

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Modelos de Contato com Probabilidades Aperiódicas

Darielder Jesus Ribeiro



Prof. Celso Luiz Lima
Presidente da Comissão de Pós-Graduação



Orientador: Silvio R. A. Salinas

*Dissertação de mestrado
apresentada ao Instituto de
Física para a obtenção do
título de Mestre em Ciências*

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Silvio Roberto Azevedo Salinas (IFUSP)

Prof^a. Dr^a. Tânia Tomé Martins de Castro (IFUSP)

Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)

SÃO PAULO
2005



SBI-IFUSP



305M810T4419

def. 31/10/05

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

Ribeiro, Darielder Jesus

Modelos de Contato com Probabilidades Aperiódicas.
São Paulo, 2005.

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

Orientador: Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas
Área de Concentração: Física

Unitermos:

- 1
- 2 1. Dinâmica Estocástica;
- 3 2. Modelo de Mecânica Estatística-Modelo de Contato
3. Modelo de Mecânica Estatística-Modelos Desordenados;
4. Modelo de Mecânica Estatística – Modelos Aperiódicos.

USP/IF/SBI-086/2005

Agradecimentos

Ao Mestre Prof. Salinas que aceitou-me e aturou-me desde a iniciação científica com uma orientação absurdamente enriquecedora e profícua.

Aos professores Tânia Tomé e Mário José de Oliveira, que sempre tiveram enorme paciência quando por mim procurados.

Aos amigos de sala; Alexei Veneziane, Leonardo Crochick, Renato Germano e Leonardo Guide.

Aos caros amigos e colegas de grupo que muitíssimo contribuíram na realização deste trabalho; André Vieira, Angsula Ghosh, Masayuki Hase e Tomás Haddad.

Ao pessoal de apoio que realmente nos apoia; José Valdir, Sérgio Milaré, Márcia Silvani, Dirce de Almeida, Silvana Oliveira e Ivone Vantini.

Aos amigos Áttila Leães e Henrique Guide nas interações e discussões sobre nossos trabalhos acadêmicos.

Aos meus amigos de longo curso Derberson de Sousa e Edwin Júnior, pela amizade companheirismo e ombros.

Aos meus amados pais Dário e Nalva, e irmãos; Van, Ed, Jony, Joi e Dine.

À minha amada Prenda, cujo nome sintetiza tudo.

E finalmente a Deus que tudo fez e tudo criou, em tudo me fortaleceu e me capacitou para que este trabalho viesse a fim. Obrigado Senhor.

Resumo

A análise de modelos de contato na presença de elementos de desordem fixa indica o surgimento de desvios em relação ao comportamento crítico do modelo uniforme subjacente. Nesse trabalho consideramos o efeito da aperiodicidade, que também é capaz de produzir flutuações de natureza geométrica. Utilizamos distribuições aperiódicas de probabilidades, definidas através de regras de substituição determinísticas, a fim de analisar o comportamento crítico desses modelos de contato. Realizamos simulações de Monte Carlo para modelos definidos por três regras distintas, caracterizadas por um expoente ω , associado à intensidade das flutuações geométricas. Nos modelos A e B, com $\omega = -1$ e $\omega = 0$, não constatamos qualquer mudança em relação à classe de universalidade crítica da percolação direcionada. Já no Modelo C, com $\omega = 0.6309$, as flutuações geométricas alteram a classe de universalidade crítica.

Abstract

The analysis of contact models in the presence of quenched disorder indicates the onset of deviations with respect to the critical behavior of the underlying uniform system. In the present work, we consider the effects of aperiodicity, which are also known to produce fluctuation of geometric nature. We use aperiodic distributions of probabilities, given by deterministic substitution rules, in order to analyze the critical behavior. We performed Monte Carlo simulations for three different rules, characterized by an exponent ω , which gauges the intensity of the geometric fluctuations. For models A and B, with $\omega = -1$ and $\omega = 0$, we have not detected any changes with respect to the universality class of directed percolation. For model C, with $\omega = 0.6309$, the geometric fluctuations change the critical universality class.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Modelo de contato uniforme	3
1.1.1	Aproximações de campo médio	5
1.1.2	Expoentes críticos do modelo de contato	9
1.1.3	Escala de tamanho finito	11
1.1.4	Simulações de Monte Carlo	12
1.2	Modelo de contato desordenado	22
2	Aperiodicidade	27
2.1	Modelos aperiódicos	27
2.2	Modelo de contato aperiódico	30
2.2.1	Modelo A	32
2.2.2	Modelo B	37
2.2.3	Modelo C	42
3	Conclusão	48

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas décadas, em parte devido ao avanço dos recursos computacionais, tem havido grande interesse no estudo de modelos de física estatística com transições de fase fora do equilíbrio termodinâmico. Autômatos celulares [1] probabilísticos, como o autômato de Domany-Kinzel [2], ou modelos estocásticos descritos por uma equação mestra, como o modelo de contato, que será tratado neste texto, têm despertado o interesse de pesquisadores das mais variadas áreas [3]. Uma das características atrativas destes modelos é a presença de transição de fase mesmo em uma dimensão, diferentemente dos modelos de equilíbrio, como o modelo de Ising, que não são capazes de apresentar transição em uma dimensão para temperaturas finitas.

Nosso trabalho abordará os aspectos críticos do modelo de contato. No capítulo 1 introduzimos o modelo de contato uniforme e algumas simulações para caracterizar a sua criticalidade. Esse estudo é uma preparação para a aplicação de técnicas que usaremos mais adiante. Em seguida apresentamos o modelo de contato desordenado, cujas propriedades críticas já foram estudadas, revelando mudanças de classe de universalidade. No capítulo 2 apresentamos o modelo de contato com probabilidades aperiódicas. Estudamos três casos distintos e apresentamos os resultados obtidos a partir de simulações de Monte Carlo, suas análises e conclusões.

Tanto a desordem quanto uma distribuição aperiódica provocam flutuações geométricas que podem alterar a classe de universalidade crítica dos modelos estatísticos. Isso é bem conhecido no caso de fenômenos críticos em equilíbrio (o critério de Harris [19] para a relevância da desordem foi generalizado por Luck [24] para situações

de aperiodicidade). Há evidências numéricas de que elementos de desordem introduzem flutuações geométricas que alteram o comportamento crítico dos modelos de contato em uma dimensão [15, 17]. No presente trabalho o modelo de contato unidimensional é estudado na presença de aperiodicidade produzida por regras de substituição associadas a um expoente ω que se refere à intensidade das flutuações geométricas. Apresentamos evidências numéricas de que o comportamento crítico somente se altera para valores suficientemente grandes de ω .

1.1 Modelo de contato uniforme

O processo de contato proposto por Harris em 1974 [4] é um mecanismo estocástico para explicar a propagação de uma epidemia simples. O modelo de contato consiste de uma rede em que cada sítio representa um indivíduo que pode estar em dois estados, são ou infectado. A epidemia se propaga através de contatos entre primeiros vizinhos; um indivíduo infectado transmite a doença à sua vizinhança à taxa λ/z , em uma rede de coordenação z , enquanto o indivíduo infectado se torna são com uma taxa igual a 1, mas não fica imune a uma nova infecção. Para que um indivíduo seja infectado é necessário no mínimo um vizinho infectado. Assim, existe um estado em que todos os indivíduos estão sãos, que é chamado *estado absorvente* do sistema. A evolução do sistema está vinculada à taxa de infecção λ : abaixo de um certo valor λ_c o sistema evolui para o estado absorvente; acima deste valor, o sistema evolui para um *estado estacionário ativo*, em que a epidemia não cessa completamente mas também não contamina a totalidade da população, pois existe sempre a probabilidade de um indivíduo se recuperar espontaneamente.

Formalmente o processo de contato pode ser visto como um sistema de partículas interagentes residindo em sítios de uma rede, cuja evolução ocorre segundo regras locais numa cadeia de Markov [5]. Cada sítio da rede pode estar em dois estados: vazio ou ocupado. A evolução do sistema consiste em escolher ao acaso um sítio na rede: se o sítio estiver vazio, ele passa a ser ocupado com a taxa de transição $\lambda n/z$, onde n é o número total de primeiros vizinhos ocupados, representando um processo de criação autocatalítica de partículas; se o sítio escolhido estiver ocupado, ele é esvaziado a uma taxa igual a 1, que representa um processo de aniquilação espontânea de partículas.

Uma configuração microscópica do sistema é dada por

$$\vec{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N),$$

onde $\sigma_i = 1$ ou 0 representa um sítio ocupado ou vazio, respectivamente, e N é o número total de sítios no sistema. A evolução temporal da probabilidade de encontrarmos o sistema em uma dada configuração $\vec{\sigma}$ pode ser obtida a partir da

equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\vec{\sigma}, t) = \sum_i \{\omega_i(\sigma^i)P(\sigma^i, t) - \omega_i(\sigma)P(\sigma, t)\}. \quad (1.1)$$

A notação σ^i representa a configuração microscópica

$$\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, 1 - \sigma_i, \dots, \sigma_N);$$

a taxa de transição $\omega_i(\sigma)$ é dada por

$$\omega_i(\sigma) = \frac{\lambda}{z}(1 - \sigma_i) \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + \sigma_i. \quad (1.2)$$

A soma é realizada sobre os z primeiros vizinhos do sítio i . Notemos que na expressão acima o primeiro termo corresponde a uma criação autocatalítica de partículas, enquanto o segundo diz respeito à aniquilação espontânea de partículas. Multiplicando a equação (1.1) por σ_i e realizando uma soma sobre todas as configurações σ , obtemos a equação de evolução para a média $\langle \sigma_i \rangle$, que é dada por

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_i \rangle = \langle (1 - 2\sigma_i)\omega_i(\sigma) \rangle. \quad (1.3)$$

Usando a taxa de transição 1.2 para este modelo, obtemos

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_i \rangle = \frac{\lambda}{z} \sum_{\delta} \langle (1 - \sigma_i)\sigma_{i+\delta} \rangle - \langle \sigma_i \rangle. \quad (1.4)$$

Considerando uma solução isotrópica, podemos tomar a média $\langle \sigma_i \rangle$ como a densidade de partículas ρ no sistema (independente de i), e a média $\langle \sigma_i \sigma_{i+\delta} \rangle$ como a correlação entre dois sítios vizinhos ϕ (independente de i e de δ). Logo, reescrevendo a equação (1.4), teremos

$$\frac{d}{dt}\rho = \lambda(\rho - \phi) - \rho. \quad (1.5)$$

Esta equação não possui solução exata. Em geral, podemos recorrer a uma aproximação de campo médio, como será visto adiante.

1.1.1 Aproximações de campo médio

- *campo médio simples*

A aproximação de campo médio simples consiste em adotar a aproximação $\phi = \rho^2$. Desta forma, a equação (1.5) torna-se

$$\frac{d}{dt}\rho = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2. \quad (1.6)$$

As soluções estacionárias para esta equação, que correspondem a

$$\frac{d}{dt}\rho = 0,$$

são facilmente obtidas, sendo dadas por

$$\rho = 0,$$

que representa o estado absorvente do modelo, e

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda},$$

que representa o estado estacionário ativo, para $\lambda > 1$, com uma densidade de partículas não nula. Notemos que o sistema possui uma transição de fase, no estado estacionário, entre um estado de densidade nula (estado absorvente) e um estado de densidade maior que zero (estado ativo). A transição de fase do sistema é caracterizada pelo parâmetro de ordem ρ , que representa a densidade de sítios ativos. Na vizinhança do ponto crítico o sistema se comporta assintoticamente, para $\lambda \rightarrow \lambda_c$, de acordo com a relação

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^\beta, \quad (1.7)$$

onde λ_c é a taxa crítica (neste caso $\lambda_c = 1$), e o expoente crítico é $\beta = 1$. Essa aproximação é tão simples que também nos permite resolver exatamente a equação (1.6), para $\lambda \neq 1$, com a solução

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda - ce^{-(\lambda-1)t}}. \quad (1.8)$$

A constante c depende das condições iniciais do problema. Para o caso em que $\rho(0) = \rho_0$, no instante $t = 0$, temos

$$c = \lambda - \frac{(\lambda - 1)}{\rho_0}.$$

No limite $t \rightarrow \infty$ e $\lambda < 1$, o sistema decai exponencialmente para a solução estacionária, $\rho = 0$, de acordo com a expressão

$$\rho = Ae^{-(1-\lambda)t},$$

onde A é uma constante positiva. No entanto, para $\lambda > 1$, nesse mesmo limite $t \rightarrow \infty$, atinge-se um estado ativo do sistema, $\rho = (\lambda - 1)/\lambda$, conforme a expressão

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}.$$

Nos dois regimes podemos definir um tempo de relaxação τ , dado por

$$\tau \sim |\lambda_c - \lambda|^{-1}.$$

Vemos que, no ponto crítico $\lambda_c = 1$, o tempo de relaxação diverge. Podemos voltar à equação (1.6); inserindo o valor $\lambda = 1$, temos

$$\frac{d}{dt}\rho = -\rho^2,$$

que nos fornece a solução

$$\rho = \frac{1}{k + t},$$

onde k é uma constante. Esta solução mostra, para tempos longos, que o sistema apresenta um comportamento tipo lei de potência, $\rho \sim t^{-1}$, no ponto crítico.

- *campo médio de pares*

Neste caso, trata-se com maior cuidado a correlação entre dois sítios, $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$. A

equação para a evolução temporal de dois sítios é dada por

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \langle(1-2\sigma_i)\sigma_j\omega_i(\sigma)\rangle + \langle(1-2\sigma_j)\sigma_i\omega_j(\sigma)\rangle. \quad (1.9)$$

Usando a taxa de transição do modelo (1.2), encontramos

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \frac{\lambda}{z} \sum_{\delta(i+\delta\neq j)} \langle(1-\sigma_i)\sigma_j\sigma_{i+\delta}\rangle + \frac{\lambda}{z} \langle(1-\sigma_i)\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\sigma_j\rangle. \quad (1.10)$$

Vemos que a evolução da correlação de dois sítios envolve a correlação de três sítios, e assim sucessivamente. Para resolver (aproximadamente) este problema, introduzimos um truncamento a fim de desacoplar o sistema de equações. Utilizamos então a aproximação de pares,

$$\langle\sigma_j\sigma_i\sigma_k\rangle = \frac{\langle\sigma_j\sigma_i\rangle\langle\sigma_i\sigma_k\rangle}{\langle\sigma_i\rangle}, \quad (1.11)$$

sendo j e k dois sítios vizinhos ao sítio i . Considerando um sistema isotrópico, como na aproximação mais simples, obtemos

$$\frac{d}{dt}\phi = \frac{2\lambda(z-1)}{z} \frac{(\rho-\phi)^2}{(1-\rho)} + \frac{2\lambda}{z}(\rho-\phi) - 2\phi. \quad (1.12)$$

Desta forma, as equações (1.6) para a evolução de um sítio e (1.12) para a evolução da correlação de pares formam um sistema fechado em ρ e ϕ , possuindo, como na aproximação simples, duas soluções estacionárias. A solução trivial,

$$\rho = \phi = 0,$$

corresponde ao estado absorvente do sistema. A solução que corresponde ao estado estacionário ativo ($\lambda > \lambda_c$) é dada por

$$\rho = \frac{\lambda(z-1) - z}{\lambda(z-1) - 1}, \quad (1.13)$$

com

$$\phi = \frac{\lambda - 1}{\lambda}\rho.$$

Nesta aproximação a taxa crítica da transição é dada por

$$\lambda_c = \frac{z}{z-1}.$$

É importante ressaltar que, embora as taxas críticas apresentem valores distintos nessas aproximações, o comportamento crítico do parâmetro de ordem (1.7) continua o mesmo, sendo descrito pelo expoente crítico $\beta = 1$. Esperamos que à medida em que aumentemos a ordem da aproximação de campo médio o valor da taxa crítica se aproxime cada vez mais do valor exato do modelo. Notamos que o modelo de contato possui transição de fase mesmo em uma dimensão, ao contrário do modelo de Ising e de outros modelos de equilíbrio com interações de curto alcance, que não são capazes de apresentar transição de fase, em uma dimensão, para temperaturas finitas.

rede	λ_c	β
unidimensional	3.2979	0.2765
quadrada	1.649	0.58
cúbica	1.317	0.81

Tabela 1.1: Parâmetros críticos e expoentes críticos do processo de contato [5, 6].

