**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

ANDERSON AUGUSTO FERREIRA

**Ensaio analítico e numérico de processos
estocásticos unidimensionais**

São Carlos

2009

ANDERSON AUGUSTO FERREIRA

Ensaaios analíticos e numéricos de processos estocásticos unidimensionais

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação
em Física do Instituto de Física de São Carlos da
Universidade de São Paulo, para a obtenção do
título de Doutor em Ciência.

Área de Concentração: Física Básica
Orientador: Prof. Dr. José Fernando Fontanari

São Carlos

2009

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE
TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC/USP

Ferreira, Anderson Ferreira.

Ensaio analítico e numérico de processos estocásticos
unidimensionais / Anderson Ferreira Ferreira; orientador José Fernando
Fontanari.-- São Carlos, 2009.
116 p.

Tese (Doutorado em Ciências - Área de concentração: Física Básica) –
Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo.

1. Bethe Ansatz. 2. Modelos de Vértices. 3. Modelos de Tráfego. 4.
Processos de Contato. 5. Campo Médio em Cluster. I. Título.

IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400
13566-590 - São Carlos, SP

Fone/Fax: (16) 3373. 9777
www.ifsc.usp.br
svposgrad@ifsc.usp.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Anderson Augusto Ferreira

Tese apresentada ao Instituto de Física de São
Carlos da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em Ciências. Área
de Concentração: Física Básica.

Aprovado em: 31/03/2009

Comissão Julgadora

Prof. Dr. José Fernando Fontanari

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof. Dr. Americo Tristão Bernardes

Instituição: UFOP

Assinatura

Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizhari

Instituição: UFSCar

Assinatura

Prof. Dr. Mario José de Oliveira

Instituição: IF/USP

Assinatura

Dedicatória

Dedico este trabalho a minha mãe Elizabeth e a Hashem

Agradecimentos

- À Hashem
- Aos meus pais Elizabeth e Justino
- Aos meus irmãos Fernanda e Leandro
- Ao meu amor Glaucia
- Aos amigos Alcaraz, Matheus J. Lazo, Gilberto, Elton, Daniel Silvestre, Lauro, Moshe, Cacheffo, Fabiano
- Aos professores Fontanari, Márcio, Adilson, Raguza, Lidério, Krankel, Augustinho, Miled, Marcassa, Dickman, Walter, Dijalma e Luís Nunes.
- Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro.

“Não podemos ter medo dos homens, pois nós mesmos somos homens.”
— ALBERT EINSTEIN (1879 - 1955)

Resumo

Nesta presente tese, abordaremos três problemas sobre processos estocásticos unidimensionais governados pela equação mestra. Através do Ansatz do Produto Matricial (MPA) determinaremos as condições suficientes para garantir a integrabilidade de um novo processo de difusão num meio com impurezas. Investigando o espectro de tal modelo, computaremos o expoente crítico z que determina como os observáveis atingem o estado estacionário. Em seguida, estudaremos o clássico modelo de 6-vértices bidimensional definido na matriz de transferência diagonal-diagonal, como um modelo de tráfego unidimensional com dinâmica síncrona e assíncrona. E para concluir nosso trabalho, investigaremos alguns modelos de processos de contato com difusão, utilizando a teoria de Campo Médio em Cluster.

Palavras-chave: Bethe Ansatz. Modelos de Vértices. Modelos de Tráfego. Processos de Contato. Campo Médio em Cluster.

Abstract

In this thesis, we discuss three problems on dimensional stochastic processes governed by master equation. By Product Matrix Ansatz (MPA) we determine the conditions sufficient to ensure integrability of a new process of diffusion in a medium with impurities. Investigating the spectrum of this model, we compute the critical exponent z that determines how the observable flow to stationary state. In the following, we study the classical 6-vertex model defined in two-dimensional diagonal-diagonal matrix transfer as a unidimensional model of traffic with synchronous and asynchronous dynamics. And to finish our work, we study models of diffusion processes of contact, using the theory of Cluster Mean-Field.

Keywords: Bethe Ansatz. Vertex Models. Traffic Models. Contact Process. Cluster Mean-Field.

Lista de Figuras

Figura 2.1 . Cálculo do expoente crítico z	38
Figura 3.1 . Representação dos 6 vértices na rede <i>Linha-Linha</i>	48
Figura 3.2 . Localização dos sítios na rede quadrada.	49
Figura 3.3 . Transformação da rede quadrada para diagonal.	50
Figura 3.4 . Rede diagonal.	51
Figura 3.5 . Representação dos 6 vértices na rede <i>Diagonal-Diagonal</i>	52
Figura 3.6 . Representação da rede <i>Diagonal-Diagonal</i>	52
Figura 3.7 . Estados das flechas na rede.	53
Figura 3.8 . Estados dos trens na ferrovia.	54
Figura 3.9 . Possibilidades de movimento.	55
Figura 3.10 . Possibilidades de movimento.	56
Figura 3.11 . Interpretação pictórica dos choques.	56
Figura 3.12 . Concentrações das flechas (de ambos os tipos) na rede com $p = 0.9$. Para $q = 0.9$ temos que $n_1 = n_2 = 1/2$	60
Figura 3.13 . Concentrações das flechas do tipo 1, para $p = 0.9$. Comparação entre a simulação e o cálculo analítico.	61
Figura 3.14 . Concentrações das flechas do tipo 1 em função da densidade total n do sistema.	62

Figura 3.15 . Concentrações das flechas do tipo 2 em função da densidade total n do sistema.	63
Figura 3.16 . Corrente J em função da densidade n . Comparação entre a simulação e o cálculo analítico.	65
Figura 3.17 . Corrente J em função da densidade total n . Resultados das simulações de Monte Carlo para diferentes valores de p, q . Caracterização dos três regimes que o sistema exhibe.	66
Figura 3.18 . Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da probabilidade q com $p = 0.1$ e $L = 1000$, para $n = (0.5, 0.6, 0.7, 0.8$ e $0.9)$. As curvas contínuas representam os resultados do Campo Médio.	68
Figura 3.19 . Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da probabilidade q com $p = 0.9$ e $n = 0.6$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.	69
Figura 3.20 . Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da densidade total de flechas n com $L = 1000$, para diferentes valores de p, q	70
Figura 3.21 . Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = 0.2$ e $q = 0.8$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.	72
Figura 3.22 . Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = q$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.	73
Figura 3.23 . Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = 0.9$ e $q = 0.1$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.	74
Figura 3.24 . Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.1$ e $p = (0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ e $0.9)$	75
Figura 3.25 . Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.5$ e $p = (0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ e $0.9)$	76

