/4$	$p/4$
		> 0	$p/4$	0
	1	< 0	0	$p/4$
		> 0	$p/4$	0
	0	0	0	0

Tabela 2: Casos para $\sigma_i = 0$ para o modelo 1.

Vamos continuar usando o aglomerado

$$\begin{pmatrix} & \sigma_1 & \\ \sigma_2 & \sigma_0 & \sigma_3 \\ & \sigma_4 & \end{pmatrix}$$

e considerarmos $\sigma_0 = 0$ para mostrarmos alguns exemplos de transições que podem ocorrer de acordo com a tabela 2. Seja o caso em que $n_{\pm 1} = 4$. Então, se $S \sum_{\delta} (\sigma_{i+\delta}) = S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) > 0$ temos

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & 0 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & +1 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix}$$

e

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & 0 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & +1 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix},$$

ou seja, se há maioria de sítios vizinhos a σ_0 no estado +1 então σ_0 pode assumir, com probabilidade p , o valor +1 e não pode mudar para -1. Agora, se $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) < 0$, temos

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

e

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & +1 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & -1 \end{pmatrix},$$

ou seja, nesse caso σ_0 pode assumir, com probabilidade p , o valor -1, já que há maioria de primeiros vizinhos no estado -1. Neste caso, σ_0 não pode assumir o estado +1. E, se por outro lado $S(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) = 0$, temos

$$\begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & +1 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{p/2} \sigma_0 = +1$$

$$\xrightarrow{p/2} \sigma_0 = -1.$$

Se há um número igual de +1 e -1, σ_0 pode assumir o estado +1 com a mesma probabilidade ($p/2$) que pode assumir -1. As regras descritas na tabela 2 vão se modificar quando introduzirmos o modelo 2, dando origem, como vamos ver na seção 5.4, à tabela 3.

Para formalizarmos as regras do modelo, vamos construir primeiro a probabilidade de transição $w_i^{(\pm 1)}(\sigma)$ para o caso em que $\sigma_i = \pm 1$, para o qual temos dois processos concorrentes: (1) aquele que torna o votante i neutro, (2) aquele que atua de forma a mudar a opinião do votante i . Temos, então

$$w_i^{(\pm 1)}(\sigma) = \begin{cases} r & (1) \\ \frac{1}{2} \cdot [1 - \delta(n_{\pm 1}, 0)] \cdot [(1 - r) - \sigma_i(1 - r - 2q) \cdot S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})] & (2). \end{cases} \quad \text{ou} \quad (5.1)$$

Então, $w_i(\sigma)$ para o modelo proposto assume a seguinte expressão:

$$w_i(\sigma) = \delta(\sigma_i, 0) \cdot n_{\pm 1} \cdot \frac{p}{4} + \delta(|\sigma_i|, 1) \cdot w_i^{(\pm 1)}(\sigma). \quad (5.2)$$

As regras do modelo possuem simetria *up-down*, pois se fizermos $\sigma_i = -\sigma_i$, temos $S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) = -S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$ e $w_i^{(\pm 1)} = -w_i^{(\pm 1)}(\sigma_i)$; e consequentemente, $w_i(\sigma) = -w_i(\sigma)$.

Equações de Evolução

Assim como fizemos na seção 4.2, para o modelo A com simetria *up-down*, elaboramos as equações de evolução seguindo o formalismo descrito nas seções 2.1 e 2.2. Construímos as equações de evolução da densidade média de +1, $P(+1) = \langle \delta(\sigma_i, +1) \rangle$, e da densidade média de -1, $P(-1) = \langle \delta(\sigma_i, -1) \rangle$. Através dessas equações, encontramos as equações de evolução da densidade, ρ , e da magnetização, m , tendo em vista que

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{dP(+1)}{dt} + \frac{dP(-1)}{dt} \quad (5.3)$$

e

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dP(+1)}{dt} - \frac{dP(-1)}{dt}. \quad (5.4)$$

Após essas etapas, alcançamos as seguintes equações de evolução :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 3p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ & + 3p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 6p \left[P \begin{pmatrix} +1 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & +1 \end{pmatrix} \right] \\ & + 9p \left[P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \right] + p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\ & + 4p \left[P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] - r[P(+1) + P(-1)] \end{aligned} \quad (5.5)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} = & p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 3p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ & + 3p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 9p \left[P \begin{pmatrix} +1 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & +1 & +1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \right] \\ & + 9p \left[P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \right] \\ & + 4p \left[P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & +1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned}
& +p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ 0 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} \right] + 4p \left[P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ 0 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ 0 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} \right] \\
& + 2 \left[(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ -1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + 4 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ -1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + 6 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ -1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + \right. \\
& \quad q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + 4 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \\
& \quad + 12 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 12q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \\
& \quad + 6(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ -1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + 12 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 6q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} \\
& \quad \left. 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ -1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \right] - 2 \left[4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + 4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} \right. \\
& \quad + 6 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ +1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ +1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + \\
& \quad 4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 12 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 12(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \\
& \quad + 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 6q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + 12 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & & \\ +1 & & \end{pmatrix} + \\
& \quad \left. 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} + 6(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & & \\ -1 & & \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & & \\ 0 & & \end{pmatrix} \right] - r[P(+1) - P(-1)].
\end{aligned}$$

5.2 Aproximação de campo médio simples para o modelo 1

Aplicamos a aproximação de campo médio simples, apresentada na seção 2.4, nas equações (5.5) e (5.6) e substituímos $P(1)$ e $P(-1)$ pelas expressões

$$P(+1) = \frac{(\rho + m)}{2} \quad (5.7)$$

$$P(-1) = \frac{(\rho - m)}{2}. \quad (5.8)$$

A equação (5.5) tomou a seguinte forma:

$$\frac{d\rho}{dt} = p \cdot \rho(1 - \rho) - r \cdot \rho, \quad (5.9)$$

enquanto a equação (5.6) se transformou em

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} = & \frac{1}{8} \cdot m \cdot \{ [4\rho(4 - 3\rho)(2q - 1 + r) - 4p(1 - \rho)(3 - 2\rho)] \cdot m^2 \\ & - 8q\rho[(2 - \rho)^3 + 2\rho^2(3 - 2\rho)] + 4\rho^3(1 - r)(4 - 3\rho) + \\ & + 4p\rho^2(1 - \rho)(3 - 2\rho) + 8p(1 - \rho) - 8r \} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Análise de Estabilidade

Encontramos os seguintes pontos fixos ou estados estacionários de (5.5):

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \begin{cases} \rho_1 = 0 \\ \rho_2 = \frac{(p-r)}{p} \end{cases} \quad \text{ou} \quad (5.11)$$

Observe que se multiplicarmos e dividirmos ρ_2 por r^{-1} e denotarmos $\lambda = (p/r)$, voltamos à expressão (3.9) encontrada para a densidade do modelo de contato na aproximação de campo médio simples (seção 3.3), ou seja

$$\rho_2 = \frac{\lambda - 1}{\lambda}. \quad (5.12)$$

Uma análise de estabilidade linear mostrou que ρ_1 é estável para $(p/r) > 1$, ρ_2 estável para $(p/r) < 1$ e portanto $(p/r)_c = 1$. Então,

$$\rho = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \rho_1 = 0 & \text{se } (p/r) < 1 \\ \rho_2 = \frac{(p-r)}{p} & \text{se } (p/r) > 1. \end{cases} \quad (5.13)$$

A figura (5.1) mostra a forma da curva ρ versus λ .

Figura 5.1: Gráfico da densidade (ρ) versus λ para o modelo 1, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1, 0$. Esta curva se repete para o modelo 1 e para o modelo 2.

Para estudarmos o comportamento da magnetização, vamos reescrever a equação (5.10) na seguinte forma:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{1}{8} \{bm + am^3\}, \quad (5.14)$$

com

$$a = \{8qp \cdot (4 - 3\rho) - 4 \cdot \rho \cdot (1 - r) \cdot (4 - 3\rho) - 4p(1 - \rho)(3 - 2\rho)\}$$

e

$$b = -\{8qp[(2 - \rho)^3 + 2\rho^2(3 - 2\rho)] - 4\rho^3(1 - r)(4 - 3\rho) - 4p\rho^2(1 - \rho)(3 - 2\rho) - 8p(1 - \rho) + 8r\}. \quad (5.15)$$

As soluções estacionárias da equação (5.14) se expressam por:

$$\frac{dm}{dt} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} m_1 = 0 & \text{ou} \\ m_2^2 = -\frac{b}{a}. \end{cases} \quad (5.16)$$

O estudo do fator (b) do termo linear da equação (5.14) mediante análise de estabilidade nos permitiu determinar parâmetros críticos do sistema e encontrar o diagrama de fases.