Os parâmetros críticos do modelo de contato podem ser obtidos de forma mais controlada através de expansões em séries, ou através de simulações numéricas, que são capazes de gerar excelentes resultados. A tabela 1.1 apresenta a taxa crítica λ_c e o expoente β definidos por meio do comportamento do parâmetro de ordem na criticalidade (1.7), obtidos a partir de simulações numéricas e expansões em séries para valores de $\lambda > \lambda_c$. Note que o valor do expoente crítico β depende da dimensionalidade.

Vemos que os valores das taxas críticas obtidos anteriormente a partir das aproximações de campo médio são menores do que os valores exatos. Para o modelo unidimensional ($z = 2$) a aproximação de campo médio simples fornece $\lambda_c = 1$, enquanto para a aproximação de pares resulta em $\lambda_c = 2$ (mais próximo do valor correto). No modelo bidimensional ($z = 4$), a aproximação simples continua gerando o mesmo resultado ($\lambda_c = 1$), enquanto a aproximação de pares fornece $\lambda_c = 1.333$,

mais próximo do valor tabelado. No entanto, as duas aproximações geram o mesmo valor de expoente crítico $\beta = 1$. De fato, todas as aproximações auto-consistentes, do tipo campo médio, acabam conduzindo ao expoente "clássico", $\beta = 1$. É necessário implementar cálculos mais adequadas, capazes de captar os efeitos das flutuações críticas, a fim de obter os valores numéricos corretos dos expoentes críticos.

1.1.2 Expoentes críticos do modelo de contato

Os expoentes críticos do modelo de contato são definidos de forma análoga aos expoentes de modelos de equilíbrio. A própria definição (1.7) do parâmetro de ordem do modelo, que representa a densidade média de partículas do sistema, que vai a zero no estado absorvente, tem um papel semelhante à magnetização espontânea de um material ferromagnético, cuja função apresenta uma dependência em relação à temperatura na forma

$$m \sim \epsilon^\beta,$$

onde ϵ representa a distância ao ponto crítico, dada por

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c},$$

β é o expoente crítico relacionado ao parâmetro de ordem do modelo, e T_c é a temperatura crítica (em $\epsilon \rightarrow 0$).

Os expoentes críticos do modelo de contato podem ser divididos em dois grupos. No primeiro grupo estão os expoentes dinâmicos, que em geral podem ser definidos a partir de grandezas que são obtidas tomando-se uma configuração inicial do modelo bem próxima do estado absorvente; ou seja, com apenas uma única partícula na origem. Nesse primeiro grupo, temos:

- 1) A probabilidade de sobrevivência,

$$P(t) \propto t^{-\delta},$$

que representa a probabilidade de que o sistema não atinja o estado absorvente no tempo t (suficientemente longo), medida sobre diversas realizações do sistema.

2) O número total médio de partículas no sistema, medido sobre o conjunto de todas as realizações do sistema, incluindo aquelas em que o sistema tenha atingido o estado absorvente, no tempo t (suficientemente longo),

$$N(t) = \left\langle \sum_i \sigma_i(t) \right\rangle \propto t^\eta.$$

3) A distância quadrática média, que mede a partir da origem o espalhamento das partículas no sistema em um tempo determinado t ,

$$R^2(t) = \frac{1}{N(t)} \left\langle \sum_i i^2 \sigma_i(t) \right\rangle \propto t^z.$$

No segundo grupo estão os expoentes estáticos, definidas em função da distância ao ponto crítico, $\epsilon = \lambda - \lambda_c$, a partir de condições iniciais homogêneas, ou seja, a partir de partículas distribuídas na rede aleatoriamente. Neste segundo grupo temos:

1) A densidade média de partículas ativas no sistema,

$$\rho \propto \epsilon^\beta.$$

2) O tempo de relaxação do sistema,

$$\tau \propto \epsilon^{-\nu_{\parallel}},$$

que apresenta um comportamento divergente no ponto crítico.

3) O comprimento de correlação,

$$\xi \propto \epsilon^{-\nu_{\perp}},$$

que mede a distância da correlação entre dois sítios do sistema. Assim como o tempo de relaxação do sistema, o comprimento de correlação apresenta um comportamento divergente na criticalidade.

Os expoente críticos apresentados anteriormente têm um caráter universal, de-

pendendo apenas de algumas características do sistema, como a dimensão da rede ou o alcance das interações [6]. Segundo uma conjectura de Grassberger [7], amplamente verificada, o modelo de contato pertence à mesma classe de universalidade da percolação direcionada (ver por exemplo [5]), ou seja, os expoentes críticos são os mesmos nos dois modelos. Na presença de leis de conservação ou simetrias adicionais, outras classes de universalidade podem ocorrer, como a classe de conservação da paridade [8].

1.1.3 Escala de tamanho finito

Apresentamos na seção anterior as definições dos expoentes críticos do modelo de contato. Vamos agora fazer algumas considerações. Sabemos que no ponto crítico o comprimento de correlação tem um comportamento divergente ($\xi \rightarrow \infty$), fazendo com que qualquer pequena perturbação no parâmetro de controle do sistema provoque fortes mudanças em qualquer uma das grandezas definidas acima. Assim, nas vizinhanças do ponto crítico de um sistema linear de dimensão L , as correlações são da ordem do tamanho do sistema, ou seja,

$$\xi(t) \sim L. \quad (1.14)$$

Mas sabemos que $\xi \sim \epsilon^{-\nu_{\perp}}$; logo, para $\epsilon \ll 1$, podemos escrever

$$\epsilon \sim L^{-\frac{1}{\nu_{\perp}}}, \quad (1.15)$$

que nos leva à relação

$$\rho \sim L^{-\frac{\rho}{\nu_{\perp}}}, \quad (1.16)$$

onde ρ , como já definido, representa o parâmetro de ordem do modelo. Supondo que $\rho(\epsilon, L)$ seja uma função homogênea das variáveis ϵ e L , escrevemos

$$\rho(\epsilon, L) = k\rho(k^a\epsilon, k^bL), \quad (1.17)$$

onde k é um parâmetro arbitrário, e a e b são dois expoentes bem definidos. Escolhendo $k^a \epsilon = 1$ ($k = \epsilon^{-1/a}$), e substituindo em 1.17, temos

$$\rho(\epsilon, L) = \epsilon^{-\frac{1}{a}} \rho(1, L\epsilon^{-\frac{b}{a}}).$$

No entanto, conhecendo o comportamento crítico do parâmetro de ordem do sistema, dado por 1.7, podemos escrever $-\frac{1}{a} = \beta$, que nos fornece a relação

$$\rho(\epsilon, L) = \epsilon^\beta \rho(L\epsilon^{b\beta}), \quad (1.18)$$

Fazendo agora a escolha $k^b L = 1$ ($k = L^{-1/b}$), e novamente substituindo em 1.17, temos

$$\rho(\epsilon, L) = L^{-\frac{1}{b}} \rho(\epsilon L^{-\frac{b}{\beta}}, 1).$$

Portanto, de acordo com a relação 1.16, encontramos

$$b = -\frac{\nu_\perp}{\beta}.$$

Desta forma, temos finalmente a relação

$$\rho(\epsilon, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu_\perp}} \Phi(\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}}), \quad (1.19)$$

onde $\Phi(x)$ deve ser uma função universal.

Este resultado será extremamente importante para os cálculos apresentados mais adiante dos parâmetros críticos dos modelos de contato.

1.1.4 Simulações de Monte Carlo

Uma forma muito utilizada para estudar a dinâmica do sistema consiste em transformar a taxa λ em uma probabilidade, fazendo $p = \lambda/(\lambda + 1)$. Neste caso a evolução do sistema se desenvolve da seguinte forma: a cada passo de tempo escolhemos aleatoriamente um sítio i na rede; se o sítio estiver vazio, nada acontece com o sistema; se o sítio estiver ocupado, olhamos para sua vizinhança; se o vizinho escolhido estiver vazio, ele é ocupado com uma probabilidade p , ou então o sítio i

escolhido é desocupado com a probabilidade complementar $(1 - p)$; se a vizinhança estiver ocupada, o sistema permanece como antes. Nas simulações numéricas que mostraremos a seguir consideramos sempre condições periódicas de contorno. As configurações iniciais do sistema são obtidas aleatoriamente, com a metade da rede preenchida. O tempo é incrementado levando-se em consideração que em média todos os sítios tenham sido atualizados uma única vez; desta forma, o incremento no tempo é dado por

$$\Delta t = \frac{1}{N(t)},$$

onde $N(t)$ é o número de sítios ativos no sistema no tempo t .

O gráfico 1.1 mostra o comportamento da densidade

$$\rho = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \sigma_i \tag{1.20}$$

em função do parâmetro p , para um tempo transcorrido de 10^4 passos de Monte Carlo (*PMC*), onde consideramos que o sistema já tenha atingido o estado estacionário, em uma rede de $L = 10^4$ sítios. A estatística é feita em uma amostra de 40 realizações das condições iniciais do sistema obtidas aleatoriamente.

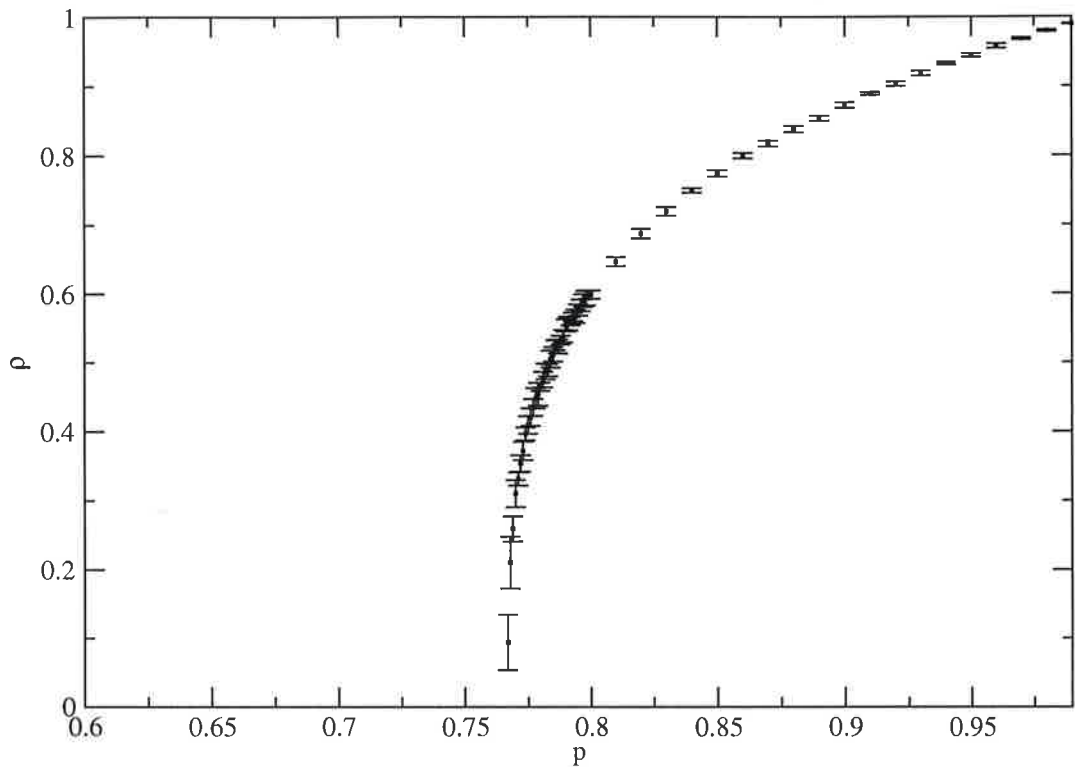


Figura 1.1: Gráfico da densidade de sítios ativos em função da probabilidade p para o modelo de contato uniforme unidimensional, com $L = 10^4$ sítios e $t = 10^5$ passos de Monte Carlo.

Os métodos que utilizamos para o cálculo dos parâmetros críticos do modelo de contato uniforme são os mesmos que aplicaremos para o modelo de contato aperiódico que será analisado no capítulo seguinte. Para o modelo uniforme os métodos podem ser aplicados de forma independente, resultando em boas estimativas dos parâmetros críticos. Para os modelos aperiódicos não há previsão na literatura. Portanto, diversos métodos precisam ser aplicados concomitantemente a fim de produzir estimativas dos parâmetros críticos. A idéia consiste em obter uma descrição consistente do comportamento crítico. Esta situação é mais grave quando o modelo foge da classe de universalidade crítica da percolação direcionada.

• *Método dos cumulantes*

Os momentos M_n da distribuição associada ao parâmetro de ordem ρ são dados por

$$M_n = \int \rho^n P(\rho, L) d\rho, \quad (1.21)$$

onde a probabilidade de distribuição de ρ , $P(\rho, L)$, escala de acordo com a relação

$$P(\rho, L) = L^{\beta/\nu_\perp} F(\rho L^{\beta/\nu_\perp}). \quad (1.22)$$

Portanto, como visto na equação 1.19, os momentos de interesse, $M_1 = \langle \rho \rangle$ e $M_2 = \langle \rho^2 \rangle$, têm as relações de escala

$$M_1 = \rho(\epsilon, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu_\perp}} \Phi_1(\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}}),$$

e

$$M_2 = \phi(\epsilon, L) = L^{-\frac{2\beta}{\nu_\perp}} \Phi_2(\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}}),$$

onde Φ_1 e Φ_2 são funções universais. Podemos definir a grandeza κ como uma razão entre os cumulantes de segunda ordem,

$$\kappa = \frac{\langle \rho^2 \rangle}{\langle \rho \rangle^2} - 1,$$

com a relação de escala

$$\kappa(\epsilon, L) = \tilde{\kappa}(\epsilon L^{1/\nu_\perp}),$$

independente de L , onde $\tilde{\kappa}$ representa uma função universal. Logo, em um gráfico de κ em função do parâmetro p ocorre um cruzamento das curvas no ponto crítico $(\tilde{\kappa}(0), p_c)$ para redes de tamanhos distintos. Essa abordagem é muito geral e pode ser aplicada para diversos tipos de modelos (veja, por exemplo, as referências [9, 11, 12, 13, 14]).

