

881-IFUSP



305M810T3724

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

TRANSIÇÕES DE FASE E CRITICALIDADE EM MODELOS
ESTOCÁSTICOS

Munir Machado de Sousa Sabag

Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

Munir Machado de Sousa Sabag

Banca Examinadora

Prof. Dr. Jurgen Fritz Stilck - UFF
Prof. Dr. Mário José de Oliveira - IFUSP (orientador)
Prof. Dr. Ronald Dickman - UFMG
Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas - IFUSP
Prof. Dr. Wagner Figueiredo - UFSC

São Paulo
2002

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

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3724
ex. 1

def. 20/08/02

530.155352

S1137

Doc. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Sabag, Munir Machado de Sousa

Transições de Fase e Criticalidade em Modelos
Estocásticos. São Paulo, 2002

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

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Transições de Fase;
2. Dinâmicas Estocásticas;
3. Simulações Numéricas.

USP/IF/SBI-053/2002

Agradecimentos

Neste momento, gostaria de agradecer a todos aqueles que contribuíram para que esse trabalho fosse realizado:

Ao Prof. Mário de Oliveira, pela competente orientação, pela paciência, e, principalmente, pelo infinito respeito que teve comigo durante esse período.

À FAPESP pelo apoio financeiro, fundamental para a execução do trabalho.

Ao Grupo de Mecânica Estatística como um todo, que nos proporciona um ambiente saudável para se fazer ciência.

Ao Departamento de Física Matemática, na pessoa do Prof. Jorge Lacerda de Lyra, que gentilmente colocou seu sistema computacional à nossa disposição.

Aos meus colegas de sala, especialmente ao Leonardo, pela boa vontade que sempre teve para resolver minhas dúvidas e ajudar no que fosse preciso.

Ao André Vieira, que muito me auxiliou a lidar com o Linux.

Ao Sérgio e ao Waldir, por também estarem sempre prontos a resolver qualquer problema com os computadores.

Às secretárias do Departamento de Física Geral, Dirce, Márcia, Ivone e Silvana, pela eficiência e delicadeza com que trabalham.

Às queridas Vera Henriques e Amélia Hamburger, com quem tive o privilégio de discutir um pouco dos meus próprios rumos, e cujas palavras me foram muito valiosas.

À Nara, a quem eu jamais poderei agradecer devidamente, não só pela participação fundamental para a conclusão deste trabalho, mas principalmente pela cumplicidade e apoio incondicionais que só existem em amizades a toda prova.

Finalmente, agradeço àqueles que, por minha própria culpa, tantas vezes tiveram de fazer o mais difícil dos papéis - estar em silêncio enquanto se preocupavam comigo - Marcia, Karin e meus pais.

RESUMO

Neste trabalho, analisamos três modelos definidos sobre redes e governados por dinâmicas estocásticas. Nosso principal interesse repousa no estudo das transições de fase e no comportamento crítico desses modelos. O primeiro deles é o autômato celular probabilístico de Domany-Kinzel, ao qual aplicamos o método de expansões em série. Em seguida, estudamos o comportamento para tempos longos de alguns processos de reação-difusão por meio de simulação numérica. Tais processos podem ser relevantes para o entendimento da compactação em sistemas granulares. Finalmente, também através de simulações numéricas, analisamos o processo de contato conservativo, que é uma versão do modelo original definida em um ensemble onde o número de partículas é conservado.

ABSTRACT

In this work, we have analyzed three lattice models governed by stochastic dynamics. Our main interest lies on the study of the phase transitions and critical behavior of these models. The first of them is the Domany-Kinzel probabilistic cellular automaton, to which we have applied the method of series expansions. Next, we studied the long time behavior of some reaction-diffusion processes by means of numerical simulations. Such processes may be relevant to the understanding of granular compaction. Finally, also by means of numerical simulations, we have analyzed the conserved contact process, which is a version of the original model defined on an ensemble where the number of particles is conserved.

Conteúdo

1	Introdução	3
1.1	Processo estocástico markoviano	4
1.2	Equação mestra	6
1.3	Autômato celular probabilístico	7
2	Autômato Celular de Domany-Kinzel	9
2.1	Introdução	9
2.2	Percolação direcionada	11
2.3	Expansão em série	13
2.3.1	Obtenção da série	16
2.3.2	Método da razão	18
2.3.3	O método de Padé	19
2.3.4	Percolação por sítios e ligações	23
3	Processos de Reação-Difusão	26
3.1	Introdução	26
3.2	Modelo de Altura Máxima 1	28
3.2.1	Simulação do Modelo de Altura Máxima 1	28
3.3	Modelo de Altura Máxima h	32
3.3.1	Simulação do Modelo de Altura Máxima h	32
3.4	Modelo de aniquilação de pares em uma dimensão	38
3.4.1	A configuração inicial	39
3.4.2	Simulação e Resultados	41
3.5	Modelo bidimensional	44
3.5.1	A configuração inicial	46
3.5.2	Simulação e Resultados	46
3.6	Introdução de ruído	52

4	Processo de Contato Conservativo	55
4.1	Introdução	55
4.2	Processo de contato usual	55
4.3	Processo de contato conservativo	62
	4.3.1 Regime subcrítico	64
	4.3.2 Regime supercrítico	67
4.4	Conclusões	69
5	Conclusão	71

Capítulo 1

Introdução

As transições de fase e os fenômenos críticos em sistemas em equilíbrio termodinâmico são atualmente bem conhecidos e têm como suporte fundamental a distribuição de probabilidades de Gibbs [1]. Os sistemas fora de equilíbrio, por outro lado, não são descritos por uma tal distribuição, mas também podem exibir comportamento crítico e transições de fase [2]. Nesse caso, não existe uma distribuição de probabilidades conhecida *a priori*, e o sistema é descrito pelas regras que ditam sua dinâmica. Neste trabalho, estudamos modelos em que essas regras constituem processos markovianos e dessa forma dizemos que tais sistemas são descritos por uma dinâmica estocástica [3]. Exemplos de dinâmicas estocásticas são os autômatos celulares probabilísticos [4, 5], os sistemas descritos por equações mestras [6] e os sistemas descritos pela equação de Langevin [7]. Os métodos de Monte Carlo [7] usados na simulação de sistemas descritos pela distribuição de Gibbs são exemplos de sistemas governados por equação mestra.

Nesta tese analisamos três modelos estocásticos. No primeiro deles, correspondente ao capítulo 2, utilizamos o método de expansões em série para estudar o autômato celular probabilístico de Domany-Kinzel. No capítulo 3, estudamos a evolução temporal de sistemas de reação-difusão, que podem ser relevantes para o entendimento da compactação de sistemas granulares. No capítulo 4 estudamos o modelo de contato num ensemble onde o número de partículas é constante.

Nas seções seguintes, baseados na referência [3], apresentamos uma introdução aos processos estocásticos onde mostramos uma dedução da equação mestra e da equação de evolução dos autômatos celulares probabilísticos.

1.1 Processo estocástico markoviano

Um processo estocástico é um processo que envolve a dinâmica de uma variável aleatória x_t que depende do tempo t . Essa variável aleatória é, nesse caso, denominada variável estocástica. Supondo que x_t , assim como o tempo t , sejam variáveis discretizadas, tomando valores inteiros, podemos dizer que o processo fica completamente definido pela distribuição de probabilidade conjunta

$$P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_\ell) \quad (1.1)$$

até o instante ℓ . Dessa forma, P_ℓ é a probabilidade de que x_t tome o valor n_1 no instante $t = 1$, n_2 no instante $t = 2$, ..., e n_ℓ no instante $t = \ell$. Em vista disso, podemos definir a probabilidade condicional

$$P_\ell(n_\ell | n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}) \quad (1.2)$$

de que x_t tome o valor n_ℓ no instante ℓ uma vez que ela tenha tomado o valor n_0 em $t = 0$, n_1 em $t = 1$ e assim por diante, por

$$P_\ell(n_\ell | n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}) = \frac{P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}, n_\ell)}{P_{\ell-1}(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1})}. \quad (1.3)$$

Equivalentemente, temos

$$P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}, n_\ell) = P_\ell(n_\ell | n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}) P_{\ell-1}(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}). \quad (1.4)$$

Um processo markoviano é um processo estocástico cuja dinâmica satisfaça a condição:

$$P_\ell(n_\ell | n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}) = P_\ell(n_\ell | n_{\ell-1}), \quad (1.5)$$

ou seja, a probabilidade de que a variável estocástica x_t tome o valor n_ℓ no instante ℓ deve depender unicamente do valor que ela tomou no instante imediatamente anterior, $t = \ell - 1$, não importando quais tenham sido os valores tomados por x_t em instantes anteriores a esse. Portanto, substituindo essa expressão em (1.4) obtemos a equação

$$P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}, n_\ell) = P_\ell(n_\ell | n_{\ell-1}) P_{\ell-1}(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}), \quad (1.6)$$

que usada recursivamente nos fornece

$$P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_{\ell-1}, n_\ell) = P_\ell(n_\ell | n_{\ell-1}) \dots P_2(n_2 | n_1) P_1(n_1 | n_0) P_0(n_0). \quad (1.7)$$

Considerando em seguida a probabilidade de que x_t tome o valor n_ℓ no instante ℓ , independentemente dos valores que tenham sido tomados em instantes anteriores, dada por

$$P_\ell(n_\ell) = \sum_{n_0} \sum_{n_1} \dots \sum_{n_{\ell-1}} P_\ell(n_0, n_1, \dots, n_\ell), \quad (1.8)$$

obtemos, a partir de (1.6),

$$P_\ell(n_\ell) = \sum_{n_{\ell-1}} P_\ell(n_\ell | n_{\ell-1}) P_{\ell-1}(n_{\ell-1}). \quad (1.9)$$

A equação (1.9) é uma relação de recorrência e mostra que a probabilidade inicial $P_0(n_0)$, juntamente com as probabilidades $P_\ell(n_\ell | n_{\ell-1})$, definem completamente o processo estocástico markoviano.

No caso em que as probabilidades de transição não dependem do tempo, podemos escrever simplesmente

$$P_{\ell+1}(n_{\ell+1} | n_\ell) = T(n_{\ell+1}, n_\ell), \quad (1.10)$$

e assim

$$P_\ell(n) = \sum_{n_{\ell-1}} T(n_\ell, n_{\ell-1}) P_{\ell-1}(n_{\ell-1}), \quad (1.11)$$

onde $T(n, m)$ é uma matriz denominada matriz estocástica e deve possuir as propriedades

$$T(n, m) \geq 0 \quad (1.12)$$

e

$$\sum_n T(n, m) = 1. \quad (1.13)$$

Os elementos de T devem ser não-negativos, pois são probabilidades condicionais, e a soma dos elementos de uma coluna deve ser igual à unidade, uma vez que as probabilidades devem estar normalizadas. Na verdade, qualquer matriz quadrada que apresente as propriedades (1.12) e (1.13) pode ser denominada matriz estocástica.

Definindo a matriz coluna P_ℓ , cujos elementos são $P_\ell(n)$, podemos reescrever a equação (1.11) como um produto de matrizes, ou seja:

$$P_\ell = T P_{\ell-1}. \quad (1.14)$$

Assim, dadas as probabilidades iniciais agrupadas na matriz coluna P_0 , podemos obter as probabilidades em qualquer instante posterior ℓ através da relação de recorrência (1.14). Assim, podemos ainda escrever as probabilidades no instante ℓ em termos das probabilidades no instante inicial e da matriz T :

$$P_\ell(n) = \sum_m T^\ell(n, m) P_0(m). \quad (1.15)$$

Notamos então que um elemento de matriz $T^\ell(n, m)$ deve ser interpretado como a probabilidade de transição do estado m para o estado n em ℓ passos, e o problema de determinar $P_\ell(n)$ se reduz ao cálculo da ℓ -ésima potência da matriz estocástica T . Entretanto, nosso interesse é utilizar as probabilidades de transição para elaborar algoritmos para a simulação numérica.

1.2 Equação mestra

Neste trabalho, analisamos alguns processos descritos por equações mestras. Tais equações governam a dinâmica dos sistemas, fornecendo a evolução temporal da probabilidade de encontrá-los em determinados estados.

Sendo $T(n, m)$ a matriz estocástica associada a um processo markoviano, vamos supor que as transições ocorram a cada intervalo de tempo τ de maneira que possamos reescrever $T(n, m)$ como

$$T(n, m) = \tau W(n, m), n \neq m \quad (1.16)$$

e

$$T(n, n) = 1 - \tau \Omega(n), \quad (1.17)$$

onde τ é muito pequeno, de maneira que $T(n, n) \simeq 1$. Assim, lembrando da propriedade (1.13) das matrizes estocásticas, podemos escrever

$$\Omega(n) = \sum_{m(\neq n)} W(m, n). \quad (1.18)$$

Uma vez que o processo é markoviano, a probabilidade $P_{\ell+1}(n)$ de que o sistema esteja no estado n no instante $t = (\ell + 1)\tau$ é dada pela equação de evolução

$$P_{\ell+1}(n) = \sum_m T(n, m) P_\ell(m), \quad (1.19)$$

cujo segundo membro pode ser separado em uma parcela em que $m = n$ e na soma restante:

$$P_{\ell+1}(n) = T(n, n)P_{\ell}(n) + \sum_{m(\neq n)} T(n, m)P_{\ell}(m). \quad (1.20)$$

Usando as equações (1.16) e (1.17), chegamos a

$$\frac{P_{\ell+1}(n) - P_{\ell}(n)}{\tau} = \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P_{\ell}(m) - \Omega(n)P_{\ell}(n). \quad (1.21)$$

No limite $\tau \rightarrow 0$, temos, no primeiro membro, a derivada temporal de $P(n)$; no segundo membro, substituindo a equação (1.18), chegamos a

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_{m(\neq n)} \{W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t)\}. \quad (1.22)$$

A equação (1.22) é denominada equação mestra. $W(n, m)$ é interpretado como a probabilidade de transição de m para n por unidade de tempo, ou taxa de transição de m para n . Nesta tese, consideramos modelos cujos estados são caracterizados por um conjunto de variáveis estocásticas dispostas sobre uma rede. O estado m deve ser interpretado como o conjunto

$$\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N), \quad (1.23)$$

onde a cada sítio da rede associamos a variável estocástica η_i . A equação mestra se escreve então

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{\eta'(\neq \eta)} \{W(\eta, \eta')P(\eta', t) - W(\eta', \eta)P(\eta, t)\}. \quad (1.24)$$

As taxas de transição de cada modelo definido numa rede caracterizam a maneira com que os estados de cada sítio devem ser atualizados.

1.3 Autômato celular probabilístico

Outro tipo de processo markoviano, também tratado neste trabalho, é o autômato celular probabilístico. Tal processo ocorre em tempo discreto, e

é caracterizado por um conjunto de variáveis estocásticas também discretas residindo sobre os sítios de algum tipo de reticulado. De acordo com regras probabilísticas definidas para o sistema, todas as variáveis são atualizadas independentemente e de forma simultânea. Definindo um microestado do sistema como

$$\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N), \quad (1.25)$$

podemos escrever, já que o processo é markoviano,

$$P_{\ell+1}(\eta) = \sum_{\eta'} W(\eta|\eta') P_{\ell}(\eta'), \quad (1.26)$$

onde $W(\eta|\eta')$ é a probabilidade condicional de transição do estado η' para o estado η , e analogamente à matriz de transição dos sistemas descritos por equações mestras, deve estar normalizada e portanto apresentar as propriedades

$$W(\eta|\eta') \geq 0 \quad (1.27)$$

e

$$\sum_{\eta} W(\eta|\eta') = 1. \quad (1.28)$$

Uma vez que, pela definição do autômato, os sítios devem ser atualizados de forma independente e simultânea, a probabilidade de transição $W(\eta|\eta')$ pode ser expressa como um produto:

$$W(\eta|\eta') = \prod_{i=1}^N w_i(\eta_i|\eta'), \quad (1.29)$$

onde $w_i(\eta_i|\eta')$ é a probabilidade condicional de transição do estado η' para o estado η , em que o estado do sítio i é η_i . A propriedade

$$\sum_{\eta_i} w_i(\eta_i|\eta') = 1 \quad (1.30)$$

também deve ser satisfeita, garantindo que (1.27) e (1.28) também o sejam.

Por sua forma discreta e pelo tipo de atualização, os autômatos celulares probabilísticos são apropriados para simulações computacionais, e a forma explícita das probabilidades de transição depende de cada modelo.

Capítulo 2

Autômato Celular de Domany-Kinzel

2.1 Introdução

O autômato celular de Domany-Kinzel [3, 4, 8] é um autômato celular probabilístico definido sobre uma rede regular, onde cada sítio pode estar em um de dois estados: vazio ou ocupado. Em uma dimensão, as regras dinâmicas para a evolução desse sistema são tais que o estado de um sítio em um instante de tempo depende apenas do estado de seus dois vizinhos no instante anterior da seguinte maneira:

(a) Se os dois sítios vizinhos estiverem vazios o sítio estará vazio no próximo instante;

(b) Se apenas um dos vizinhos estiver ocupado, o sítio estará ocupado com probabilidade p_1 ;

(c) Se os dois vizinhos estiverem ocupados, o sítio estará ocupado com probabilidade p_2 .

A primeira regra garante que há um estado absorvente no sistema, identificado como o estado em que todos os sítios estão vazios.

No estado estacionário, esse sistema pode estar em duas fases. Uma delas é correspondente a uma fase congelada, ou seja, o sistema no estado absorvente com todos os sítios vazios, do qual a dinâmica não permite que ele saia. A outra fase possível no estado estacionário, a fase ativa, tem uma densidade não nula de sítios ocupados. A transição entre essas duas fases é

contínua e o modelo pertence à mesma classe de universalidade da percolação direcionada.

Um autômato celular probabilístico é definido da seguinte maneira [3]. A cada sítio i de uma rede regular associamos uma variável de ocupação η_i que toma os valores 0 ou 1 conforme o sítio i esteja vazio ou ocupado por uma partícula, respectivamente. Denotamos por $P_\ell(\eta)$ a probabilidade do estado $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$ no instante ℓ , onde N é o número de sítios da rede. A evolução temporal é governada pela equação de Markov:

$$P_{\ell+1}(\eta) = \sum_{\eta'} W(\eta|\eta') P_\ell(\eta'), \quad (2.1)$$

onde $W(\eta|\eta')$ é a probabilidade de transição do estado η' para o estado η . Mais precisamente, $W(\eta|\eta')$ é a probabilidade condicional de que o sistema esteja no estado η dado que no estado anterior ele estava no estado η' . Dessa forma, devemos ter

$$\sum_{\eta} W(\eta|\eta') = 1 \quad (2.2)$$

para qualquer estado η' . A equação (2.1) é válida para qualquer cadeia de Markov. Para um autômato celular probabilístico a probabilidade de transição $W(\eta|\eta')$ possui a forma [3]

$$W(\eta|\eta') = \prod_i w_i(\eta_i|\eta'), \quad (2.3)$$

o que significa que cada sítio é atualizado independentemente dos outros. A grandeza $w_i(\eta_i|\eta')$ é a probabilidade de que o sítio i venha a estar no estado η'_i e possui a propriedade

$$w_i(0|\eta') + w_i(1|\eta') = 1. \quad (2.4)$$

Para o autômato celular de Domany-Kinzel, temos

$$w_i(\eta_i|\eta') = w(\eta_i|\eta'_{i-1}, \eta'_{i+1}), \quad (2.5)$$

onde

$$w(1|00) = 0, \quad (2.6)$$

$$w(1|10) = w(1|01) = p_1, \quad (2.7)$$

e

$$w(1|11) = p_2. \quad (2.8)$$

A partir das equações (2.1) e (2.3), podemos deduzir que probabilidade marginal de um sítio $P_{\ell+1}(\eta_i)$ está relacionada com a probabilidade marginal de dois sítios $P_{\ell}(\eta_i, \eta_{i+1})$ por meio da equação

$$P_{\ell+1}(\eta_i) = \sum_{\eta'_i} \sum_{\eta'_{i+1}} w(\eta_i|\eta'_i, \eta'_{i+1}) P_{\ell}(\eta'_i, \eta'_{i+1}). \quad (2.9)$$

Usando as probabilidades de transição de Domany-Kinzel, obtemos

$$P_{\ell+1}(1) = p_2 P_{\ell}(11) + p_1 P_{\ell}(10) + p_1 P_{\ell}(01). \quad (2.10)$$

Analogamente, a probabilidade de dois sítios $P_{\ell+1}(\eta_i, \eta_{i+1})$ está relacionada com a probabilidade de três sítios $P_{\ell}(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2})$, a de três com a de quatro, e assim por diante.