Digrama de Fases

Para construirmos o diagrama de fases, q versus r , vamos considerar três casos: **Linha** $r = 0$ ($0 < p \leq 1$, $r = 0$ e $0 < q \leq 1$); **Linha** $q = 0$ ($0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $q = 0$); **Linha Crítica** ($0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $0 < q \leq 1$).

Linha $r = 0$: $0 < p \leq 1$, $r = 0$ e $0 < q \leq 1 \Rightarrow \rho = 1$

Nestas circunstâncias, a e b se expressam da seguinte forma:

$$a = 8q - 4 \quad (5.17)$$

e

$$b = (-24q + 4). \quad (5.18)$$

Substituindo a e b na solução estacionária m_2 (5.16), chegamos à seguinte expressão:

$$m_2^2 = \frac{24q - 4}{8q - 4} \Rightarrow m_2 = \pm \left(\frac{24q - 4}{8q - 4} \right)^{1/2}. \quad (5.19)$$

A análise do termo $-24q + 4$ nos permitiu verificar que $m_1 = 0$ é estável para $q > \frac{1}{6}$ e m_2 é estável para $q < \frac{1}{6}$; consequentemente, o ponto crítico, q_c , é igual a $1/6 \sim 0,166$. A expressão da magnetização é finalmente

$$m = \begin{cases} 0 & \text{se } q < \frac{1}{6} \\ m_2 & \text{se } q > \frac{1}{6} \end{cases} \quad (5.20)$$

cujo gráfico, para $p = 1, 0$, encontra-se na figura 5.2. Neste caso, $P(+1)$ e $P(-1)$ assumem a seguinte forma:

$$P(1) = \begin{cases} \frac{\rho_2 + m_1}{2} = \frac{1}{2} & \text{se } q > \frac{1}{6} \\ \frac{(1 + |m_2|)}{2} = \frac{1}{2} \left[1 + \left(\frac{24q - 4}{8q - 4} \right)^{1/2} \right] & \text{se } q < \frac{1}{6} \end{cases} \quad (5.21)$$

e

$$P(-1) = \begin{cases} \frac{\rho_2 + m_1}{2} = \frac{1}{2} & \text{se } q > \frac{1}{6} \\ \frac{(1 - |m_2|)}{2} = \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{24q - 4}{8q - 4} \right)^{1/2} \right] & \text{se } q < \frac{1}{6} \end{cases}. \quad (5.22)$$

Esta linha corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico e $q_c = 1/6$ é, portanto, uma quota superior para o valor crítico real.

Linha $q = 0$: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $q = 0 \Rightarrow \rho = \rho_2$

Nestas condições, a e b se expressam como segue:

$$a = -4 \{ \rho_2 \cdot (1 - r) \cdot (4 - 3\rho_2) - p \cdot (1 - \rho_2) \cdot (3 - 2\rho_2) \}$$

Figura 5.2: Gráfico da magnetização (m) versus q para o modelo 1, obtido através da aproximação de campo médio simples, para a linha $r = 0$, com $p = 1, 0$.

e

$$b = 4(\rho_2)^2 \cdot [\rho_2 \cdot (1 - r) \cdot (4 - 3\rho_2) + p \cdot (1 - \rho_2) \cdot (3 - 2\rho_2)],$$

já que a substituição de $\rho_2 = \frac{p-r}{p}$ no termo $8p(1 - \rho) - 8r$ resulta na anulação deste. Substituindo a e b na expressão de m_2^2 (5.16) alcançamos

$$(m_2)^2 = (\rho_2)^2, \quad (5.23)$$

então,

$$m_2 = \pm \rho_2. \quad (5.24)$$

Uma análise de estabilidade linear mostrou que $m_1 = 0$ é estável para $(p/r) < 1$, enquanto m_2 é estável para $(p/r) > 1$. Temos, então

$$m = \begin{cases} 0, & \text{se } (p/r) < 1 \\ |m_2|, & \text{se } (p/r) > 1, \end{cases} \quad (5.25)$$

ou seja, m assume a mesma forma da densidade, ρ , mostrada na figura (5.1). Agora $P(1)$ e $P(-1)$ se expressam por

$$P(1) = \begin{cases} 0 & \text{se } (p/r) < 1 \\ \frac{(\rho_2 + |m_2|)}{2} & \text{se } (p/r) > 1 \end{cases} \quad (5.26)$$

e

$$P(-1) = \begin{cases} 0 & \text{se } (p/r) < 1 \\ \frac{(\rho_2 - |m_2|)}{2} & \text{se } (p/r) > 1 \end{cases}. \quad (5.27)$$

Para $|m_2| = -\rho_2$, por exemplo, temos $P(+1) = 0$ e $P(-1) = \rho_2$. Portanto, nesta linha, encontramos apenas estados estacionários de caráter ferromagnético.

Linha Crítica: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $0 < q \leq 1 \Rightarrow \rho = \rho_2$

A solução m_2 assume a seguinte forma:

$$m_2 = \pm \left(\frac{8q\rho_2[(2 - \rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3 - 2\rho_2)] - 4\rho_2^2[\rho_2(1 - r)(4 - 3\rho_2) + p(1 - \rho_2)(3 - 2\rho_2)]}{4\rho_2(4 - 3\rho_2)(2q - 1 + r) - 4p(1 - \rho_2)(3 - 2\rho_2)} \right)^{1/2}.$$

Para $p = 1, 0$ e $r = 0, 3$, a solução $m_1 = 0$ é estável para $q > 0,131$ e m_2 é estável para $q < 0,131$, e portanto $q_c(1, 0; 0, 3) = 0,131$. A figura 5.3 mostra o gráfico de m para $p = 1, 0$ e $r = 0, 3$.

Para cada par p e r , temos $q_c(p, r)$ e portanto temos uma linha crítica $q_c(p, r)$ dada por

$$q_c(p, r) = \frac{4 \cdot (\rho_2)^2 \cdot [\rho_2(1 - r) \cdot (4 - 3\rho_2) + p \cdot (1 - \rho_2) \cdot (3 - 2\rho_2)]}{8\rho_2[(2 - \rho_2)^3 + 2(\rho_2)^2 \cdot (3 - 2\rho_2)]}. \quad (5.28)$$

Figura 5.3: Gráfico da magnetização (m) versus q para o modelo 1, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1,0$ e $r = 0,3$.

Se $r = 0$, chegamos novamente a $q_c = 1/6$. No limite em que $\rho \rightarrow 0$ e ($r = 1, p = 1$) temos $q = 0$, ou seja, a linha crítica termina em $q = 0$ e pode se vista no diagrama de fases apresentado na figura 5.4.

No diagrama de fases, se $r \leq 1$, temos uma fase ativa caracterizada por $\rho \neq 0$. Esta fase se subdivide em outras duas: uma fase ativa de caráter ferromagnético (F), caracterizada por $m \neq 0$, e outra de caráter paramagnético, caracterizada por $m = 0$. Se fixarmos $r = 0,3$ e variarmos o parâmetro q entre os valores 0,0 e 0,5, o sistema passa por uma transição de fase. Se $q \leq 0,131$, o sistema se encontra na fase ativa ferromagnética (F); em $q_c = 0,131$, sofre uma transição de fase contínua para a fase ativa paramagnética (P).

Figura 5.4: Diagrama de fases (r versus q) para o modelo 1, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1, 0$. Os símbolos F e P indicam as fases ferromagnética e paramagnética, respectivamente.

5.3 Simulações de Monte Carlo do modelo 1

O processo foi simulado segundo o algoritmo geral descrito na seção 2.4, utilizando condições de contorno periódicas em redes quadradas de lado L , $5 \leq L \leq 80$. As condições iniciais escolhidas foram caracterizadas por redes totalmente completas com $+1$'s e -1 's. Usamos principalmente a condição onde distribuimos $+1$ e -1 na rede com igual probabilidade. A cada PMC armazenamos o número de $+1$ e -1 na rede, e a partir dessas informações encontramos estimativas para $P(+1)$, $P(-1)$, ρ , m , U e χ .