No caso específico do modelo de contato uniforme, podemos desenvolver uma análise semelhante ao trabalho de Dickman e Kamphorst [9], onde os valores dos

parâmetros críticos obedecem a relação

$$\lambda_{cr}(L, 2L) \simeq \lambda_{cr}(\infty) + \text{const}/L^2. \quad (1.23)$$

Na figura 1.2 apresentamos o comportamento dos cumulantes para o modelo uniforme. É importante apontar que como estamos tratando com redes finitas existe uma probabilidade diferente de zero de o sistema cair no estado absorvente mesmo para valores de p maiores do que p_c . Desta forma utilizamos um algoritmo que injeta partículas no sistema sempre que ele cai no estado absorvente, possibilitando o cálculo de κ , e praticamente não alterando as flutuações na densidade [13].

A figura 1.3 mostra um ajuste com a função (1.23), fornecendo o valor $p_c = 0.767(1)$ no limite $L \rightarrow \infty$. De posse do valor de p_c , ajustamos os dados do gráfico 1.1 por meio da relação,

$$\rho \sim (p - p_c)^\beta.$$

Para uma faixa de valores de p nas vizinhanças de p_c , encontramos $\beta = 0.276(2)$, totalmente de acordo com a literatura (ver tabela 1.1). Nesse método as incertezas apresentadas no parâmetro crítico p_c são estimadas graficamente. Em β as incertezas foram obtidas através dos ajustes de mínimos quadrados. Este ajuste pode ser visto no gráfico Log-Log da figura 1.4.

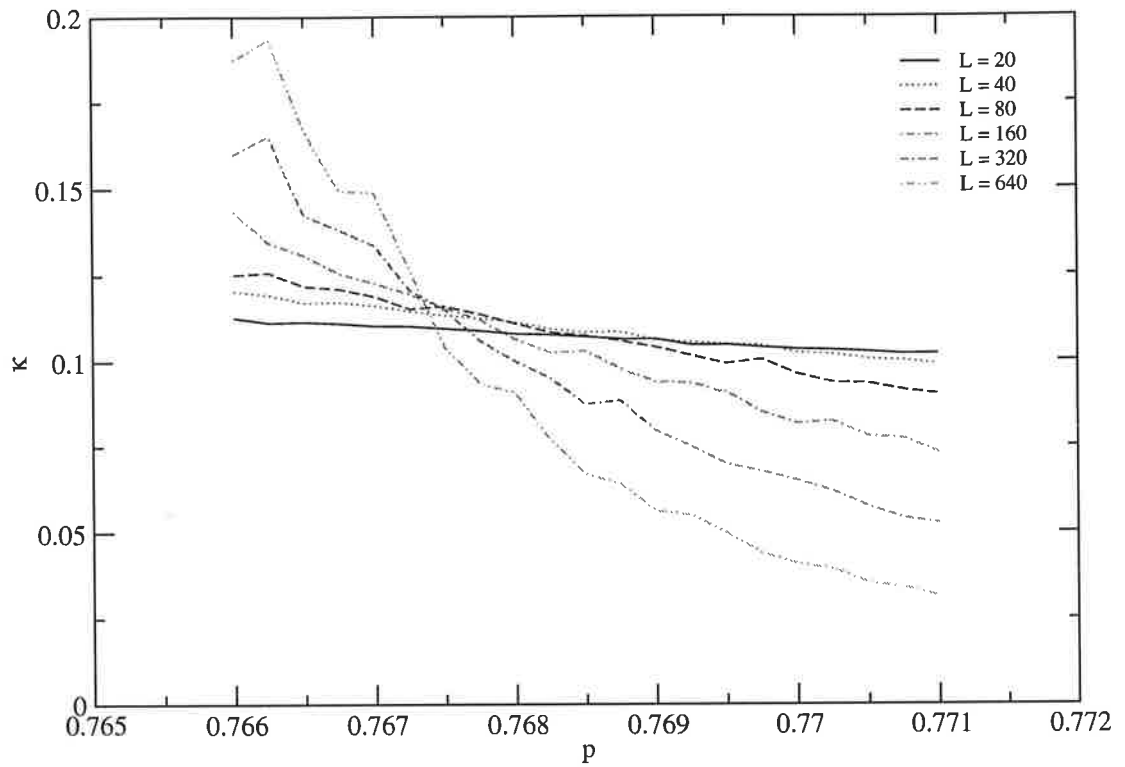


Figura 1.2: Gráfico da razão $\kappa = (\langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2) - 1$ em função do parâmetro p , para $L = 20, 40, 80, \dots, 640$.

Os tempos transcorridos nas simulações dos cumulantes são da ordem de 10^7 *PMC*. Para a rede de tamanho $L = 640$, as simulações exigiram um esforço computacional considerável (os programas ficaram rodando durante dias ou até semanas).

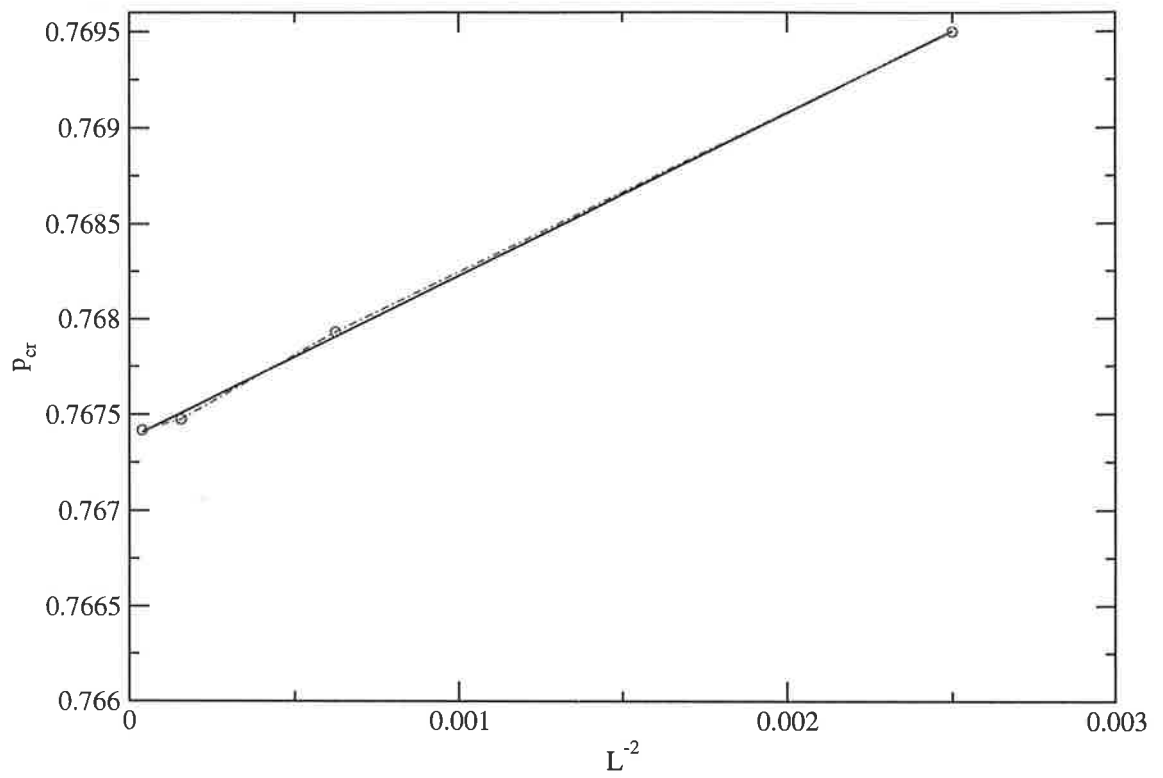


Figura 1.3: Ajuste de mínimos quadrados para os dados de $p_c(L, 2L)$ contra $1/L^2$, para $L = 20, 40, 80, 160$, e 320 .

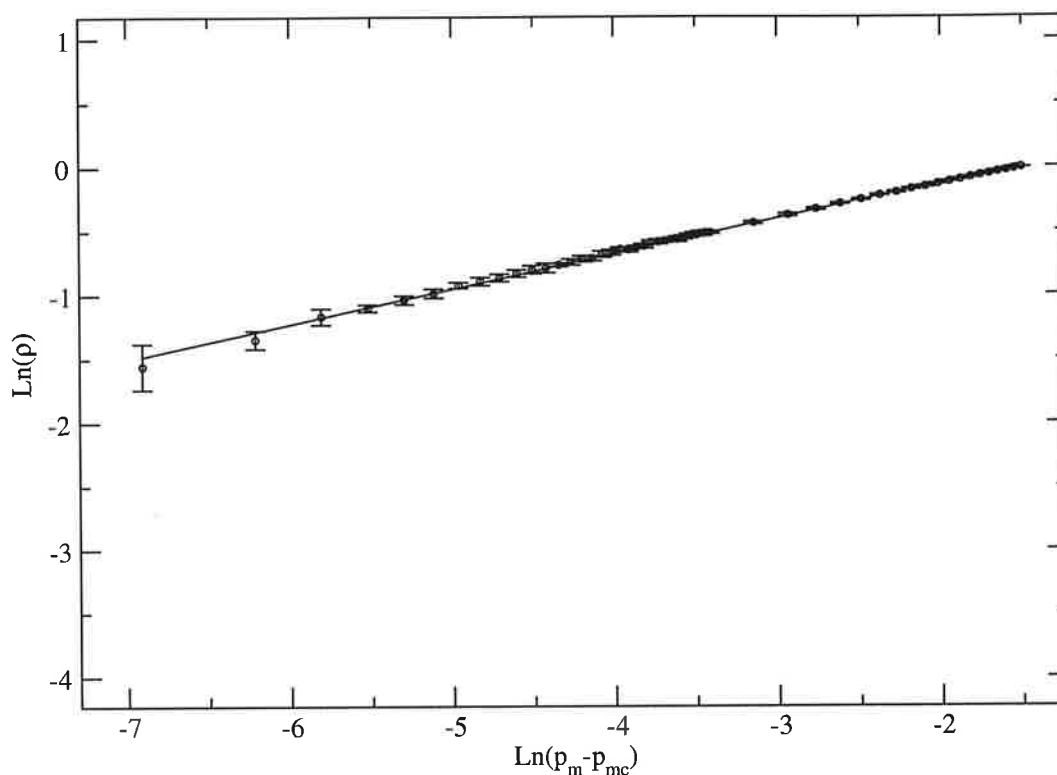


Figura 1.4: Gráfico Log-Log da densidade em função da diferença $p - p_c$, com $p_c = 0.767$, para os dados da figura 1.1.

- **Método do ajuste de funções não lineares nos parâmetros através do mapeamento por resíduos quadráticos**

Este método consiste em obter a soma dos resíduos quadráticos para vários valores dos parâmetros β e $p_c < p_i$, encontrando o mínimo valor da função [10]

$$Q = \sum_i \frac{[\rho_i - a(p_i - p_c)^\beta]^2}{\sigma_i^2}. \quad (1.24)$$

A vantagem deste método consiste em permitir aproximar-se dos parâmetros o quanto for necessário e com bastante flexibilidade (logicamente dependendo do

tempo que se queira disponibilizar para as iterações). A precisão deste método para encontrar os parâmetros críticos depende basicamente do conjunto de dados obtidos na simulação e de uma boa estatística nestes dados. Para o modelo uniforme a aplicação deste método foi capaz de gerar boas estimativas para β e p_c .

A partir dos dados da simulação da densidade ρ em função do parâmetro p , fizemos um programa para calcular Q , definido pela equação 1.24 (para valores de p_i no intervalo de 0.768 a 0.901) iterativamente, variando os parâmetros a , β e p_c . O mínimo da função Q é caracterizado pelos mínimos dos parâmetros procurados, ou seja, representa um mínimo global. Os gráficos apresentados neste trabalho mostram a função Q em relação a um único parâmetro, sendo que os outros dois, já obtidos, foram fixados com o intuito de ilustrarmos graficamente os resultados.

Obtivemos então, neste contexto, os valores $\beta = 0.272(3)$ e $p_c = 0.767(1)$, também em concordância com a literatura. As incertezas neste método são obtidas graficamente. O intervalo de confiança é dado a partir da diferença das abcissas em $Q_{min} + 1$. Nas figuras 1.5 e 1.6 apresentamos o comportamento de Q em relação aos parâmetros β e p_c , respectivamente.