Figura 3.26 . Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.9$ e $p =$ (0.1, 0.3, 0.5, 0.7 e 0.9).	77
Figura 4.1 . Densidade Estacionária ρ em função de γ . Comparação entre a simulação numérica e o método de Campo Médio em Cluster.	89
Figura 4.2 . Dependência de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $D = 0$	90
Figura 4.3 . Densidade estacionária ρ em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots 0.9.)$	91
Figura 4.4 . Densidade Estacionária ρ em função de γ . Comparação entre a simulação numérica e o método de Campo Médio em Cluster.	94
Figura 4.5 . Dependência de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $D = 0$	95
Figura 4.6 . Densidade Estacionária ρ em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots 0.9.)$	96
Figura 4.7 . Soluções para densidade estacionária na aproximação de $L = 1$ para $D =$ (0, 0.1, ..., 0.9.)	101
Figura 4.8 . Soluções para densidade estacionária na aproximação de $L = 2$ para $D =$ (0, 0.1, ..., 0.9.)	102
Figura 4.9 . Soluções para densidade estacionária em função de γ para $D = 0$ para diversos valores do Cluster L	104
Figura 4.10 . Dependência de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $D = 0$	105
Figura 4.11 . Dependência da densidade estacionária em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots, 0.9)$	105
Figura 4.12 . Dependência da difusão no ponto tricrítico em função do tamanho do Cluster L	106
Figura 4.13 . Dependência de γ no ponto tricrítico em função do tamanho do Cluster L .	107

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 - Valores dos autovalores (parte real) referente ao primeiro estado excitado do setor com $n_1 = L/2$ para qualquer valor de n_2	39

Lista de Abreviaturas

<i>MPA</i>	Ansatz do Produto Matricial
<i>Gap</i>	Comportamento do segundo menor autovalor do operador de evolução estocástico em função do tamanho da rede
<i>ASEP</i>	Processo de Exclusão Assimétrico
<i>TASEP</i>	Processo de Exclusão Totalmente Assimétrico
<i>NaSch</i>	Modelo de Nagel-Schreckenberg
<i>CA</i>	Automata Celular
<i>CP</i>	Processo de Contato

Lista de Símbolos

J	Corrente total do sistema no estado estacionário
$T_{Linha-Linha}$	Matriz de Transferência Linha para Linha
$T_{Diagonal-Diagonal}$	Matriz de Transferência Diagonal para Diagonal
H_{XXZ}	Hamiltoniano Quântico XXZ
D	Probabilidade de difusão
D_t	Probabilidade de difusão no ponto tricrítico
γ	Probabilidade de decaimento
γ_c	Probabilidade de decaimento no ponto crítico
γ_t	Probabilidade de decaimento no ponto tricrítico
$P_{x_1, x_2, \dots, x_n}$	Componente da distribuição de probabilidade nos pontos $x_1, x_2, \dots, x_n$ no tempo t

Sumário

1	Introdução	18
2	Uma nova classe de modelos de Spin-1 com duas leis de conservação: o modelo assimétrico de exclusão de partículas com impurezas	21
2.1	Introdução	21
2.2	Definição do Modelo	22
2.3	Diagonalização do Operador de Evolução	23
2.3.1	O Expoente Crítico z	32
3	Modelos de Tráfego	40
3.1	Introdução	40
3.1.1	Questões Fundamentais sobre Tráfego	41
3.1.2	Questões Práticas sobre Tráfego	41
3.1.3	As Teorias Físicas para o Tráfego	42
3.2	Modelo de 5-Vértices como Modelo de Tráfego	47
3.3	Modelo de 6-Vértices na rede Diagonal como um Modelo de tráfego	48
3.3.1	Concentrações das Flechas no Estado Estacionário	58
3.3.2	Corrente J das Flechas no Estado Estacionário	64
3.3.3	Concentração das Colisões entre Flechas do Tipo 1 e 2 no Estado Estacionário	67

3.3.4	Definição do Modelo	68
3.3.5	Corrente J das Flechas no Estado Estacionário	71
4	Estudos de Processos de Contato na Aproximação de Campo Médio em Cluster	79
4.1	Introdução	79
4.2	Aproximação em Cluster para Campo Médio	81
4.2.1	Aproximação Configuracional da Equação Mestra	82
4.3	Modelos K	84
4.3.1	Introdução	84
4.3.2	Modelos K com Difusão	85
4.3.3	Modelo $K = 0$ com Difusão	85
4.3.4	Modelo $K = 1$ com Difusão	90
4.3.5	Modelo $K = 2$ com Difusão: O Modelo de Criação por Tripleto	97
5	Conclusão	108
	Referências	110
	Apêndice A – Gap $\Delta = 0$	116

1 *Introdução*

Einstein e Langevin, no início do século XX, foram os primeiros idealizadores de sistemas estocásticos. De forma independente e usando abordagens diferentes, ambos os cientistas, estudaram o movimento dos pólenes em suspensão em água em um meio aquoso.

A idéia de sistema (do grego $\sigma\upsilon\sigma\tau\eta\mu\alpha$ que significa *combinar; ajustar*), refere-se à um conjunto de elementos interconectados harmonicamente, de forma a compor um todo organizado. Naturalmente, o conceito de harmonia e organização grega não se aplica em sistemas de natureza estocástica. Pois, tais sistemas apresentam flutuações temporais ao longo de sua evolução, que podem promover transições de fase dinâmica.

A descrição matemática de tais problemas por variáveis aleatórias é perfeitamente plausível, visto que, na prática é impossível computar todas as leis microscópicas relevantes de certos sistemas estocásticos. Os processos dessa natureza são descritos por uma distribuição $P_s(t)$ que determina a probabilidade de encontrar o sistema numa determinada configuração s num determinado tempo t .

Existe na literatura diversos abordagens para se trabalhar matematicamente com processos estocásticos. Podemos citar por exemplo, a equação de Fokker-Planck, a equação de Boltzmann, a equação Mestra, etc. Através da equação Mestra é possível definir um operador não hermitiano de evolução temporal do sistema. Com o espectro deste operador podemos calcular qualquer observável mediante o cálculo de valores esperados.

Em poucos casos, é possível resolver de forma exata esse tipo de equação, principalmente quando os modelos a serem tratados são formulados numa rede espacial. Nas últimas duas

décadas, houve um enorme progresso na obtenção de soluções exatas de modelos estocásticos longe do equilíbrio, através das técnicas de Bethe Ansatz de Coordenada, Algébrico, Funcional e o Ansatz do Produto Matricial (MPA) (1), (2), (3).

Entretanto, diversos problemas (principalmente aqueles onde não há conservação do número de partículas) ainda estão longe de serem resolvidos analiticamente. Neste contexto, o uso de técnicas numéricas de diagonalização (DMRG) (4), de simulações de Monte Carlo (2), de métodos perturbativos (5, 6), de renormalização de teorias efetivas de campos (7), são extremamente importantes para se conhecer as propriedades de sistemas mais complexos.

Técnicas de Campo Médio são comumente empregadas nesse cenário. Entretanto, em sistemas de baixa dimensionalidade, este tipo de técnica não prevê resultados satisfatórios, uma vez que os efeitos das flutuações estocásticas são marcantes em sistemas cuja dimensionalidade crítica inferior é maior que a dimensão em que o modelo está sendo formulado. Como por exemplo, a densidade média de partículas do processo de reação-difusão $A + A \rightarrow 0$ em uma dimensão, atinge o estado estacionário de forma $\rho \approx t^{-1/2}$, enquanto que, os resultados de Campo Médio predizem um comportamento assintótico da forma $\rho \approx t^{-1}$.

Do ponto de vista físico, é interessante investigar sistemas estocásticos no qual os graus de liberdade apresentam um comportamento coletivo em diversas escalas. O comportamento coletivo desta natureza é comumente observado em sistemas que apresentam criticalidade. Um bom exemplo sobre o fenômeno de criticalidade, é o famoso modelo de Ising em 2-D em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura T nas proximidades de seu ponto crítico.