2.2 Percolação direcionada

Vamos mostrar aqui que o autômato de Domany-Kinzel unidimensional está relacionado com o modelo de percolação direcionada bidimensional [3, 4].

Consideramos uma rede quadrada em que cada sítio pode estar ativo ou inativo e que além disso a ligação entre dois sítios vizinhos pode estar ativa ou inativa. Nessa rede, dois sítios vizinhos se dizem conectados quando ambos estão ativos e há entre eles uma ligação ativa. Consideramos uma rede quadrada semi-infinita com todos os sítios da fronteira ativos. Assim, dizemos que um sítio está conectado com a fronteira se existir um caminho entre o sítio considerado e um sítio da fronteira, formado apenas por pares de sítios conectados. Na percolação direcionada, consideramos que a rede é formada por camadas de sítios paralelas à camada da fronteira. Nesse caso, o caminho deve passar uma única vez por cada camada, ou seja, imaginando que a fronteira esteja na parte superior, como mostrado na figura (2.1), o caminho é sempre descendente.

Seja então p a probabilidade de um sítio estar ativo e r a probabilidade de uma ligação estar ativa. A grandeza que possui um papel fundamental na percolação direcionada é a probabilidade P de que um sítio qualquer a uma

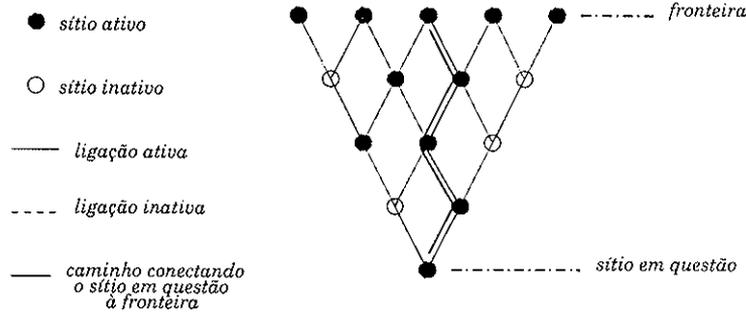


Figura 2.1: Esquema de percolação direcionada

certa distância da fronteira esteja ligado à fronteira. Em particular, estamos interessados no valor dessa grandeza quando a distância é infinita.

Um caso particular do modelo de percolação direcionada é aquele em que $r = 1$, ou seja, todas as ligações estão ativas e o modelo é de percolação por sítios. Analogamente, existe o caso $p = 1$, em que todos os sítios estão ativos e fala-se em percolação por ligações.

Vamos associar uma variável η_i ao sítio i , que toma o valor 1 quando o sítio i está ligado à fronteira e o valor 0 em caso contrário. Podemos então escrever a probabilidade de um sítio a uma distância $\ell + 1$ estar ligado à fronteira em termos das probabilidades referentes a sítios que estão a uma distância ℓ da fronteira. Assim,

$$P_{\ell+1}(1) = p\{r^2[P_\ell(11) + P_\ell(10) + P_\ell(01)] + r(1-r)[P_\ell(11) + P_\ell(10)] + (1-r)r[P_\ell(11) + P_\ell(01)], \quad (2.11)$$

ou seja,

$$P_{\ell+1}(1) = pr(2-r)P_\ell(11) + prP_\ell(10) + prP_\ell(01). \quad (2.12)$$

Comparando com a equação (2.10) para o autômato de Domany-Kinzel obtemos as seguintes relações entre os parâmetros:

$$p_2 = pr(2-r) \quad \text{e} \quad p_1 = pr. \quad (2.13)$$

Equivalentemente, temos

$$r = \frac{2p_1 - p_2}{p_1} \quad \text{e} \quad p = \frac{p_1^2}{2p_1 - p_2}. \quad (2.14)$$

As equações acima mostram que há uma correspondência entre o autômato de Domany-Kinzel em uma dimensão e o modelo de percolação em duas dimensões. Para cada par de parâmetros (r, p) da percolação direcionada, existe um par de parâmetros (p_1, p_2) do autômato de Domany-Kinzel. Entretanto, existem valores de p_1 e de p_2 dentro do intervalo $[0, 1]$ que correspondem a valores de r e p que estão fora do intervalo $[0, 1]$. Exemplo: para $p_1 = 1$ e $p_2 = 0$ temos $r = 2$ e $p = 1/2$. Nesse sentido a correspondência não é biunívoca. Em particular, notamos que a percolação por sítios, $r = 1$, corresponde a $p_2 = p_1$, enquanto a percolação por ligações, $p = 1$, corresponde a $p_2 = p_1(2 - p_1)$.

2.3 Expansão em série

Expansões em série podem ser feitas para se conhecer o comportamento de uma determinada grandeza como função de um parâmetro [9, 10, 11]. Para isso é preciso conhecer o estado em torno do qual a expansão é feita. Por exemplo, se desejamos conhecer a densidade P de sítios ocupados no autômato de Domany-Kinzel, podemos fazer uma expansão em torno do ponto $p_1 = p_2 = 1$. Para esse valor dos parâmetros o estado estacionário é bem conhecido e corresponde a todos os sítios ocupados. Para realizar a expansão definimos as grandezas

$$q_1 = 1 - p_1 \quad \text{e} \quad q_2 = 1 - p_2. \quad (2.15)$$

Assim, consideramos a expansão de $P(q_1, q_2)$ em potências de q_1 e q_2 . Começamos por ilustrar o método para o caso de expansão em primeira e segunda ordem. Para isso supomos que no instante inicial $\ell = 0$ todos os sítios estejam ocupados.

Em primeira ordem, consideramos um aglomerado de três sítios, no espaço posição-tempo, tais que dois deles correspondem ao instante 0 e um deles corresponde ao instante 1. Considerando que os dois sítios no instante 0 estejam ocupados então a probabilidade de o sítio correspondente ao instante 1 estar ocupado é

$$P = p_2 \quad (2.16)$$

Essa é a expansão de P até primeira ordem. Em segunda ordem, consideramos um aglomerado de seis sítios tais que três correspondem ao instante

0, dois ao instante 1 e um ao instante 2. Os três sítios correspondentes ao instante 0 estão ocupados. Para determinar a probabilidade do sítio correspondente ao instante 2 estar ocupado usamos a equação (2.10):

$$P_2(1) = p_2 P_1(11) + p_1 P_1(10) + p_1 P_1(01). \quad (2.17)$$

Mas $P_1(11) = p_2^2$, $P_1(10) = P_1(01) = p_2(1 - p_2)$, de modo que

$$P_2(1) = p_2^3 + 2p_1 p_2(1 - p_2), \quad (2.18)$$

ou seja

$$P = 1 - q_2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 - q_2^3 + 2q_1 q_2^2. \quad (2.19)$$

Esse resultado está correto até ordem dois e recupera o resultado da expansão anterior.

Essas expansões também podem ser realizadas utilizando o formalismo da percolação direcionada. Aqui também definimos as grandezas

$$q = 1 - p \quad \text{e} \quad s = 1 - r. \quad (2.20)$$

Novamente, desejamos obter uma expressão para a probabilidade $P(q, s)$ de que um sítio esteja conectado à fronteira em potências de q e s . Entretanto, inicialmente vamos considerar somente o caso da percolação por sítios ($r = 1$).

Em primeira ordem, consideramos um aglomerado de três sítios sendo que dois deles estão na camada 0 e um na camada 1. A fronteira é formada pelos sítios da camada 0. Assim, temos

$$P = p = 1 - q. \quad (2.21)$$

Em segunda ordem, consideramos um aglomerado de seis sítios tais que três estão na camada 0, dois na camada 1 e um na camada 2. Novamente, a fronteira é formada pelos sítios da camada 0. A probabilidade de que o sítio da camada 2 esteja conectado à fronteira é obtida somando-se as probabilidades de todos os estados do aglomerado que permitam que esse sítio se ligue com a fronteira. Assim,

$$P = p^3 + 2p^2(1 - p), \quad (2.22)$$

ou ainda,

$$P = 1 - q - q^2 + q^3. \quad (2.23)$$

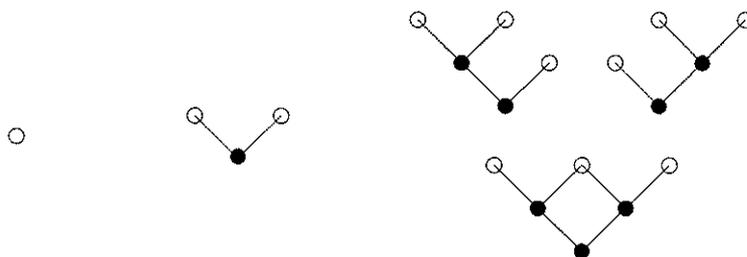


Figura 2.2: Contribuições para os três primeiros termos da expansão de Q

Temos novamente um resultado correto até ordem dois, recuperando o caso anterior.

Uma maneira mais eficiente de se fazer a expansão no modelo de percolação direcionada é expandir a probabilidade $Q = 1 - P$ de um sítio não estar ligado à fronteira ao invés de expandir a probabilidade P de o sítio estar ligado à fronteira, como fizemos acima. Sendo Q o produto da probabilidade de o sítio estar vazio pela probabilidade de que, dado que ele esteja ocupado, a conexão se bloqueie em algum lugar, então o que fazemos é determinar as configurações que bloqueiam a conexão de um sítio à fronteira. Na figura (2.2) mostramos as configurações que contribuem para os três primeiros termos dessa expansão.

A soma das probabilidades dessas configurações nos dá

$$Q = q + pq^2 + 2p^2q^3 + p^3q^3. \quad (2.24)$$

Contando as configurações dessa maneira podemos ter certeza de que a expansão está correta até ordem três pois qualquer outro grafo que interrompa a conexão do sítio com a fronteira terá mais que três sítios vazios e portanto de ordem superior a q^3 . Substituindo $p = 1 - q$, obtemos a seguinte expressão até termos de terceira ordem:

$$Q = q + q^2 + 2q^3. \quad (2.25)$$

Logo, até terceira ordem,

$$P = 1 - q - q^2 - 2q^3. \quad (2.26)$$

2.3.1 Obtenção da série

Na seção anterior mostramos diferentes maneiras de se tentar fazer uma expansão em série para conhecer o comportamento de P para o modelo de Domany-Kinzel e da grandeza equivalente no modelo de percolação direcionada.

Seja $Q_\ell(1)$ a probabilidade de que um sítio 1 da camada ℓ não esteja conectado à fronteira (camada 0) dado que o sítio esteja ativo. Então a probabilidade Q_ℓ de que o mesmo sítio não esteja conectado à fronteira está relacionado com $Q_\ell(1)$ por meio de

$$Q_\ell = q + pQ_\ell(1). \quad (2.27)$$

Definimos também $Q_\ell(12)$ como a probabilidade de que dois sítios contíguos, sítios 1 e 2, da camada ℓ não estejam ambos conectados à fronteira dado que ambos os sítios estejam ativos. A relação entre as probabilidades $Q_{\ell+1}(1)$ e $Q_\ell(12)$ é dada por

$$Q_{\ell+1}(1) = q^2 + qpQ_\ell(2) + pqQ_\ell(1) + p^2Q_\ell(12). \quad (2.28)$$

Essa relação é obtida imaginando dois sítios contíguos na camada ℓ e um na camada $\ell + 1$. Usando a invariância translacional, temos $Q_\ell(2) = Q_\ell(1)$ de modo que

$$Q_{\ell+1}(1) = q^2 + 2pqQ_\ell(1) + p^2Q_\ell(12). \quad (2.29)$$

Utilizando três sítios contíguos na camada ℓ e dois sítios contíguos na camada $\ell + 1$ obtemos, de forma análoga, a relação

$$\begin{aligned} Q_{\ell+1}(12) = & q^3 + q^2pQ_\ell(3) + qpqQ_\ell(2) + qp^2Q_\ell(23) + \\ & + pq^2Q_\ell(1) + pqpQ_\ell(13) + p^2qQ_\ell(12) + p^3Q_\ell(123). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Usando a invariância translacional obtemos

$$\begin{aligned} Q_{\ell+1}(12) = & q^3 + 3q^2pQ_\ell(1) + 2qp^2Q_\ell(12) + \\ & + pqpQ_\ell(13) + p^3Q_\ell(123). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Analogamente, podemos obter as relações

$$Q_{\ell+1}(123) = q^4 + 4q^3pQ_\ell(1) +$$

$$+3q^2p^2Q_\ell(12) + 2q^2p^2Q_\ell(13) + 2qp^3Q_\ell(123) + \\ +q^2p^2Q_\ell(14) + qp^3Q_\ell(134) + qp^3Q_\ell(124) + p^4Q_\ell(1234) \quad (2.32)$$

e

$$Q_{\ell+1}(13) = Q_{\ell+1}(123). \quad (2.33)$$

Para obter a expansão de Q em diversas ordens em q procedemos como segue. Em primeira ordem utilizamos somente a equação (2.27) impondo $Q_\ell(1) = 0$, obtendo assim

$$Q = q. \quad (2.34)$$

Em segunda ordem, utilizamos as equações (2.27) e (2.29) impondo $Q_\ell(1) = Q_\ell(12) = 0$, para obter

$$Q = q + pq^2. \quad (2.35)$$

Em terceira ordem, analogamente, usamos as equações (2.27), (2.29) e (2.31), impondo $Q_\ell(1) = Q_\ell(12) = Q_\ell(13) = Q_\ell(123) = 0$. o que resulta em

$$Q = q + pq^2 + 2p^2q^3 + p^3q^3. \quad (2.36)$$

À medida em que se desejem obter mais termos dessa série, torna-se necessário construir aglomerados de tamanho cada vez maior, que se tornam muito numerosos para ordens altas. Desenvolvemos, então, um algoritmo que os gera computacionalmente, de maneira que possamos contá-los, e assim determinar o peso de cada uma das potências de q na série. O algoritmo permitiu obter 14 termos da expansão de Q , dados por

$$Q = q + q^2 + 2q^3 + 5q^4 + 13q^5 + 35q^6 + 98q^7 + 280q^8 + \\ + 818q^9 + 2423q^{10} + 7279q^{11} + 22090q^{12} + 67632q^{13} + 208893q^{14},$$

a partir da qual obtemos a série para $P = 1 - Q$. Para uso posterior escrevemos abaixo a série para $1/P$, dada por

$$\frac{1}{P} = 1 + q + 2q^2 + 5q^3 + 14q^4 + 41q^5 + 123q^6 + 376q^7 + 1164q^8 + \\ + 3642q^9 + 11487q^{10} + 36481q^{11} + 116508q^{12} + 373846q^{13} + 1204685q^{14},$$

obtida a partir de

$$\frac{1}{P} = 1 + Q + Q^2 + Q^3 + \dots, \quad (2.37)$$

onde truncamos cada termo na ordem desejada. Os resultados obtidos pelo nosso algoritmo concordam com os obtidos por Duarte [9] até ordem seis.

2.3.2 Método da razão

Uma vez obtida a probabilidade Q em série de potências de q até uma certa ordem, é preciso utilizar algum método para obter os parâmetros críticos do modelo, já que a série finita é apenas um polinômio, uma função analítica que não apresenta nenhuma espécie de comportamento crítico. Os métodos que utilizamos para análise da série são o *método da razão* e o método dos *aproximantes de Padé* [12, 13, 14].

Uma maneira de obter os parâmetros críticos deste modelo é analisar as razões entre os coeficientes da série finita, o que se denomina *método da razão*. A densidade de sítios ligados P deve ter um comportamento crítico do tipo

$$P = (q_c - q)^\beta, \quad (2.38)$$

e portanto

$$\frac{1}{P} = A\left(1 - \frac{q}{q_c}\right)^{-\beta}, \quad (2.39)$$

onde A é constante. Considerando a expansão em série de Taylor

$$(1 - x)^{-\beta} = 1 + \beta x + \frac{\beta(\beta + 1)}{2}x^2 + \dots, \quad (2.40)$$

podemos escrever

$$(1 - x)^{-\beta} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n, \quad (2.41)$$

onde

$$a_n = \frac{\beta(\beta + 1)(\beta + 2)\dots(\beta + n - 1)}{n!}. \quad (2.42)$$

Assim, a série para $1/P$ pode ser escrita como

$$\frac{1}{P} = A\left\{1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{q^n}{q_c^n}\right\} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n q^n, \quad (2.43)$$

onde

$$A_n = A \frac{a_n}{q_c^n}. \quad (2.44)$$

Essa série deve ser próxima da série finita, ao menos para potências não muito pequenas de q . Dessa forma, definimos razões R_n entre os coeficientes

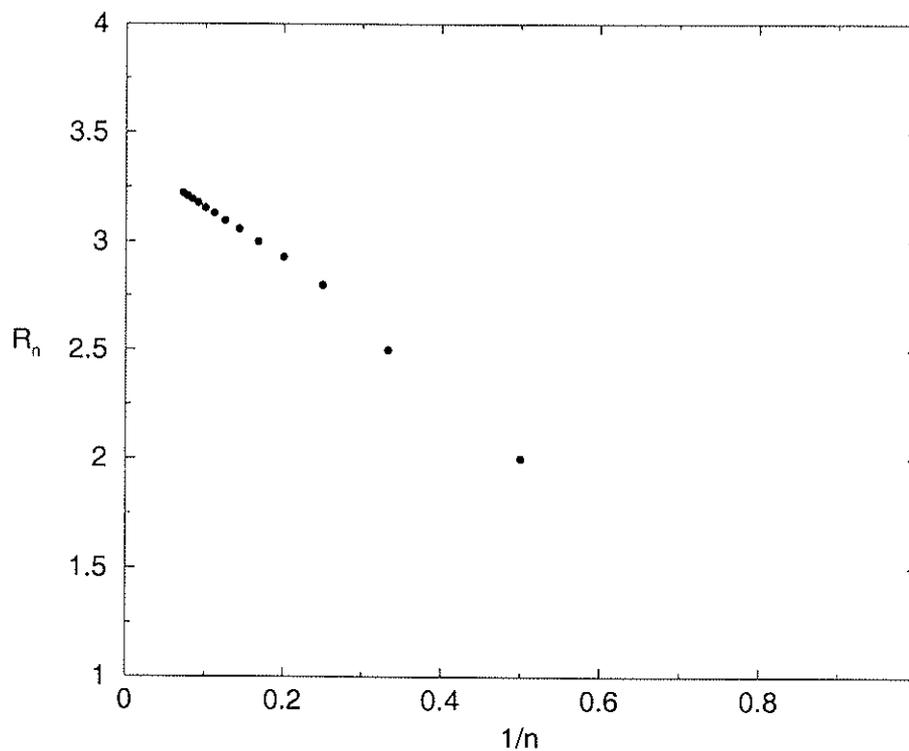


Figura 2.3: Método da razão

da série, podendo relacioná-las com os parâmetros críticos

$$R_n = \frac{A_n}{A_{n-1}} = \frac{1}{q_c} \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{1}{q_c} \left(1 - \frac{1-\beta}{n}\right). \quad (2.45)$$

Na figura (2.3), mostramos os valores obtidos de R_n versus $1/n$.