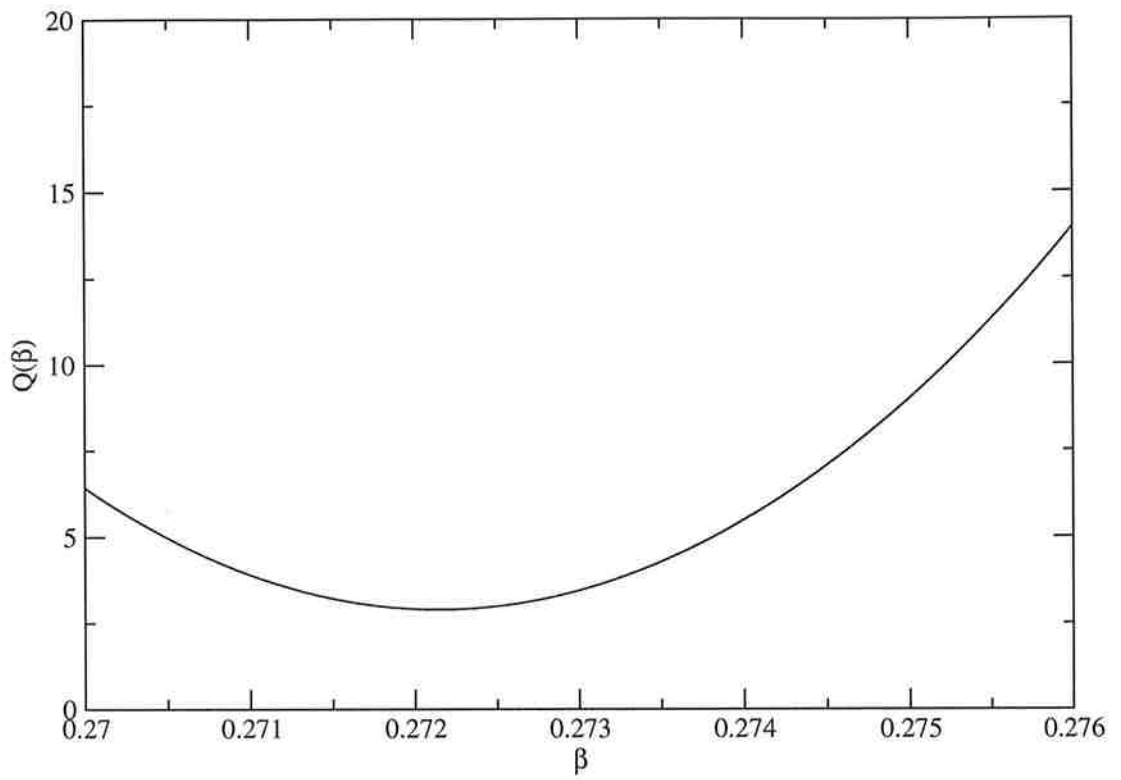
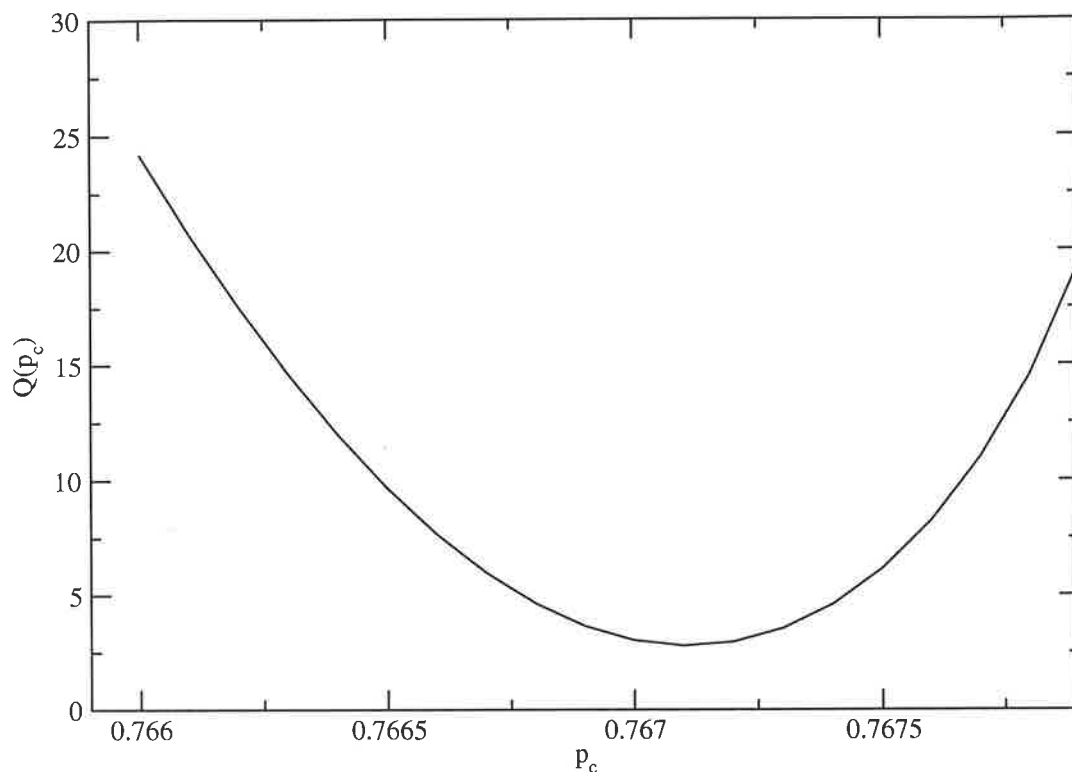


Figura 1.5: Função Q em relação ao parâmetro β .

Figura 1.6: Função Q em relação ao parâmetro p_c .

1.2 Modelo de contato desordenado

Apesar de toda a consistência dos cálculos teóricos e suas previsões, nenhum experimento tem sido capaz de reproduzir os resultados previstos para os expoentes críticos da classe de universalidade da percolação direcionada. Uma possível justificativa pode ser o fato de que os sistemas reais sempre possuem um certo grau intrínseco de impureza que acaba por alterar o comportamento crítico, levando a outras classes de universalidade. Assim, na tentativa de considerar as imperfeições e a falta de uniformidade de sistemas reais, vários trabalhos têm sido desenvolvidos

no intuito de analisar o comportamento de modelos dinâmicos na presença de algum tipo de desordem [15, 16, 17, 18].

De maneira geral, implementa-se a desordem usando uma distribuição aleatória para qualquer um dos parâmetros do sistema. Por exemplo, podemos usar uma distribuição aleatória para a taxa de criação ou aniquilação de partículas para cada sítio de uma rede. Podemos também considerar uma distribuição para as ligações entre os sítios da rede. Contudo, há uma distinção fundamental entre os tipos de desordem. A desordem pode ser *fixa* (ou congelada), quando a variável que representa a desordem está fixa no sistema; ou *recozida*, quando a variável aleatória está “livre” no sistema. Em geral, nos sistemas de interesse físico, a desordem é fixa. A desordem recozida é termalizada e pode ser estudada bem mais facilmente.

Para estudar modelos com desordem fixa é interessante recorrer a um critério devido a Harris [19], que estabelece quando certo grau de desordem adicionada ao sistema pode ser capaz de alterar o seu comportamento crítico, ou seja, se a desordem será ou não relevante para o comportamento crítico do sistema. De maneira simples, e utilizando idéias de escala, pode-se desenvolver o seguinte argumento. Considere um modelo de Ising ferromagnético em uma rede regular de dimensão d , sem campo externo, e com hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.25)$$

onde os acoplamentos entre os sítios primeiros vizinhos são dados por $J_{i,j} > 0$. Supondo que os acoplamentos entre os primeiros vizinhos em uma rede regular sejam uniformes, $J_{i,j} = J_0 > 0$, teremos uma transição de fase na temperatura crítica T_c , proporcional a J_0 . Escrevendo a distância em relação ao ponto crítico como $t = (T - T_c)/T_c$, o comprimento de correlação e o calor específico do sistema divergem de acordo com as expressões $\xi \sim |t|^{-\nu}$ e $C \sim |t|^{-\alpha}$, respectivamente. Os expoentes acima devem obedecer a relação de hiperscala, $2 - \alpha = d\nu$. Agora, suponha que exista desordem nos acoplamentos, do tipo $J_{i,j} = J_0(1 + \epsilon_{i,j})$, sendo os $\epsilon_{i,j}$ variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, com média igual a zero, ou seja, $\bar{\epsilon} = 0$, e $\overline{\epsilon^2} = \Delta^2 \ll 1$. O caso em que a largura da distribuição

é nula, $\Delta = 0$, representa a situação uniforme. Na criticalidade o sistema está dividido em domínios de correlação, representados pelo volume ξ^d . Nesses domínios de correlação cada acoplamento, para uma pequena desordem, será caracterizado por um acoplamento típico J , que se desvia do valor médio J_0 através da relação

$$\frac{(J - J_0)}{J_0} \sim \xi^{-d/2} \Delta,$$

representando um decaimento relativo característico, com uma distribuição que obedece a lei dos grandes números. Essa desordem induzida pela flutuação nos acoplamentos levará a um desvio na temperatura relativa local δt , que será proporcional ao próprio desvio do acoplamento típico, ou seja,

$$\delta t \sim \xi^{-d/2} \Delta.$$

Tendo em mente a lei de escala para o comprimento de correlação, temos

$$\delta t \sim |t|^{d\nu/2} \Delta.$$

A desordem será capaz de alterar o comportamento do sistema quando $\delta t \gg |t|$, lembrando que a região crítica implica $|t| \ll 1$. Então, para

$$d\nu \leq 2 \tag{1.26}$$

o comportamento crítico do modelo uniforme será alterado. Usando a relação de hiperescala, percebe-se que a desordem será relevante para $\alpha > 0$.

Transpondo este raciocínio heurístico para a classe de universalidade da percolação direcionada, com $\nu_{\perp} \simeq 1.097, 0.733$ e 0.581 em $d = 1, 2$ e 3 dimensões, respectivamente, a maior parte dos autores que analisaram efeitos de desordem fixa apontam que de fato há mudança na classe de universalidade do modelo de contato [15, 16, 17, 18].

Em um trabalho pioneiro, Noest [15] estudou através de simulações de Monte Carlo um modelo estocástico desordenado em d dimensões constatando a relevância da desordem na alteração do comportamento crítico. Em seu modelo, a desordem

é implementada a partir de distribuições aleatórias das probabilidades nos sítios da rede em uma e duas dimensões. Para o caso uniforme o modelo possui os mesmos expoentes da percolação direcionada. Noest encontrou $\beta = 1.75(10)$, em uma dimensão, e $\beta = 1.10(5)$ em 2 dimensões (compare estes valores com aqueles da tabela 1.1).

Moreira e Dickman [16] propuseram um modelo de contato bidimensional com desordem adicionada por meio de frações de partículas que são inativadas durante a evolução do sistema, como se fossem regiões proibidas. Durante a evolução desse *modelo de contato diluído* uma fração de sítios é removida aleatoriamente. A cada partícula (i, j) na rede bidimensional é associada uma nova variável $\eta(i, j)$, aleatória e independente, assumindo os valores 0 ou 1 com probabilidades x e $1 - x$, respectivamente. Assim, a dinâmica do sistema fica restrita apenas às partículas com $\eta(i, j) = 1$; os sítios com $\eta(i, j) = 0$ nunca são ocupados. Os resultados mostraram que, ao invés de uma lei de potência, como no modelo uniforme, o sistema passa a apresentar um comportamento crítico logarítmico. Os resultados obtidos indicam uma violação na lei de escala para os expoentes críticos dinâmicos, que fogem da classe de universalidade da percolação direcionada; os expoentes críticos dependem da fração de sítios diluídos (inativos). Neste trabalho há também uma confirmação da conjectura de Bramson *et al.* [20], de que em $d \geq 2$ dimensões o modelo de contato desordenado tem apenas uma única transição de fase, e que não existe fase intermediária.

Nesta mesma linha de raciocínio, Vojta e Dickison [21], estudaram um modelo de contato unidimensional desordenado. No entanto, eles analisaram sistemas da ordem de 10^7 sítios, e com tempos da ordem de até 10^9 *PMC*. Por conta destas escalas de tempo e dimensão do sistema, eles puderam encontrar valores dos expoentes críticos universais, que independem da quantidade de desordem que é aplicada ao modelo. Mesmo para desordem pequena, eles encontraram $\beta = 0.38197$, em linha com previsões teóricas feitas por Hooyberghs *et al.* [22].

x	λ_c	β'
0	1.6488(1)	0.586(14)
0.02	1.6850(3)	0.566(7)
0.05	1.7409(1)	0.97(10)
0.1	1.84640(5)	0.89(4)
0.2	2.1080(5)	0.99(4)
0.3	2.470(3)	1.07(3)
0.35	2.719(2)	1.01(5)

Tabela 1.2: Parâmetros críticos do processo de contato diluído.

Na tabela 1.2, apresentamos os valores do expoente crítico β' e do parâmetro λ_c , encontrados por Moreira e Dickman através de simulações para o modelo de contato bidimensional [16]. Esses resultados apontam forte dependência com a fração x de sítios diluídos, indicando que não há nenhum comportamento universal do expoente crítico β .

É importante ressaltar que em todos esses estudos a desordem acaba por alterar a criticalidade do sistema. Vemos que o caso uniforme para o modelo de contato diluído bidimensional é recuperado quando $x = 0$, ou seja, quando nenhum sítio é removido do sistema; nesse caso β assume o seu valor universal (tabela 1.2).

Na próxima seção, vamos introduzir um modelo de contato com flutuações geométricas, análogo aos modelos desordenados, com a possibilidade de controlar a relevância dessas flutuações, abrangendo casos relevantes e irrelevantes.

Capítulo 2

Aperiodicidade

O interesse em implementar aperiodicidade em modelos físicos cresceu muito a partir de 1984, quando foi descoberta [23] uma liga metálica que não possuía uma célula atômica básica de repetição, como nos cristais, e nem ao menos apresentava uma estrutura amorfa, como é possível identificar em materiais como o vidro. Aquela amostra parecia possuir uma estrutura situada entre os cristais (estrutura ordenada) e os vidros (estrutura desordenada). Esta estrutura apresentava uma fase com simetrias proibidas pela cristalografia, e não era compatível com uma ordem translacional de longo alcance. Por este motivo ela ficou conhecida como estrutura quase-cristalina, motivando a aplicação de modelos aperiódicos para sua descrição.

A seguir mostramos como construir modelos aperiódicos e quais são suas principais características para o nosso trabalho.

2.1 Modelos aperiódicos

Uma maneira simples de construir uma estrutura aperiódica pode ser a partir das chamadas regras de substituição de letras. Supomos dois objetos, ou parâmetros, que podem ser representados pelas letras A e B; por exemplo, uma massa e uma mola, ou ainda duas diferentes formas de interação entre corpos. Desejamos formar uma seqüência infinita de letras A's e B's de tal forma que nenhuma célula básica se repita, e desejamos também ter o controle sobre a formação da seqüência. Podemos então utilizar regras do tipo $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow A$ para montar uma cadeia infinita de

letras,

$$A \rightarrow AB \rightarrow ABA \rightarrow ABAAB \rightarrow ABAABABA \rightarrow \dots$$

Esta cadeia não possui nenhuma célula básica que se repete, e é formada pela execução iterativa da regra (mais adiante vamos ver que ela produz uma seqüência de Fibonacci). Existem diversos tipos de regras de substituição de letras que podem levar à construção de cadeias aperiódicas. Entre outras, destacamos $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow AA$, que é a regra de duplicação de período; $A \rightarrow ABB$ e $B \rightarrow AAA$, que é conhecida como a regra da triplicação de período. De maneira geral podemos representar todos os tipos de cadeias que podem ser geradas por este método pela relação

$$\sigma : \begin{cases} A \rightarrow A^\alpha B^\beta \\ B \rightarrow A^\gamma B^\delta \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde α , β , γ e δ são inteiros não-negativos e não simultaneamente nulos. As estruturas assim geradas possuem uma série de características importantes que são fundamentais para o nosso estudo.

A cada regra está associada uma matriz de substituição que fornece um algoritmo fácil de manusear, bem como um parâmetro que mostra a evolução das flutuações espaciais (geométricas), chamado *expoente de flutuação* ω . A n -ésima aplicação da regra acima leva a determinados valores N_A^n e N_B^n , de letras A e B na seqüência, que podem ser obtidos através da relação recursiva

$$\begin{pmatrix} N_A^n \\ N_B^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_A^{n-1} \\ N_B^{n-1} \end{pmatrix}.$$

Podemos então definir a matriz de substituição,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix}.$$

Começando uma seqüência com apenas uma letra A , é fácil perceber que depois da n -ésima iteração teremos

$$\begin{pmatrix} N_A^n \\ N_B^n \end{pmatrix} = \mathbf{M}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Os autovalores da matriz de substituição \mathbf{M} têm uma grande importância neste contexto, pois governarão as flutuações geométricas da estrutura aperiódica.