Como na Mecânica Estatística do Equilíbrio, os fenômenos longe do equilíbrio são particularmente interessantes no que se referem as transições de fase. O conceito de classe de universalidade, que aparece nos modelos físicos de equilíbrio, também pode ser aplicado aos processos longe do equilíbrio. Todavia, a classe de universalidade desses últimos é esperado ser mais rica, uma vez que tais processos apresentam simetrias adicionais associadas ao operador de evolução temporal.

Além do estudo sobre as transições de fases e os expoentes críticos associados aos proces-

so estocásticos unidimensionais, os profissionais interessados nessa área de pesquisa buscam mapear processos abstratos em modelos que simulem fenômenos de tráfego (8–13), processos intra e extra celulares, movimentos de formigas, tráfego de pedestres (14), tráfego na Web (15, 16), crescimento de superfícies (17) e até modelos que tentam descrever a origem da vida (18, 19).

Sabendo-se da grande importância de compreender o comportamento físico de tais problemas, buscamos nesse doutoramento, *atacar* alguns problemas inéditos (difusão de partículas num meio com impurezas, e o modelo de seis vértices como um processo de tráfego na matriz de transferência Daigonal-Diagonal) de forma exata (Ansatz do Produto Matricial) e outros problemas polêmicos (modelo de criação por trincas unidimensional), fazendo uso de uma abordagem numérica (simulação de Monte Carlo) e aproximativa (Teoria de Campo Médio em Cluster).

Desta forma, a nossa tese está arquitetada na seguinte estrutura: No capítulo 2 apresentamos um novo modelo exatamente solúvel de spin 1 com duas leis de conservação utilizando o Ansatz do Produto Matricial. Explorando a versão estocástica deste modelo (difusão de partículas num meio com impurezas), mostraremos que o tempo de relaxação do sistema τ escala com o comprimento da rede L na forma $\tau^{-1} \sim \frac{1}{L^z}$ com $z = \frac{5}{2}$, onde z é o expoente crítico dinâmico. No capítulo 3 apresentamos o modelo de seis vértices como um modelo de tráfego de dinâmica síncrona e assíncrona. Mostaremos que cálculos de Campo Médio de primeira ordem para a corrente no estado estacionário descrevem com boa precisão os dados das simulações de Monte Carlo. No capítulo 4 abordaremos novos modelos de processos de contato unidimensionais com difusão, denotado por nós por modelos K , mostraremos que o modelo $K = 0$ recupera o modelo ordinário de processos de contato (20), e para $K = 2$ obtemos o modelo de criação por trincas (21). Através de aproximações de Campo Médio em Cluster nas componentes do vetor de probabilidade da equação mestra associado ao modelo $K = 2$, mostraremos que no limite de Cluster infinito, esse esquema de aproximação fornece um valor absurdo (negativo) para o parâmetro livre do modelo ($0 \leq \gamma \leq 1$) no suposto ponto tricrítico (γ_t). Por fim, no capítulo 5, expomos nossas conclusões dos trabalhos apresentados nessa tese, e os futuros problemas que pretendemos trabalhar.

2 *Uma nova classe de modelos de Spin-1 com duas leis de conservação: o modelo assimétrico de exclusão de partículas com impurezas*

2.1 Introdução

Nas duas últimas décadas, os problemas unidimensionais de natureza estocástica longe do equilíbrio tem despertado grandes interesses pelos físicos de Mecânica Estatística (2). Quando modelados pela equação mestra, todo problema se resume na obtenção da distribuição de probabilidade no tempo. Na prática, é necessário apenas estudar o comportamento assintótico e estacionário de alguns observáveis (20). Através do Ansatz do Produto Matricial (MPA) (1) é possível, à priori, determinar a distribuição de probabilidade para qualquer instante de tempo, desde que o problema seja considerado exatamente solúvel. O que consiste em dizer, que é possível escrever, para tal problema, as amplitudes dos autoestados do operador de evolução, como um produto de matrizes de determinante não nulo.

Fazendo uso desta poderosa técnica, apresentamos um novo modelo estocástico unidimensional exatamente solúvel. Determinaremos as condições que garantem a integrabilidade desse novo modelo, a expressão dos autovalores associados aos blocos diagonais do operador de evolução, bem como, as equações algébricas não lineares transcendentes acopladas (conhecidas na literatura por equações do ansatz de Bethe), que fixam os parâmetros relacionados com a expressão dos autovalores e das amplitudes dos autovetores.

2.2 Definição do Modelo

Propomos um modelo para descrever a dinâmica ou interação entre spins s_1, s_2 (no caso de estudar o modelo na abordagem de matéria condensada) de dois tipos de partículas (spin) (tipo 1 e 2) numa rede, onde o número total de partículas de cada tipo é conservado separadamente. Neste modelo, se os sítios vizinhos estão vazios, as partículas do tipo 1 podem pular para a direita ou para a esquerda com taxa Γ_{01}^{10} e Γ_{10}^{01} respectivamente. As partículas do tipo 2 não podem pular se os sítios vizinhos estão vazios, mas podem trocar de posição com as partículas do tipo 1 com taxa Γ_{21}^{12} e Γ_{12}^{21} se a partícula do tipo 1 estiver a sua esquerda ou direita, respectivamente, que pode ser visualizado pelas reações

De uma forma geral, o operador de evolução estocástico definido numa rede unidimensional de comprimento L é dado por:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j=1}^L H_j - L\Gamma_{00}^{00} \\ H_j &= \Gamma_{01}^{10} E_j^{0,1} E_{j+1}^{1,0} + \Gamma_{10}^{01} E_j^{1,0} E_{j+1}^{0,1} \\ &+ \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta \neq \alpha=1}^2 \Gamma_{\beta}^{\alpha} E_j^{\beta,\alpha} E_{j+1}^{\alpha,0} E_{j+1}^{0,\beta} + \sum_{\alpha=0}^2 \sum_{\beta=0}^2 \Gamma_{\alpha}^{\alpha} E_j^{\alpha,\alpha} E_{j+1}^{\beta,\beta}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde $|P\rangle$ satisfaz a equação mestra

$$\partial_t |P\rangle = -H|P\rangle, \quad (2.6)$$

sendo que $|P\rangle$ é o vetor que reúne todas as componentes da distribuição de probabilidade em função do tempo, e $E^{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = 0, 1, 2$) são as usuais 3×3 matrizes de Weyl com i, j elementos $(E^{l,m})_{i,j} = \delta_{l,i} \delta_{m,j}$ e $\Gamma_{no}^{l,m}$ são as taxas de transição (constantes de acoplamento). A última soma em (2.5) está relacionada com as interações “estáticas” enquanto a primeira e a segunda somas são os termos “cinéticos” que representam o movimento e a troca de posição das partículas, respectivamente.

2.3 Diagonalização do Operador de Evolução

A conservação do número de partículas do tipo 1 (n_1) e do tipo 2 (n_2), juntamente com o momento total do sistema $P = \frac{2\pi l}{L}$ ($l = 0, 1, \dots, L-1$) (invariância translacional) nos sugere que o operador de evolução H pode ser construído por blocos diagonais rotulados por n_1, n_2 e P .