O Algoritmo do Bloco de Transição

Vamos considerar novamente as seguintes variáveis: i , um sítio escolhido aleatoriamente; ξ , um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1]$; $S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}) = vz$, que indica como se distribuem os primeiros vizinhos de i ; $\sum_{\delta} |\sigma_{i+\delta}| = n_{\pm 1}$, que indica o número de sítios participantes ($\sigma_i = \pm 1$) dentre os primeiros vizinhos.

O algoritmo se estrutura da seguinte forma:

- Se o sítio i tem pelo menos um primeiro vizinho ocupado, duas situações podem ocorrer:

1. o sítio i está ocupado por $+1$ ou -1 ($\sigma_i = \pm 1$). Neste caso, por sua vez, apresentam-se duas situações:

- * se $\xi \leq r$ então o sítio i recebe 0 ($\sigma_i = 0$);

- * se $\xi > r$ abrem-se os seguintes casos, dependentes do sinal de vz :

- $vz > 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de $+1$'s, implicando nas seguintes alternativas:

- * se $r < \xi \leq q + r$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

- * caso contrário, se $\xi \geq q + r$, então o sítio i recebe $+1$ ($\sigma_i = +1$)

- $vz < 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de -1 's, implicando nos seguintes casos:

* se $r < \xi \leq q + r$, então o sítio i recebe +1 ($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $\xi \geq q + r$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

- $vz = 0$, ou seja, com igual número de primeiros vizinhos com opinião +1 e -1, implicando nos seguintes casos:

* se $r < \xi < r + \frac{(1-r)}{2}$, então o sítio i recebe +1 ($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $\xi \geq \frac{(1+r)}{2}$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

2. o sítio i está ocupado por 0 ($\sigma_i = 0$). Temos então as seguintes alternativas:

- $vz > 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de +1's:

* se $\xi < \frac{p}{4} \cdot n_{\pm 1}$ então o sítio i recebe +1 ($\sigma_i = +1$)

- $vz < 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de -1's:

* se $\xi < \frac{p}{4} \cdot n_{\pm 1}$ então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

- $vz = 0$, ou seja, com igual número de primeiros vizinhos com opinião +1 e -1, e neste caso temos:

* se $\xi < (\frac{p}{8} \cdot n_{\pm 1})$ então o sítio i recebe +1
($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $(\frac{p}{8} \cdot n_{\pm 1}) \leq \xi < \frac{p}{4} \cdot n_{\pm 1}$ então o sítio i recebe -1
($\sigma_i = -1$)

Resultados

Assim como fizemos na apresentação dos resultados da aproximação de campo médio simples, vamos apresentar os resultados da simulação considerando os três casos anterior-

mente citados: Linha $r = 0$, Linha $q = 0$ e Linha Crítica.

Linha $r = 0$: $0 < p \leq 1$, $r = 0$ e $0 < q \leq 1$

Nesta parte do trabalho apenas reproduzimos os resultados alcançados por de Oliveira [19] para o modelo do votante majoritário isotrópico em rede quadrada. As figuras 5.5 e 5.6 mostram m_L versus q e χ_L versus q , respectivamente. Para determinarmos q_c usamos o método descrito na seção 2.4, ou seja, determinamos o ponto de intersecção das curvas provenientes do gráfico U_L versus q para diferentes valores de L , mostradas na figura 5.7. Porém, o ponto de intersecção não é exatamente claro pois as curvas não se cruzam em um único ponto. Em decorrência disso, tomamos os vários pontos de cruzamento e através dos respectivos valores de q e U_L , calculamos valores médios, que são estimativas para q_c e $U^*(q_c)$. Obtivemos $q_c = 0,076 \pm 0,001$ e $U^*(q_c) = 0,611 \pm 0,001$.

Figura 5.5: Gráfico da magnetização (m_L) versus q obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1,0$ e $r = 0$. A linha $r = 0$ corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico.

Uma vez determinado q_c estimamos os expoentes β/ν e γ/ν , como descrito na seção 2.4. Encontramos $\beta/\nu = 0,127 \pm 0,002$ a partir do coeficiente angular da reta da figura 5.8. Por outro lado, através do coeficiente angular da reta da figura 5.9, alcançamos $\gamma/\nu = 1,72 \pm 0,08$. Estes valores estão de acordo com os valores dos expoentes críticos do modelo de Ising (de equilíbrio) em duas dimensões, apresentados no final da seção 2.4.

Figura 5.6: Gráfico de $\ln(\chi_L)$ versus q obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1,0$ e $r = 0$. A linha $r = 0$ corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico.

Figura 5.7: Gráfico do cumulante de quarta ordem reduzido (U_L) versus q obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1,0$ e $r = 0$. A linha $r = 0$ corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico.

Figura 5.8: Gráfico de $\ln m_L(q_c)$ versus $\ln L$. O coeficiente angular da reta forneceu o valor de β/ν . Os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $r = 0$. A linha $r = 0$ corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico.

Figura 5.9: Gráfico de $\ln \chi_L(q_c)$ versus $\ln L$. O coeficiente angular da reta forneceu o valor de γ/ν . Os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $r = 0$. A linha $r = 0$ corresponde ao modelo do votante majoritário isotrópico.

Linha $q = 0$: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $q = 0$

A aproximação de campo médio simples, como era esperado, conseguiu prever o comportamento quantitativo da densidade apenas em regiões distantes da criticalidade. Através das simulações numéricas, verificamos que a transição de fase do estado absorvente para o estado ativo ocorre em $\lambda_c \approx 1,647$ ($r_c \approx 0,607$ para $p = 1, 0$), como pode ser visto na figura 5.10. Encontramos o expoente crítico $\beta \approx 0,581$ a partir do coeficiente angular da reta da figura 5.11. Este valor está de acordo com o previsto na literatura para os modelos da classe de universalidade da percolação direcionada nesta dimensão.

Assim como aconteceu na aproximação de campo médio simples, encontramos estados estacionários ferromagnéticos em praticamente toda linha $q = 0$, ou seja: $m = \rho$, $P(1) = \rho$ (ou $P(-1) = \rho$). Contudo, na região próxima à transição ativo-absorvente, não obtivemos dados conclusivos que confirmassem esse comportamento. Vamos discutir um pouco mais sobre a linha $q = 0$ quando apresentarmos o diagrama de fases do modelo.

Figura 5.10: Gráfico da densidade (ρ) versus λ obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $q = 0$. Corresponde à curva da densidade do processo de contato em duas dimensões.

Figura 5.11: Gráfico de $-\ln(\rho)$ versus $-\ln|r_c - r|$ utilizado para obter o expoente crítico β . Os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $q = 0$

Linha Crítica: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $0 < q \leq 1$

Os gráficos das figuras 5.12 e 5.13 apresentam m_L versus q e χ_L versus q para diferentes valores de L quando $p = 1,0$ e $r = 0,3$. Da mesma forma que fizemos para a **Linha $r=0$** , dos dados do gráfico U_L versus q , mostrado na figura 5.14. Além disso, para os mesmos valores de p e r , encontramos $\beta/\nu = 0,125 \pm 0,005$ e $\gamma/\nu = 1,72 \pm 0,06$ a partir dos coeficientes angulares das retas mostradas nas figuras 5.15 e 5.16. Novamente, os valores de β/ν e γ/ν concordam com os valores de expoentes críticos β , γ e ν para o modelo de Ising (de equilíbrio) em duas dimensões ($\beta = 0,125$, $\gamma = 1,75$ e $\nu = 1$ [24]).

Figura 5.12: Gráfico da magnetização (m_L) versus q obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $r = 0,3$.

Figura 5.13: Gráfico de $\ln(\chi_L)$ versus q obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $r = 0,3$.

Figura 5.14: Gráfico do cumulante de quarta ordem reduzido (U_L) versus q obtido através de simulação de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1$ e $r = 0,3$.

Figura 5.15: Gráfico de $\ln(m_L(q_c))$ versus $\ln L$. O coeficiente angular da reta forneceu o valor de β/ν . Os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1,0$ e $r = 0,3$.