Fazendo um ajuste quadrático podemos calcular q_c e β . O resultado do ajuste através desse método foi

$$q_c = 0.294(1) \quad \text{e} \quad \beta = 0.26(1). \quad (2.46)$$

2.3.3 O método de Padé

Conforme explicitamos na seção anterior, já que a série que obtemos através da expansão em aglomerados é um polinômio, precisamos utilizar algum ou-

tro método para extrair dela algum comportamento crítico. Já citamos o método da razão e o método dos aproximantes de Padé, que consiste em aproximar uma função pela razão de dois polinômios. Essa razão é denominada *aproximante de Padé* para a função. Os polos nas raízes do polinômio denominador, que são singularidades do aproximante, reconstituem o comportamento crítico da função. A probabilidade P deve se comportar como

$$P \sim (q_c - q)^\beta, \quad (2.47)$$

e portanto

$$\ln P \sim \beta(q_c - q) \quad (2.48)$$

e

$$\frac{d}{dq} \ln P = \frac{-\beta}{q_c - q}. \quad (2.49)$$

Assim, quando aproximamos P por uma razão de polinômios, um polo fornece o valor de q_c , e o resíduo correspondente nos dá o expoente β . Por esse motivo, optamos por não construir aproximantes para a série P , e sim para sua derivada logarítmica $d(\ln P)/dq$. Essa maneira de aproximar a série se denomina método *Dlog-Padé*. Para determinar os coeficientes dos polinômios do aproximante, impõe-se, a cada ordem em q , a validade da equação

$$\frac{d}{dq} \ln P = \frac{A_L(q)}{B_M(q)} = [L, M], \quad (2.50)$$

onde

$$A_L(q) = a_0 + a_1q + a_2q^2 + \dots + a_Lq^L \quad (2.51)$$

e

$$B_M(q) = 1 + b_1q + b_2q^2 + \dots + b_Mq^M \quad (2.52)$$

até a ordem desejada, obtendo-se um sistema linear de $L + M - 1$ equações (normalmente adota-se a normalização $b_0 = 1$). A_L e B_M são polinômios de graus no máximo L e M , respectivamente. Para uma mesma série P de ordem N , portanto, poderão existir vários aproximantes $[L, M] \leq N - 1$. O valor máximo $N - 1$ para a soma de L e M vem do fato de se perder um termo da série original no momento da derivação. Na análise de séries pelo método de Padé, um procedimento usual é a montagem da “tabela de Padé”, uma coleção de aproximantes com os diferentes valores possíveis de L e M para a

série estudada. Normalmente, os resultados fornecidos por aproximantes de ordem mais alta e mais próximos da diagonal ($L \simeq M$) são os melhores.

Uma maneira alternativa de se obter os coeficientes é, ao invés de se calcular o aproximante de Padé para $d(\ln P)/dq$, aplicar o método Dlog-Padé propriamente dito para a própria série P . Reescreve-se a equação (2.50) na forma

$$\frac{1}{P} \frac{d}{dq} P(q) = \frac{A_L(q)}{B_M(q)}, \quad (2.53)$$

e assim,

$$A_L(q)P(q) = B_M(q) \frac{dP}{dq}(q). \quad (2.54)$$

Impondo-se a validade desta última equação até a ordem desejada, obtêm-se os coeficientes dos polinômios cuja razão aproximará diretamente $d(\ln P)/dq$, não havendo a necessidade de se calcular essa derivada logarítmica por algum outro meio, como no caso anterior. Lembrando da definição dos polinômios A_L e B_M , basta substituí-los em (2.54):

$$\left(\sum_{l=0}^L a_l q^l \right) \left(\sum_{n=0}^N p_n q^n \right) = \left(\sum_{m=0}^M b_m q^m \right) \left(\sum_{n=0}^N n p_n q^{n-1} \right), \quad (2.55)$$

e, portanto,

$$\sum_{n,l} a_l p_n q^{l+n} = \sum_{m,n} n b_m p_n q^{m+n-1}. \quad (2.56)$$

Chamando o índice mudo n do segundo membro de $n+1$, temos

$$\sum_{n,l} a_l p_n q^{l+n} = \sum_{m,n} (n+1) b_m p_{n+1} q^{m+n}, \quad (2.57)$$

e assim a equação para cada ordem definida p^i se escreve:

$$\sum_{n,l(n+l=i)} a_l p_n = \sum_{m,n(M=n=i)} (n+1) b_m p_{n+1}. \quad (2.58)$$

As equações (2.58), escritas para diferentes valores de i formam um sistema cuja solução é o conjunto dos coeficientes desejados. Naturalmente, não se pode ir além da ordem disponível na série original. Esse último procedimento é equivalente ao primeiro, e foi aqui descrito pois nos referiremos a ele quando citarmos os *aproximantes diferenciais parciais* nas seções seguintes.

Tabela 2.1: Parâmetros críticos fornecidos pelos aproximantes de Padé.

Aproximante	q_c	β
[2/2]	0.288547	0.242142
[2/3]	0.291646	0.254405
[3/3]	0.292113	0.256778
[4/3]	0.293806	0.268037
[3/4]	0.292113	0.253811
[4/4]	0.294230	0.271649
[5/4]	0.294322	0.272586
[4/5]	0.294308	0.227243
[5/5]	0.294332	0.272699
[6/5]	0.294323	0.272600
[5/6]	0.294315	0.272500
[6/6]	0.294323	0.272592
[7/6]	0.294323	0.272588
[6/7]	0.294310	0.272454
[7/7]	0.294322	0.272588

Apresentamos na tabela (2.1) os parâmetros críticos $q_c = 1 - p_c$ e β fornecidos pelos aproximantes $[L, M]$ para a série obtida.

Os últimos valores da tabela permitem concluir que $q_c = 0.2943(1)$ e $\beta = 0.2725(2)$. Esses valores devem ser comparados com aqueles aceitos na literatura [11], que são $q_c = 0.294515(5)$ e $\beta = 0.2763(3)$. Acreditamos que a discrepância se deva a um número relativamente pequeno de termos existentes nesta série que utilizamos.

2.3.4 Percolação por sítios e ligações

O caso que estudamos em seguida foi o de percolação por sítios e ligações, o que significa que os sítios podem estar vazios ou ocupados e as ligações podem estar ativas ou inativas. Mais uma vez, estamos interessados em obter as propriedades críticas desse sistema, e procuramos construir a série para a probabilidade $Q = 1 - P$ de que um ponto não esteja ligado a uma superfície muito afastada dele próprio. Torna-se necessário, mais uma vez, gerar os aglomerados que bloqueiam essa ligação. A geração computacional dos aglomerados torna-se mais complexa agora que temos mais essa variável no problema. Temos que considerar os aglomerados que bloqueiam a ligação por qualquer razão, seja por haver sítios vazios, seja por haver ligações inativas, ou por qualquer combinação desses fatores. Dessa forma, foi possível obter aglomerados de no máximo nove camadas.

A série obtida através do cômputo das probabilidades desses aglomerados agora tem duas variáveis, que são as probabilidades p (de um sítio estar ocupado) e q (de uma ligação estar ativa). No diagrama de fases do modelo, teremos agora uma linha crítica separando a fase em que o sistema forma um aglomerado de tamanho infinito da fase em que isso não ocorre. Para analisar a série obtida para esse caso, recorreremos a um método de cortes ao longo do diagrama de fases, reduzindo a série $Q(p, r)$ a uma série em uma única variável ao longo de cada corte. Isso se faz simplesmente estabelecendo-se relações entre p e r e substituindo na série. Uma vez escolhido um corte, usamos o mesmo método Dlog-Padé já descrito na seção anterior para encontrar o ponto crítico ao longo da linha determinada pela relação escolhida entre p e r . No caso de uma relação linear, cada corte corresponde a uma reta no espaço de fases. Variando-se a inclinação dessa reta, pode-se varrer todo o diagrama e assim obter a linha crítica do modelo.

Com o intuito de verificar os resultados fora da região “permitida” no

modelo de percolação direcionada, utilizamos um mapeamento para analisar a série nas variáveis $q_1 = 1 - p_1$ e $q_2 = 1 - p_2$ do autômato de Domany-Kinzel. Realizamos tentativas com retas e parábolas, que não apresentaram diferenças significativas nos resultados, e por isso apresentamos os resultados obtidos com cortes lineares (retas). Uma vez que temos disponível a série até ordem nove, os aproximantes de ordem mais alta que podemos calcular são $[3, 3]$, $[3, 4]$, $[4, 3]$ e $[4, 4]$. Fizemos testes com todos eles, e o que fornece melhores resultados é o aproximante $[4, 4]$. Na figura (2.4), mostramos a linha crítica obtida através desse método de expansão em aglomerados comparada com os resultados de grupo de renormalização para o autômato. Destacamos ainda, na mesma figura, as linhas correspondentes a percolação por sítios e a percolação por ligações, para lembrar que é apenas no espaço entre elas que se mapeia toda a região ($0 \leq r \leq 1, 0 \leq p \leq 1$) do modelo de percolação direcionada.

O que podemos observar a partir dessa figura é que, através do método de expansão em série para percolação direcionada, pudemos recuperar resultados do autômato apesar de extrapolarmos a região em que as variáveis têm significado. Nas linhas críticas que obtivemos pelo método de cortes, fossem eles retas ou parábolas, e qualquer que fosse o aproximante utilizado para o cálculo, observamos um conjunto mais disperso de pontos nas proximidades do ponto (0.5, 1.0) no diagrama de fases do autômato celular. O método dos cortes pode não estar funcionando bem nessa região, tornando-se necessário um outro método para obter os pontos críticos, que consistiria em analisar a série em duas variáveis, e não em uma única, como fizemos neste trabalho. Esse método é uma espécie de generalização do esquema Dlog-Padé para o caso de duas variáveis e é denominado método dos aproximantes diferenciais parciais (PDAs) [13].

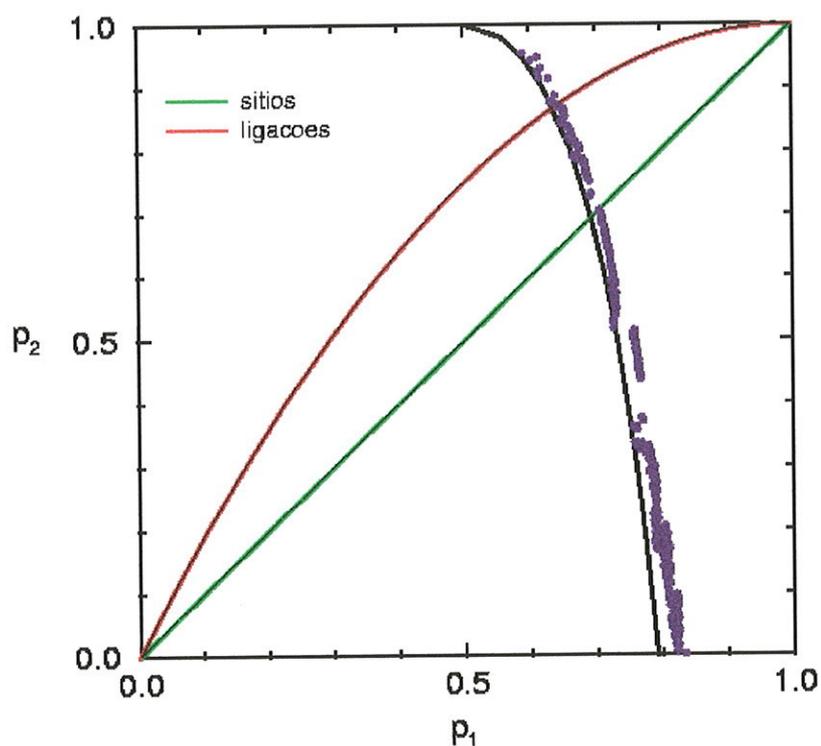


Figura 2.4: Diagrama de fases do autômato de Domany-Kinzel. Os pontos correspondem aos nossos resultados de expansão em série, enquanto a linha contínua negra é um resultado de simulação numérica. Para melhor visualização, indicamos as linhas correspondentes aos casos de percolação por sítios e percolação por ligações, que delimitam o espaço de fases do modelo de percolação direcionada.

Capítulo 3

Processos de Reação-Difusão

3.1 Introdução

Neste capítulo, concentramo-nos no estudo de processos de reação-difusão [15, 16, 17, 18], realizando simulações de dois modelos de compactação que serão descritos nas seções seguintes. Uma das motivações para se estudar tais modelos vem do estudo de sistemas granulares [19]. Existem, por exemplo, alguns sistemas granulares modelados por camadas de partículas dispostas horizontalmente, com possíveis vacâncias dentro de cada camada. Na figura (3.1), ilustramos um exemplo simples de um modelo no qual as partículas ocupam, cada uma, dois sítios de uma rede unidimensional. Se considerarmos o movimento aleatório das partículas da camada inferior, elas poderão, eventualmente, dar espaço para que uma das partículas da camada superior “caia” sobre a outra camada.

O movimento das partículas da camada inferior pode ser, como a figura ilustra, equivalente ao movimento das próprias vacâncias, que desaparecem ao tomarem posições vizinhas. Esse processo pode, então, ser visto como uma aniquilação de pares se considerarmos as vacâncias como partículas. Assim como esta, há outras possibilidades para as regras dinâmicas do sistema. Neste capítulo, simulamos dois modelos similares: em um deles, a que chamaremos *modelo de altura máxima 1*, uma partícula desaparece quando se dirige a um sítio ocupado por outra partícula. Em seguida procedemos a uma espécie de generalização em que as partículas podem se “empilhar” sobre um sítio, até que a pilha atinja uma altura máxima especificada.

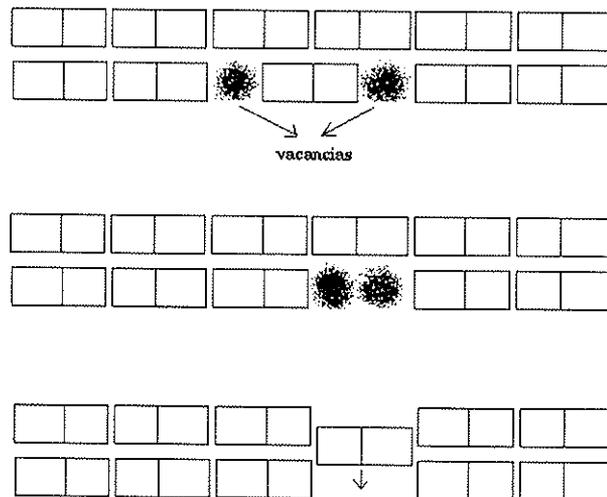


Figura 3.1: Esquema de um processo onde há aniquilação de pares (encontro de duas vacâncias)

3.2 Modelo de Altura Máxima 1

O modelo de reação-difusão que analisamos primeiramente é definido sobre uma rede unidimensional onde os sítios podem estar vazios ou ocupados por uma partícula. A dinâmica do sistema compreende o movimento aleatório das partículas sobre a cadeia, de maneira que cada uma delas pode se movimentar passando para o sítio vizinho à direita ou à esquerda, com igual probabilidade. A evolução do sistema é assíncrona, pois a cada instante de tempo, apenas uma partícula se movimenta, caracterizando um processo de reação ou de difusão, conforme será explicado a seguir.

No modelo de altura 1, um sítio é escolhido aleatoriamente a cada passo da simulação, e no caso de estar ocupado, a partícula que o ocupava passa à posição vizinha à direita ou à esquerda desse sítio. Se essa posição estiver vazia, a partícula simplesmente passará a ocupá-la, esse movimento caracterizando um processo de *difusão*. Por outro lado, se o sítio ao qual a partícula se dirige estiver ocupado, duas partículas teriam de se “empilhar” e o sítio em questão ficaria ocupado por duas partículas sobrepostas. Entretanto, isso não é permitido neste modelo, o que faz com que uma delas tenha de desaparecer. Esse encontro de duas partículas, seguido do desaparecimento de uma delas, é o processo de *reação* do modelo. Assim, à medida em que vão ocorrendo tais processos, a densidade do sistema diminui, e as simulações que realizamos visam a observar seu comportamento em função do tempo.

3.2.1 Simulação do Modelo de Altura Máxima 1

Para simular o modelo que acabamos de descrever, consideramos uma cadeia de n sítios, numerados de 0 a $n - 1$, e n_p partículas sobre eles distribuídas. A condição inicial que consideramos para o sistema é a de densidade igual a 1, ou seja, $n_p = n$. Dessa forma, a simulação começa necessariamente com um processo de reação, em que uma partícula desaparece, gerando um sítio vazio. A seguir, cada passo da simulação compreende a escolha de um sítio da cadeia que, no caso de estar ocupado, gera um processo de reação ou difusão, segundo o estado dos sítios vizinhos. Entretanto, à medida em que vão ocorrendo processos de reação, o número n_p de partículas presentes no sistema diminui, e o processo de escolha aleatória de um sítio consome cada vez mais tempo de computação, pois são feitas muitas escolhas de sítios vazios, que não resultam em nenhuma modificação do sistema. Assim, ao invés de escolher

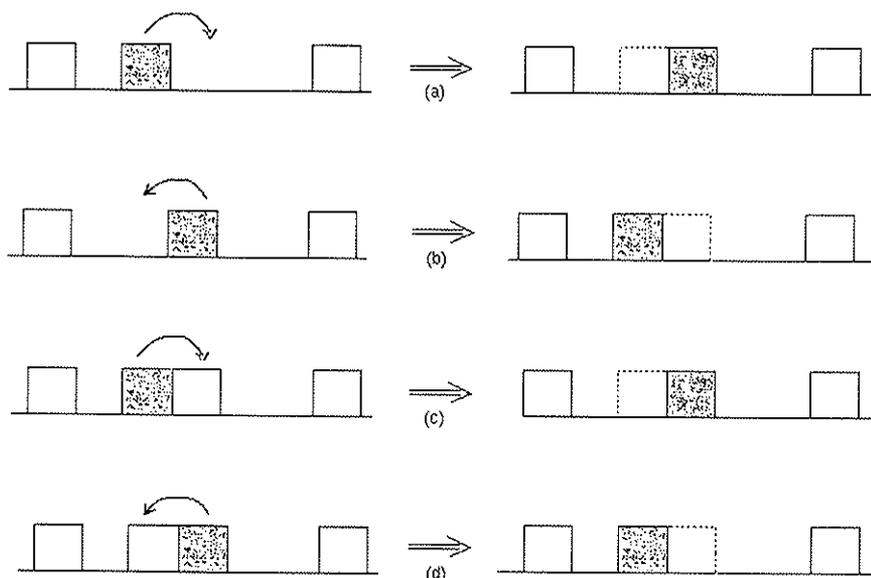


Figura 3.2: Os quatro processos possíveis no modelo de altura 1. (a) difusão à direita; (b) difusão à esquerda; (c) reação com uma partícula à direita; (d) reação com uma partícula à esquerda.

aleatoriamente os *sítios*, passamos a fazê-lo com as *partículas*, e estimamos o número de passos necessários para escolher um sítio ocupado quando há n_p partículas na cadeia de n sítios como $\Delta t = n/n_p$. Assim, passamos a trabalhar com dois vetores: $x(m)$, que é a posição da partícula m ; e $h(k)$ que é a altura do sítio k . Lembramos que neste modelo nunca é permitido que $h(k)$ seja maior que 1, qualquer que seja k , e durante a simulação consideramos condições periódicas de contorno. Na figura (3.2) estão esquematizados os quatro processos possíveis nesse sistema.