Os autovalores do operador de evolução desse modelo são determinados pela diagonalização direta do operador de evolução. Todavia, esse processo não é uma tarefa trivial de se executar. No entanto iremos formular um *ansatz* de produto de matrizes para os autovetores $|\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle$ da seguinte equação de autovalor

$$H|\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle = \epsilon_{n_1, n_2} |\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle \quad (2.7)$$

ao longo do subespaço rotulado por (n_1, n_2, P) . Pois dessa maneira, o operador de evolução temporal é bloco diagonal. Primeiramente iremos escrever os autovetores da seguinte maneira

$$|\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle = \sum_{\{Q\}} \sum_{\{x\}} f(x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n) |x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n\rangle, \quad (2.8)$$

onde os kets $|x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n\rangle$ denotam as configurações com partículas do tipo Q_i ($Q_i = 1, 2$) localizadas nas posições x_i ($x_i = 1, \dots, L$). O número total de partículas é $n = n_1 + n_2$. A soma no conjunto $\{Q\} = \{Q_1, \dots, Q_n\}$ se estende sobre todas as permutações dos n números $\{1, 2\}$ no qual os n_1 termos tem valor 1 e os n_2 termos tem valor 2, enquanto que a soma $\{x\} = \{x_1, \dots, x_n\}$ se estende para cada permutação $\{Q\}$, dentro do conjunto dos não decrescentes inteiros satisfazendo $x_{i+1} \geq x_i + 1$.

O *ansatz* do produto matricial que estamos propondo, nos assegura que as amplitudes de uma autofunção arbitrária (2.8) sejam dadas em termos do seguinte produto de matrizes

$$f(x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n) = E^{x_1-1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1-1} Y^{(Q_2)} \dots E^{x_n-x_{n-1}-1} Y^{(Q_n)} E^{L-x_n}. \quad (2.9)$$

As matrizes $Y^{(Q)}$ estão associadas com os tipos de partículas dos tipos Q ($Q=1,2$) e a matriz E está associada aos sítios vazios. Vamos considerar inicialmente os casos mais simples onde o número total de partículas no bloco seja $n = 1$ e $n = 2$.

n = 1.

Nós temos que distinguir as equações que dependem dos tipos $Q = 1, 2$ de partículas. A equação de autovalor (2.7) nos fornece

$$\begin{aligned} \epsilon^{(1)} E^{x-1} Y^{(1)} E^{L-x} &= \Gamma_{01}^1 E^{x-2} Y^{(1)} E^{L-x+1} + \Gamma_{10}^0 E^x Y^{(1)} E^{L-x-1} \\ &- (2\Gamma_{00}^0 - \Gamma_{01}^0 - \Gamma_{10}^1) E^{x-1} Y^{(1)} E^{L-x}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

se a partícula é do tipo 1, e

$$\varepsilon^{(2)} E^{x-1} Y^{(2)} E^{L-x} = - (2\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{20}^{20}) E^{x-1} Y^{(2)} E^{L-x}, \quad (2.11)$$

se a partícula é do tipo 2. Nestas últimas duas equações $\varepsilon^{(1)} = \varepsilon_{1,0}$ e $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon_{0,1}$ são os autovalores. Uma solução conveniente é obtida quando introduzimos um parâmetro espectral relacionado com as matrizes

$$Y^{(Q)} = Y_k^{(Q)} E \quad (Q = 1, 2), \quad (2.12)$$

com $k \in C$, que satisfaz a relação de comutação com a matriz E

$$E Y_k^{(Q)} = e^{ik} Y_k^{(Q)} E \quad (Q = 1, 2). \quad (2.13)$$

Inserindo (2.12) e (2.13) em (2.10) e (2.11) obtemos

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(1)}(k) &= \left(\Gamma_{01}^{10} e^{-ik} + \Gamma_{10}^{01} e^{ik} - 2\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{01}^{01} + \Gamma_{10}^{10} \right), \\ \varepsilon^{(2)}(k) &= -2\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{20}^{20}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

n= 2.

Para duas partículas dos tipos Q_1 e Q_2 ($Q_1, Q_2 = 1, 2$) na rede, temos dois tipos de relações. A equação de autovalor aplicada nas componentes onde as partículas de classes Q_1 e Q_2 quando estão nas posições (x_1, x_2) com $x_2 > x_1 + 1$ nos fornecem a generalização de (2.14)

$$\begin{aligned}
& \varepsilon^{(Q_1, Q_2)} E^{x_1-1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1-1} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2} = \\
& -\Gamma_{0 Q_1}^{Q_1 0} E^{x_1-2} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2} - \Gamma_{Q_1 0}^0 E^{x_1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1-2} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2} \\
& -\Gamma_{0 Q_2}^{Q_2 0} E^{x_1-1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1-2} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2+1} - \Gamma_{Q_2 0}^0 E^{x_1-1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2-1} \\
& + \left(4\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{0 Q_1}^0 - \Gamma_{Q_1 0}^{Q_1 0} - \Gamma_{0 Q_2}^0 - \Gamma_{Q_2 0}^{Q_2 0} \right) E^{x_1-1} Y^{(Q_1)} E^{x_2-x_1-1} Y^{(Q_2)} E^{L-x_2}, \quad (2.15)
\end{aligned}$$

onde estamos considerando $\Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{20} = 0$, enquanto que as componentes onde as partículas estão na posição de colisão ($x_1 = x$, $x_2 = x+1$) nos dão

$$\begin{aligned}
& \varepsilon^{(Q_1, Q_2)} E^{x-1} Y^{(Q_1)} Y^{(Q_2)} E^{L-x-s_{Q_1}} = -\Gamma_{0 Q_1}^{Q_1 0} E^{x-2} Y^{(Q_1)} E Y^{(Q_2)} E^{L-x-s_{Q_1}} \\
& -\Gamma_{Q_2 0}^0 E^{x-1} Y^{(Q_1)} E Y^{(Q_2)} E^{L-x-s_{Q_1}-1} - \Gamma_{Q_1 Q_2}^{Q_2 Q_1} E^{x-1} Y^{(Q_2)} Y^{(Q_1)} E^{L-x-s_{Q_2}} \\
& + \left(3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{0 Q_1}^0 - \Gamma_{Q_2 0}^{Q_2 0} - \Gamma_{Q_1 Q_2}^{Q_1 Q_2} \right) E^{x-1} Y^{(Q_1)} Y^{(Q_2)} E^{L-x-s_{Q_1}}. \quad (2.16)
\end{aligned}$$

Vamos considerar inicialmente o caso onde as partículas são do mesmo tipo. Uma solução de (2.15-2.16) é obtido mediante a identificação de $Y^{(Q)}$ composta por parâmetros espectrais dependendo das matrizes $Y_{1,k_1}^{(Q)}$ e $Y_{2,k_2}^{(Q)}$ ¹, ou seja,

$$Y^{(Q)} = \sum_{j=1}^n Y_{j,k_j}^{(Q)} E \quad \text{com} \quad E Y_{j,k_j}^{(Q)} = e^{ik_j} Y_{j,k_j}^{(Q)} E, \quad \left(Y_{j,k_j}^{(Q)} \right)^2 = 0 \quad (Q=1,2), \quad (2.17)$$

com $n=2$. As últimas relações, quando inseridas em (2.15) nos fornecem o autovalor em termos dos parâmetros espectrais k_j ($j=1,2$)

$$\varepsilon^{(Q,Q)} = \sum_{j=1}^n \varepsilon^{(Q)}(k_j), \quad (2.18)$$

¹ Nós estamos introduzindo as matrizes $Y_{j,k_j}^{(Q)}$ ao invés de $Y_{k_j}^{(Q)}$, como na formulação original do MPA, em ordem de não produzir um produto de matrizes nulo no estado estacionário do sistema no setor estocástico do problema, onde os parâmetros espectrais $\{k_j\}$ são degenerados.