Figura 5.16: Gráfico de $\ln(\chi_L(q_c))$ versus $\ln L$. O coeficiente angular da reta forneceu o valor de γ/ν . Os dados foram obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1,0$ e $r = 0,3$.

Para construirmos a linha crítica $q_c(p, r)$ fixamos $p = 1,0$ e para determinados valores de r ($0,05 \leq r \leq 0,60$), encontramos $q_c(p, r)$. Para $r < 0,4$ encontramos q_c de forma bastante clara, porém, à medida que nos aproximávamos de r_c , tornou-se muito difícil determinar q_c . Como pode ser visto no diagrama de fases (figura 5.17), a curva $q_c(1, r)$ tangencia o eixo vertical na região próxima ao estado absorvente. Para explorarmos essa região, em vez de fixarmos r , fixamos q e determinamos r_c . Ainda assim a dificuldade se manteve, pois para qualquer valor um pouco maior que 0 ($\sim 10^{-6}$) já observávamos estados estacionários paramagnéticos.

O diagrama de fases mostra o estado absorvente (A) de zero para $r > 0,607$ caracterizado por $\rho = m = 0$, e as fases ativas ferromagnética (F) ($m \neq 0$) e paramagnética (P) ($m = 0$) para $r \leq 0,607$, onde $\rho \neq 0$. Se tomarmos $q = 0,06$ e fizermos r variar entre 0,0 e 1,0, observamos o sistema passar por duas transições de fase. Para $r \leq 0,15$ o sistema se encontra na fase ativa ferromagnética (F). Em $r_c = 0,15$, passa por uma transição de fase contínua para a fase ativa paramagnética (P), permanecendo nessa fase enquanto

$r \leq 0,607$. Em $r_c \approx 0,607$, o sistema sofre outra transição de fase, também contínua, para o estado absorvente (A) de zero.

Figura 5.17: Diagrama de Fases (r versus q) obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 1, com $p = 1, 0$. O símbolo A indica a fase absorvente, enquanto os símbolos F e P indicam as fases ativas ferromagnética e paramagnética, respectivamente.

5.4 Apresentação do modelo 2

Consideramos, novamente, uma rede quadrada regular onde cada sítio tem quatro primeiros vizinhos. A cada sítio i associamos uma variável σ_i que pode assumir três valores: -1 , 0 e $+1$.

Nesta versão, uma das mudanças está na forma do votante neutro i ($\sigma_i = 0$) adquirir opinião. Ao contrário do modelo 1, onde usamos a regra da maioria, nesta nova apresentação do modelo, o votante i assume a opinião $+1$ (-1) com probabilidade proporcional ao número de $+1$'s (-1 's) dentre os primeiros vizinhos. Para sistematizarmos essa regra, definimos as funções $S_{+1}(\sigma_i)$, que fornece o número de primeiros vizinhos de um sítio neutro i com opinião $+1$, e $S_{-1}(\sigma_i)$, que fornece, por sua vez, o número de primeiros vizinhos de i ocupados por -1 . Assim, com probabilidade

$$S_{+1}(\sigma_i) \cdot \frac{p}{4} \quad (\text{ou } S_{-1}(\sigma_i) \cdot \frac{p}{4}),$$

o sítio i recebe $+1$ (ou -1). As regras descritas acima estão explicitadas na Tabela 3.

Por outro lado, o votante participativo ($\sigma_i = \pm 1$) muda de opinião da mesma forma descrita na seção 5.1 e seguindo as situações descritas nas tabelas 2. Contudo, adicionamos a probabilidade $(1 - r)/2$ do votante i poder mudar de opinião apesar de ter todos os primeiros vizinhos neutros ($n_{\pm 1} = 0$). Essas regras estão sintetizadas na tabela 4.

σ_i	$n_{\pm 1}$	$S_{+1}(\sigma_i)$	$S_{-1}(\sigma_i)$	Probabilidade de assumir opinião $+1$	Probabilidade de assumir opinião -1
0	4	4	0	p	0
		0	4	0	p
		3	1	$3p/4$	$p/4$
		1	3	$p/4$	$3p/4$
		2	2	$p/2$	$p/2$
	3	3	0	$3p/4$	0
		0	3	0	$3p/4$
		2	1	$p/2$	$p/4$
		1	2	$p/4$	$p/2$
		2	0	$p/2$	0
	2	0	2	0	$p/2$
		1	1	$p/4$	$p/4$
		1	0	$p/4$	0
	1	1	0	$p/4$	$p/4$
		0	1	0	$p/4$

Tabela 3: Casos para $\sigma_i = 0$ para o modelo 2.

σ_i	$n_{\pm 1}$	$S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})$	$p_{(\pm 1) \rightarrow +1}$	$p_{(\pm 1) \rightarrow -1}$	$p_{(\pm 1) \rightarrow 0}$
± 1	≥ 1	> 0	$1 - r - q$	q	r
		< 0	q	$1 - r - q$	
		0	$(1 - r)/2$	$(1 - r)/2$	
	$= 0$	0	$(1 - r)/2$	$(1 - r)/2$	

Tabela 4: Casos para $\sigma_i = \pm 1$ para o modelo 2

Para exemplificarmos algumas das situações descritas na tabela 3, vamos usar o aglomerado bidimensional

$$\begin{pmatrix} & \sigma_1 & \\ \sigma_2 & \sigma_0 & \sigma_3 \\ & \sigma_4 & \end{pmatrix}$$

apresentado na seção 5.1, com $\sigma_0 = 0$. Vamos tomar $S_{+1}(\sigma_0) = 4$ e $S_{-1}(\sigma_0) = 0$:

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & 0 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & +1 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix}.$$

Com probabilidade p , σ_0 assume o valor $+1$, de maneira similar ao exemplo mostrado na seção 5.1 para modelo 1. A diferença entre os modelos aparece quando tomamos, por exemplo, $S_{+1}(\sigma_0) = 3$ e $S_{-1}(\sigma_0) = 1$:

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ +1 & 0 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{\frac{3p}{4}} \sigma_0 = +1 \\ \xrightarrow{\frac{p}{4}} \sigma_0 = -1 \end{array}.$$

Agora, há uma probabilidade de σ_0 assumir -1 , diferentemente do modelo 1, para o qual a regra da maioria não permitia que σ_0 assumisse -1 . Para $S_{+1}(\sigma_0) = 2$ e $S_{-1}(\sigma_0) = 2$, temos

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ -1 & 0 & -1 \\ & +1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{\frac{p}{2}} \sigma_0 = +1 \\ \xrightarrow{\frac{p}{2}} \sigma_0 = -1 \end{array}.$$

Nesta situação, σ_0 assume $+1$ ou -1 com probabilidade igual para ambos os modelos. Se $S_{+1}(\sigma_0) = 1$ e $S_{-1}(\sigma_0) = 3$, temos

$$\begin{pmatrix} & +1 & \\ -1 & 0 & -1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \begin{array}{l} \xrightarrow{\frac{p}{4}} \sigma_0 = +1 \\ \xrightarrow{\frac{3p}{4}} \sigma_0 = -1 \end{array}.$$

Temos assim, outra situação na qual existe diferença entre os dois modelos. E ainda para $S_{+1}(\sigma_0) = 0$ e $S_{-1}(\sigma_0) = 4$, temos

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{p} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix},$$

onde σ_0 assume -1 com probabilidade p e não pode mudar para $+1$, da mesma forma que o modelo 1.