Apesar de sabermos que, aplicando indefinidamente a dinâmica ao sistema, sua densidade pode diminuir até que sobre uma única partícula, é claro que os processos de reação vão se tornando muito raros quando a densidade diminui. Assim, temos que interromper cada uma das simulações quando o sistema atinge uma densidade estabelecida *a priori*, e essa escolha da densidade mínima caracteriza a precisão dos resultados. No modelo de

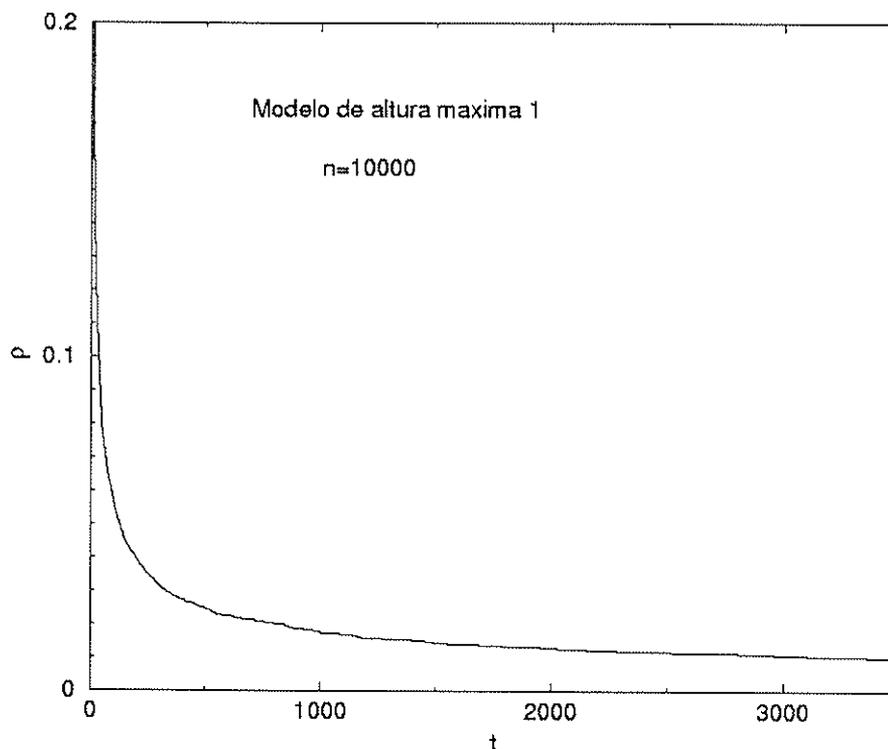


Figura 3.3: Comportamento da densidade de partículas em função do tempo para uma cadeia de 10000 sítios. A curva representa uma média sobre 100 ensaios independentes.

altura 1, é esperado um decaimento algébrico da densidade do tipo $\rho \sim t^{-1/2}$ para tempos grandes [17, 18]. Nas figuras a seguir mostramos os resultados da primeira simulação, que foi interrompida quando $\rho = 0.001$. Na figura (3.3) está representado seu comportamento em função do tempo t (número de passos da dinâmica), e na figura (3.4) está representado o comportamento do logaritmo de ρ em função do logaritmo de t . Essa última relação deve, pois, tornar-se linear para valores grandes de t , e o coeficiente angular corresponderá ao expoente que se espera que seja $1/2$ para esse modelo.

Um ajuste linear da parte final da curva obtida fornece um coeficiente angular de valor 0.498(3), em acordo com o esperado. A precisão dos resultados obtidos sempre pode ser aumentada considerando sistemas de tamanho maior, ou então, deixando que o sistema evolua até uma densidade ainda

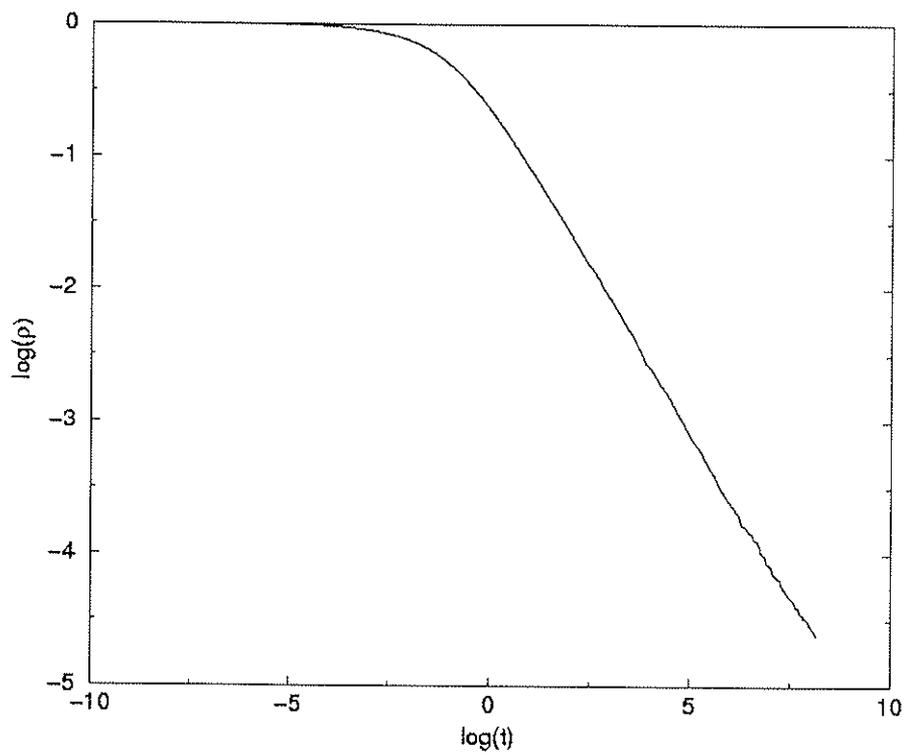


Figura 3.4: Logaritmo da densidade em função do logaritmo do tempo. A relação torna-se linear para tempos grandes.

mais baixa. A escolha de um sistema maior evoluindo até uma densidade proporcionalmente maior produz resultados semelhantes e consome tempos de computação parecidos.

3.3 Modelo de Altura Máxima h

O sistema que analisamos posteriormente é uma generalização do modelo anterior em que as partículas se movem aleatoriamente, mas agora podem se empilhar sobre um sítio até que este atinja uma altura máxima especificada. O sistema é igualmente definido sobre uma rede unidimensional de n sítios, mas agora cada um deles pode estar vazio ou ocupado por um certo número de partículas, variando de 1 a h . A evolução do sistema também é assíncrona e compreende, primeiramente, a escolha aleatória de um sítio da rede. No caso de este sítio estar ocupado, *apenas uma* das partículas que o ocupam deve se mover em direção ao sítio vizinho à esquerda ou à direita, com igual probabilidade. Em seguida, considera-se essa posição: se ela estiver vazia, a partícula passa a ocupá-la; se estiver ocupada por um número de partículas menor que h , a partícula se empilha sobre as outras, aumentando a altura deste sítio; e, finalmente, se a posição já estiver ocupada por h partículas, a partícula em movimento desaparece, uma vez que h é a altura máxima permitida para qualquer dos sítios da cadeia. A densidade ρ , portanto, é a razão do número n_p de partículas presentes no sistema pelo número de posições possíveis para elas, que é nh , em oposição a n no modelo de altura 1. As simulações que descreveremos a seguir também visam a determinar o comportamento de ρ em função do tempo, especialmente para tempos grandes.

3.3.1 Simulação do Modelo de Altura Máxima h

Na simulação deste modelo, novamente consideramos uma cadeia de n sítios, numerados de 0 a $n - 1$, e começamos o processo a partir da condição de densidade 1, ou seja, havendo um número $n_p = nh$ partículas inicialmente presentes no sistema. Escolhendo-se aleatoriamente um dos sítios da cadeia, o primeiro processo certamente acarretará o desaparecimento de uma partícula, pois esta se moverá em direção a um sítio já ocupado por h partículas. De maneira análoga ao caso anterior, os primeiros processos são semelhantes,

com o desaparecimento de muitas partículas. À medida em que estas vão desaparecendo do sistema, entretanto, começam a surgir mais e mais sítios desocupados, e a escolha aleatória de sítios novamente passa a provocar uma perda desnecessária de tempo de computação. Assim, repetimos a opção pela escolha aleatória de partículas e não de sítios, a fim de evitar os vazios. Porém, pela construção do modelo que estamos tratando, pode haver, em um dado momento, um número muito maior de partículas do que de sítios, mesmo havendo sítios vazios. Assim, adaptamos nossa opção escolhendo não uma partícula, mas *um sítio entre os ocupados* e estimamos o número de passos necessários para que essa escolha aconteça como sendo $\Delta t = n/n_{oc}$, onde n_{oc} é o número de sítios ocupados (por uma ou mais partículas) na cadeia de n sítios. No processo de simulação do modelo, é preciso considerar primeiramente a posição escolhida e verificar por quantas partículas ela está ocupada, ou seja, sua altura. É necessário considerar separadamente o caso em que o sítio escolhido tem altura 1, pois o número de posições ocupadas do sistema se comporta de forma diferente do caso em que altura é maior que 1, mesmo que a densidade do sistema não varie nos processos. As diferentes possibilidades estão esquematizadas nas figuras seguintes. Na figura (3.5) consideramos o caso em que o sítio escolhido tem altura 1.

Na verdade, cada um desses casos corresponde a quatro possibilidades diferentes que devem ser consideradas no programa, pois podem envolver movimento à direita ou à esquerda ou ainda movimentos nos extremos da cadeia (consideramos condições periódicas de contorno). Devemos notar ainda que nos casos (b) e (c) o número de sítios ocupados diminui, mas apenas no caso (c) a densidade do sistema se altera. Na figura (3.6), ilustramos os processos possíveis quando o sítio escolhido tem altura maior que 1.

Dentre as possibilidades indicadas na figura, deve-se notar que a densidade do sistema só se altera no caso (c), enquanto que o número de sítios ocupados, por outro lado, só se altera no caso (a). É importante notar que apesar de a densidade só poder se manter ou diminuir durante esses processos, é perfeitamente possível que o número de sítios ocupados aumente em alguns dos passos da simulação. Esse número é importante pois dele depende o tempo estimado para que ocorra qualquer um dos processos mencionados.

Dessa forma, realizamos várias simulações desse modelo para diferentes tamanhos de cadeias, alturas máximas e densidades finais (valores para os quais a simulação é interrompida). Para chegar aos resultados que apresenta-

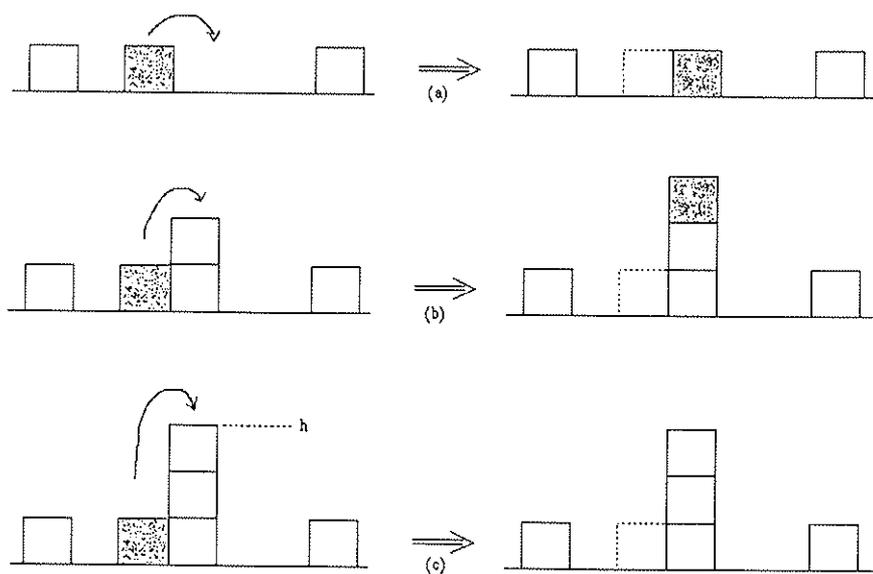


Figura 3.5: Processos possíveis quando o sítio escolhido tem altura 1.

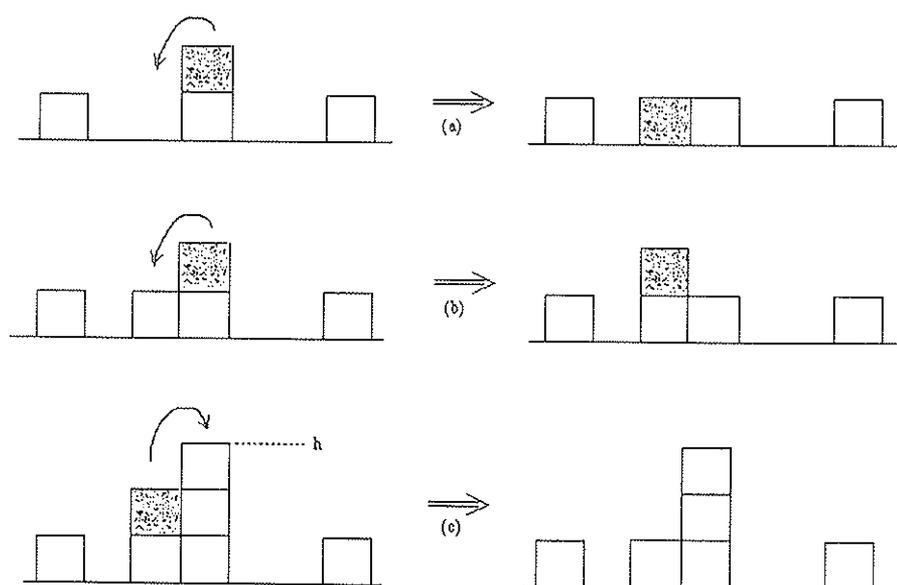


Figura 3.6: Possíveis processos quando o sítio escolhido tem altura maior que 1.

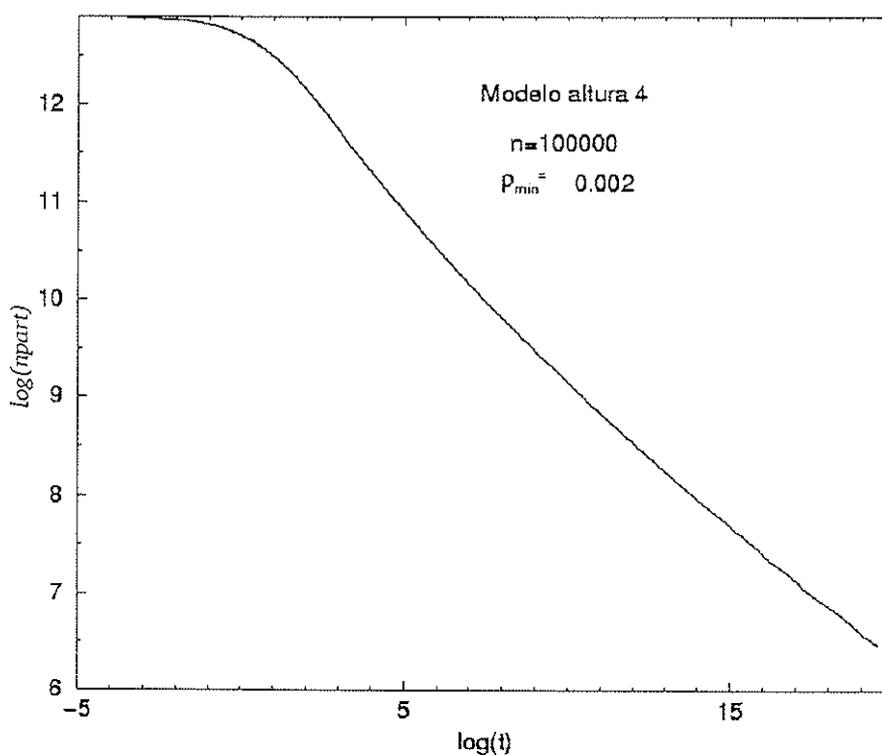


Figura 3.7: Comportamento do logaritmo do número de partículas em função do logaritmo do tempo para um modelo de altura 4 sobre uma rede de 100000 sítios. A curva representa a média tomada sobre 100 ensaios independentes.

mos a seguir, procederam-se ainda a várias simulações diferentes do mesmo sistema, para obter as curvas médias, que devem fornecer resultados mais precisos. O primeiro teste do programa de simulação do modelo geral de altura h foi recuperar os resultados do modelo de altura 1, o que foi verificado sem problemas. De maneira análoga ao caso anterior, apresentamos a seguir um exemplo das curvas obtidas para $\log(\rho) \times \log(t)$ a fim de determinar o expoente do comportamento $\rho \sim t^{-\alpha}$. O valor esperado para α é o inverso de h [18]. O exemplo que mostramos na figura (3.7) corresponde ao modelo com altura máxima 4, para uma cadeia de 100000 sítios, e cuja simulação foi interrompida quando o sistema atingiu a densidade $\rho = 0.002$.

Ao se observar essa curva, nota-se que pode ser às vezes enganoso observar o comportamento linear esperado para tempos grandes. Dependendo do

Tabela 3.1: Valores obtidos para α nas simulações do modelo com altura máxima variando de 1 a 7.

h	ρ_{min}	α	Valor α esperado
1	0.001	0.50(1)	0.50
2	0.001	0.50(1)	0.50
3	0.001	0.35(2)	0.33
4	0.002	0.26(2)	0.25
5	0.005	0.22(3)	0.20
6	0.010	0.20(3)	0.17
7	0.015	0.18(3)	0.14

ponto onde a simulação é interrompida, pode-se ter uma impressão diferente sobre o coeficiente angular da parte final da curva, que na figura vai claramente mudando de inclinação. Todas as curvas que obtivemos tendem a diminuir seu coeficiente angular com a aumento do tempo, o que fez com que alguns dos resultados obtidos fossem sistematicamente maiores do que os valores esperados. Na tabela (2) apresentamos os valores que puderam ser obtidos dentro de um tempo de computação viável. Em todas as simulações, foram consideradas cadeias de 100000 sítios e alturas máximas variando de 1 a 7. As densidades mínimas que cada sistema atingiu, apesar de estabelecidas *a priori*, variaram, pois algumas das simulações, devido ao tempo de computação, foram interrompidas antes que fossem atingidos os valores desejados.

As densidades que o sistema chegou a atingir foram maiores à medida em que se aumentou a altura máxima do modelo. Conforme explicamos acima, isso se deve ao fato de as simulações se tornarem muito mais custosas quando se aumenta h . O erro nos valores obtidos também é importante, pois ele provém tanto da imprecisão na escolha do trecho da curva em que se faz o ajuste linear, como da falta de dados na região de densidades menores. Esta última razão, provocou, sem dúvida, um erro sistemático nos valores obtidos, que foram quase sempre maiores que o esperado. Entretanto, apesar desses problemas, os resultados tiveram um acordo bastante razoável com os valores

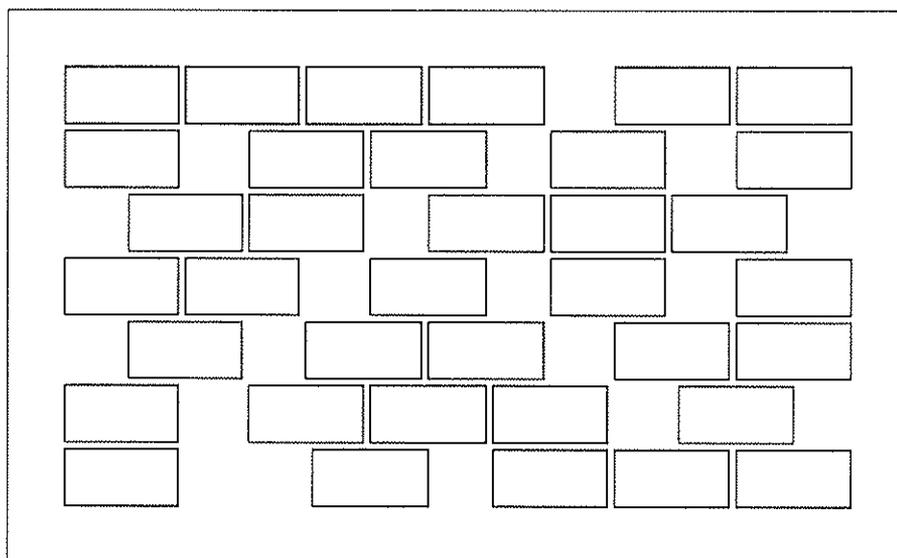


Figura 3.8: Modelo de partículas em camadas sobrepostas, com vacâncias em cada camada.

indicados na tabela (3.1).

3.4 Modelo de aniquilação de pares em uma dimensão

Este modelo, que foi citado como um exemplo em uma seção anterior, tem sua motivação na compactação de sistemas granulares. Alguns sistemas dessa natureza são modelados por partículas dispostas em camadas horizontais que se sobrepõem, mas de maneira que em cada uma delas pode haver vacâncias entre as partículas que a compõem (fig.3.8).

Quando ocorre nesse sistema algum processo estocástico que faça com que as partículas se movam aleatoriamente dentro das camadas, surge a possibilidade (figura 3.9) de que duas vacâncias da mesma camada se tornem vizinhas, gerando uma única vacância de tamanho maior (situação (1)). O modelo estudado propõe que, nesse caso, deve haver uma partícula na camada imediatamente superior que “cairá” para ocupar esse espaço (situação(2)).