com $n = 2$ e $\varepsilon^{(Q)}(k)$ definido por (2.14). Usando (2.17) e (2.18) em (2.16) para $Q_1 = Q_2 = 1$ obtemos as relações

$$Y_{j,k_j}^{(1)} Y_{l,k_l}^{(1)} = S_{11}^{11}(k_j, k_l) Y_{l,k_l}^{(1)} Y_{j,k_j}^{(1)} \quad (j \neq l), \quad \left(Y_{j,k_j}^{(1)}\right)^2 = 0, \quad (1 \leq j, l \leq n) \quad (2.19)$$

onde

$$S_{11}^{11}(k_j, k_l) = -\frac{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_j + k_l)} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{11}^{11} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_j}}{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_j + k_l)} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{11}^{11} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_l}}. \quad (2.20)$$

Para $Q_1 = Q_2 = 2$ em (2.16), obtemos, mediante os uso de (2.17) e (2.18), a relação

$$(\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{22}^{22} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{02}^{02}) \sum_{j,l=1}^2 Y_{j,k_j}^{(2)} E Y_{l,k_l}^{(2)} = 0, \quad (2.21)$$

A soma nesta última equação precisa ser diferente de zero ou o MPA produzirá autofunções com norma nula. De uma forma mais geral, necessitamos garantir que

$$\sum_{j,l=1}^2 Y_{j,k_j}^{(2)} E^x Y_{l,k_l}^{(2)} \neq 0, \quad (2.22)$$

onde $x = x_2 - x_1$ é a distância entre duas partículas, e é uma carga conservada do operador (2.5).

Fazendo uso da relação de comutação em (2.17) obtemos

$$\sum_{j,l=1}^2 e^{ik_l x} Y_{j,k_j}^{(2)} Y_{l,k_l}^{(2)} = e^{ik_2 x} Y_{1,k_1}^{(2)} Y_{2,k_2}^{(2)} + e^{ik_1 x} Y_{2,k_2}^{(2)} Y_{1,k_1}^{(2)} \neq 0. \quad (2.23)$$

As relações algébricas em (2.17) nos asseguram que os produtos de matrizes que definem nosso ansatz (2.9) podem ser expressos em termos do simples produto de matrizes $Y_{1,k_1}^{(2)} Y_{2,k_2}^{(2)} E^L$ e $Y_{2,k_2}^{(2)} Y_{1,k_1}^{(2)} E^L$. Usando (2.17) temos, a partir das condições periódicas de contorno,

$$\begin{aligned}
Y_{j,k_j}^{(2)} Y_{l,k_l}^{(2)} E^L &= e^{-ik_j L} e^{-ik_l L} E^L Y_{j,k_j}^{(2)} Y_{l,k_l}^{(2)} = \\
e^{-ik_j L} e^{-ik_l L} Y_{l,k_l}^{(2)} Y_{j,k_j}^{(2)} E^L &= e^{-2ik_j L} e^{-2ik_l L} Y_{l,k_l}^{(2)} Y_{j,k_j}^{(2)} E^L,
\end{aligned} \tag{2.24}$$

para satisfazer esta relação nós deveremos ter

$$k_2 = -k_1 \pm \frac{\pi}{L} j \quad (j = 0, 1, \dots). \tag{2.25}$$

consequentemente, de (2.24),

$$Y_{1,k_1}^{(2)} Y_{2,k_2}^{(2)} = Y_{2,k_2}^{(2)} Y_{1,k_1}^{(2)}. \tag{2.26}$$

Inserindo (2.25) em (2.23) e usando (2.26) nós obtemos

$$(e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x} e^{\pm i \frac{\pi}{L} j x}) Y_{2,k_2}^{(2)} Y_{1,k_1}^{(2)} \neq 0, \tag{2.27}$$

então

$$\begin{aligned}
k_1 &\neq \pm \frac{\pi}{2} \left[\frac{j}{L} \pm \frac{(l+1)}{2} \right] \quad (j, l = 0, 1, \dots), \quad \text{ou equivalentemente} \\
k_2 &\neq k_1 \pm \pi(l+1) \quad (l = 0, 1, \dots).
\end{aligned} \tag{2.28}$$

A partir das condições periódicas de contorno, similarmente como em (2.24), nós obtemos

$$e^{ik_j L} = 1, \quad k_j = \pm \frac{2\pi}{L} l \quad (l = 0, 1, \dots, \quad j = 1, 2). \tag{2.29}$$

Finalmente, de (2.21) nós temos

$$\Gamma_{22}^{22} + \Gamma_{00}^{00} = \Gamma_{20}^{20} + \Gamma_{02}^{02}. \quad (2.30)$$

Vamos considerar agora o caso onde as partículas são de tipos diferentes. O operador de evolução (2.5) não é solúvel pelo ansatz de (1) onde as matrizes $Y^{(Q)}$ ($Q = 1, 2$) são compostas por dois parâmetros espectrais de matrizes com o mesmo valor dos parâmetros espectrais k_1, k_2 (caso a de (1)). Nós necessitamos agora considerar uma solução especial onde cada $Y^{(Q)}$ é composto por um simples parâmetro espectral de matriz (como no caso b em (1)), com um distinto parâmetro espectral, ou seja,

$$Y^{(1)} = Y_{1,k^{(1)}}^{(1)} E, \quad Y^{(2)} = Y_{1,k^{(2)}}^{(2)} E \quad \text{com} \quad E Y_{1,k^{(Q)}}^{(Q)} = e^{ik^{(Q)}} Y_{1,k^{(Q)}}^{(Q)} E \quad (Q = 1, 2). \quad (2.31)$$

Usando (2.14), (2.18) e (2.31), a equação (2.16) nos fornece duas relações independentes:

$$\begin{aligned} & \left[- \left(\Gamma_{0Q_2}^{Q_2 0} + \Gamma_{Q_1 0}^{0 Q_1} e^{i(k^{(1)} + k^{(2)})} \right) + \left(\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{Q_1 Q_2}^{Q_1 Q_2} - \Gamma_{Q_1 0}^{Q_1 0} - \Gamma_{0 Q_2}^{0 Q_2} \right) e^{ik^{(Q_2)}} \right] Y_{1,k^{(Q_1)}}^{(Q_1)} Y_{1,k^{(Q_2)}}^{(Q_2)} \\ & + \Gamma_{Q_1 Q_2}^{Q_2 Q_1} e^{ik^{(Q_2)}} Y_{1,k^{(Q_2)}}^{(Q_2)} Y_{1,k^{(Q_1)}}^{(Q_1)} = 0 \quad (Q_1 \neq Q_2 = 1, 2). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Essas duas relações necessitam ser satisfeitas identicamente, e desde que nesta etapa nós desejamos fixar k_1 e k_2 como parâmetros complexos livres, (2.32) implica numa escolha especial das taxas Γ_{kl}^{mn} de (2.5):

$$\Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{20} = 0, \quad \Gamma_{12}^{21} \Gamma_{21}^{12} = \Gamma_{10}^{01} \Gamma_{01}^{10}, \quad t_{12} = t_{21} = t_{22} = 0, \quad (2.33)$$

onde $t_{Q_1 Q_2} = \Gamma_{Q_1 Q_2}^{Q_1 Q_2} + \Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{Q_1 0}^{Q_1 0} - \Gamma_{0 Q_2}^{0 Q_2}$ ($Q_1, Q_2 = 1, 2$). Nós também obtemos a constante de estrutura:

$$S_{21}^{21}(k^{(2)}, k^{(1)}) = \frac{1}{S_{12}^{12}(k^{(1)}, k^{(2)})} = \frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}} e^{ik^{(2)}}. \quad (2.34)$$

Caso geral: n.