Agora, a probabilidade $w_i^{(\pm 1)}(\sigma)$ assume a seguinte forma:

$$w_i^{(\pm 1)}(\sigma) = \begin{cases} r & (1) \\ \frac{1}{2} \cdot [1 - r - \sigma_i(1 - r - 2q) \cdot S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})] & \text{ou} \quad (2), \end{cases} \quad (5.29)$$

e $w_i(\sigma)$ não se modifica:

$$w_i(\sigma) = \delta(\sigma_i, 0) \cdot n_{\pm 1} \cdot \frac{p}{4} + \delta(|\sigma_i|, 1) \cdot w_i^{(\pm 1)}(\sigma). \quad (5.30)$$

5.5 Aproximação de campo médio simples para o modelo 2

As equações de evolução da densidade, ρ , e da magnetização, m , foram construídas da mesma maneira descrita na seção 5.1. A equação de evolução da densidade, ρ , é igual á apresentada na equação (5.5). A expressão de ρ obtida após a aplicação de campo médio simples é, então análoga à encontrada na seção 5.2, ou seja,

$$\rho = \begin{cases} \rho_1 = 0 & \text{se } (p/r) < 1 \\ \rho_2 = \frac{(p-r)}{p} & \text{se } (p/r) > 1. \end{cases} \quad (5.31)$$

Já a equação de evolução da magnetização, m , apresentou algumas modificações e pode ser apreciada no Apêndice A. Depois de aplicarmos a aproximação de campo médio simples, $\frac{dm}{dt}$ tomou a seguinte forma:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{1}{8} \cdot m \cdot \{ [4\rho(4-3\rho)(2q-1+r)]m^2 - 8q\rho[(2-\rho)^3 + 2\rho^2(3-2\rho)] + 4\rho^3(1-r)(4-3\rho) + 8[p(1-\rho)-r] - 8(1-r)(1-\rho)^4 \} \quad (5.32)$$

Assim como fizemos anteriormente reescrevemos $\frac{dm}{dt}$ como segue:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{1}{8}\{bm + am^3\}, \quad (5.33)$$

onde

$$a = 4\rho(4 - 3\rho)(2q - 1 + r) \quad (5.34)$$

e

$$\begin{aligned} b = & -8q\rho[(2 - \rho)^3 + 2\rho^2(3 - 2\rho)] + 4\rho^3(1 - r)(4 - 3\rho) \\ & + 8[p(1 - \rho) - r] - 8(1 - r)(1 - \rho)^4 \end{aligned} \quad (5.35)$$

Analogamente, as soluções estacionárias de (5.32) são dadas por:

$$\begin{cases} m_1 = 0 & \text{ou} \\ m_2^2 = -\frac{b}{a} \end{cases} \quad (5.36)$$

Da mesma forma que no caso do modelo 1, o estudo do fator (b) do termo linear da equação (5.33) mediante análise de estabilidade nos permitiu determinar parâmetros críticos do sistema e encontrar o diagrama de fases.

Diagrama de Fases

Estabelecidas as equações construímos o diagrama de fases analisando as seguintes situações : **Linha** $r = 0$ ($0 < p \leq 1$, $r = 0$ e $0 < q \leq 1$), **Linha** $q = 0$ ($0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$, $q = 0$) e **Linha Crítica** ($0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $0 < q \leq 1$).

Linha $r = 0$: $0 < p \leq 1$, $r = 0$ e $0 < q \leq 1 \Rightarrow \rho = 1$

Este é o mesmo caso da linha $r = 0$ da seção 5.2 e verifica-se facilmente que:

$$a = 8q - 4 \quad (5.37)$$

e

$$b = -24q + 4. \quad (5.38)$$

Da mesma forma que no caso anterior, m se expressa como

$$m = \begin{cases} 0 & \text{se } q < \frac{1}{6} \\ \pm \left(\frac{24q-4}{8q-4} \right)^{1/2} & \text{se } q > \frac{1}{6}, \end{cases} \quad (5.39)$$

e portanto $q_c = 1/6$.

Linha $q = 0$: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$, $q = 0 \Rightarrow \rho = \rho_2$

Temos:

$$a = -4\rho_2(4 - 3\rho_2)(1 - r) \quad (5.40)$$

e

$$b = 4\rho_2^3(1 - r)(4 - 3\rho_2) - 8(1 - r)(1 - \rho)^4, \quad (5.41)$$

resultando em

$$m_2 = \pm \left(\frac{4\rho_2^3(1 - r)(4 - 3\rho_2) - 8(1 - r)(1 - \rho)^4}{4\rho_2(4 - 3\rho_2)(1 - r)} \right)^{1/2}. \quad (5.42)$$

Para $p = 1$, m é estável para $r < 0,572$, enquanto $m = 0$ é estável para $r > 0,572$. Então, $r_c^* = 0,572$ é um ponto crítico para a linha $q = 0$.

Linha Crítica: $0 < p \leq 1$, $0 < r \leq 1$ e $0 < q \leq 1 \Rightarrow \rho = \rho_2$

A expressão de m_2 para este caso é

$$m_2 = \pm \left(\frac{8q\rho_2[(2 - \rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3 - 2\rho_2)] - 4\rho_2^3(1 - r)(4 - 3\rho_2) + 8(1 - r)(1 - \rho)^4}{4\rho_2(4 - 3\rho_2)(2q - 1 + r)} \right)^{1/2}, \quad (5.43)$$

que é estável para $q(p, r) < q_c(p, r)$, onde a linha crítica $q_c(p, r)$ toma a seguinte forma:

$$q_c(p, r) = \frac{(1-r)[(4-3\rho_2)\rho_2^3 - 2(1-\rho_2)^4]}{2\rho_2[(2-\rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3-2\rho_2)]}. \quad (5.44)$$

A figura 5.18 mostra o gráfico de m versus q para o caso $p = 1,0$ e $r = 0,15$, para o qual $q_c \approx 0,139$. A figura 5.19 mostra o diagrama de fases, para $p = 1,0$, que contém a linha crítica $q_c(p, r)$.

De forma similar à discutida nas seções 5.2 e 5.3, o diagrama de fases da figura 5.19 mostra as fases ativas ($\rho \neq 0$) ferromagnética (F) ($m \neq 0$) e paramagnética (P) ($m = 0$). Se tomarmos $r < 0,57$ e variarmos q entre 0,0 e 0,5, vamos observar o sistema sofrer uma transição de fase contínua da fase ativa ferromagnética (F) para a fase ativa paramagnética (P).

Figura 5.18: Gráfico da magnetização (m) versus q para o modelo 2, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.19: Diagrama de Fases (r versus q) para o modelo 2, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1$. Os símbolos F e P indicam as fases ativas ferromagnética e paramagnética, respectivamente.

5.6 Simulações de Monte Carlo do modelo 2

Simulamos o modelo 2 em redes quadradas regulares de tamanho L , $10 \leq L \leq 80$, com condições de contorno periódicas e usamos a mesma condição inicial descrita na seção 5.3. Para apresentarmos o algoritmo do bloco de transição vamos considerar novamente as seguintes variáveis: i , um sítio escolhido aleatoriamente; ξ , um número aleatório distribuído uniformemente no intervalo $[0, 1]$; $n_{\pm 1}$, que indica o número de primeiros vizinhos ocupados ($\sigma_i = \pm 1$); vz , que indica como é formada a maioria dos primeiros vizinhos. Também usamos a variável ($S_{+1}(\sigma_i) = s_{+1}$), indicando o número de primeiros vizinhos com opinião $+1$. A estrutura do algoritmo é a seguinte:

1. Se o sítio i está ocupado por $+1$ ou -1 ($\sigma_i = \pm 1$), temos duas situações :

* se $\xi \leq r$ então o sítio i recebe 0 ($\sigma_i = 0$);

* se $\xi > r$, abrem-se os seguintes casos, dependentes do sinal de vz :

- $vz > 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de $+1$'s:

* se $r < \xi \leq q + r$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

* caso contrário, se $\xi \geq q + r$, então o sítio i recebe $+1$ ($\sigma_i = +1$)

- $vz < 0$, ou seja, primeiros vizinhos formados por maioria de -1 's:

* se $r < \xi \leq q + r$, então o sítio i recebe $+1$ ($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $\xi \geq q + r$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

- $vz = 0$, ou seja, com igual número de primeiros vizinhos com opinião $+1$ e -1 , ou com todos o primeiros vizinhos neutros:

* se $r < \xi < r + \frac{(1-r)}{2}$, então o sítio i recebe +1 ($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $\xi \geq \frac{(1+r)}{2}$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

2. Se o sítio i está ocupado por 0 ($\sigma_i = 0$) e $n_{\pm 1} \neq 0$, ou seja, há pelo menos um primeiro vizinho ocupado. Temos as seguintes alternativas:

* se $\xi < (s_{+1} \cdot \frac{p}{4})$, então o sítio i recebe +1 ($\sigma_i = +1$)

* caso contrário, se $(s_{+1} \cdot \frac{p}{4}) < \xi < (n_{\pm 1} \cdot \frac{p}{4})$, então o sítio i recebe -1 ($\sigma_i = -1$)

Resultados

Na linha $r = 0$, como esperávamos, encontramos novamente a linha do modelo do votante majoritário isotrópico com $q_c = 0,076 \pm 0,001$. Para $q = 0$ e $p = 1,0$, obtivemos $r_c^* = 0,323 \pm 0,001$ com $U^*(r_c^*) = 0,613 \pm 0,004$. Portanto, diferentemente do modelo 1, a linha $q = 0$ apresentou um ponto crítico bem definido, separando fases ativas de caráter ferromagnético e paramagnético. Para $r \leq 0,323$, o sistema fica na fase ativa ferromagnética, sofrendo uma transição de fase contínua em $r_c^* \approx 0,323$ para a fase ativa paramagnética.