Com essa motivação, simulamos o modelo analisando o movimento de

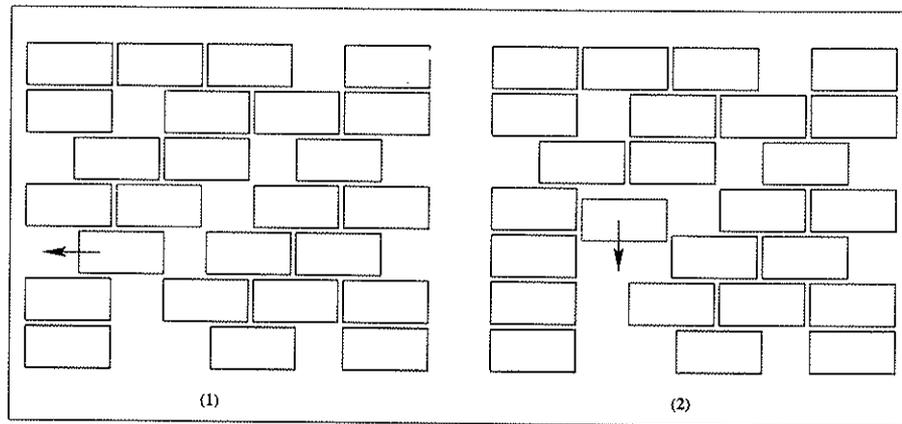


Figura 3.9: Exemplo de compactação no sistema proposto

partículas em uma única camada, e assumindo que sempre que se formar uma vacância do tamanho de uma partícula, ela passará a ser ocupada, aumentando assim a densidade de partículas na cadeia. Conforme ilustram as figuras anteriores, quando for possível ocorrer o movimento de uma das partículas, estará também ocorrendo o movimento de uma das vacâncias, e ao analisarmos o sistema considerando apenas os movimentos destas últimas, teremos um processo de aniquilação de pares no modelo, pois duas vacâncias desaparecem (aniquilam-se) quando se tornam vizinhas.

3.4.1 A configuração inicial

O modelo que analisamos é definido sobre uma única cadeia de N sítios, onde cada partícula do sistema tem tamanho igual a dois espaçamentos da rede. Para efeito da simulação, isso significa que, ao posicionar uma partícula no sítio i , ficam excluídos os primeiros vizinhos à esquerda e à direita desse sítio, uma vez que não pode ser colocada uma nova partícula em uma dessas posições. Para montar uma configuração do sistema a partir da qual se possa iniciar a simulação, permitimos inicialmente que os sítios σ_i da rede tomem três valores diferentes: (i) zero (desocupado); (ii) 1 (ocupado por uma partícula); e (iii) 2 (excluído por uma partícula em sítio vizinho). Começamos, então, por atribuir o valor zero a todos os sítios σ_i para em seguida colocar partículas aleatoriamente sobre a rede. Ao se sortear um dos sítios para se tentar posicionar uma partícula, é necessário que a este sítio

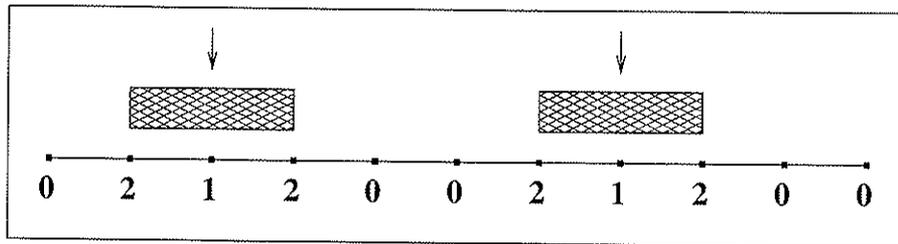


Figura 3.10: Colocação de partículas sobre a cadeia.

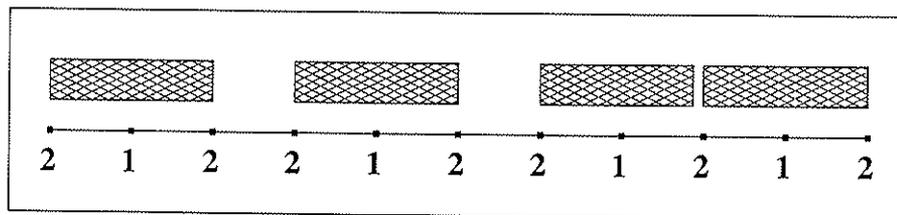


Figura 3.11: Exemplo de configuração inicial.

esteja atribuído o valor zero. No caso de assim não ser, a partícula não é colocada. Se for possível colocá-la, fica atribuído ao sítio em questão o valor 1 e a cada um de seus vizinhos o valor 2, indicando que não é possível colocar novas partículas nas posições vizinhas (figura 3.10).

Esses sorteios devem ser repetidos até que não haja no sistema nenhum sítio ao qual esteja atribuído o valor zero, significando que não há mais nenhuma vacância do tamanho de uma partícula ou maior que ela (figura 3.11), gerando assim uma configuração inicial adequada para a simulação.

A partir daí, tais vacâncias só poderão ser criadas através do movimento das partículas presentes, e, a cada vez que isso ocorrer, será introduzida uma nova partícula, aumentando a densidade da cadeia. Essa densidade pode, em princípio, aumentar até atingir o valor 1 ou muito próximo disso, correspondendo a uma situação em que não é mais possível introduzir novas partículas na cadeia. Na prática, porém, as simulações são interrompidas quando o sistema atinge uma densidade pré-estabelecida, conforme será descrito na seção seguinte.

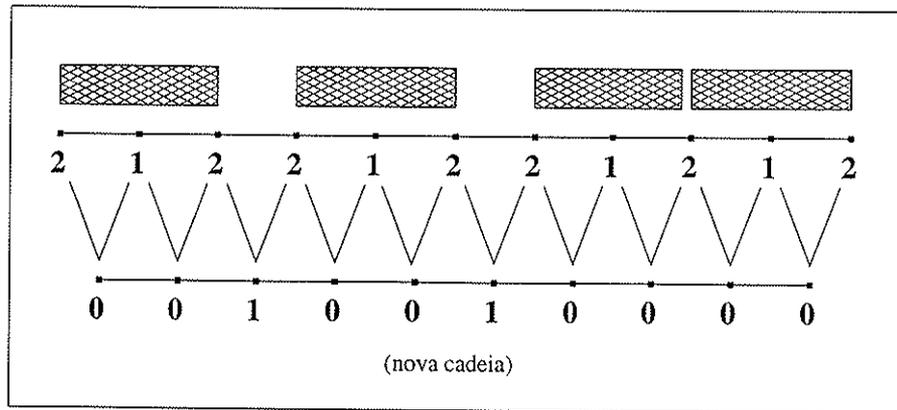


Figura 3.12: Formação da rede das vacâncias.

3.4.2 Simulação e Resultados

Uma vez gerada uma configuração inicial do sistema, nela estão definidas as posições de todas as partículas, e, portanto de todas as vacâncias. Para proceder à simulação do modelo, tratamos o sistema analisando o movimento das próprias vacâncias, que se aniquilarão quando tomarem posições vizinhas, e não das partículas propriamente ditas. Para poder analisar o problema dessa forma, definimos uma nova rede unidimensional, cujos sítios localizam-se nos interstícios da primeira rede. Se um sítio da nova cadeia estiver no interstício entre dois sítios aos quais estava atribuído o valor 2, atribuiremos-lhe o valor 1, significando que ali existe uma vacância. Do contrário, atribuiremos ao novo sítio o valor zero, indicando que ele corresponde a um espaço ocupado por alguma partícula na cadeia anterior (figura 3.12). A partir de agora nos referiremos às vacâncias da nova rede como partículas, e a presença de uma delas no sítio i se identifica pela atribuição do valor 1 à variável σ_i , enquanto que σ_i igual a zero corresponde a um sítio vazio. Dessa forma, a simulação deste modelo compreende a movimentação de tais partículas, que devem se aniquilar ao tomarem posições vizinhas. O comportamento esperado para a densidade de partículas na cadeia em função do tempo é $\rho \sim t^{-1/2}$ [17] para tempos longos. Apesar de, em princípio, essa densidade poder chegar a zero esperando-se tempo suficiente, as simulações são interrompidas quando o sistema atinge uma densidade mínima pré-estabelecida, pois o processo se torna cada vez mais lento à medida em que a densidade diminui. Além disso,

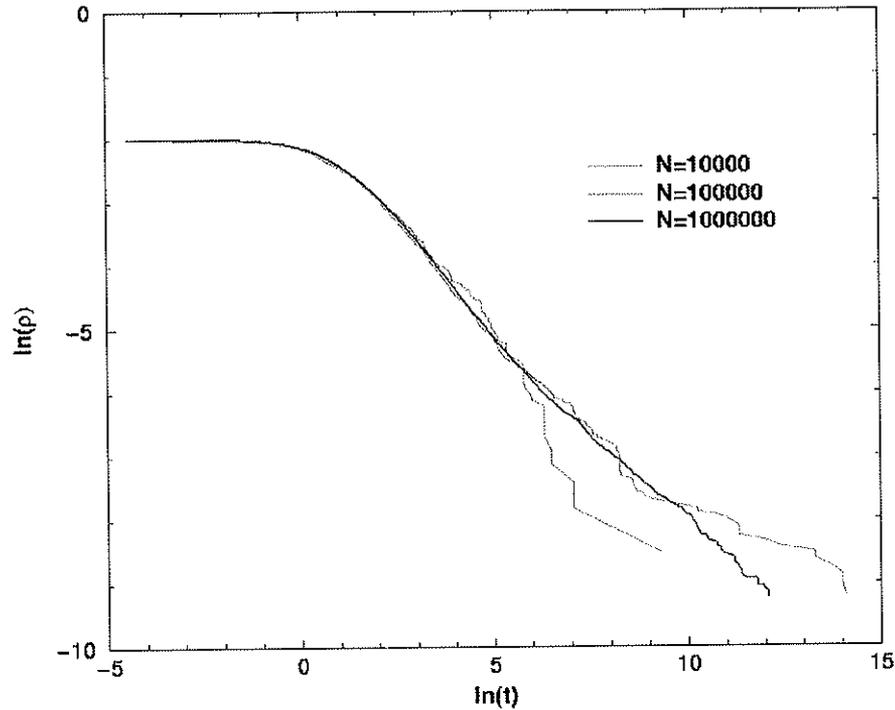


Figura 3.13: Densidade em função do tempo para cadeias de tamanho 10000, 100000 e 1000000. As curvas representam médias tomadas sobre 100 ensaios independentes.

estamos interessados apenas no comportamento assintótico de ρ para tempos muito grandes. A simulação foi realizada utilizando-se condições periódicas de contorno para cadeias de diferentes tamanhos. Mostramos na figura (3.13) o comportamento obtido para a densidade para cadeias de tamanhos 10000, 100000 e 1000000.

As simulações das cadeias $N = 100000$ e $N = 1000000$ foram interrompidas quando a densidade atingiu o valor 10^{-4} . Fazendo um ajuste linear da curva $N = 1000000$ na região de tempos longos (figura 3.14), obtivemos o valor 0.53 ± 0.02 para o expoente α .

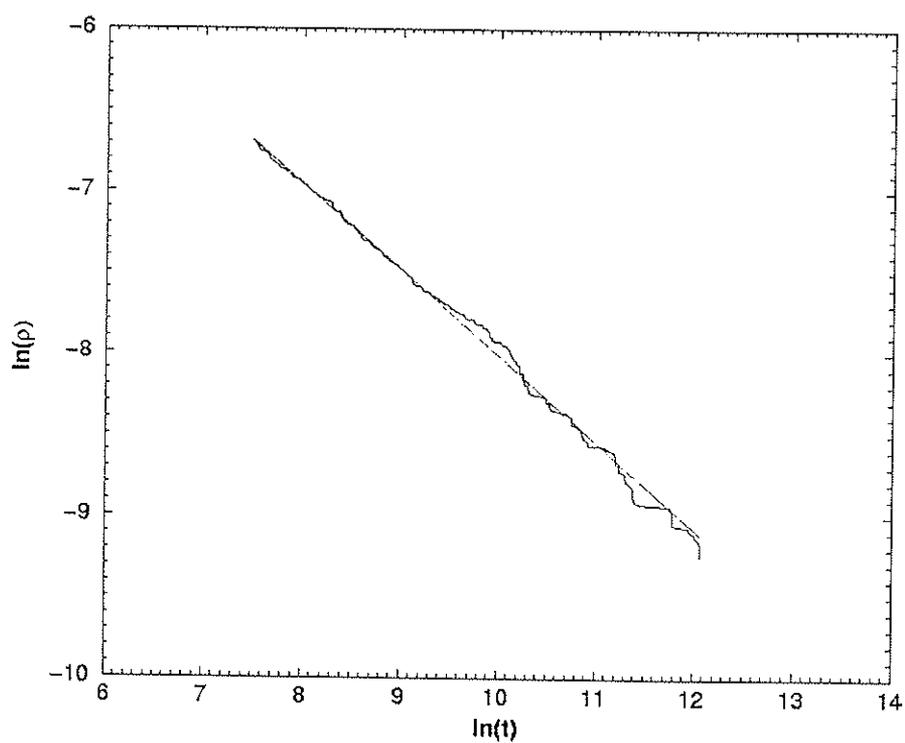


Figura 3.14: Ajuste linear na região de tempos longos para obtenção do expoente α .

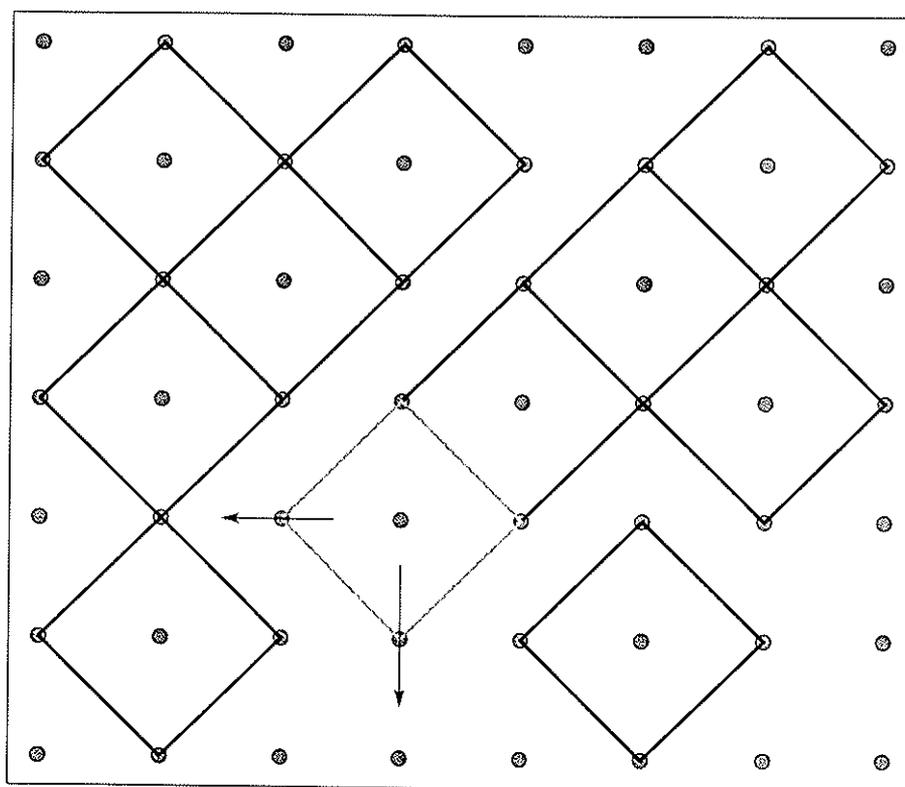


Figura 3.15: Esquema do modelo bidimensional.

3.5 Modelo bidimensional

O modelo que estudamos em seguida é inspirado naquele da seção anterior, mas é definido sobre uma rede quadrada bidimensional sobre a qual se localizam as partículas conforme ilustra a figura (3.15).

Neste modelo, as partículas em questão são quadrados dispostos ao longo da direção diagonal da rede. Entretanto, os movimentos possíveis para cada uma delas se dão nas direções horizontal ou vertical e só ocorrem se houver espaço para isso. A partícula destacada na figura (3.15), por exemplo, só pode se movimentar para a esquerda ou para baixo. De forma análoga ao modelo unidimensional, sempre que o movimento de uma das partículas criar espaço para que sejam adicionadas uma ou mais partículas ao sistema, isso deve acontecer, aumentando sua densidade, cujo comportamento será analisado em função do tempo.

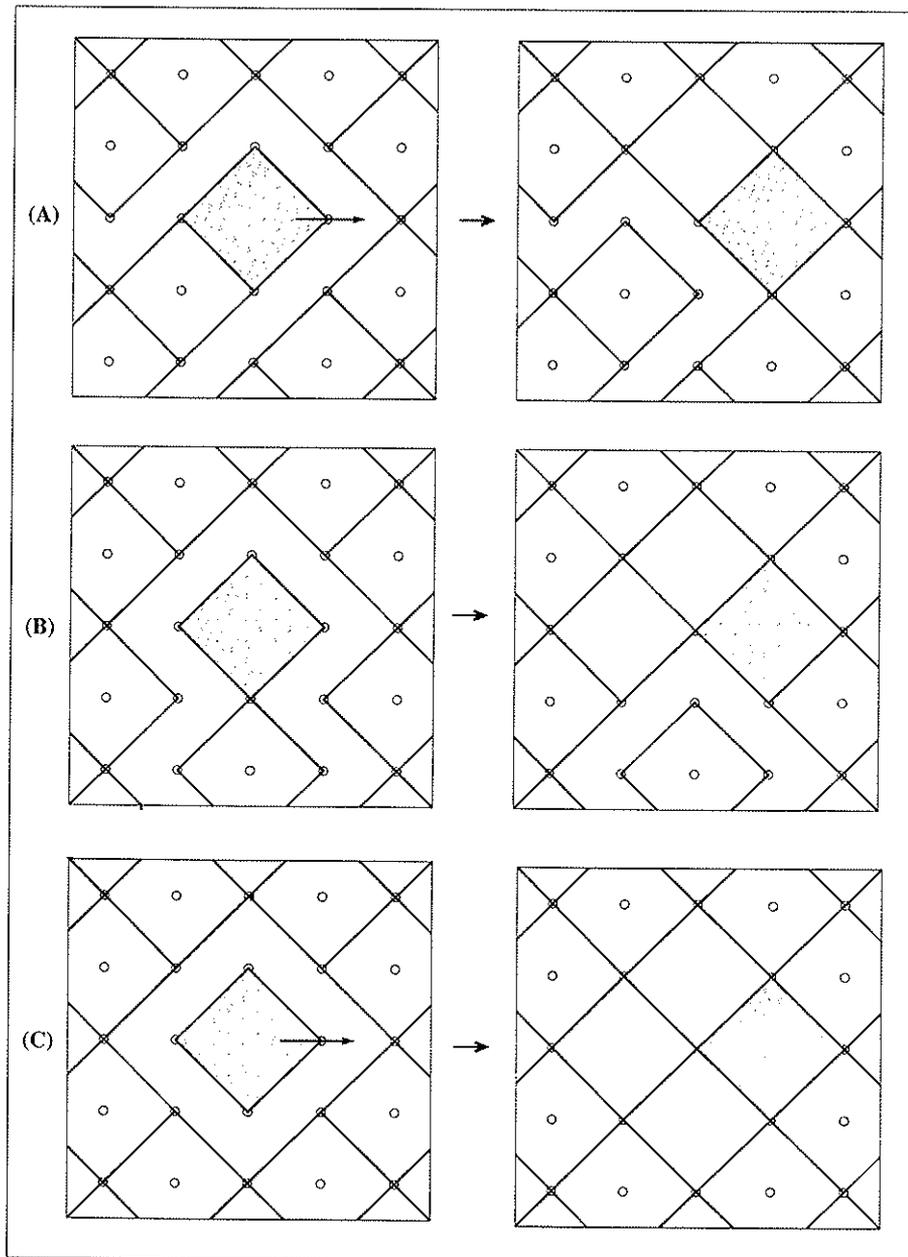


Figura 3.16: Exemplos de aparecimento de novas partículas na rede.