Para uma melhor compreensão, vamos desenvolver um exemplo utilizando a seqüência de Fibonacci. Depois de n iterações teremos

$$N_A^{(n)} = \frac{(\sqrt{5} + 5)}{10} \lambda_1^n - \frac{(\sqrt{5} - 5)}{10} \lambda_2^n \quad e \quad N_B^{(n)} = \frac{\sqrt{5}}{5} \lambda_1^n - \frac{\sqrt{5}}{5} \lambda_2^n,$$

onde

$$\lambda_1 = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad e \quad \lambda_2 = \frac{1 - \sqrt{5}}{2}, \quad (2.2)$$

são os autovalores da matriz de substituição \mathbf{M} .

Para n suficientemente grande temos as expressões assintóticas $N_A^{(n)} \sim \lambda_1^n$ e $\Delta N_A^{(n)} \sim \lambda_2^n$, onde $\Delta N_A^{(n)}$ representa uma flutuação em torno do valor assintótico. Para n qualquer, $N^{(n)} = N_A^{(n)} + N_B^{(n)}$; assim temos também a expressão assintótica $N^{(n)} \sim \lambda_1^n$. Podemos então escrever

$$n \sim \frac{\ln N^{(n)}}{\ln \lambda_1};$$

assim,

$$\Delta N_A^{(n)} \sim \lambda_2^n \Rightarrow \Delta N_A^{(n)} \sim \lambda_2^{\frac{\ln N^{(n)}}{\ln \lambda_1}};$$

logo,

$$\Delta N_A^{(n)} \sim e^{\frac{\ln \lambda_2}{\ln \lambda_1} \ln N} \Rightarrow \Delta N_A^{(n)} \sim (N^{(n)})^\omega,$$

onde

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1}.$$

Observemos que, se $\omega > 0$, a flutuação terá um caráter ilimitado, ou seja, a estrutura aperiódica fica cada vez mais distante do comportamento médio. Se $\omega \leq 0$, a flutuação será limitada.

2.2 Modelo de contato aperiódico

Nosso próximo objetivo consiste em implementar algum tipo de aperiodicidade no modelo de contato e verificar se ela é ou não relevante, ou seja, se a aperiodicidade levará a uma mudança na classe de universalidade, assim como ocorre no modelo com desordem fixa [16, 17]. Nesta altura é importante resaltar que, assim como nos modelos com desordem, no contexto da aperiodicidade existe um critério que diz quando a aperiodicidade será ou não relevante ao sistema. Este critério, formulado por Luck [24], está muito bem estabelecido para modelos em equilíbrio [25, 26]. Torna-se mais difícil fazer afirmações sobre os modelos fora do equilíbrio. Segundo o critério de Luck para um modelo de Ising ferromagnético, no qual a aperiodicidade seja implementada ao longo de D_m dimensões, o sistema mudará de classe de universalidade se o expoente de flutuação ω for maior que ω_c , dado por

$$\omega_c = 1 - \frac{1}{D_m \nu}, \quad (2.3)$$

onde ν é o expoente do comprimento de correlação do modelo uniforme. Se de fato este critério puder ser generalizado para o modelo de contato, vale então registrar o valor $\omega_c = 0.0883$ para o modelo de contato unidimensional.

Em sua conjectura, Luck raciocina de forma semelhante à exposição do critério de Harris desenvolvida para o modelo desordenado, tomando como ponto de partida o modelo de Ising ferromagnético (1.25) em uma rede regular. Luck considera uma certa região Ω da rede, com um comprimento característico L . Esta região deve conter N_Ω ligações, proporcional ao seu volume L^d . A soma das constantes de troca relacionadas às ligações dessa região,

$$\Sigma_\Omega(J) = \sum_{\langle i,j \rangle \in \Omega} J_{i,j},$$

também deve ter um comportamento do tipo $\Sigma_\Omega(J) \sim L^d$. O acoplamento típico da região Ω está relacionado à razão Σ_Ω/N_Ω , que também deve ser proporcional a L^d . Vamos agora supor, de uma forma bem geral, que a flutuação geométrica obedeça

a lei de escala

$$\Delta J = |\Sigma_{\Omega}(J) - J_0 N_{\Omega}| \sim L^{d\omega},$$

onde ω é o expoente de flutuação geométrica. Na região crítica, ou seja, $|t| \ll 1$, o comprimento de correlação ξ do sistema tem um comprimento característico L ($\xi \sim L$); uma pequena flutuação aperiódica no sistema deve produzir um desvio no acoplamento típico, dado por

$$(J - J_0)/J_0 \sim \xi^{-d(1-\omega)} \Delta.$$

Usando a relação de escala para o comprimento de correlação ($\xi \sim |t|^{-\nu}$), e considerando que o desvio da temperatura δt deve apresentar um comportamento semelhante, temos

$$\delta t \sim |t|^{d\nu(1-\omega)} \Delta.$$

A relevância da aperiodicidade ocorre para $\delta t \gg |t|$; logo, chegamos à relação (2.3). Usando a relação de hiperescala $d\nu = 2 - \alpha$, podemos reescrever essa relação na forma

$$\omega_c = \frac{(1 - \alpha)}{(2 - \alpha)}, \quad (2.4)$$

onde α é o expoente crítico do calor específico do sistema uniforme.

Vamos em seguida definir o modelo dinâmico. Na rede unidimensional, a cada passo de tempo escolhemos aleatoriamente um sítio i . Se o sítio estiver vazio, nada acontece com o sistema. Se o sítio estiver ocupado, olhamos para sua vizinhança ($i-1$ ou $i+1$); se o vizinho escolhido estiver vazio, ele é ocupado com uma probabilidade p_i ; ou então o sítio i é desocupado com a probabilidade complementar ($1 - p_i$); se a vizinhança estiver ocupada o sistema permanece como antes. As probabilidades p_i estão distribuídas na rede unidimensional aperiodicamente de acordo com uma regra específica, ou seja, cada sítio da rede possui um valor de parâmetro específico ($p_i = p_1$ ou p_2 , de acordo com a seqüência de duas letras escolhidas).

As seqüências aperiódicas que estamos utilizando são geradas a partir da regra binária de substituição de letras (2.1), tomando diferentes valores dos expoentes α, β, γ e δ . A seguir apresentamos três modelos distintos com diferentes valores do

expoente de flutuação ω , e os cálculos para seus respectivos parâmetros críticos.

2.2.1 Modelo A

Neste modelo utilizamos a regra de substituição $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow A$, conhecida como regra de Fibonacci. Tanto N , o número total de letras, quanto os valores N'_A e N'_B , crescem segundo a seqüência de Fibonacci, $F_{n+1} = F_{n-1} + F_n$. Para esta regra temos a matriz de substituição

$$\mathbf{M}_A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Os autovalores de \mathbf{M}_A já foram calculados anteriormente em 2.2, fornecendo o expoente $\omega = -1$.

O gráfico da figura 2.1 mostra a curva de transição de fase deste modelo, obtida a partir de uma simulação numérica, utilizando um tamanho natural da estrutura aperiódica com $L = 10946$ sítios, que corresponde a $n = 19$ iteradas da regra, e 10^5 PMC, considerando também que o sistema em estudo já tenha entrado no estado estacionário. As letras A e B da seqüência correspondem aos valores dos parâmetros p_1 e p_2 respectivamente. Para facilitar as simulações, relacionamos os parâmetros p_1 e p_2 com a média

$$p_m = \frac{p_1 + p_2}{2}.$$

Tanto aqui, como nos modelos que mostraremos adiante utilizamos $p_2 = 0.2$, no entanto, ressaltamos que a utilização de outros valores de p_2 não alteram o comportamento crítico do sistema.

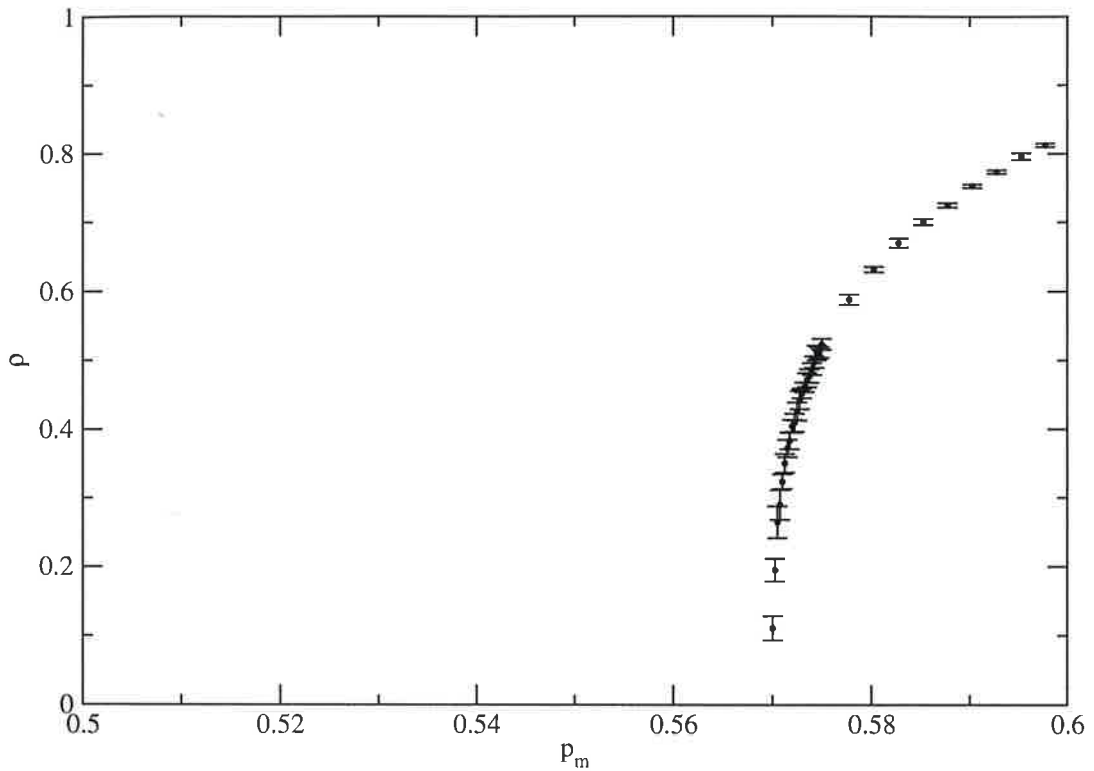


Figura 2.1: Gráfico da densidade de sítios ativos em função do parâmetro p_m , com $p_2 = 0.2$ e $L = 10946$.

Para o cálculo do parâmetro crítico e do expoente β utilizamos dois métodos, ambos aplicados com sucesso ao modelo uniforme. A seguir descrevemos os métodos, a aplicação aos modelos aperiódicos e os resultados.

- *Método dos cumulantes*

Quando aplicamos o método dos cumulantes para o modelo uniforme, vimos que podíamos descrever o comportamento do parâmetro crítico p_c em relação aos cruzamentos de duas redes de tamanhos L e $2L$. Ajustamos a relação 1.23 e encontramos uma boa estimativa para p_c . No entanto, quando tentamos fazer esta mesma análise

para o caso aperiódico, vimos que os dados obtidos não apontam para uma relação semelhante àquela obtida para o modelo uniforme. A figura 2.2 mostra o comportamento dos cumulantes para o modelo A. A partir de uma análise gráfica, obtivemos $p_{mc} = 0.57011(1)$ para o valor crítico do parâmetro p_m .

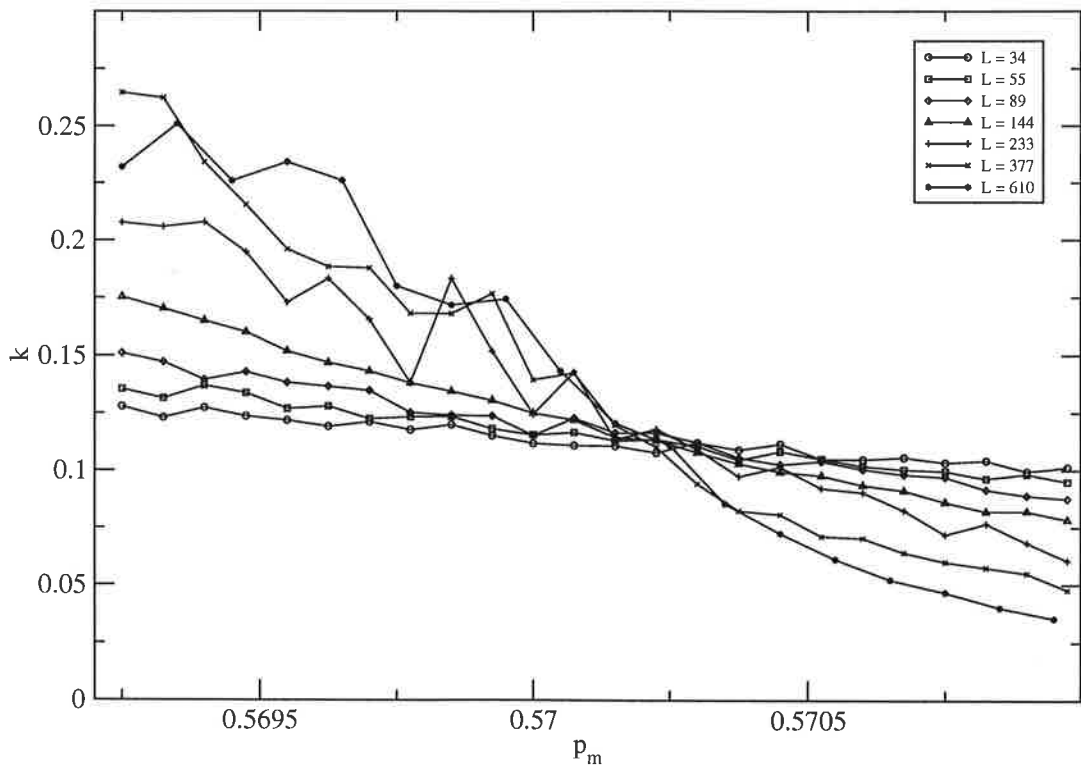


Figura 2.2: Gráfico dos cumulantes em função do parâmetro p_m , com $p_2 = 0.2$ e $L = 34, 55, 89, 144, 233, 377, 610$.

A partir do valor de p_{mc} , linearizando os dados mostrados no gráfico 2.1, obtemos $\beta = 0.2762(38)$, que coincide, dentro das incertezas numéricas do procedimento, com o valor do expoente β no caso do modelo uniforme. De acordo com as nossas expectativas para a seqüência de Fibonacci, caracterizada por $\omega = -1$, as flutuações geométricas não produzem nenhuma mudança na classe de universalidade crítica.