Para $p = 1,0$ e $r = 0,15$ construímos os gráficos de m_L versus q , χ_L versus q e U_L versus q , apresentados nas figuras 5.20, 5.21 e 5.22, respectivamente. Para esses valores encontramos $q_c = 0,040 \pm 0,002$ e $U^*(q_c) = 0,610 \pm 0,005$. Uma vez determinado q_c , obtivemos $\beta/\nu = 0,122 \pm 0,009$ e $\gamma/\nu = 1,72 \pm 0,16$ a partir dos coeficientes angulares das retas das figuras 5.23 e 5.24. Construímos a linha crítica, para $p = 1$, fixando r e determinando o respectivo ponto q_c . A linha crítica pode ser vista no diagrama de fases, figura 5.25.

Para $p = 1, 0$, a transição de fase ativo-absorvente ocorreu em $r_c \approx 0,607$ ($\lambda_c \approx 1,647$), o mesmo valor alcançado para o modelo 1. A forma da curva da densidade, ρ , versus λ obtida na simulação do modelo 2 foi similar àquela mostrada na figura 5.10, da seção 5.3.

No diagrama de fases encontrado para o modelo 2, mostrado na figura (5.25), com $p = 1, 0$, se $r > 0,607$ temos uma fase absorvente (A) de $\rho = 0$ zero, caracterizado por entre uma fase de caráter ferromagnético (F), para o qual $m \neq 0$ e outra de caráter paramagnético (P), para a qual $m = 0$. Se fixarmos $q \approx 0,04$, por exemplo, e variarmos r entre $0,0$ e $1,0$, o sistema sofre duas transições de fase. Se $r \leq 0,15$, o sistema se encontra na fase ativa ferromagnética, sofrendo em, $r \approx 0,15$, uma transição de fase contínua para a fase ativa paramagnética. O sistema permanece nesta fase enquanto $r \leq 0,607$, passando por uma transição de fase contínua em $r \approx 0,607$ para a fase absorvente de 0 (zero).

Figura 5.20: Gráfico da magnetização m_L versus q , obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 2, com $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.21: Gráfico de $(\ln \chi_L)$ versus q , obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 2, com $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.22: Gráfico do cumulante reduzido de quarta ordem (U_L) versus q , obtido através de simulações de Monte Carlo do modelo 2, com $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.23: Gráfico de $\ln(m_L(q_c))$ versus $\ln L$ para o modelo 2, utilizado para obter o valor de β/ν para $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.24: Gráfico de $\ln(\chi_L(q_c))$ versus $\ln L$ para o modelo 2, utilizado para obter o valor de γ/ν para $p = 1$ e $r = 0,15$.

Figura 5.25: Diagrama de Fases (r versus q) para o modelo 2, obtido através de simulações de Monte Carlo, com $p = 1$. Os símbolos F e P indicam as fases ativas ferromagnética e paramagnética, respectivamente, enquanto o símbolo A indica o estado absorvente.

5.7 Relação entre os modelos 1 e 2

Com o objetivo de relacionar comparativamente os dois modelos estudados, introduzimos um novo parâmetro, α . Numa primeira etapa inserimos, no modelo 1, a probabilidade $(1-r)/2$ de um votante opinativo ($\sigma_i = \pm 1$) mudar de opinião mesmo com todos os primeiros vizinhos neutros. Adicionamos α para controlar essa probabilidade e ficamos com $\alpha(1-r)/2$, onde $0 \leq \alpha \leq 1$. Numa segunda etapa, acrescentamos α também ao modelo 2. Para ambos os casos a taxa $w_i^{(\pm 1)}(\sigma)$ passa a ter a seguinte forma:

$$w_i^{(\pm 1)}(\sigma) = \begin{cases} r \\ \text{ou} \\ \frac{1}{2} \cdot [1 - \delta(n_{\pm 1}, 0)] \cdot [(1-r) - \sigma_i((1-r) - 2q) \cdot S(\sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})] + \alpha \cdot \frac{(1-r)}{2} \delta(n_{\pm 1}, 0) \end{cases}$$

A inserção dessa regra não muda a equação de evolução da densidade apresentada na equação (5.9). No entanto, para o modelo 1, a equação de evolução da magnetização na aproximação de campo médio simples fica acrescida do termo $-8\alpha(1-r)(1-\rho)^4 m$. Para o modelo 2, apenas multiplicamos o termo proporcional a $(1-r)(1-\rho)^4 m$ por α .

A expressão de m_2 anteriormente obtida para o modelo 1, quando $0 \leq p \leq 1$, $0 \leq r \leq 1$ e $0 \leq q \leq 1$, assume, agora, a seguinte forma:

$$m_2 = \pm \left(\frac{8 q \rho_2 [(2-\rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3-2\rho_2)] -}{4 \rho_2 (4-3\rho_2) \cdot (2q-1+r) - 4p (1-\rho_2) (3-2\rho_2)} \right. \\ \left. \frac{-4\rho_2^2[\rho_2(1-r)(4-3\rho_2) + p(1-\rho_2)(3-2\rho_2)] + 8\alpha(1-r)(1-\rho)^4}{4\rho_2(4-3\rho_2)(2q-1+r) - 4p(1-\rho_2)(3-2\rho_2)} \right)^{1/2}, \quad (5.45)$$

que é estável para p , r , q e α , tais que $q(p, r, \alpha) < q_c(p, r, \alpha)$, onde

$$q_c(p, r) = \frac{4 \cdot (\rho_2)^2 \cdot [\rho_2(1-r) \cdot (4-3\rho_2) + p \cdot (1-\rho_2) \cdot (3-2\rho_2)] - 8\alpha(1-r)(1-\rho)^4}{8\rho_2[(2-\rho_2)^3 + 2(\rho_2)^2 \cdot (3-2\rho_2)]} \quad (5.46)$$

Por outro lado, no caso do modelo 2 para as mesmas condições, m_2 toma a seguinte forma:

$$m_2 = \pm \left(\frac{8q\rho_2[(2-\rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3-2\rho_2)] - 4\rho_2^3(1-r)(4-3\rho_2) + 8\alpha(1-r)(1-\rho)^4}{4\rho_2(4-3\rho_2)(2q-1+r)} \right)^{1/2},$$

que por sua vez, é estável para p, r, q e α , tais que $q(p, r, \alpha) < q_c(p, r, \alpha)$, com $q_c(p, r, \alpha)$ tomando a seguinte expressão:

$$q_c(p, r, \alpha) = \frac{(1-r)[(4-3\rho_2)\rho_2^3 - 2\alpha(1-\rho)^4]}{2\rho_2[(2-\rho_2)^3 + 2\rho_2^2(3-2\rho_2)]}. \quad (5.47)$$

A figura 5.26 mostra de maneira comparativa os diagramas de fases obtidos através das expressões (5.46) e (5.47), com $p = 1,0$ e $0 \leq \alpha \leq 1$. As linhas tracejadas, em especial, correspondem aos modelos 1 e 2. No gráfico 1 do quadro comparativo, o modelo 1 está associado a $\alpha = 0$, enquanto que o modelo 2 corresponde a $\alpha = 1$ no gráfico 2. Em ambos os gráficos, as linhas críticas, associadas a diferentes valores de α , somente deixam de terminar em $r_c = 1,0$ ($p = 1,0$) se α é diferente de zero. Portanto, a introdução da probabilidade de transição do votante opinativo ($\sigma_i = \pm 1$) com todos os primeiros vizinhos neutros parece ser fundamental para que haja mais de um ponto crítico na linha $q = 0$.