A figura (3.16) ilustra alguns exemplos de situações em que a partícula central, ao se mover para a direita, faz com que apareçam novas partículas no sistema. As situações (A), (B) e (C) são exemplos de movimentos que acarretam o aparecimento de uma, duas e três partículas, respectivamente. Além das configurações ilustradas na figura, há várias outras em que aparecem de uma até no máximo três novas partículas no sistema, e devem ser levadas em consideração para se realizar a simulação deste modelo.

3.5.1 A configuração inicial

A montagem da configuração inicial para a simulação se faz de forma também análoga ao modelo anterior, começando com uma rede quadrada $N \times N$ toda vazia (atribuindo-se o valor 0 a todas as variáveis de sítio $\sigma_{i,j}$), e em seguida colocando-se as partículas aleatoriamente em sítios da rede. Nesse caso, a introdução de uma partícula no sítio (i, j) é identificada pela atribuição do valor 1 à variável $\sigma_{i,j}$ e do valor 2 às variáveis relativas aos quatro primeiros vizinhos deste sítio, $\sigma_{i,j+1}$, $\sigma_{i,j-1}$, $\sigma_{i+1,j}$ e $\sigma_{i-1,j}$ o que significa que estes sítios estão excluídos e neles não se pode colocar uma nova partícula (figura 3.17).

Assim como no modelo unidimensional, sorteia-se um sítio (i, j) para colocar uma partícula e esta só é colocada se $\sigma_{i,j} = 0$. Este procedimento é repetido até que não haja mais nenhum sítio da rede ao qual esteja atribuído o valor 0. Quando se atinge uma tal configuração, pode-se iniciar a movimentação das partículas.

Para se realizar essa simulação, diferentemente do modelo anterior, não é tão simples transformar o problema do movimento das partículas no do movimento de vacâncias. No modelo unidimensional as vacâncias eram simplesmente colocadas nas posições correspondentes aos sítios desocupados, enquanto que em duas dimensões elas são linhas sobre a rede, indicadas na figura (3.18). Para realizar as primeiras simulações optamos por não transformar a análise do sistema no movimento dessas linhas, e sim no das próprias partículas. Algumas considerações, entretanto, podem ser feitas a respeito do comportamento dessas linhas, conforme discutiremos adiante.

3.5.2 Simulação e Resultados

A simulação deste modelo se faz escolhendo-se aleatoriamente uma partícula da rede e sorteando-se uma direção para seu possível movimento. Após

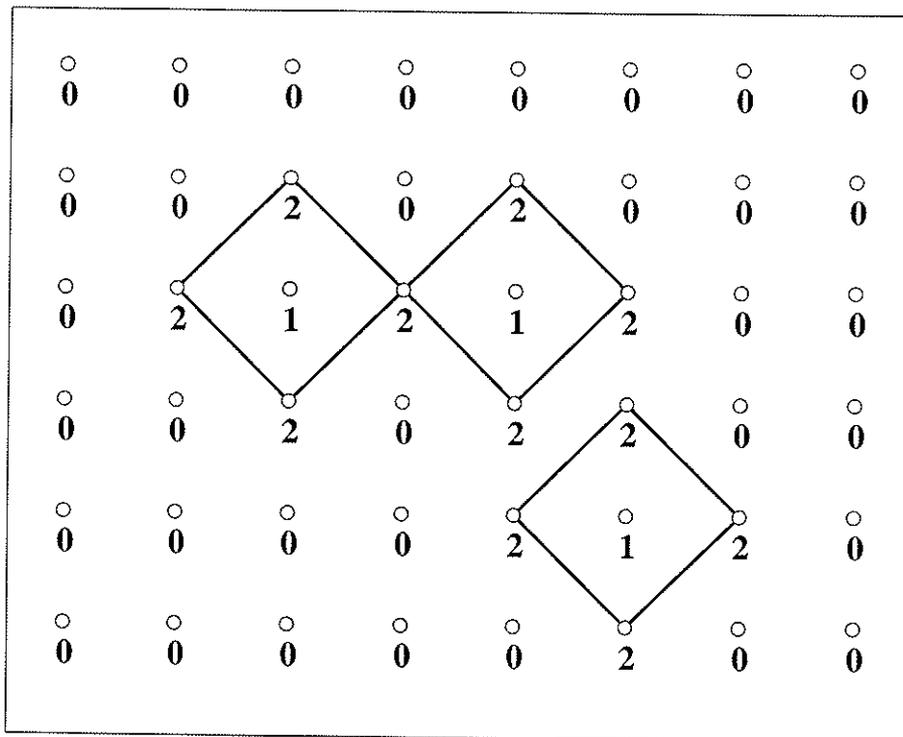


Figura 3.17: Colocação das partículas na rede para montagem da configuração inicial.

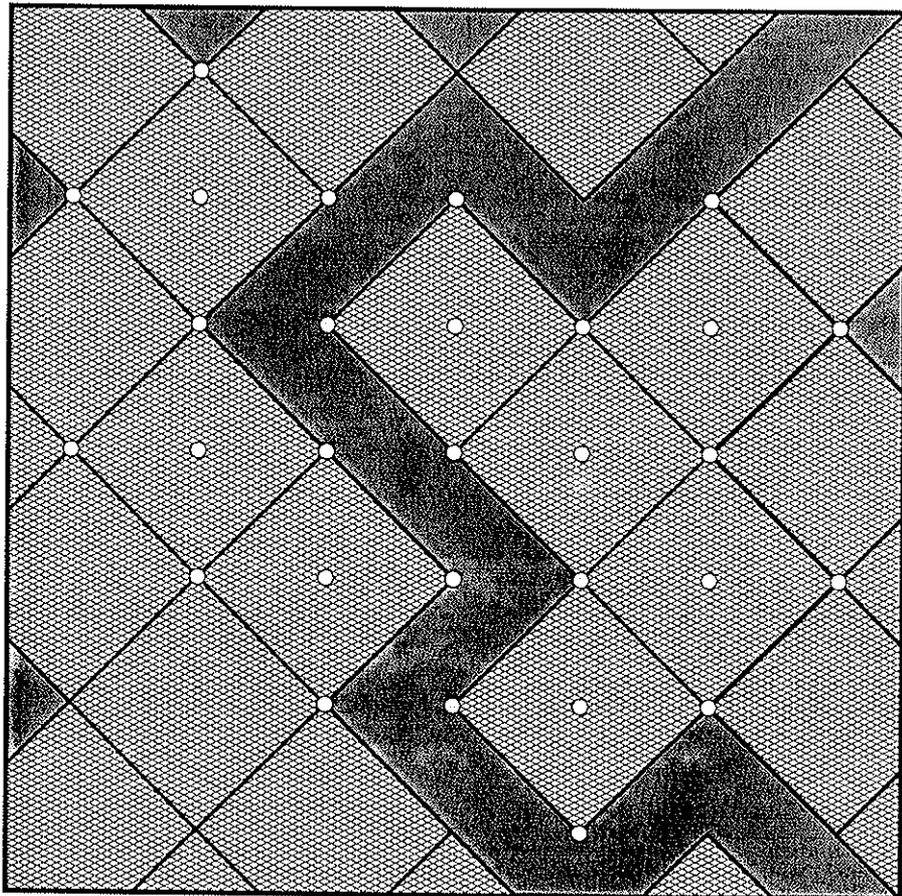


Figura 3.18: Exemplo de configuração inicial.

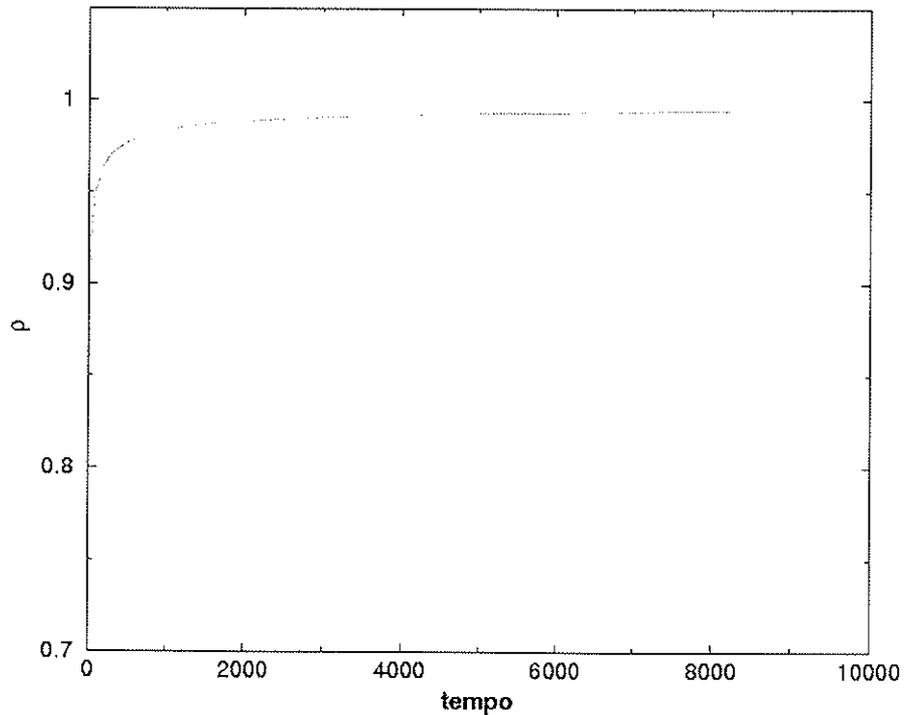


Figura 3.19: Densidade em função do tempo.

uma análise dos vizinhos, pode-se decidir se esse movimento é viável ou não. No caso de ele ocorrer, há que se fazer uma nova análise das posições das partículas vizinhas para saber se o movimento liberou espaço para que apareçam novas partículas na rede. As condições de contorno utilizadas são toroidais. À medida em que ocorre o movimento das partículas, a densidade da rede aumenta até atingir um valor pré-estabelecido, no qual se interrompe a simulação. Se a densidade se comporta como $\rho \sim 1 - t^{-\alpha}$, devemos obter um comportamento linear de $\ln(\rho) \times \ln(t)$ para tempos longos, cujo coeficiente angular será o expoente α . Na figura (3.19), mostramos o comportamento obtido para a densidade em função do tempo para uma rede quadrada 500×500 .

Tomando os logaritmos de $1 - \rho$ e t para fazer um ajuste linear na região de tempos longos e assim calcular o expoente, obtivemos a curva mostrada na figura (3.20), que nos forneceu o expoente $\alpha = 0,5021 \pm 0,0006$, já bem próximo do valor $1/2$.

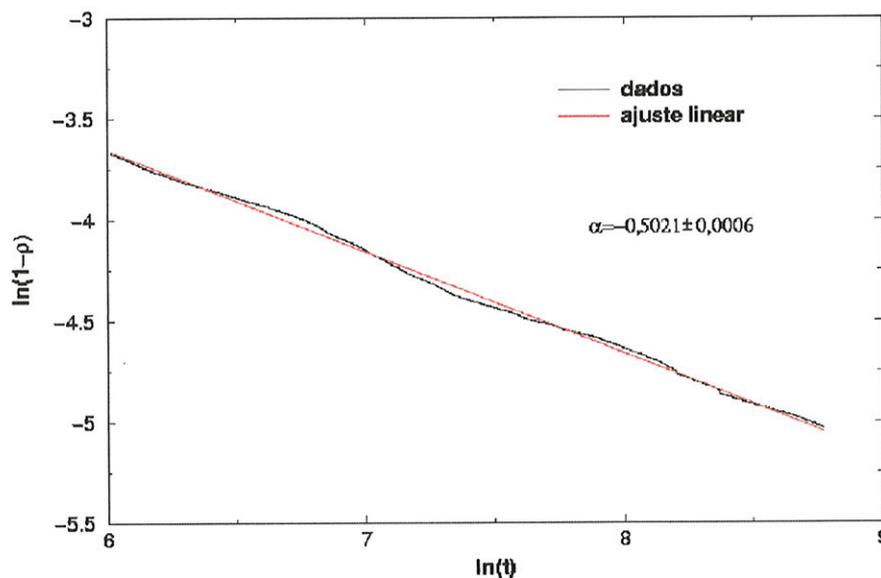


Figura 3.20: $\ln(1 - \rho) \times \ln(t)$ para a rede 500×500 .

Para obter resultados mais precisos, entretanto, além de simular redes maiores é necessário que sejam realizados vários ensaios de cada processo, para posteriormente se fazer uma média das curvas encontradas. Quando tentamos fazer essas médias, deparamo-nos com o fato de, em alguns dos ensaios, o sistema ocasionalmente ficar “preso” em uma certa densidade durante um tempo muito grande. Para ilustrar essa situação, mostramos na figura (3.21) os resultados de cinco ensaios independentes do mesmo processo para uma rede 50×50 .

Esta figura, embora tenha sido gerada através da simulação de uma rede bastante pequena, já mostra claramente que, em um dos ensaios realizados, o sistema passa um tempo muito grande sem alterar sua densidade se comparado com os demais ensaios. Esse problema persistiu nas tentativas de simulações de redes maiores, independentemente da configuração inicial que fosse utilizada, o que sugere que talvez seja necessário introduzir algum tipo de ruído no sistema para que este não fique aprisionado em algumas densidades.

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3724

ex. 1

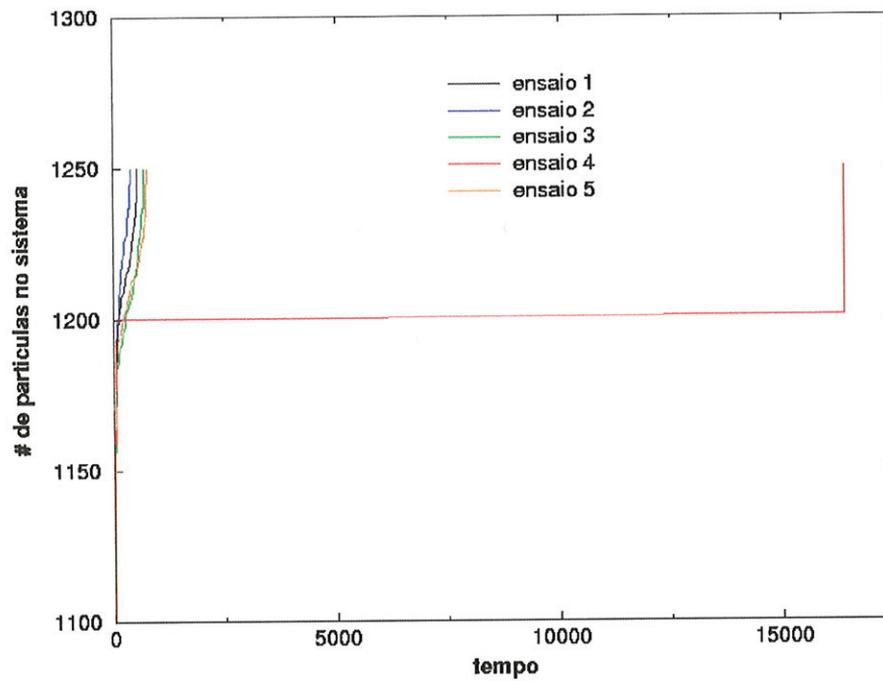


Figura 3.21: Número de partículas em função do tempo para cinco ensaios independentes de uma rede 50×50

3.6 Introdução de ruído

Conforme ilustramos em na seção (3.5.1), as vacâncias no sistema bidimensional são linhas formadas por segmentos dispostos ao longo das direções diagonais da rede quadrada, e, utilizando-se condições de contorno toroidais, sempre se fecham sobre a superfície do toro. Uma característica dessas curvas fechadas, dada a dinâmica que utilizamos, é que elas tendem sempre a diminuir seu perímetro até desaparecerem, quando isso é possível. Uma linha pode se dobrar, duas linhas podem eventualmente se tocar, formando uma curva maior, mas a soma de seus perímetros sempre diminui ou se conserva. Se essas linhas representam as vacâncias existentes no sistema, isso equivale a dizer que a densidade só pode aumentar, como prevê a própria construção do modelo. Acreditamos que essa restrição pode ser responsável pelos ocasionais “aprisionamentos” do sistema em alguma densidade. A idéia que sugerimos para tentar evitar que o sistema fique preso durante muito tempo em algumas configurações é introduzir pequenas flutuações que eventualmente acelerem o processo de redução das vacâncias. Isso equivale, nesse caso, a permitir que as linhas também possam aumentar seu perímetro, com uma pequena probabilidade. Fazendo uma analogia com o algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (J > 0), \quad (3.1)$$

por exemplo, a dinâmica sem flutuações que utilizamos neste trabalho é equivalente ao modelo de Ising a temperatura zero, onde a energia do sistema, que fica armazenada nas fronteiras das “ilhas” de spins de um mesmo sinal, só pode diminuir. A idéia de agora permitir que as linhas aumentem de perímetro com alguma probabilidade equivale a deixar que a energia do sistema também aumente com uma certa probabilidade, aumentando a fronteira de uma ilha de spins. Isso corresponde, portanto, a introduzir uma temperatura não nula no algoritmo de Metropolis, em que uma mudança de spin é sempre aceita se isso diminuir a energia do sistema, e é aceita apenas com uma certa probabilidade $e^{-\beta \Delta E}$ se essa energia aumentar. Na figura (3.22) procuramos ilustrar os dois tipos de movimento da fronteira através do “flipping” de um dos spins. O movimento ilustrado no caso (a) é energeticamente favorável ($\Delta E = -4J$) e portanto é sempre aceito. Já o caso (b), desfavorável ($\Delta E = +4J$), é aceito com probabilidade $e^{-\beta \Delta E}$ e portanto nunca ocorrerá se o sistema estiver a temperatura zero ($\beta = \infty$).

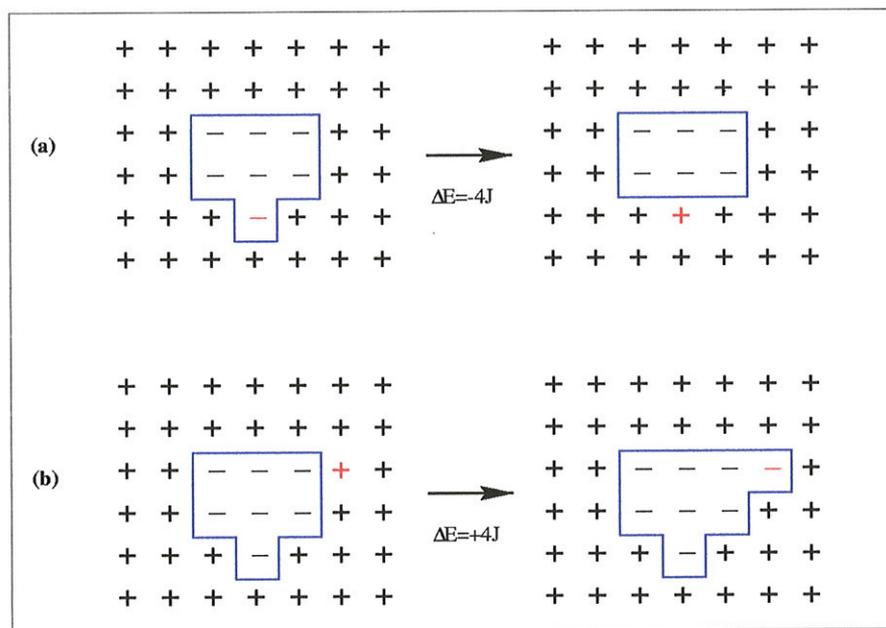


Figura 3.22: Exemplos de movimentos possíveis para as fronteiras de uma ilha de spins no modelo de Ising a temperatura zero. (a) $\Delta E = -4J$, energeticamente favorável; (b) $\Delta E = +4J$, desfavorável.

Para introduzir essa “temperatura” no modelo que estudamos, ao se sortear uma partícula para movimentar, deve-se aceitar o movimento pretendido sempre que houver espaço para que ele ocorra (já que dessa forma o comprimento de uma linha de vacâncias diminui), mas também se deve aceitá-lo com uma certa probabilidade mesmo que não haja espaço, retirando do sistema “à força” as partículas que impediriam esse movimento. Isso acontecendo, a densidade do sistema ocasionalmente diminuirá, mas esse estudo é algo que deve ser realizado no futuro para verificar se a introdução desse tipo de flutuação faz com que o sistema possa “escapar” de algumas configurações e assim acelerar sua evolução para estados de maior densidade.