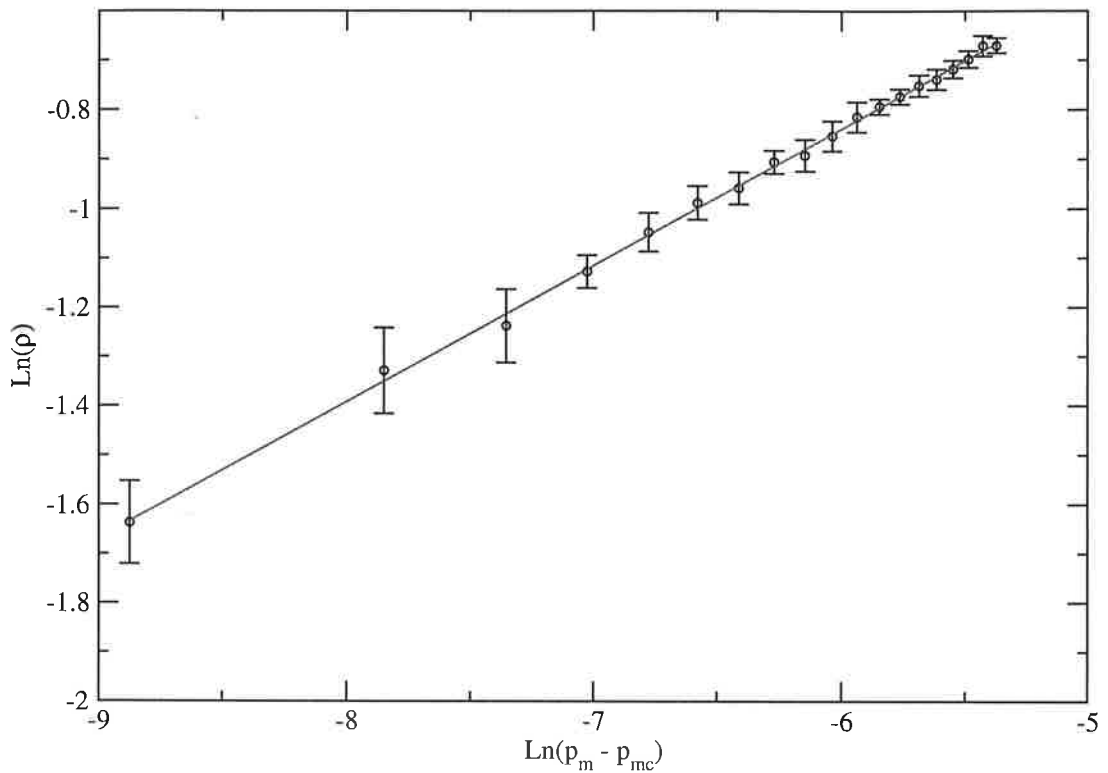


Figura 2.3: Gráfico Log-Log da densidade em função da diferença $p_m - p_{mc}$, com $p_{mc} = 0.57011$.

- **Método do ajuste de funções não lineares nos parâmetros através do mapeamento por resíduos quadráticos**

Os gráficos 2.4 e 2.5 apresentam o comportamento da função Q em relação aos parâmetros procurados, β e p_{mc} , respectivamente. Encontramos os valores $\beta = 0.2751(9)$ e $p_{mc} = 0.57011(1)$, corroborando as estimativas obtidas através do método dos cumulantes.

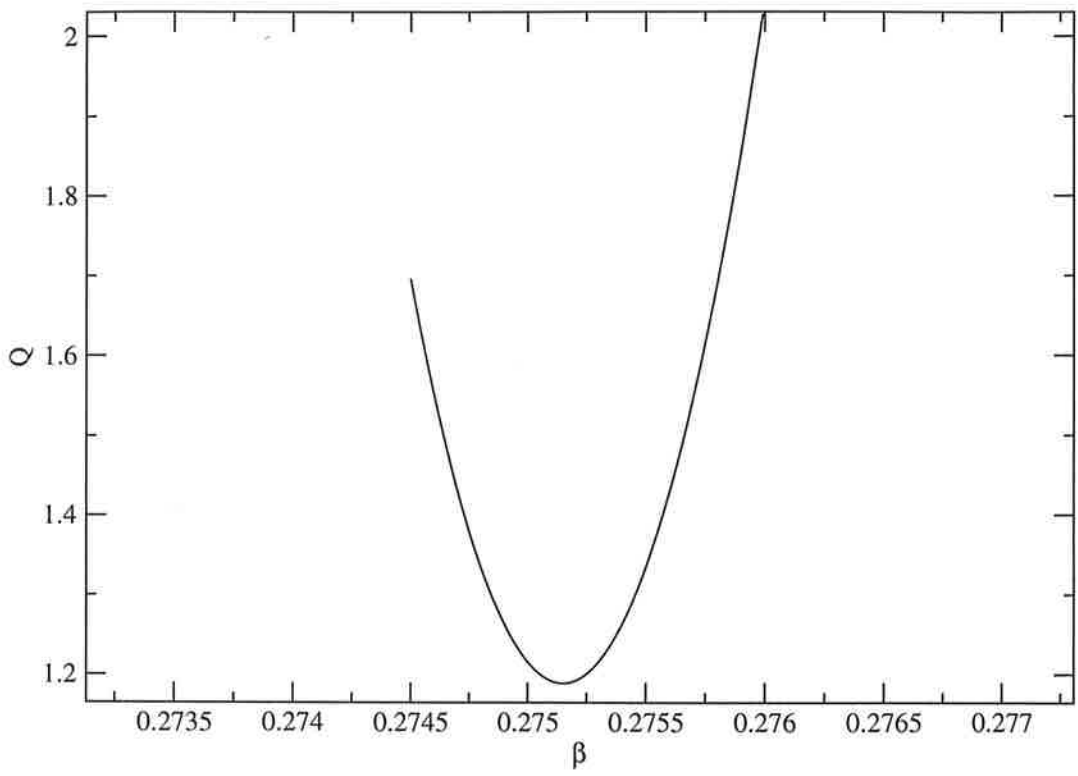


Figura 2.4: Função Q em relação ao parâmetro β .

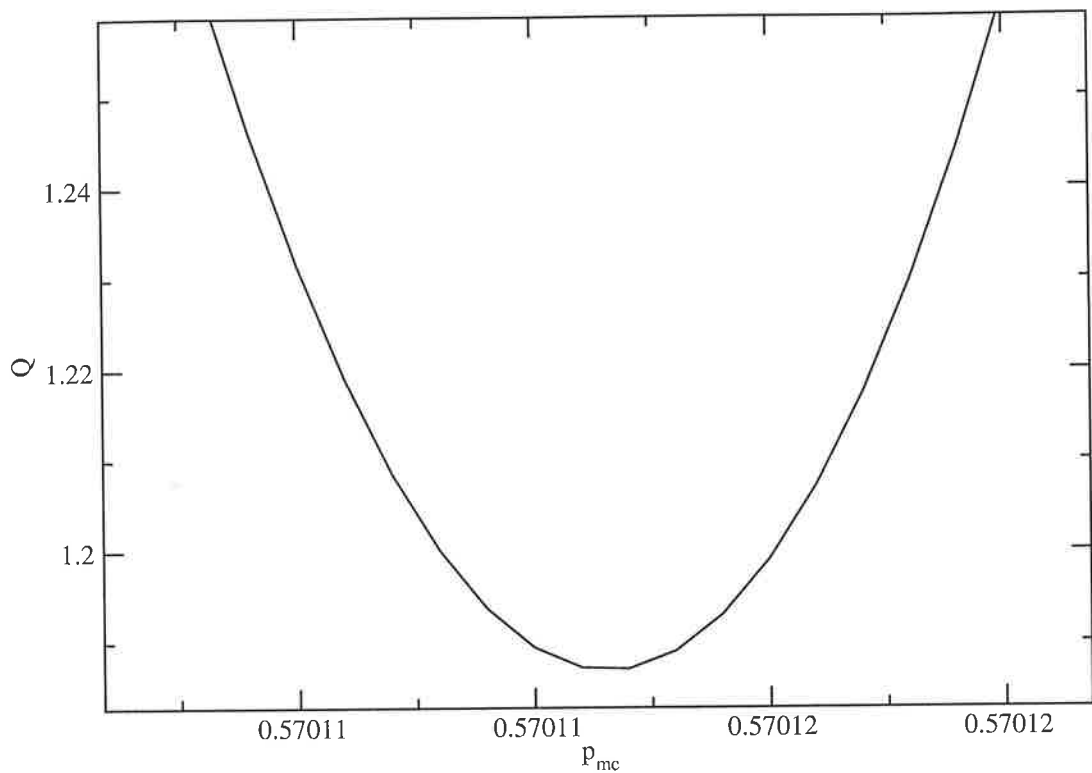


Figura 2.5: Função Q em relação ao parâmetro p_{mc} .

2.2.2 Modelo B

O **modelo B** é dado pela regra $A \rightarrow AB$ e $B \rightarrow AA$, que é conhecida na literatura como regra da duplicação de período [25, 27]. A matriz de substituição é dada por

$$\mathbf{M}_B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = -1$, fornecendo o valor $\omega = 0$.

O gráfico da figura 2.6 mostra a curva de transição de fase, obtida a partir de uma simulação numérica onde utilizamos um tamanho natural da estrutura aperiódica

com $L = 8192$ sítios, que corresponde a $n = 13$ iteradas e tempo da ordem de 10^5 PMC (no regime estacionário).

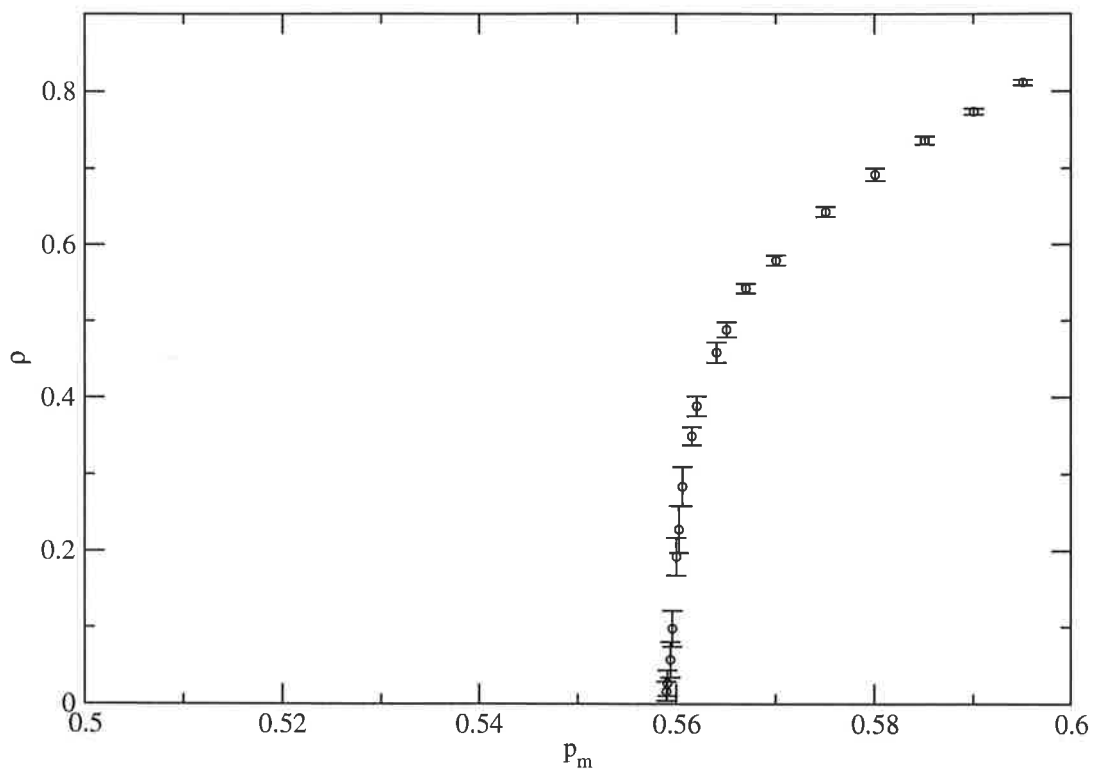


Figura 2.6: Densidade de sítios ativos em função do parâmetro médio p_m para uma rede de tamanho $L = 8192$.

- *Método dos cumulantes*

No gráfico 2.7 vemos o comportamento dos cumulantes κ para alguns tamanhos naturais de redes. A análise gráfica nos forneceu o valor $p_{mc} = 0.55980(5)$.

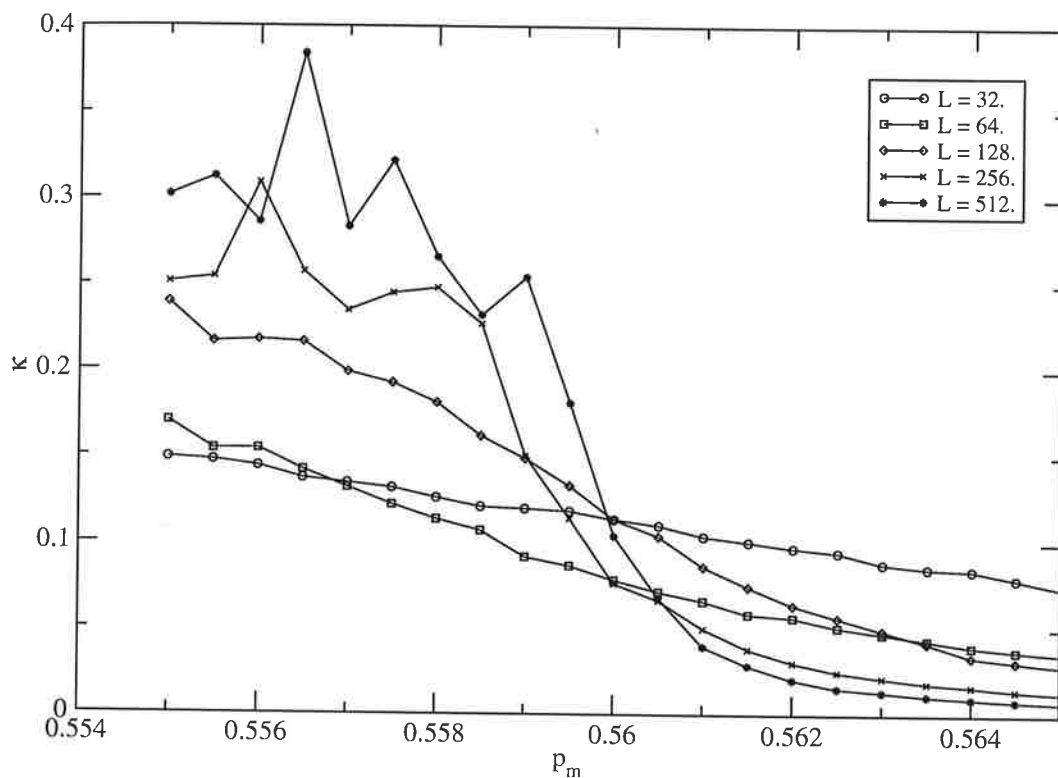


Figura 2.7: Gráfico dos cumulantes em função do parâmetro p_m , com $p_2 = 0.2$ e $L = 16, 32, 64, 128, 256$ e 512 sítios.