Figura 5.26: Quadro comparativo dos diagramas de fases dos modelos 1 e 2, obtido através de aproximação de campo médio simples, com $p = 1$ e $0 \leq \alpha \leq 1$. Os símbolos F e P indicam as fases ativas ferromagnética e paramagnética, respectivamente.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho propusemos modelos estocásticos de gás de rede descritos por regras locais e irreversíveis. Os modelos apresentam simetria *up-down* e um estado absorvente.

O modelo A com simetria *up-down*

O primeiro modelo proposto foi o modelo A com simetria *up-down*. Neste trabalho, os sítios podem estar vazios ($\sigma_i = 0$) ou ocupados por partículas $+1$ e -1 ($\sigma_i = \pm 1$). Segundo as regras do modelo, os sítios ocupados tornam-se vazios espontaneamente, enquanto os sítios vazios são ocupados segundo uma taxa λ , se há pelo menos um primeiro vizinho ocupado. O tipo de partícula que pode ocupar o sítio vazio depende do número de partículas de cada tipo dentre os primeiros vizinhos ocupados. Se há, por exemplo, uma maioria de $+1$'s (-1 's), o sítio é ocupado por $+1$ (-1). O modelo proposto é semelhante, em alguns aspectos, a um modelo estocástico de gás de rede, conhecido como modelo A. Neste modelo, os sítios só podem estar ocupados por partículas $+1$. Portanto, os modelos se assemelham quando mapeamos o valor $+1$ nos valores $+1$ e -1 .

Na cadeia linear, o modelo foi estudado mediante aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo. Ambos os métodos mostraram somente a existência de uma transição de fase contínua em $\lambda = \lambda_c$ entre um estado ativo, caracterizado por densidade não nula de partículas, e um estado absorvente de 0, caracterizado por densidade nula de partículas, e no qual, uma vez atingido, o sistema fica aprisionado. Essa transição de fase era esperada, já que ela acontece no modelo A original. A aproximação de campo médio simples forneceu $\lambda_c = 0,5$, enquanto a aproximação de campo médio de pares alcançou $\lambda_c = 1,0$. Já as simulações de Monte Carlo forneceram $\lambda_c \approx 1,739$ e $\beta \approx 0,29$, mostrando que o modelo proposto também está na classe de universalidade da percolação direcionada.

Por outro lado, as simulações numéricas, ainda em cadeias lineares, mostraram que o estado estacionário ativo é de caráter ferromagnético, ou seja, caracterizado por domínios

Os modelos 1 e 2 foram estudados inicialmente com todos os primeiros vizinhos neutros.

Os modelos 1 e 2 foram estudados mediante aproximação de campo médio simples e simulações de Monte Carlo associadas à análise de teoria de escala finita, enquanto os modelos com o parâmetro α foram explorados apenas através de aproximação de campo médio simples.

No conjunto dos resultados, vamos enumerar primeiro aqueles que são comuns a todas as versões. A aproximação de campo médio simples se mostrou bastante satisfatória e em consonância com os resultados das simulações numéricas, apontando a existência de três tipos de estados estacionários: estado absorvente, onde a densidade de votantes, ρ , é igual a zero; estado estacionário ativo, caracterizado por $\rho \neq 0$, sub-classificado em estados estacionários de caráter ferromagnético e paramagnético. Dado que as dinâmicas foram construídas a partir do modelo de contato, esperaríamos que os modelos apresentassem transição de fase contínua em $r = r_c$ entre o estados absorvente e ativo. E o ponto crítico seria, então, da classe de universalidade da percolação direcionada. Esse comportamento foi verificado tanto pela aproximação de campo médio simples como pelas simulações numéricas. O primeiro método forneceu $r_c = 1,0$ ($p = 1$), enquanto as simulações de Monte Carlo alcançaram $r_c \approx 0,607$ ($p = 1,0$) e $\beta \approx 0,581$, que está de acordo com a literatura.

Outro ponto comum entre os modelos corresponde à situação na qual $r = 0$, $p = 1$ e, por conseguinte $\rho = 1, 0$. Neste caso, temos de volta, em meio às regras do modelo proposto, o modelo do votante majoritário isotrópico que apresenta transição de fase contínua, em $q = q_c$, entre estados estacionários de caráter ferromagnético e paramagnético. Este ponto crítico é da classe de universalidade do modelo de Ising (de equilíbrio) em duas dimensões. O nosso trabalho reproduziu esses resultados, sendo que a aproximação de campo médio simples forneceu $q_c = 0,167$, uma quota superior para o valor real, enquanto as simulações numéricas produziram $q_c = 0,076 \pm 0,001$, $\beta/\nu = 0,127 \pm 0,002$, $\gamma/\nu = 1,72 \pm 0,08$, de acordo com a literatura, cmo pode ser observado no Quadro 1.

Os diagramas de fases (r versus q) dos modelos, fornecidos por aproximação de campo médio simples e simulações de Monte Carlo, figuras 6.1 e 6.2 respectivamente, mostram uma linha crítica que nasce em $q = q_c$ e termina na linha $q = 0$. Esta linha se estreita na medida em que se aproxima da fase absorvente, ou na medida em que r cresce e termina em $r = r_c$, ou em $r < r_c$, para os modelos 2 e 1, respectivamente. A linha crítica separa as fases ativas de caráter ferromagnético e paramagnético. Se, por exemplo, fixarmos $r = r'$ tal que $r' < r_c$ e variarmos q , enquanto $q < q_c(r')$, onde $q_c(r')$ indica o ponto crítico correspondente a r' , o sistema se encontra na fase ativa ferromagnética. Em $q_c(r')$, o sistema passa por uma transição de fase contínua e atinge a fase ativa paramagnética. Segundo indicaram nossos resultados ($r'; q_c(r')$) tem as mesmas propriedades universais do modelo do votante majoritário isotrópico. Alguns valores de ($r'; q_c(r')$) encontram-se no Quadro 1, conjuntamente com os respectivos expoentes críticos e valores universais, que

podem ser comparados aos valores correspondentes para a temperatura crítica do modelo de Ising (de equilíbrio) em duas dimensões. Vale ressaltar que é bastante interessante que, apesar do estado absorvente, o comportamento crítico do modelo do votante majoritário isotrópico, dentro de certos limites, não tenha sido alterado.

Figura 6.1: Diagramas de fase (r versus q) dos modelos 1 e 2, obtidos através de Aproximação de Campo Médio Simples, com $p = 0,8$. Os símbolos F e P indicam as fases ativas Ferromagnética e Paramagnética, respectivamente. O símbolo A indica o estado Absorvente.

O diagrama de fases do modelo 1, obtido mediante aproximação de campo médio simples, mostra a linha crítica terminando em r_c . As simulações numéricas não mostraram resultados conclusivos a esse respeito, dado que a região próxima ao estado absorvente é muito complicada devido a fatores como necessidade de redes muito grandes e conseqüente aumento no tempo da simulação. Estudar melhor essa região é uma das questões em aberto deste trabalho. Provavelmente, seria necessário desenvolver a aproximação de campo médio de pares e usar técnicas mais apuradas de simulação.

Figura 6.2: Diagramas de Fase (r versus q) obtidos através de Simulações de Monte Carlo dos modelos **1** e **2**, com $p = 1,0$. O símbolo A indica a fase Absorvente, enquanto os símbolos F e P indicam as fases ativas Ferromagnética e Paramagnética, respectivamente.

O diagrama de fases do modelo **2**, fornecido pela aproximação de campo médio simples, apresenta a linha crítica terminando em um ponto crítico, $r = r_c^*$, relativamente distante da transição ativo-absorvente. Esse método forneceu $r_c^* = 0,572$ ($p = 1,0$), uma quota superior para seu valor real. As simulações numéricas confirmaram esse comportamento e forneceram $r_c^* = 0,323 \pm 0,001$ ($p = 1,0$) que, segundo indicaram nossos resultados, também pertence à classe de universalidade do modelo de Ising (de equilíbrio) em duas dimensões.