Capítulo 4

Processo de Contato Conservativo

4.1 Introdução

Neste capítulo, começamos por apresentar a definição formal do processo de contato, seguida de uma pequena análise de campo médio. Em seguida apresentamos uma variante, o *processo de contato conservativo*, que pode ser interpretada como o próprio modelo de contato num ensemble onde o número de partículas é constante. Para este último, detalhamos as simulações numéricas realizadas, que fornecem bons resultados para o parâmetro externo crítico e para os expoentes críticos.

4.2 Processo de contato usual

O processo de contato foi proposto em 1974 por Harris [26] como um modelo estocástico para a propagação de uma epidemia simples, e é o mais simples dos modelos de não-equilíbrio que apresentam transição de fase e comportamento crítico [2, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]. Neste modelo, cada sítio de uma rede representa um organismo que pode existir em dois estados, *são* ou *infectado*. Essa infecção se espalha através de contatos entre primeiros vizinhos, de maneira que um sítio infectado transmite a doença a seus vizinhos mais próximos à taxa λ/z em uma rede de coordenação z . Indivíduos infectados se recuperam com taxa igual a 1, e estão imediatamente sujeitos a

reinfecção. Uma vez que um indivíduo necessita de um vizinho doente para se infectar, o estado em que todos os organismos estão sãos é um estado absorvente do sistema. A continuidade da epidemia depende, portanto, da 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, onde a epidemia nunca cessa completamente mas não chega a contaminar a totalidade dos indivíduos. Assim, o processo de contato também pode ser visto como um processo onde uma excitação temporária se espalha por uma influência de curto alcance, e a espécie excitada acaba por se extinguir a menos que se propague suficientemente rápido.

De uma maneira formal, o processo de contato consiste num sistema de partículas interagentes residindo em sítios de uma rede e evoluindo de acordo com regras locais e markovianas. Dois processos podem ocorrer neste sistema: a *criação catalítica* e a *aniquilação espontânea* de partículas. O primeiro destes processos significa que ao se escolher ao acaso um dos sítios da rede, este será ocupado com uma taxa de transição proporcional ao número n de vizinhos ocupados caso esteja vazio. Numa rede regular de coordenação z , esta taxa de transição vale $\lambda n/z$, onde λ é um parâmetro positivo. O segundo processo significa que ao se escolher um sítio da rede ao acaso, ele se tornará vazio com taxa igual à unidade caso já esteja ocupado.

A forma geral de uma equação mestra que descreve um processo markoviano é:

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{\eta'(\neq\eta)} \{W(\eta, \eta')P(\eta', t) - W(\eta', \eta)P(\eta, t)\}, \quad (4.1)$$

onde $P(\eta, t)$ é a probabilidade de o sistema se encontrar no estado η no instante t e $W(\eta, \eta')$ é interpretado como a taxa de transição do estado η' para o estado η . No caso do processo de contato, um estado η é definido pelo conjunto de variáveis estocásticas η_i associadas a cada sítio i :

$$\eta = (\eta_1, \dots, \eta_N), \quad (4.2)$$

onde $\eta_i = 0$ ou 1 significa que o sítio i está vazio ou ocupado, respectivamente. A dinâmica é tal que a cada intervalo de tempo um sítio é escolhido aleatoriamente e atualizado segundo seu próprio estado e o de seus vizinhos. Já que apenas um sítio é atualizado de cada vez, a taxa de transição entre

os estados η e η' só não será nula se existir um único sítio tal que $\eta_i = 1 - \eta'_i$. A taxa de transição do estado η' para o estado η é, então:

$$W(\eta, \eta') = \sum_i \delta(\eta_i, 1 - \eta'_i) \prod_{j(\neq i)} \delta(\eta_j, \eta'_j) w_i(\eta'), \quad (4.3)$$

onde $w_i(\eta')$ é a taxa de transição do i -ésimo sítio ($\eta' \rightarrow 1 - \eta'_i$). Dessa forma, podemos reescrever a equação mestra como

$$\frac{d}{dt} P(\eta, t) = \sum_i \left\{ w_i(\eta^i) P(\eta^i, t) - w_i(\eta) P(\eta, t) \right\}, \quad (4.4)$$

onde os estados η^i são aqueles que diferem de η apenas pelo sítio i :

$$\eta^i = (\eta_1, \dots, 1 - \eta_i, \dots, \eta_N), \quad (4.5)$$

e a taxa de transição de um sítio, no processo de contato, pode ser escrita como

$$w_i(\eta) = \frac{\lambda}{z} (1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} + \eta_i, \quad (4.6)$$

onde a soma é realizada sobre os z primeiros vizinhos do sítio i . Na expressão (4.6), notamos que o primeiro termo só não se anula quando $\eta_i = 0$ (sítio vazio) e portanto corresponde à criação autocatalítica. Analogamente, o segundo termo não se anula quando $\eta_i = 1$ (sítio ocupado) e corresponde à aniquilação espontânea. Num caso geral, a evolução temporal da média de uma função de estado $f(\eta)$ pode ser encontrada multiplicando-se a equação mestra (4.4) por $f(\eta)$ e realizando-se uma soma em η :

$$\frac{d}{dt} \langle f(\eta) \rangle = \sum_j \langle (f(\eta^j) - f(\eta)) w_j(\eta) \rangle. \quad (4.7)$$

A equação (4.7) nos fornece a evolução temporal de qualquer função de estado $f(\eta)$. Em particular, podemos utilizá-la para analisar o comportamento da média da função $f(\eta) = \eta_i$. Entretanto, pela definição de $f(\eta)$, temos que $f(\eta^j) = f(\eta)$ sempre que $j \neq i$, pois nesse caso temos $2f(\eta^i) = 1 - \eta_i$. Assim, na somatória da equação (1.9), só restará o termo $j = i$. Portanto:

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_i \rangle = \langle (1 - 2\eta_i) w_i(\eta) \rangle. \quad (4.8)$$

Substituindo a definição da taxa de transição do modelo (4.6), temos:

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_i \rangle = \frac{\lambda}{z} \sum_{\delta} \langle (1 - \eta_i) \eta_{i+\delta} \rangle - \langle \eta_i \rangle. \quad (4.9)$$

Supondo que exista uma solução isotrópica para este problema, interpretamos a média $\langle \eta_i \rangle$ como sendo a densidade, ρ , independentemente de i , e a média $\langle \eta_i \eta_{i+\delta} \rangle$ como a correlação entre dois sítios vizinhos, ϕ , independentemente de i e de δ . Assim, podemos reescrever a equação para a evolução temporal da densidade ρ :

$$\frac{d}{dt} \rho = \lambda(\rho - \phi) - \rho. \quad (4.10)$$

Alguns resultados importantes para o modelo podem ser obtidos através de uma análise de campo médio, que apresentamos a seguir.

(a) Campo médio simples

Nessa aproximação, consideramos simplesmente $\phi = \rho^2$, de modo que a equação de evolução para a densidade se torna:

$$\frac{d}{dt} \rho = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2. \quad (4.11)$$

Os estados estacionários do modelo serão, pois, caracterizados pelas soluções estacionárias da equação (4.11), que são:

- (a) $\rho = 0$, solução trivial correspondente ao estado absorvente;
- (b) $\rho = \frac{\lambda-1}{\lambda}$, solução relacionada ao estado estacionário ativo.

Através dessa simples análise, já fica evidenciado que o sistema exhibe uma transição de fases no estado estacionário, cujo parâmetro de ordem se comporta como

$$\rho \sim \lambda - \lambda_c \quad (4.12)$$

próximo de $\lambda_c = 1$.

A equação (4.11) pode ainda ser resolvida exatamente para o caso $\lambda \neq 1$, e tem como solução:

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda - ce^{-(\lambda-1)t}}, \quad (4.13)$$

onde c é uma constante determinada pelas condições iniciais. O comportamento dessa solução depende, portanto, do valor de λ . Para $\lambda < 1$, o termo exponencial do denominador tende a infinito para tempos longos e o sistema tende exponencialmente ao estado absorvente (solução nula):

$$\rho = Ae^{-(1-\lambda)t}, \quad \lambda < 1, A \text{ constante.} \quad (4.14)$$

Por outro lado, para $\lambda > 1$, o termo exponencial se torna muito pequeno para tempos longos:

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}, \quad \lambda > 1, B \text{ constante,} \quad (4.15)$$

e nesse caso o sistema relaxa exponencialmente para a solução não nula, $\rho = (\lambda - 1)/\lambda$, correspondente ao estado estacionário ativo. Em ambos os casos o tempo de relaxação é

$$\tau = |\lambda_c - \lambda|^{-1} \quad (4.16)$$

e portanto no ponto crítico o tempo de relaxação τ diverge e esta deixa de ter um tempo característico. Assim, a equação (4.11) passa a não ter o primeiro termo do segundo membro, que era responsável pela solução exponencial, sendo agora escrita como

$$\frac{d}{dt}\rho = -\rho^2, \quad (4.17)$$

cuja solução é dada por

$$\rho = \frac{1}{t + C}, \quad C \text{ constante,} \quad (4.18)$$

de modo que, no ponto crítico, o decaimento se torna algébrico para tempos longos.

(b) Aproximação de pares:

Para fazer uma aproximação de pares para este modelo, precisamos escrever a correlação entre dois sítios vizinhos, $\langle \eta_i \eta_j \rangle$. Através de um procedimento análogo ao da aproximação de campo médio simples, utilizamos a equação (4.7) para calcular a média da função de estado $f(\eta) = \eta_i \eta_j$. Substituindo $f(\eta)$, temos

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_i \eta_j \rangle = \sum_k (f(\eta^k) - f(\eta)) w_k(\eta). \quad (4.19)$$

Aqui lembramos que $f(\eta^k) = f(\eta)$ sempre que $k \neq i$ e $k \neq j$. Assim restarão apenas dois termos não nulos na somatória da equação (4.19), correspondentes a $k = i$ e $k = j$, ou seja,

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_i \eta_j \rangle = \langle (1 - 2\eta_i) \eta_j w_i(\eta) \rangle + \langle (1 - 2\eta_j) \eta_i w_j(\eta) \rangle. \quad (4.20)$$

Mais uma vez substituindo a taxa de transição do modelo (4.6), chegamos à equação de evolução para a correlação de dois sítios $\langle \eta_i \eta_j \rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_i \eta_j \rangle = \frac{\lambda}{z} \sum_{\delta(i+\delta \neq j)} \langle (1 - \eta_i) \eta_j \eta_{i+\delta} \rangle + \frac{\lambda}{z} \langle (1 - \eta_i) \eta_j \rangle - \langle \eta_i \eta_j \rangle. \quad (4.21)$$

O primeiro termo do segundo membro nos mostra que a correlação de dois sítios envolve a de três sítios, etc., de modo que para analisar seu comportamento precisaremos truncar o sistema de equações em algum ponto. Numa aproximação de campo médio de segunda ordem, ou aproximação de pares, escrevemos a correlação de três sítios em termos das correlações de um e dois sítios de acordo com a relação

$$\langle \eta_j \eta_i \eta_k \rangle = \frac{\langle \eta_j \eta_i \rangle \langle \eta_i \eta_k \rangle}{\langle \eta_i \rangle}, \quad (4.22)$$

onde j e k são dois vizinhos distintos de um sítio i . Considerando um sistema isotrópico, ou seja, supondo que $\langle \eta_i \rangle = \rho$ independentemente de i , e supondo ainda que $\langle \eta_i \eta_j \rangle = \phi$ para dois sítios vizinhos i e j , independentemente de quais sejam, obtém-se a equação

$$\frac{d}{dt} \phi = \frac{2\lambda(z-1)}{z} \frac{(\rho - \phi)^2}{(1 - \rho)} + \frac{2\lambda}{z} (\rho - \phi) - 2\phi. \quad (4.23)$$

As equações (4.23) e (4.10) formam um sistema fechado para ρ e ϕ , que também possui duas soluções estacionárias. Uma delas, naturalmente, é a solução trivial,

$$\rho = \phi = 0, \quad (4.24)$$

e corresponde ao estado absorvente. A outra solução é não nula, relacionada ao estado estacionário ativo:

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

$$\phi = \frac{\lambda - 1}{\lambda} \rho. \quad (4.25)$$

Nesse caso, o valor crítico da taxa λ , a partir do qual $\rho = 0$, é

$$\lambda_c = \frac{z}{z-1}. \quad (4.26)$$

Mais uma vez, observamos as duas fases distintas que podem existir no estado estacionário, caracterizando a transição. A solução (4.24) é válida para $\lambda < \lambda_c$ (estado estacionário congelado) enquanto a solução (4.25) vale para $\lambda > \lambda_c$ (estado estacionário ativo). Apesar de as aproximações de campo médio simples e com pares fornecerem valores diferentes para a taxa crítica, o comportamento crítico do parâmetro de ordem continua o mesmo, pois este continua descrevendo a transição com expoente crítico igual a 1. À medida em que se aumenta a ordem da aproximação de campo médio, espera-se que o valor da taxa crítica se aproxime do valor correto. É importante notar que o processo de contato apresenta transição de fase em qualquer dimensão, e nesse sentido possui comportamento distinto do modelo de Ising e de outros modelos de equilíbrio com interações de curto alcance que não apresentam transição de fases a temperaturas finitas em uma dimensão. O modelo está na classe de universalidade da percolação direcionada [36, 37, 38], e, em d dimensões, tem os mesmos expoentes críticos da percolação em $D = d + 1$ dimensões. A dimensão crítica superior da percolação direcionada é $D_c = 5$ [39], de modo que, para o processo de contato, é $d_c = 4$. Portanto, para $d \geq 4$ os expoentes críticos devem ser os expoentes clássicos com possíveis correções logarítmicas na dimensão crítica superior.

4.3 Processo de contato conservativo

Recentemente, Tomé e de Oliveira [20] introduziram o processo de contato conservativo (PCC), que é uma versão do processo de contato usual onde o número de partículas, ou de sítios ocupados, é estritamente conservado. Neste processo as partículas podem saltar sobre sítios de uma rede regular, mas caem somente em sítios vazios que tenham pelo menos um vizinho ocupado por uma partícula. Ao contrário do processo usual, o processo de contato conservativo não possui estado absorvente. Apesar de não possuir essa importante propriedade, o novo processo exibe, no limite termodinâmico, um comportamento idêntico àquele do processo usual, reproduzindo quantidades universais e não-universais. O processo de contato conservativo foi então identificado com o processo de contato num ensemble de número de partículas constante, fato já confirmado por simulações numéricas em uma dimensão [20]. Depois disso, Hilhorst e Wijland [21] forneceram uma prova da equivalência de ensembles no estado estacionário: o ensemble usual (onde a taxa é constante) e o ensemble conservativo (onde o número de partículas é constante). O uso de diferentes ensembles para calcular as propriedades termodinâmicas de um sistema em equilíbrio é algo bem estabelecido e existe um procedimento padrão para se passar de um ensemble a outro [22, 23, 24]. Para sistemas de não-equilíbrio, entretanto, não existe um procedimento geral. De qualquer forma, a possibilidade de se usar diferentes ensembles em modelos de não-equilíbrio foi colocada por Ziff e Brosilow [25], quando eles empregaram um ensemble de cobertura constante para analisar um modelo irreversível de reação-difusão, originalmente definido em um ensemble de taxa constante.

Nesta seção, apresentamos uma análise numérica do processo de contato conservativo definido em redes hipercúbicas com dimensões d variando de 1 a 5. A conservação do número de partículas nos permitiu realizar simulações numéricas sem o risco de o sistema ficar aprisionado no estado absorvente. Determinamos o ponto crítico, assim como o expoente crítico β e a dimensão fractal d_F no ponto crítico. O uso desse novo ensemble nos permitiu determinar o ponto crítico com uma precisão muito boa. Os resultados para β e d_F também estão em boa concordância com os valores conhecidos para o processo de contato usual.

O processo de contato em um ensemble de número de partículas constante é definido a seguir. Um sítio vazio da rede é ocupado de maneira similar à

criação catalítica do processo de contato usual. A diferença é que nesse caso nenhuma partícula é criada; uma partícula do sistema é escolhida aleatoriamente, deixando seu sítio original e passando a ocupar o sítio em questão. Dessa maneira, os processos de aniquilação espontânea e de criação catalítica são simplesmente substituídos por um processo de saltos. Entretanto, estes saltos não são aleatórios pois não se permite que uma partícula salte para um sítio vazio rodeado por sítios também vazios: pelo menos um vizinho deve estar ocupado. Os sítios que potencialmente podem alojar uma partícula, ou seja, aqueles que têm ao menos um vizinho ocupado, serão chamados *sítios ativos*, e têm fundamental importância no modelo. De acordo com essa definição, o processo de contato conservativo é um modelo de dois estados governado pela equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \frac{1}{n} \sum_i \sum_j \left\{ w_{ij}(\eta^{ij})P(\eta^{ij}, t) - w_{ij}(\eta)P(\eta, t) \right\}, \quad (4.27)$$

onde o vetor η^{ij} é aquele que difere de η apenas pelo estado dos sítios i e j ,

$$\eta^{ij} = (\eta_1, \dots, 1 - \eta_i, \dots, 1 - \eta_j, \dots, \eta_N), \quad (4.28)$$

e $w_{ij}(\eta)$ é a taxa de transição do estado η para o estado η^{ij} , dada por

$$w_{ij}(\eta) = \eta_i \frac{1}{z} (1 - \eta_j) \sum_{\delta} \eta_{j+\delta}, \quad (4.29)$$

de modo que o modelo conserva o número n de partículas, e o número de sítios ativos no sistema é dado por

$$n_{ac} = \frac{1}{z} \sum_i (1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta}. \quad (4.30)$$

Uma quantidade que será utilizada durante toda a análise a seguir é o *número efetivo médio de sítios ativos por partícula*, denotado por α , e escrito como

$$\alpha = \frac{\langle n_{ac} \rangle}{n} \quad (4.31)$$

Nas seções seguintes, apresentaremos nossa análise numérica deste sistema, nos diferentes regimes possíveis.

4.3.1 Regime subcrítico

Devido ao fato de a dinâmica conservar o número de partículas do sistema, este não possui um estado absorvente. Essa lei de conservação nos permite realizar simulações numéricas sem o perigo de o sistema ser aprisionado no estado absorvente, como ocorre no processo de contato usual. Assim, os estados quase-estacionários [2] observados no processo de contato usual, no regime subcrítico, se tornam estados estacionários genuínos no processo conservativo.

Simulamos o processo de contato conservativo em redes hipercúbicas d -dimensionais com $d = 1, 2, 3, 4$ e 5 , para diferentes valores do número total n de partículas no sistema, variando de $n = 2$ a $n = 2600$ [41]. Em uma rede infinita as partículas não se espalham ao infinito, como se poderia esperar, mas permanecem unidas formando aglomerados fractais como se pode observar na figura (4.1). A razão para isso é o fato de as partículas não saltarem para qualquer sítio da rede, mas somente para aqueles sítios que são adjacentes a uma partícula.

A simulação do sistema com n partículas é realizada da forma descrita a seguir. A cada intervalo de tempo um dos n sítios ocupados é sorteado aleatoriamente e um de seus z primeiros vizinhos é também escolhido ao acaso. Se o sítio vizinho sorteado estiver vazio, então ele será ocupado por uma das n partículas do sistema, escolhida aleatoriamente. Se, por outro lado, o sítio vizinho sorteado já estiver ocupado, o estado do sistema permanece o mesmo. Um passo de Monte Carlo é definido como n passos como esse. Cada simulação foi realizada começando de uma configuração onde todas as partículas estavam juntas. As quantidades de interesse, tais como $\langle n_{ac} \rangle$, foram estimadas usando-se um número de passos de Monte Carlo variando de 10^7 a 10^8 .

Uma vez que a rede é infinita e o número de partículas é finito, a densidade de partículas é zero e o sistema está naturalmente confinado no regime subcrítico. A tabela (4.1) mostra os valores numéricos de $\alpha = \langle n_{ac} \rangle / n$ obtidos através das simulações.