Vamos considerar o caso arbitrário dos números n_1, n_2 de partículas do tipo 1 e 2 ($n = n_1 + n_2$). A equação de autovalor (2.7) quando aplicada nas componentes da autofunção $|\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle$ onde todas as partículas não estão nas posições de colisão, nos fornece a generalização de (2.15) e (2.16). Para resolver estas equações identificamos as matrizes $Y^{(Q)}$ ($Q = 1, 2$) formadas pelas matrizes com parâmetro espectral

$$Y^{(1)} = \sum_{j=1}^{n_1} Y_{j, k_j^{(1)}}^{(1)} E, \quad Y^{(2)} = \sum_{j=1}^{n_2} Y_{j, k_j^{(2)}}^{(2)} E, \quad (2.35)$$

onde $Y_{j, k_j^{(Q)}}^{(Q)}$ satisfaz

$$E Y_{j, k_j^{(Q)}}^{(Q)} = e^{ik_j^{(Q)}} Y_{j, k_j^{(Q)}}^{(Q)} E, \quad \left(Y_{j, k_j^{(Q)}}^{(Q)} \right)^2 = 0, \quad j = 1, \dots, n_Q, \quad (Q = 1, 2). \quad (2.36)$$

Os autovalores, em termos dos parâmetros espectrais $\{k_j^{(Q)}\}$, são dados por

$$\varepsilon_{n_1, n_2} = \sum_{j=1}^{n_1} \varepsilon^{(1)}(k_j^{(1)}) + \sum_{j=1}^{n_2} \varepsilon^{(2)}(k_j^{(2)}). \quad (2.37)$$

Para as amplitudes de $|\Psi_{n_1, n_2, P}\rangle$ onde o par de partículas dos tipos Q_1 e Q_2 estão localizados nas posições x_i e $x_{i+1} = x_i + 1$ nos fornece as seguintes relações algébricas:

$$Y_{j, k_j^{(Q_1)}}^{(Q_1)} Y_{l, k_l^{(Q_2)}}^{(Q_2)} = S_{Q_1 Q_2}^{Q_1 Q_2}(k_j^{(Q_1)}, k_l^{(Q_2)}) Y_{l, k_l^{(Q_2)}}^{(Q_2)} Y_{j, k_j^{(Q_1)}}^{(Q_1)} \quad (Q_1, Q_2 = 1, 2), \quad (2.38)$$

onde as constantes de estruturas são as matrizes- S diagonais de elementos não nulos dadas por

$$\begin{aligned} S_{11}^{11}(k_j^{(1)}, k_l^{(1)}) &= -\frac{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_j^{(1)} + k_l^{(1)})} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{11}^{11} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_j^{(1)}}}{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_j^{(1)} + k_l^{(1)})} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{11}^{11} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_l^{(1)}}}, \\ S_{22}^{22}(k_j^{(2)}, k_l^{(2)}) &= 1, \\ S_{21}^{21}(k_l^{(2)}, k_j^{(1)}) &= \frac{1}{S_{12}^{12}(k_j^{(1)}, k_l^{(2)})} = \frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}} e^{ik_l^{(2)}}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

e taxas que satisfazem (2.33).

Para completar nossa solução do problema, devemos fixar os parâmetros espectrais $(k_1^{(1)}, \dots, k_{n_1}^{(1)})$ e $(k_1^{(2)}, \dots, k_{n_2}^{(2)})$. Usando as relações algébricas (2.38) para uma amplitude arbitrária

$$Y_{1, k_1^{(1)}}^{(1)} \cdots Y_{n_1, k_{n_1}^{(1)}}^{(1)} Y_{1, k_1^{(2)}}^{(2)} \cdots Y_{n_2, k_{n_2}^{(2)}}^{(2)} E^L. \quad (2.40)$$

A propriedade cíclica do traço fixa os parâmetros espectrais. As relações de comutação (2.38), e (2.40) nos fornecem

$$\begin{aligned} e^{ik_j^{(1)}L} &= -\prod_{l=1}^{n_1} S_{11}^{11}(k_j^{(1)}, k_l^{(1)}) \prod_{l=1}^{n_2} S_{12}^{12}(k_j^{(1)}, k_l^{(2)}) = \\ &= -\left(\frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}}\right)^{-n_2} e^{-i\sum_{l=1}^{n_2} k_l^{(2)}} \prod_{l=1}^{n_1} S_{11}^{11}(k_j^{(1)}, k_l^{(1)}) \quad (j = 1, \dots, n_1) \\ e^{ik_j^{(2)}L} &= \prod_{l=1}^{n_2} S_{22}^{22}(k_j^{(2)}, k_l^{(2)}) \prod_{l=1}^{n_1} S_{21}^{21}(k_j^{(2)}, k_l^{(1)}) \implies \\ e^{ik_j^{(2)}(L-n_1)} &= \left(\frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}}\right)^{n_1} \quad (j = 1, \dots, n_2), \end{aligned} \quad (2.41)$$

Finalmente, com o objetivo de produzir autofunções não nulas, devemos impor a generalização de (2.28)

$$k_l^{(2)} \neq k_j^{(2)} \pm \pi(m+1) \quad (j, l = 1, \dots, n_2), \quad (m = 0, 1, \dots). \quad (2.42)$$

2.3.1 O Expoente Crítico z

O expoente crítico z é definido pela razão entre o comprimento de correlação temporal e o espacial. Com o formalismo da equação Mestra, é possível calcular o valor de z , através da análise do comportamento do primeiro auto valor não nulo do operador de evolução H . Pois a parte real desse auto valor escala com o comprimento da rede L da seguinte forma

$$\tau = \Re[E_1] \sim \frac{1}{L^z}, \quad (2.43)$$

onde E_1 é o primeiro auto valor não nulo de H . Nesse sentido, a distribuição de probabilidade das configurações da rede, atinge o estado estacionário “moderado” pelo tempo de relaxação τ , ou seja,

$$|P\rangle_t \approx |\Psi_0\rangle + A_t e^{-\frac{t}{\tau}} |\Psi_1\rangle, \quad (2.44)$$

onde $|\Psi_0\rangle$ e $|\Psi_1\rangle$ são os autoestados de H associados ao auto valores $E_0 = 0$ e E_1 respectivamente, e A_t é uma amplitude oscilante.