$(\tau; q) (p = 1, 0)$ (ponto da linha crítica)	U	β/ν	γ/ν
$(0, 076 \pm 0, 001)$ (modelos 1 e 2)	$0, 611 \pm 0, 001$	$0, 127 \pm 0, 002$	$1, 72 \pm 0, 002$
$(0, 3 ; 0, 024 \pm 0, 001)$ (modelo 1)	$0, 608 \pm 0, 007$	$0, 125 \pm 0, 005$	$1, 72 \pm 0, 06$
$(0, 15 ; 0, 040 \pm 0, 002)$ (modelo 2)	$0, 610 \pm 0, 005$	$0, 122 \pm 0, 009$	$1, 72 \pm 0, 16$
$(0, 323 \pm 0, 001 ; 0)$ (modelo 2)	$0, 613 \pm 0, 004$	$0, 129 \pm 0, 005$	$1, 76 \pm 0, 09$
Modelo do Votante Majoritário Isotrópico	$0, 61 \pm 0, 01$	$0, 125 \pm 0, 005$	$1, 73 \pm 0, 05$
Modelo de Ising $T_c (d = 2)$	$0, 611$	$1/8 = 0, 125$	$7/4 = 1, 75$

Quadro 1: Pontos críticos dos Diagramas de Fase (Simulações de Monte Carlo)

A introdução do parâmetro α na dinâmica dos modelos 1 e 2 nos proporcionou, num certo sentido, modelos mais gerais e uma base de comparação muito interessante. Provavelmente, o resultado mais importante concerne à dependência do comportamento crítico da linha $q = 0$ em relação a α . Como pode ser observado na figura 6.3, na medida em que variamos α , o comportamento crítico da linha $q = 0$ se modifica. Vale relembrar que se fizemos $\alpha = 0$ no modelo 1 generalizado, recaímos no modelo 1 descrito inicialmente. Enquanto que se fizemos $\alpha = 1$ no modelo 2 generalizado, voltamos ao modelo 2 apresentado originalmente. Se, no entanto, fizemos $\alpha = 0$ nas regras do modelo 2, a linha

crítica deixa de terminar num ponto crítico distinto de r_c (no qual ocorre a transição ativo-absorvente). Enquanto que se colocarmos $\alpha = 1$ nas regras do modelo 1, a linha crítica não termina mais em r_c , deslocando-se para $r = r_c^* < r_c$. Fica claro, dessas considerações, que a inserção da regra de mudança controlada por α é fundamental para a existência de dois pontos críticos na linha $q = 0$. Valores intermediários de α apenas deslocam o ponto r_c^* , e no limite em que α cresce, r_c^* parece tender a r_c . Contudo, tais observações devem ser verificadas por aproximações mais sofisticadas e simulações numéricas.

Figura 6.3: Quadro comparativo dos diagramas de fases dos modelos 1 e 2, obtido através de Aproximação de Campo Médio Simples, com $p = 0,8$ e $0 \leq \alpha \leq 1$. Os símbolos F e P indicam as fases ativas Ferromagnética e Paramagnética, respectivamente. O símbolo A indica o estado Absorvente

Portanto, os modelos propostos neste trabalho se mostraram bastante ricos em termos de fenômenos críticos de sistemas irreversíveis e abriram perspectivas de novos estudos.

Apêndice A

A equação de evolução de m , para o modelo 2 tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{dm}{dt} = & p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 3p \left[P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
 & + 3p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] + 3p \left[P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
 & + p \left[P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] + 2p \left[P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} - P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
 & + 2 \left[(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 \end{pmatrix} + 4 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} + 6 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
 & + q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} + 4 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + 12 \cdot (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 12q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + 6(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & +1 \end{pmatrix} + 12 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & +1 \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + 6q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & \\ & -1 & 0 \end{pmatrix} \Bigg] - 2 \left[4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ & +1 & \end{pmatrix} + 4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix} \right. \\
& + 6 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & \\ & +1 & +1 \\ & -1 & \end{pmatrix} + (1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & \\ & +1 & -1 \\ & -1 & \end{pmatrix} + 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ & +1 & -1 \\ & -1 & \end{pmatrix} + \\
& 4 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ & +1 & 0 \end{pmatrix} + 12 \cdot q \cdot P \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ & +1 & 0 \end{pmatrix} + 12(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & +1 & -1 \\ & +1 & 0 \end{pmatrix} \\
& + 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} -1 & -1 & \\ & +1 & -1 \\ & 0 & \end{pmatrix} + 6q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & \\ & +1 & 0 \\ & +1 & \end{pmatrix} + 12 \cdot \frac{(1-r)}{2} \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & \\ & +1 & 0 \\ & +1 & \end{pmatrix} + \\
& 4(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & \\ & +1 & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix} + 6(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & -1 & \\ & +1 & 0 \\ & -1 & \end{pmatrix} + 4q \cdot P \begin{pmatrix} 0 & +1 & \\ & +1 & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix} \Bigg] - r[P(+1) - P(-1)] \\
& - (1-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & 0 & \\ & +1 & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix} + 6(1-q-r) \cdot P \begin{pmatrix} 0 & 0 & \\ & +1 & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix} - r[P(+1) - P(-1)]
\end{aligned}$$

Referências Bibliográficas

- [1] T. Tomé, *Irreversibilidade: Modelos de rede com Dinâmicas Estocásticas*, Tese de livre-docência, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.
- [2] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **42**, 151 (1981).
- [3] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Yu He, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2527 (1985).
- [4] P. Grassberger, *J. Stat. Phys.* **22**, 3673 (1989).
- [5] N. G. van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [6] Sheldon M. Ross, *Stochastic Process* John Wiley, New York, 1996.
- [7] R. B. Griffiths, comunicação privada, 1989.
- [8] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [9] R. Dickman, *Phys. Lett. A* **122**, 463 (1987).
- [10] H. Mamada e F. Takano, *J. Phys. Soc. Japan* **25**, 675 (1968).
- [11] T. Tomé, M. J. de Oliveira e M.A. Santos, *J. Stat. Phys. A* **24**, 3677, 1991.
- [12] R. Dickman, *Phys. Rev. A* **34**, 4246 (1986).
- [13] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **40**, 6643 (1989).
- [14] T. Tomé e M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Edusp, 2001.
- [15] K. Binder. *Topics of Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Springer-Verlag, New York, 1984.

- [16] K. Binder and D. Heermann, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [17] O. G. Mouritsen, *Computers Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena*, Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [18] A. E. Ferdinand e M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **185** 832 (1969).
- [19] M. J. Oliveira. *J. Stat. Phys.* **66**, 273 (1992).
- [20] A. Brunstein. *Comportamento Crítico e Transições de fase dinâmicas em autômatos Celulares probabilísticos*, Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999.
- [21] N. R. S. Ortega, C.F.S. Pinheiro, T. Tomé, J.R. Drugowich de Felício, *Physica A* **255**, 189 (1998).
- [22] K. Binder. *Some recent Progress in the Phenomenological Theory of Finite Size Scaling and Application to Monte-Carlo Studies of Critical Phenomena*, in: V. Privman, Word Scientific, Cingapura, 1990.
- [23] D. P. Landau, *Finite Size Scaling and Numerical Simulations of Statistical Systems*, in: V. Privman, Word Scientific, Cingapura, 1990.
- [24] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Publicação Científica da Universidade de Oxford, 1992.
- [25] T. M. Liggett. *Interacting Particle Systems*. Springer-Verlag, New York, 1985.
- [26] L. Gray, in *Particle Systems, Random Media and Large Deviations*, R. Durrett, ed. AMS 1985, pag. 149.
- [27] R. C. Brower, M. A. Furman e M. Moshe, *Phys. Lett. B* **76**, 213 (1978).
- [28] R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **55**, 997 (1989).
- [29] P. Clifford e A. Sudbury, *Biometrika* **60**, 581 (1975).
- [30] R. Holley e T. M. Liggett, *Ann. Prob.* **3**, 643 (1975).
- [31] T. E. Harris, *Ann. Probab.* **2**, 969 (1974).
- [32] R. Dickman, *Int. J. Mod. Phys. (C4)* **271** (1993).
- [33] R. M. Ziff, E. Gulari e Y. Barshad, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553 (1986).

- [34] R. Dickman e M. Burschka, *Phys. Lett. A* **127**, 132 (1988)
- [35] N. Konno, *Phase Transitions of Interacting Particle Systems*, World Scientific, 1994.
- [36] R. Dickman e J. K. Leal da Silva, *Phys. Rev. E* **58** (4), 4266 (1998)
- [37] T. Tomé, J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* **53** (4), 3976 (1996)
- [38] Sheng-Keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*. Benjamin Reading, 1976.