Utilizando o valor de p_{mc} , linearizamos a curva 2.6 e encontramos o expoente crítico $\beta = 0.2729(38)$, como pode ser visto no gráfico 2.8. Assim como o modelo A, o **Modelo B** pertence à mesma classe de universalidade da percolação direcionada. Mais uma vez a aperiodicidade não foi capaz de alterar a classe de universalidade crítica do modelo.

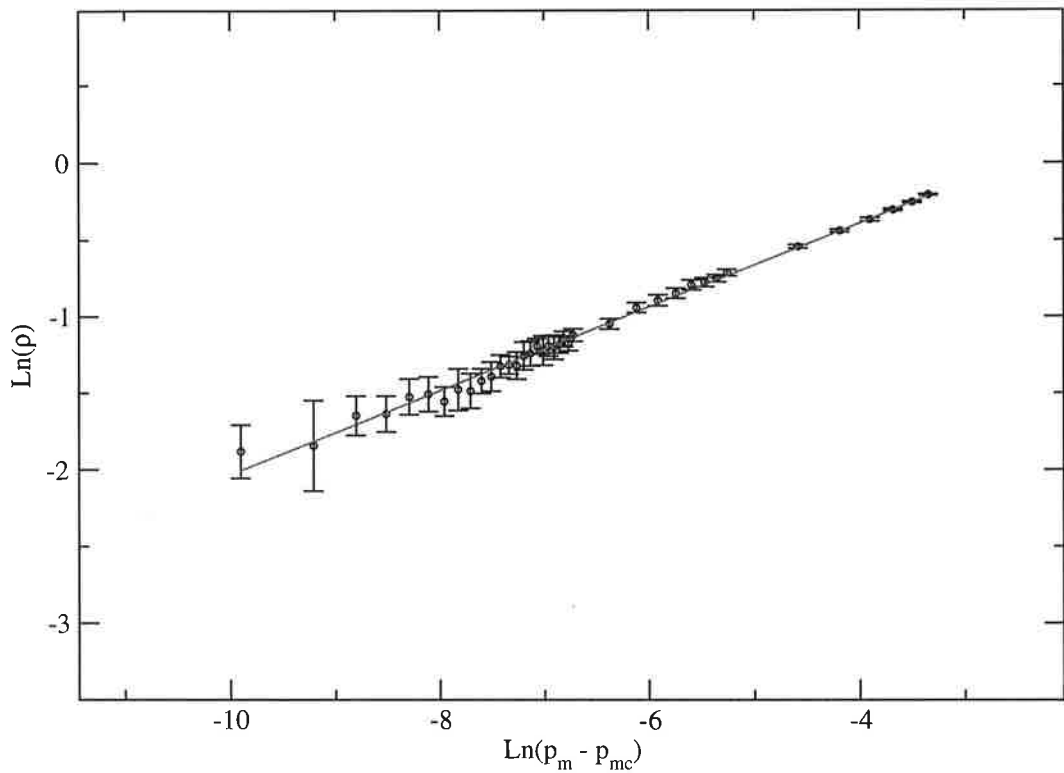


Figura 2.8: Gráfico Log-Log da densidade em função da diferença $p_m - p_{mc}$, com $p_{mc} = 0.5598$ e $L = 8192$ sítios.

- *Método do ajuste de funções não lineares nos parâmetros através do mapeamento por resíduos quadráticos*

As figuras 2.9 e 2.10 apresentam o comportamento da função Q em relação aos parâmetros β e p_{mc} . Encontramos $\beta = 0.269(4)$ e $p_{mc} = 0.55988(1)$. Os valores de p_{mc} e β confirmam os resultados anteriores. Um valor de β um pouco abaixo daquele encontrado pelo método anterior não é suficiente para caracterizar uma mudança na classe de universalidade.

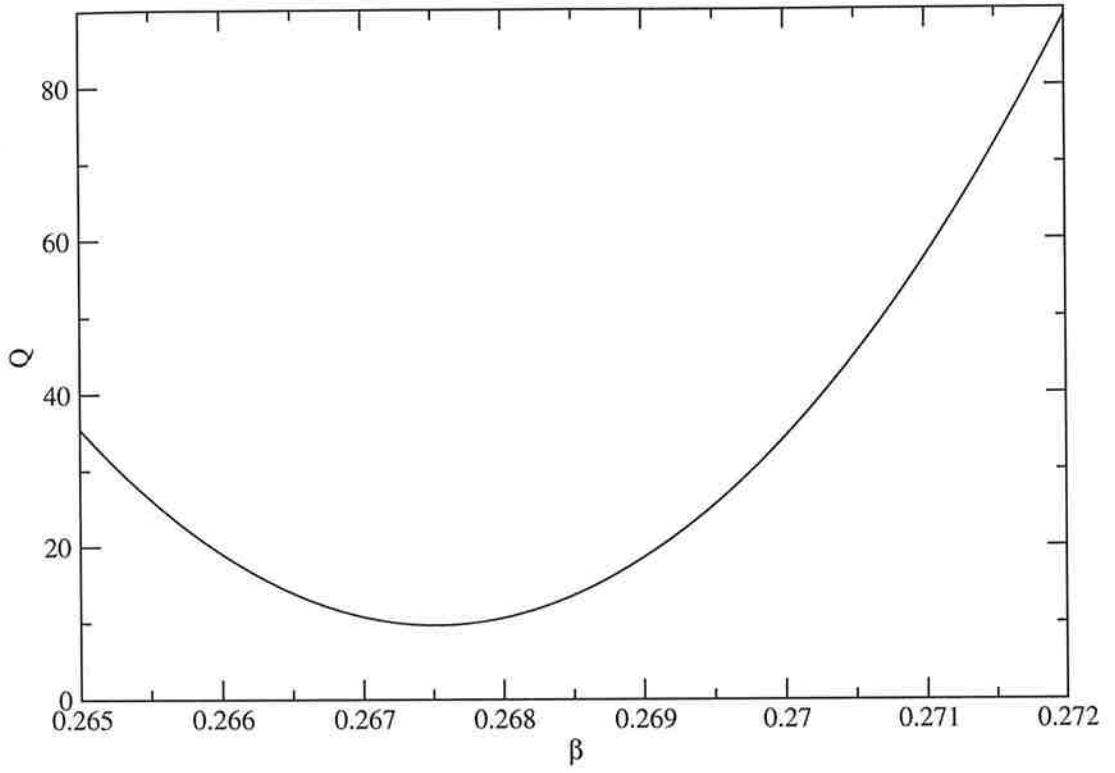


Figura 2.9: Função Q em relação ao parâmetro β .

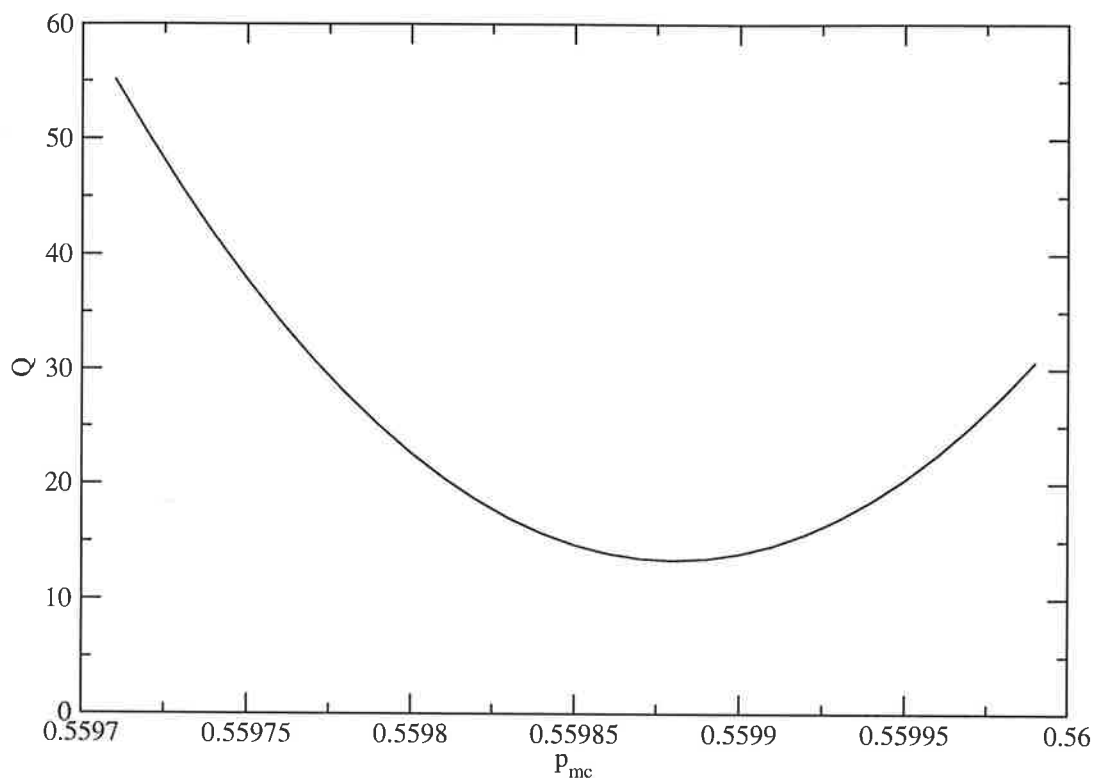


Figura 2.10: Função Q em relação ao parâmetro p_{mc} .

2.2.3 Modelo C

A regra para este modelo é $A \rightarrow ABB$ e $B \rightarrow AAA$, que nos fornece a matriz de substituição

$$M_C = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\lambda_1 = 3$ e $\lambda_2 = -2$, e $\omega = 0.6309$. Esta regra é conhecida na literatura como regra da triplicação de período [27].

O gráfico da figura 2.11 mostra a curva de transição de fase, obtida a partir de simulação numérica, usando um tamanho natural da estrutura aperiódica com

$L = 6561$ sítios, que corresponde a $n = 8$ iteradas, com um tempo total de 10^5 PMC (e o sistema no estado estacionário).

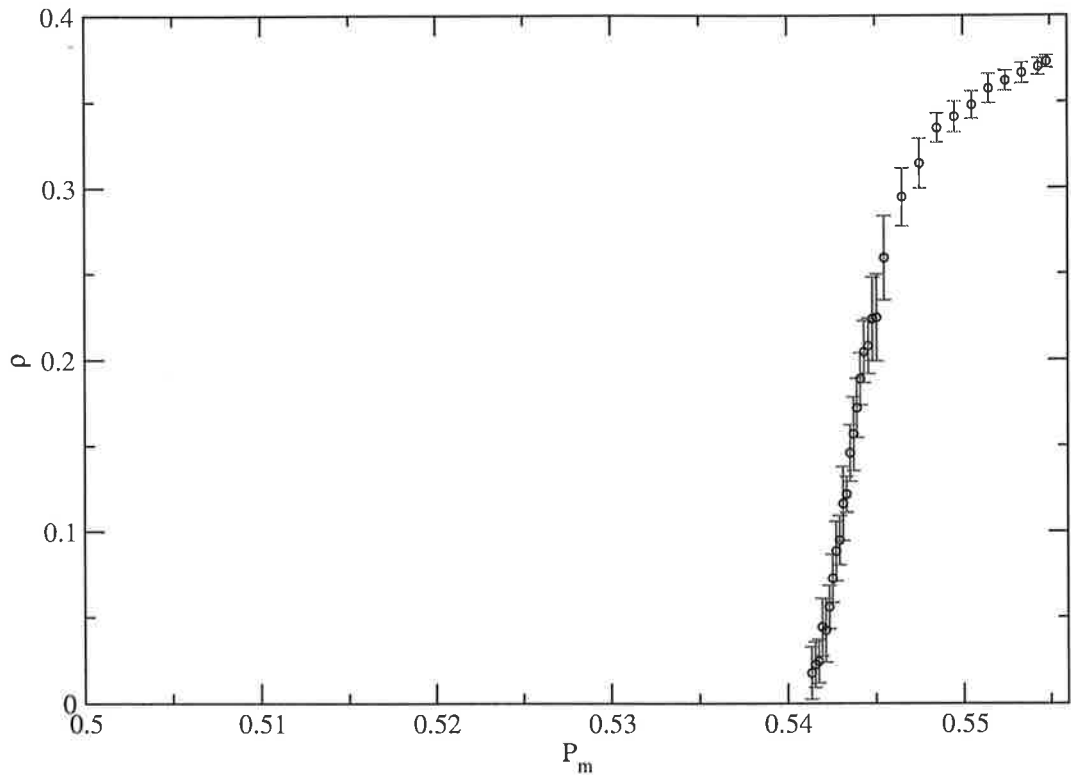


Figura 2.11: Densidade de sítios ativos em função do parâmetro médio p_m para uma rede de $L = 6561$ sítios e $p_2 = 0.2$.

- *Método dos cumulantes*

No gráfico 2.12, vemos o comportamento dos cumulantes κ para alguns tamanhos naturais de rede do sistema. A partir da análise gráfica encontramos $p_{mc} = 0.5417(5)$.

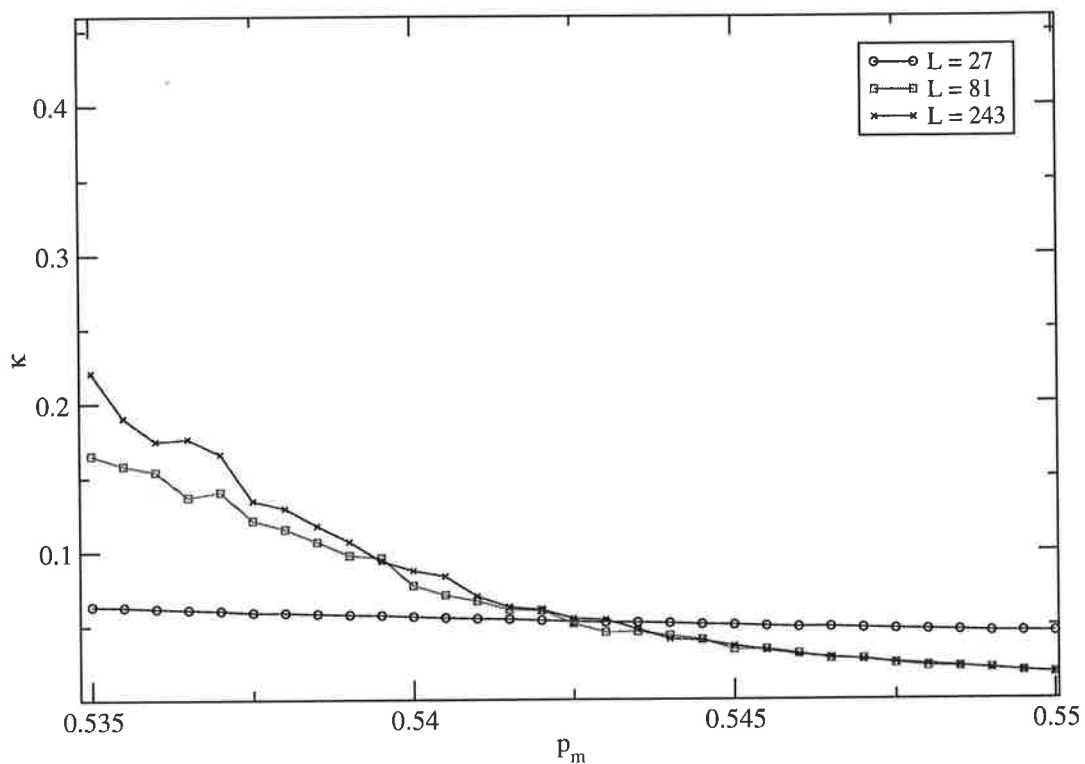


Figura 2.12: Gráfico dos cumulantes em função do parâmetro p_m , com $p_2 = 0.2$ e $L = 27, 81$ e 243 sítios.