À medida em que $n \rightarrow \infty$, o número efetivo de sítios ativos por partícula se aproxima de seu valor crítico α_c . Este valor crítico foi obtido através de um esquema de extrapolação aplicado aos dados da tabela (4.1), para $n \geq 28$. Para cada conjunto de três pontos consecutivos, $\{(\alpha_{j-1}, x_{j-1}), (\alpha_j, x_j), (\alpha_{j+1}, x_{j+1})\}$, onde $x = 1/n$, ajustamos uma reta, obtendo um valor extrapolado tentativo

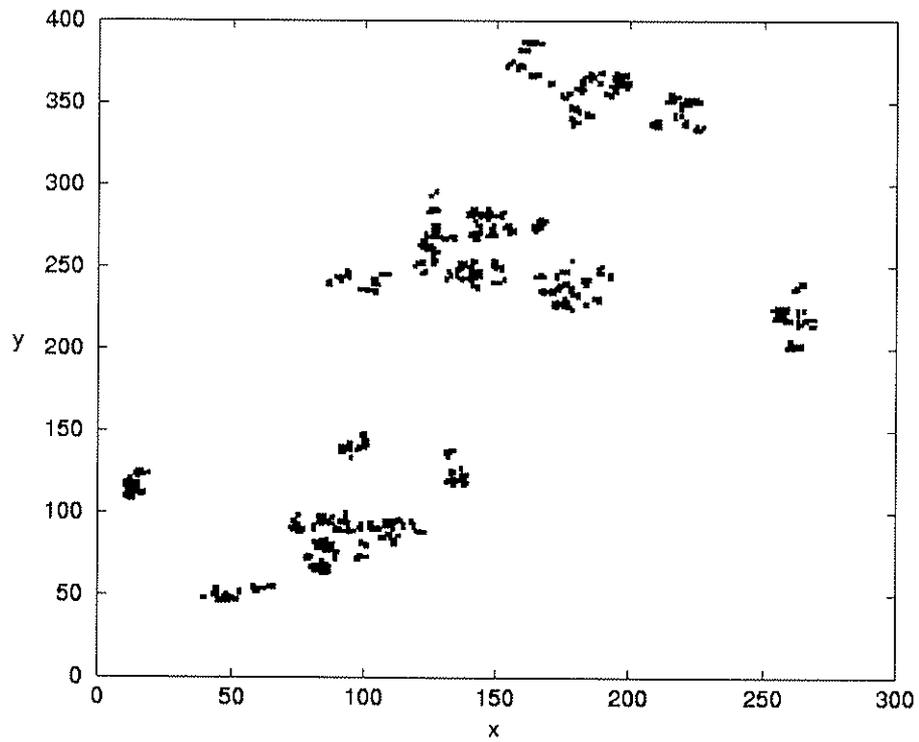


Figura 4.1: Exemplo de uma configuração de $n = 900$ partículas em uma rede quadrada infinita, no regime subcrítico. Os eixos x e y representam as coordenadas dos sítios ocupados, representados por pequenos quadrados negros. A origem dos eixos de coordenadas é arbitrária.

Tabela 4.1: Número efetivo médio α de sítios ativos por partícula para o PCC em redes hipercúbicas infinitas de dimensões variando de $d = 1$ a $d = 5$, no regime subcrítico. A última linha mostra a ordem de grandeza dos erros estatísticos dos resultados.

n	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$
2	0.633974	0.842079	0.901897	0.9292383	0.9447486
3	0.52357	0.78149	0.86573	0.903985	0.925421
4	0.46964	0.74570	0.84516	0.890173	0.915127
6	0.41611	0.70650	0.82219	0.875190	0.904183
8	0.38909	0.68508	0.80942	0.867049	0.898388
12	0.36174	0.66202	0.79539	0.858281	0.892299
16	0.34790	0.64969	0.78777	0.853580	0.889080
20	0.33944	0.64200	0.78291	0.850627	0.887106
28	0.32956	0.63281	0.77705	0.847076	0.884772
40	0.32206	0.62561	0.77237	0.844271	0.882960
56	0.31698	0.62060	0.76906	0.842302	0.881708
80	0.31299	0.61667	0.76646	0.840768	0.880748
112	0.31034	0.61396	0.76464	0.839701	0.880095
160	0.30825	0.61187	0.76320	0.838882	0.879592
224	0.30689	0.61045	0.76220	0.838308	0.879252
320	0.30585	0.60933	0.76143	0.837867	0.878993
450	0.30508	0.60856	0.76089	0.837561	0.878819
640	0.30456	0.60799	0.76048	0.837333	0.878686
900	0.30420	0.60758	0.76019	0.837170	0.878597
1300	0.30388	0.60728	0.75996	0.837042	0.878527
1800	0.30373	0.60708	0.75982	0.836966	0.878487
2600	0.30355	0.60692	0.75970	0.836900	0.878448
	0.00002	0.00001	0.00001	0.000005	0.000005

Tabela 4.2: Valores de α_c , λ_c , expoente β e dimensão fractal d_F para dimensões variando de $d = 1$ a $d = 5$, obtidos para o PCC. Os valores α_c são extrapolações feitas a partir dos resultados na tabela (4.1) conforme explicado no texto.

d	α_c	λ_c	β	d_F
1	0.30323(2)	3.2978(2)	0.277(1)	0.747(4)
2	0.60653(1)	1.64872(3)	0.585(4)	1.20(1)
3	0.75940(1)	1.31683(2)	0.78(1)	1.56(3)
4	0.83674(1)	1.19511(1)	1	2
5	0.87837(1)	1.13847(1)	1	2

α_{cj} . O valor extrapolado final foi obtido através de uma regressão quadrática sobre os pontos (α_{cj}, x_j) . O valor extrapolado α_c está apresentado na tabela (4.2) juntamente com o valor crítico $\lambda_c = 1/\alpha_c$ para cada dimensão. Uma medida do tamanho do aglomerado é dada pela quantidade $R = \sqrt{\langle r_{\max}^2 \rangle}$, onde $r_{\max}(\eta)$ é a maior distância entre duas partículas do aglomerado η . Enquanto n é finito, o tamanho linear médio R também é finito, mas diverge quando $n \rightarrow \infty$. Assumimos o comportamento assintótico [40]

$$R \sim n^{1/d_F}, \quad (4.32)$$

onde d_F é a dimensão fractal. Na figura (4.2) mostramos R como função de n em um gráfico log-log para dimensões variando de 1 a 5. As inclinações das retas ajustadas aos dados correspondentes às dimensões $d = 1, 2$ e 3 são 1.338(6), 0.832(8), 0.64(1), respectivamente. Para $d = 4$ e 5 , as inclinações são consistentes com o valor clássico $1/2$. O inverso desses valores dá a dimensão fractal d_F mostrada na tabela (4.2).

4.3.2 Regime supercrítico

No regime supercrítico a densidade de partículas ρ é não nula. Portanto, em uma rede infinita o número de partículas deve ser infinito. Se a razão $n/N = \rho$ é mantida constante e não nula, então o sistema estará confinado no regime supercrítico quando $N \rightarrow \infty$. Realizamos também simulações do processo de

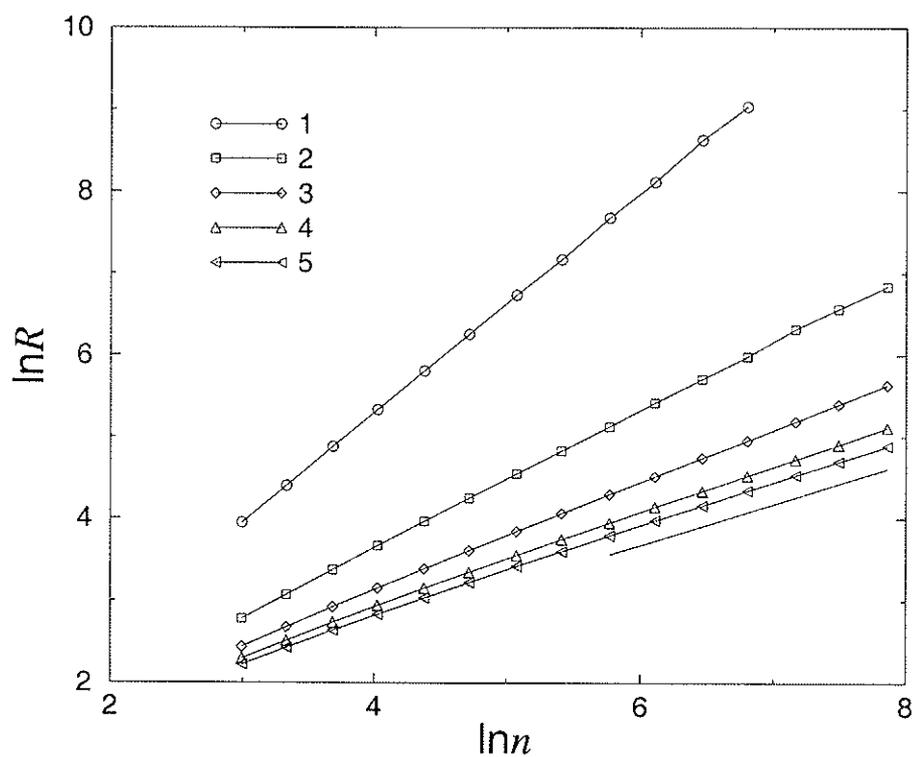


Figura 4.2: Tamanho médio R do sistema, no regime subcrítico, em função do número n de partículas para dimensões variando de 1 a 5 em um gráfico log-log. Para comparação mostramos uma linha contínua com inclinação igual a $1/2$.

contato conservativo neste regime, desta vez em redes hipercúbicas finitas com condições periódicas de contorno. Os maiores valores de N utilizados nas simulações foram $N = 10000$, $N = 100^2$, $N = 25^3$, $N = 10^4$, $N = 6^5$ para $d = 1, 2, 3, 4$ e 5 , respectivamente. Para estimar a média $\langle n_{ac} \rangle$, usamos um número de passos de Monte Carlo variando de 10^6 e 10^7 . Aqui um passo de Monte Carlo é definido como N passos definidos na simulação do regime subcrítico. A quantidade α foi então obtida através da equação (4.31). Para N suficientemente grande, espera-se o comportamento

$$(\alpha_c - \alpha) \sim \rho^{1/\beta}, \quad (4.33)$$

onde β é o expoente do parâmetro de ordem. A figura (4.3) mostra, em um gráfico log-log, os valores de $\alpha_c - \alpha$ versus os valores da densidade de partículas ρ , onde usamos os valores de α_c obtidos na seção anterior e apresentados na tabela (4.2).

As inclinações das retas ajustadas aos dados fornecem os valores 3.61(1), 1.71(2), 1.26(2) para $d = 1, 2$ e 3 , respectivamente. Para $d = 4$ e 5 , são consistentes com o valor clássico 1. O inverso desses valores fornece o expoente β , apresentado também na tabela (4.2), para cada uma das dimensões analisadas.

4.4 Conclusões

Neste capítulo, após apresentarmos as definições dos processos de contato usual e conservativo, detalhamos a análise numérica realizada e os resultados obtidos. O expoente crítico β e a dimensão fractal d_F estão em boa concordância com os respectivos valores para o processo de contato usual. Os parâmetros críticos λ_c obtidos neste capítulo estão em excelente concordância com os valores da literatura e, com exceção do caso $d = 1$, forneceram as melhores estimativas até o momento [41]. No regime subcrítico, o processo de contato conservativo tem uma propriedade notável. À medida em que se aumenta o número de partículas no sistema infinito, este se aproxima da criticalidade, e α se aproxima de seu valor crítico α_c . Este processo tem, portanto, similaridades com a criticalidade auto-organizada, já que nenhum parâmetro ajustável é necessário para levar o sistema ao estado crítico.

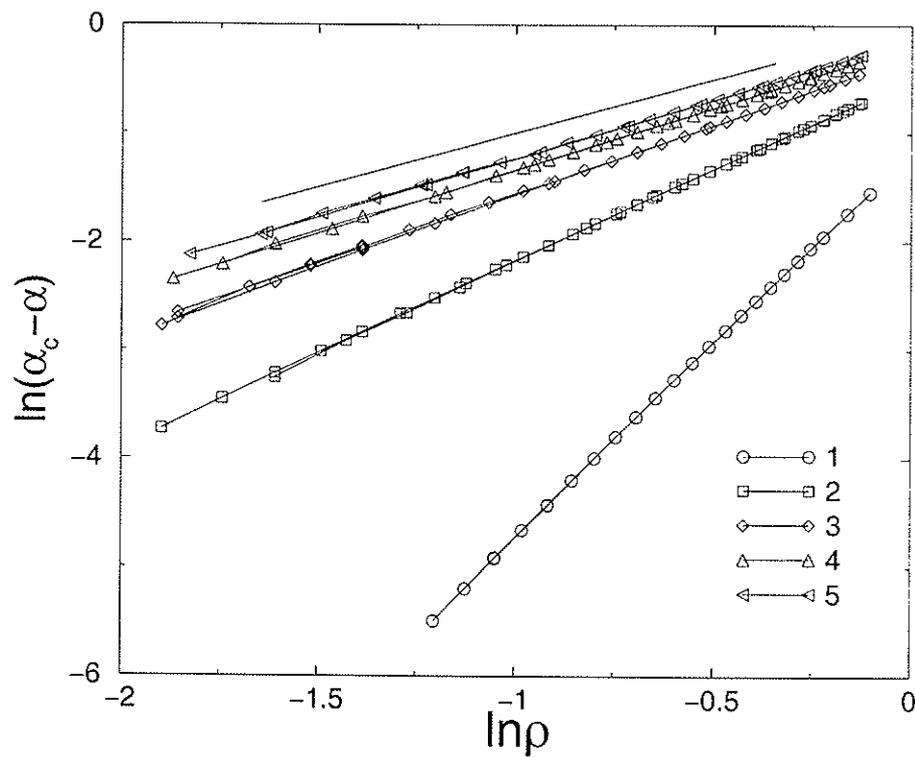


Figura 4.3: Gráfico log-log de $(\alpha_c - \alpha)$ versus a densidade ρ , no regime supercrítico. Para comparação mostramos uma linha contínua com inclinação igual a 1.

Capítulo 5

Conclusão

É bem conhecido o fato de os sistemas em equilíbrio termodinâmico serem descritos pela distribuição de probabilidades de Gibbs. Os sistemas fora do equilíbrio, por outro lado, não são descritos por uma distribuição conhecida *a priori*, e sim pelas regras dinâmicas de cada modelo. Neste trabalho, estudamos três modelos cujas regras envolvem processos estocásticos markovianos ocorrendo sobre redes.

No primeiro deles, o autômato celular probabilístico de Domany-Kinzel, utilizamos o formalismo da percolação direcionada para obter o diagrama de fases e os parâmetros críticos através do método de expansões em série. As séries obtidas no trabalho foram analisadas através do método dos aproximantes de Padé, o que permitiu obter os valores críticos $q_c = 0.2943(1)$ e $\beta = 0.2725(2)$, um pouco discrepantes daqueles da literatura, $q_c = 0.294515(5)$ e $\beta = 0.2763(3)$. Essa discrepância se deve ao número relativamente pequeno de termos que foi possível obter para as séries, através de algoritmos computacionalmente muito custosos.

Em seguida, nos utilizamos de simulações numéricas para estudar alguns processos de reação-difusão que podem estar relacionados com a compactação de sistemas granulares. Inicialmente, analisamos o modelo de altura máxima 1, o que permitiu corroborar o valor para o expoente crítico $\alpha = 0.5$. Em seguida, as simulações dos modelos de alturas máximas h , maiores do que 1, também forneceram bons resultados, permitindo confirmar a conjectura $\alpha = 1/h$. Finalmente analisamos o modelo de aniquilação de pares em uma e duas dimensões. Ambos os modelos permitiram a confirmação do valor $\alpha = 0.5$, embora as simulações do modelo bidimensional tenham algumas

vezes aprisionado o sistema em algumas densidades, o que sugerimos que possa, no futuro, ser resolvido através da introdução de ruído no sistema.

Por fim, estudamos uma variante do processo de contato em um ensemble onde o número de partículas é constante, realizando simulações numéricas que nos permitiram obter os parâmetros críticos com boa precisão. O modelo foi analisado em dimensões variando de 1 a 5, e o expoente crítico β , assim como a dimensão fractal d_F , está em boa concordância com os respectivos valores do processo de contato usual. Os valores dos parâmetros críticos λ_c estão em excelente concordância com os valores da literatura, e, com exceção do caso $d = 1$, forneceram as melhores estimativas até o momento.

Bibliografia

- [1] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Clarendon Press, Oxford (1992).
- [2] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, Cambridge University Press, 1999.
- [3] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, EDUSP, 2001.
- [4] E. Domany and W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 311 (1984).
- [5] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Y. He, *Phys. Rev. Lett* **55**, 2527 (1985).
- [6] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam (1981).
- [7] M. J. de Oliveira, *Int. J. Mod. Phys. B* **10**, 1313 (1996).
- [8] W. Kinzel, *Z. Phys. B* **58**, 229 (1985).
- [9] J. A. M. S. Duarte, *Portgal. Phys.* **15**, 119 (1984).
- [10] A. Guttmann, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. Domb and Lebowitz, vol. 13 (1989).
- [11] I. Jensen and A. Guttmann, *J. Phys. A: Math. Gen.***28**, 4813 (1995).
- [12] G. Baker, *Essentials of Padé Approximants*, Academic Press, London (1975).

-
- [13] J. F. Stilck, Dissertação de Mestrado, IFUSP, 1978.
- [14] G. Baker, Quantitative Theory of Critical Phenomena, Academic Press, London (1990).
- [15] F. C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel and V. Rittenberg, Ann. Phys. (New York) **230**, 250 (1994).
- [16] J. R. G. de Mendonça and M. J. de Oliveira, J. Stat. Phys. **92**, 651 (1998).
- [17] M. J. de Oliveira, Phys. Rev. E **60**, 2563 (1999).
- [18] M. J. de Oliveira, Braz. J. Phys. **30**, 128 (2000).
- [19] M. J. de Oliveira and A. Petri, J. Phys. A **31**, L425 (1998).
- [20] T. Tomé and M. J. de Oliveira, Phys. Rev. Lett. **86**, 5643 (2001).
- [21] H. J. Hilhorst and F. van Wijland, Phys. Rev. E **65**, 035103 (2002).
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Statistical Mechanics, Pergamon Press, 1958.
- [23] D. Ruelle, Statistical Mechanics: Rigorous Results, W. A. Benjamin, Inc., Reading, Massachusetts, 1969.
- [24] R. B. Griffiths, in C. Domb and M. S. Green (eds.), Phase Transitions and Critical Phenomena, Academic Press, London, 1972, vol. 1, p. 7.
- [25] R. M. Ziff and B. J. Brosilow, Phys. Rev. A **46**, 4630 (1992).
- [26] T. E. Harris, Ann. Probab. **2**, 969 (1974).
- [27] R. C. Brower, M. A. Furman and M. Moshe, Phys. Lett. B **76**, 213 (1978).
- [28] P. Grassberger and A. de la Torre, Ann. Phys. **122**, 373 (1979).
- [29] T. M. Liggett, Interacting Particle Systems, Springer-Verlag, New York, 1985.

-
- [30] R. Dickman and M. Burschka, *Phys. Lett. A* **127**, 132 (1988).
 - [31] P. Grassberger, *J. Phys. A* **22**, 3673 (1989).
 - [32] R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **55**, 997 (1989).
 - [33] R. Dickman and I. Jensen, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2391 (1991).
 - [34] I. Jensen and R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **71**, 89 (1993).
 - [35] I. Jensen, *J. Phys. A* **29**, 7013(1996).
 - [36] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **42**, 151 (1981).
 - [37] P. Grassberger, *Z. Phys. B* **47**, 465 (1982).
 - [38] H. Hinrichsen, *Adv. Phys.* **49**, 815 (2000).
 - [39] S. P. Obukhov, *Physica A* **101**, 145 (1980).
 - [40] H.-M. Bröker and P. Grassberger, *Physica A* **267**, 453 (1999).
 - [41] M. M. S. Sabag and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **66**, 036115 (2002)