Para calcular estes auto valores, é interessante primeiramente escrever as equações de Bethe (2.41) numa forma mais conveniente. A partir da segunda expressão de (2.41), temos

$$\begin{aligned} e^{i \sum_{j=1}^{n_2} k_j^{(2)} (L-n_1)} &= \left(\frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}} \right)^{n_1 n_2} \implies \\ e^{i \sum_{j=1}^{n_2} k_j^{(2)}} &= \left(\frac{\Gamma_{12}^{21}}{\Gamma_{10}^{01}} \right)^{\frac{n_1 n_2}{L-n_1}} e^{i \frac{2\pi}{L-n_1} m} \quad (m = 0, 1, \dots, L-n_1-1). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Inserindo (2.45) e usando (2.40) na primeira equação de (2.41), obtemos

$$e^{ik_j^{(1)}L} = (-)^{n_1-1} \phi_{n_1, n_2}(m) \prod_{l=1}^{n_1} \frac{\varepsilon^+ + \varepsilon^- e^{i(k_j^{(1)} + k_l^{(1)})} - \Delta e^{ik_j^{(1)}}}{\varepsilon^+ + \varepsilon^- e^{i(k_j^{(1)} + k_l^{(1)})} - \Delta e^{ik_l^{(1)}}} \quad (j = 1, \dots, n_1). \quad (2.46)$$

onde $\varepsilon^+ = \Gamma_{01}^1 0$, $\varepsilon^- = \Gamma_{10}^0 1$, $\Delta = \Gamma_{00}^0 0 + \Gamma_{11}^1 1 - \Gamma_{10}^1 0 - \Gamma_{01}^0 1$, e

$$\phi_{n_1, n_2}(m) = \left(\frac{\Gamma_{12}^2 1}{\Gamma_{10}^0 1} \right)^{\frac{-n_2}{L-n_1}} e^{-i \frac{2\pi}{L-n_1} m} \quad (m = 0, 1, \dots, L - n_1 - 1). \quad (2.47)$$

A equação de Bethe (2.46) difere da equação de Bethe do modelo assimétrico XXZ por um fator $\phi_{n_1, n_2}(m)$. Vamos agora obter o gap espectral (expoente z) do modelo definido em (2.5) em alguns casos especiais.

$\Delta = 0$ e $\Gamma_{21}^1 2 = \Gamma_{01}^1 0$: Neste caso (2.46) se reduz à

$$e^{i(k_j^{(1)} + \frac{2\pi}{L(L-n_1)}m)L} = (-1)^{n_1-1} \quad (m = 0, 1, \dots, L - n_1 - 1). \quad (2.48)$$

Temos dois tipos de soluções. Para n_1 ímpar temos

$$k_j^{(1)} = \frac{2\pi}{L}l - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m, \quad (l = 0, 1, \dots, L-1), \quad (m = 0, 1, \dots, L - n_1 - 1) \quad (2.49)$$

e para n_1 par

$$k_j^{(1)} = \frac{\pi}{L}l - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m, \quad (l = 0, 1, \dots, L-1), \quad (m = 0, 1, \dots, L - n_1 - 1), \quad (2.50)$$

onde $\rho_1 = n_1/L$ é a densidade de partículas do tipo 1 com a seguinte restrição (2.42). Devido ao termo proporcional à L^{-2} em (2.49) e (2.50), o gap dos autovalores $\varepsilon_0 = 0$ e ε_1 escala com

L^{-3} ao invés de L^{-1} para o caso com apenas um tipo de partícula (veja Apêndice A).

O setor estocástico ($\Delta = 1$, $\varepsilon^+ + \varepsilon^- = 1$ e $\Gamma_{21}^1 = \Gamma_{01}^1 = \varepsilon^+$): Neste setor (2.46) temos

$$e^{ik_j^{(1)}L} = (-)^{n_1-1} e^{-i\frac{2\pi}{L(1-\rho_1)}m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{\varepsilon^+ + \varepsilon^- e^{i(k_j^{(1)}+k_l^{(1)})} - e^{ik_j^{(1)}}}{\varepsilon^+ + \varepsilon^- e^{i(k_j^{(1)}+k_l^{(1)})} - e^{ik_l^{(1)}}} \quad (j = 1, \dots, n_1). \quad (2.51)$$

Vamos trabalhar com $\varepsilon^+ = 1$ and $\varepsilon^- = 0$ (processo totalmente assimétrico). Para este caso nós podemos escrever (2.51) como (22), na forma

$$(1 - z_j)^{n_1} (1 + z_j)^{L-n_1} = -2^L e^{-i\frac{2\pi}{L(1-\rho_1)}m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{z_l - 1}{z_l + 1} \quad (j = 1, \dots, n_1), \quad (2.52)$$

onde $z_j = 2e^{-ik_j^{(1)}} - 1$. Podemos notar que o lado direito desta equação é independente do índice j , consequentemente a equação de Bethe (2.52) se reduz à um simples polinômio de grau L . Introduzindo a variável auxiliar Y

$$Y = -2^L e^{-i\frac{2\pi}{L(1-\rho_1)}m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{z_l - 1}{z_l + 1}, \quad (2.53)$$

a equação de Bethe (2.52) pode ser reformulada como em (22) e (23)

$$(1 - z_j)^{n_1} (1 + z_j)^{L-n_1} = Y. \quad (2.54)$$

Esta equação tem L raízes $z_1, \dots, z_L$ que para um dado valor de Y se distribui ao longo das chamadas curvas generalizadas de Cassini definidas pela equação (veja (23))

$$|z - 1|^{\rho_1} |z + 1|^{1-\rho_1} = r, \quad (2.55)$$

onde $r = Y^{\frac{1}{L}}$ e $\rho_1 = \frac{n_1}{L}$. Os autovalores (2.37) são obtidos através da escolha de n_1 raízes de $z_1, \dots, z_L$.

Para computarmos o gap (o expoente crítico z) iremos trabalhar num setor de partículas onde a equação (2.52) fica mais simples de manipular numericamente. Ou seja, se escolhermos $\rho_1 = 1/2$ ($n_1 = L/2$), a equação do Bethe ansatz torna-se

$$(1 - z_j^2)^{n_1} = -2^L e^{-i \frac{2\pi}{L(1-\rho_1)} m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{z_l - 1}{z_l + 1} \quad (j = 1, \dots, n_1), \quad (2.56)$$

desta forma, podemos escrever

$$\begin{aligned} (1 - z^2)^{n_1} &= Y \\ Y &= -2^L e^{-i \frac{2\pi}{L(1-\rho_1)} m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{z_l - 1}{z_l + 1}. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Se parametrizarmos $Y = -a^{n_1} e^{in_1\theta}$, com $a \geq 0$ e $\theta \in (-\frac{\pi}{n_1}, \frac{\pi}{n_1})$, as $2n_1$ raízes z_j são dadas por

$$\begin{aligned} z_j &= (1 - y_j)^{\frac{1}{2}}, \quad z_{j+n_1} = -z_j; \\ y_j &= a e^{i\theta} e^{i2\pi(j-\frac{1}{2})/n_1}; \quad j = 1, \dots, n_1. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Para uma dada escolha de $\{z_j\}$ do conjunto acima e um dado valor de m , nós temos somente duas variáveis (a, θ) para serem determinadas através da seguinte equação

$$(a e^{i\theta})^{n_1} = -2^{2n_1} e^{-i \frac{2\pi}{n_1} m} \prod_{l=1}^{n_1} \frac{z_l - 1}{z_l + 1}, \quad (2.59)$$

juntamente com a expressão do autovalor

$$2\varepsilon = -n_1 + \sum_{j=1}^{n_1} z_j, \quad (2.60)$$

e a do momento $P = \frac{2\pi l}{L} (l = 0, 1, \dots, L-1)$

$$\sum_{j=1}^{n_1} \ln\left[\frac{1+z_j}{2}\right] = i\left[P - \frac{2\pi\rho_1}{L(1-\rho_1)}m\right], \quad (2.61)$$

dos autoestados.