Ajustando uma curva aos dados do gráfico 2.11, como está mostrado na figura 2.13, encontramos $\beta = 0.887(9)$.

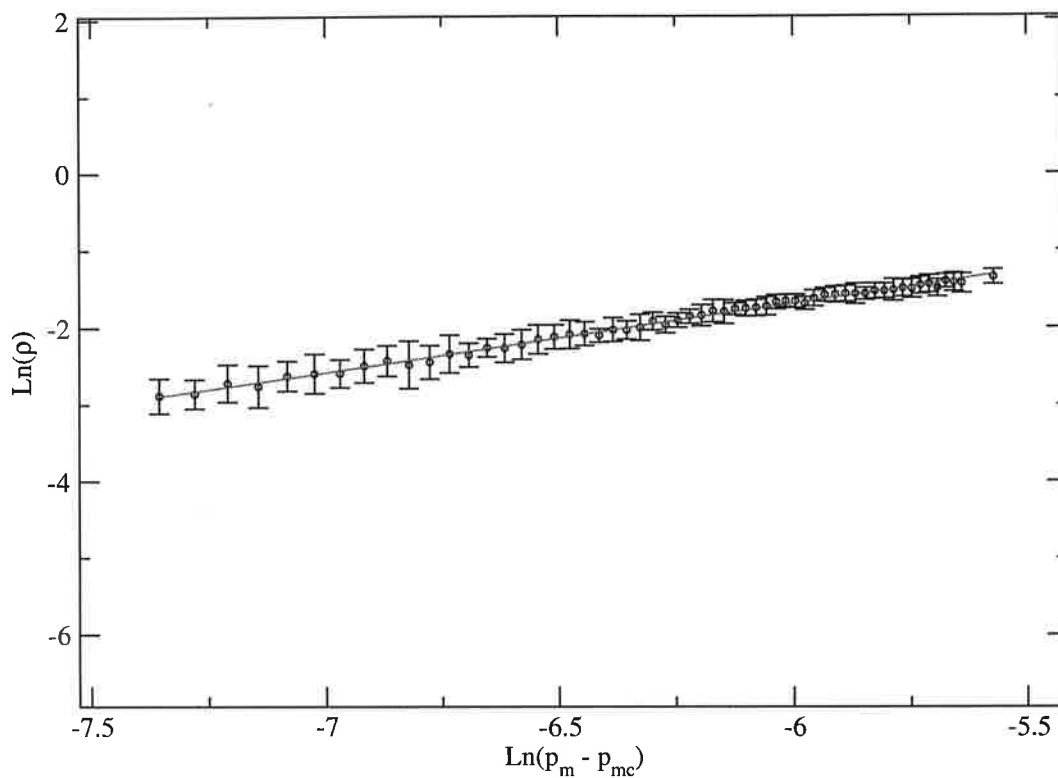
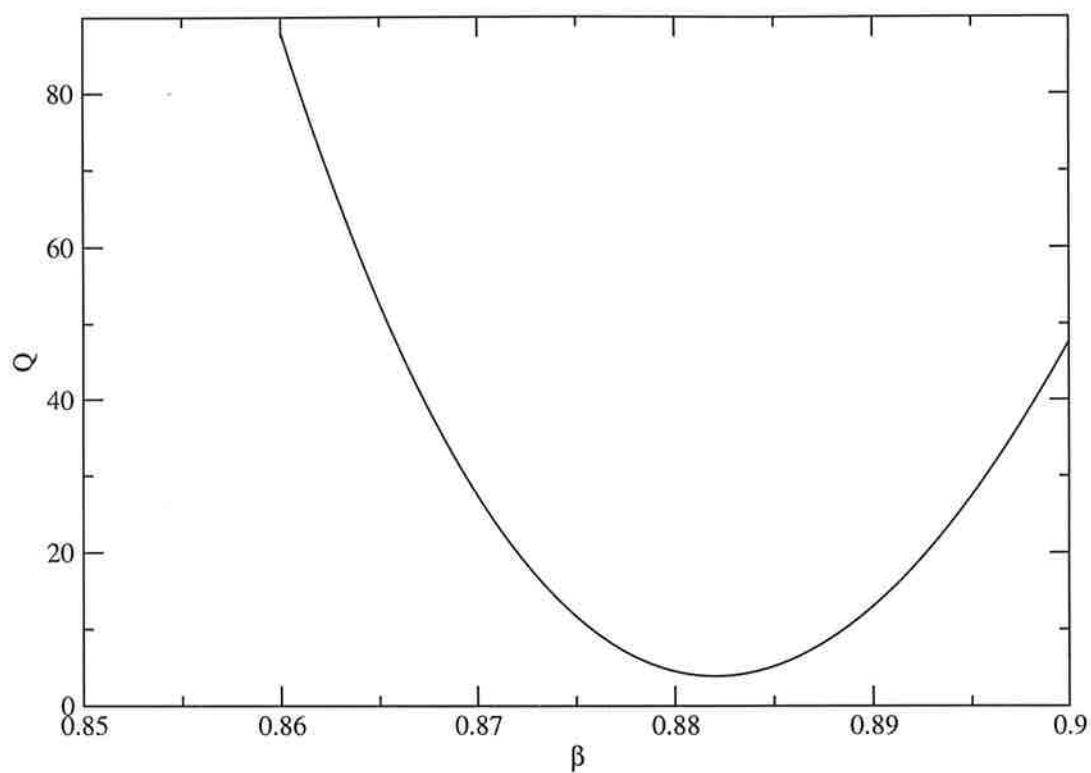
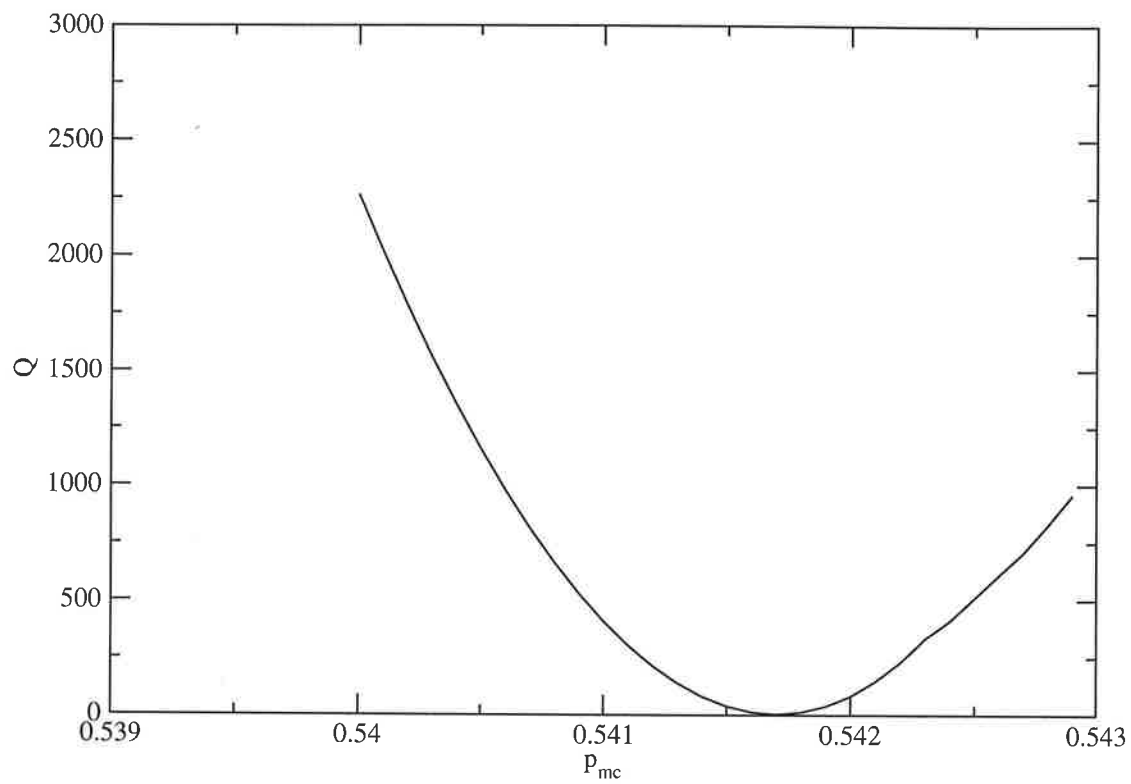


Figura 2.13: Gráfico Log-Log da densidade em função da diferença $p_m - p_{mc}$, com $p_{mc} = 0.5417$ e $L = 6561$ sítios.

- **Método do ajuste de funções não lineares nos parâmetros através do mapeamento por resíduos quadráticos**

Os gráficos 2.14 e 2.15 apresentam o comportamento da função Q em relação aos parâmetros β e p_{mc} , respectivamente. Os valores encontrados nos mínimos foram $\beta = 0.882(9)$ e $p_{mc} = 0.5417(1)$. Para este modelo, com $\omega = 0.6309$, as flutuações geométricas da regra de triplicação de período foram capazes de alterar a classe de universalidade crítica.

Figura 2.14: Função Q em relação ao parâmetro β .

Figura 2.15: Função Q em relação ao parâmetro p_{mc} .

Capítulo 3

Conclusão

Sabendo que tanto a desordem quanto uma distribuição aperiódica provocam flutuações geométricas que podem alterar a classe de universalidade crítica dos modelos estatísticos, estudamos o modelo de contato unidimensional na presença de aperiodicidade produzida por regras de substituição associadas a um expoente ω que se refere à intensidade das flutuações geométricas. Apresentamos evidências numéricas por meio de simulações de Monte Carlo de que o comportamento crítico somente se altera para valores suficientemente grandes de ω . Estudamos três modelos distintos obtidos através de diferentes seqüências aperiódicas caracterizadas por distintos expoentes de flutuação. No primeiro caso, **Modelo A**, analisamos o modelo de contato afetado por uma distribuição aperiódica caracterizada por um expoente de flutuação geométrica $\omega = -1$. Neste modelo as flutuações geométricas são incapazes de provocar quaisquer alterações no comportamento crítico, e o valor encontrado para o expoente crítico β é o mesmo encontrado para o modelo uniforme dentro do limite de incertezas, $\beta = 0.2762(38)$. Resultado semelhante é encontrado para o **Modelo B**, também caracterizado por um valor pequeno do expoente de flutuação, $\omega = 0$. No **Modelo C** foi encontrado um comportamento distinto. Com uma seqüência aperiódica dada por um expoente de flutuação geométrica $\omega = 0.6309$, as flutuações afetam o comportamento crítico do modelo de contato de maneira considerável. Neste caso encontramos $\beta = 0.882(9)$. A possibilidade de varreremos diversos casos, relevantes e irrelevantes, usando distribuições aperiódicas moduladas

por um expoente que caracteriza a distribuição (ou a seqüência), constitui a nossa contribuição para o estudo de fenômenos críticos em modelos dinâmicos.

Referências Bibliográficas

- [1] S. Wolfram, *Theory and applications of cellular automata* (Singapore: World Scientific, 1986).
- [2] E. Domany e W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 311 (1984).
- [3] A. -L. Barabási e H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge Univ. Press, Cambridge-UK, 1995).
- [4] T. E. Harris, *Ann. Probab.* **2**, 969 (1974).
- [5] T. Tomé e M. J. de Oliveira: *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Edusp, São Paulo, 2001).
- [6] R. Dickman: *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*, editado por V. Privman (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1996).
- [7] P. Grassberger, *Z. Phys. B* **47**, 365 (1982).
- [8] D. Zhong e D. Ben Avraham, *Phys. Rev. Lett. A* **209**, 333 (1995).
- [9] R. Dickman e J. K. L. da Silva, *Phys. Rev. E* **58**, R4266 (1998).
- [10] V. R. Vanin, P. Gouffon e O. Helene: *Tópicos Avançados em Tratamento Estatístico de dados em Física Experimental*, Notas de aula, segunda edição, 2º semestre de 1998.
- [11] T. Tomé e A. Petri, *J. Phys. A* **35**, 26 (2002).
- [12] K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 9 (1981).



- [13] T. Tomé e M. J. Oliveira, Phys. Rev. E **72**, 026130 (2005).
- [14] S. -H. Tsai e S. R. A. Salinas, Braz. J. Phys. **28**, 1 (1998).
- [15] A. J. Noest, Phys. Rev. Lett. **57**, 90 (1986).
- [16] A. G. Moreira e R. Dickman, Phys. Rev. E **54**, R3090 (1996);
Phys. Rev. E **57** 2 (1998) .
- [17] R. Caferio, A. Gabrielli e M. A. Muñoz, Phys. Rev. E **57**, R5060 (1998).
- [18] B. C. S. Grandi e W. Figueiredo, Phys. Rev. E **65**, 036135 (2002).
- [19] A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [20] M. Bramson, R. Durrett e R. H. Schonmann, Ann. Prob. **19**, 960 (1991).
- [21] T. Vojta e M. Dickison, Cond-mat/0505354.
- [22] J. Hooybergs, F. Igloi e C. Vanderzande, Phys. Rev. Lett. **90**, 100601 (2003).
- [23] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias e J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett.
53, 20 (1984).
- [24] J. M. Luck, Europhys. Lett. **24**, 5 (1993).
- [25] T. A. S. Haddad e S. R. A. Salinas, Physica A **306**, 98 (2002).
- [26] T. A. S. Haddad, *Comportamento crítico universal em ferromagnetismo de Potts com interações aperiódicas*, Dissertação de Mestrado, São Paulo (1996).
- [27] A. P. Vieira, Phys. Rev. B **71**, 13 (2005).
- [28] A. P. F. Atman e J.G. Moreira, Eur. Phys. J. B **16**, 501 (2002).