Resolvemos este conjunto de equações numericamente para diferentes valores de m e n_1 . O estado fundamental $E = 0$ é obtido pela escolha de $m = 0$ com o conjunto de

$$C_0 = \{z_1, \dots, z_{n_1}\}, \quad (2.62)$$

com $a = \theta = 0$.

Para determinarmos o primeiro estado excitado (o autovalor que determina o gap) é necessário primeiramente dividirmos o problema em duas partes. Ou seja, vamos verificar o expoente crítico $z = 3/2$ obtido por (24) referente ao processo que envolve apenas uma classe de partícula (tipo 1). Para este caso, devemos fazer $m = 0$ e escolher o conjunto

$$C_1 = \{z_1, \dots, z_{n_1-1}, z_{n_1+1} = -z_1\}, \quad (2.63)$$

ou o conjunto

$$C_{-1} = \{z_1, \dots, z_{n_1-1}, z_{n_1} = z_{2n_1}\}, \quad (2.64)$$

com $a, \theta \neq 0$. Para grandes valores de n_1 a parte real do autovalor correspondente a configuração $C_{\pm}$ assume a forma

$$\Re[E_{\pm, m=0}] \sim \frac{b}{n_1^z} \quad \text{com } z = \frac{3}{2}. \quad (2.65)$$

onde b é uma constante. Para o problema que envolve as impurezas (classe de partícula do tipo 2) e as partículas do tipo 1, a situação é completamente diferente, pois o primeiro estado excitado é obtido com $m = 1$ e com o conjunto

$$C_{1-2} = \{z_1, \dots, z_{n_1}\}, \quad (2.66)$$

com $a, \theta \neq 0$, para qualquer valor de n_2 . Para grandes valores de n_1 a parte real do autovalor correspondente a configuração C_{1-2} assume a forma

$$\Re[E_{1-2, m=1}] \sim \frac{c}{n_1^z} \quad \text{com } z = \frac{5}{2}. \quad (2.67)$$

Mostramos na tabela 2.1 os valores da parte real do autovalor referente ao primeiro estado excitado do problema com impureza, para diferentes valores de $L = 2n_1$. Enquanto que na figura 2.1 apresentamos os dados da tabela 2.1 graficamente.

Esses resultados sugerem a existência de uma nova equação diferencial parcial estocástica que descreve a evolução temporal de uma superfície no espaço, com “ingredientes” mais gerais que a famosa equação KPZ. Ou seja, deve haver uma equação de superfície que na condição de $n_2 \neq 0$ temos $z = 5/2$ e para $n_2 = 0$ recupera $z = 3/2$ da equação KPZ.

Medida do expoente z

Figura 2.1. Cálculo do expoente crítico z

Tabela 2.1. Valores dos autovalores (parte real) referente ao primeiro estado excitado do setor com $n_1 = L/2$ para qualquer valor de n_2 .

$\Re[E_{1-2,m=1}]$	L
5.35567810^{-3}	20
9.0357110^{-4}	40
1.5622510^{-4}	80
2.741140^{-5}	160
1.579130^{-5}	200
5.59810^{-6}	300
3.18410^{-6}	400
1.85510^{-6}	500
1.37210^{-6}	800
4.2410^{-7}	900
4.4810^{-7}	1000
4.5210^{-7}	1012

3 *Modelos de Tráfego*

3.1 Introdução

Por mais de meio século, físicos vem tentando entender os princípios fundamentais que governam as leis do tráfego de veículos, com base nos conhecimentos da física estatística (10–13, 25). Levando em consideração apenas alguns ingredientes estritamente essenciais, os físicos tentam capturar os principais efeitos que regem a dinâmica destes tipos de sistemas longe do equilíbrio.

Os problemas relacionados com a física do tráfego atingem os mais curiosos cenários e escalas de energia. Podemos citar como exemplo a síntese de proteína (26), os fenômenos de transporte intra e extra celulares, o movimento de formigas, o movimento de seres humanos em vias de pedestres (14), o movimento de materiais granulares (27), o problema de transporte de passageiros por ônibus (28) e até a transmissão de informação na WEB (15, 16, 29, 30).

As pesquisas nessa linha, se dividem em duas grandes vertentes: Os adeptos às teorias macroscópicas e os defensores de uma teoria microscópica. As teorias macroscópicas se preocupam apenas com características gerais para uma descrição em termos da dinâmica de fluídos compressíveis unidimensionais. Enquanto que nas teorias microscópicas são evocados detalhes dos movimentos individuais das entidades que compõem o sistema longe do equilíbrio.

Antes de comentarmos sobre os principais modelos conhecidos na literatura sobre tráfego, é fundamental expormos os principais termos utilizados e as grandes questões que são levantadas nas pesquisas atuais da natureza dessa classe de fenômenos.

3.1.1 Questões Fundamentais sobre Tráfego

No que se refere às questões fundamentais de tráfego, podemos destacar aquelas em nível teórico, ou seja:

- (1)-Quais são os tipos de fases físicas que o tráfego exhibe? Existe transição entre estas fases, criticalidade ou criticalidade auto-organizada?
- (2)-Qual é a natureza das flutuações em torno do estado estacionário do problema de tráfego?
- (3)-Qual é a equação que governa a evolução temporal dos problemas de tráfego?

3.1.2 Questões Práticas sobre Tráfego

Antes de expormos os principais dilemas sobre os quais os engenheiros de tráfego se questionam, é importante definirmos três quantidades que são amplamente mencionadas para se referir aos problemas práticos de tráfego. A primeira delas é a corrente J do sistema, que é definido pelo número médio de veículos por unidade de tempo que atravessam um determinado ponto da estrada. A segunda quantidade denominada na literatura por *distance-headway* define a distância entre dois veículos consecutivos. E por último temos a quantidade *time-headway*, que define de forma indireta, a velocidade máxima dos veículos no sistema onde os efeitos de tráfego são manifestados. Com base nestas três quantidades são levantadas as seguintes questões:

- (1)-Qual é a relação entre a densidade n de veículos e a corrente J ? Na engenharia de tráfego, esta relação é denominada por *diagrama fundamental*.
- (2)-Quais são as distribuições de probabilidade para as quantidades *distance-headway* e *time-headway*?

- (3)-Quais são os efeitos produzidos por vias que interceptam a via principal do tráfego?
- (4)-Quais são as estratégias de sinalização (semáforos) que devem ser tomadas para otimizar o fluxo?

3.1.3 As Teorias Físicas para o Tráfego

Teoria Fluido-Dinâmica para o Tráfego

A teoria macroscópica é desenvolvida na hipótese de que o tráfego possa ser visto como um fluido compressível unidimensional (31), análogo a teoria hidrodinâmica dos fluidos. A equação de continuidade para o fluido que representa o tráfego é dada por

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = \sum_{i=1}^{N_{in}} \alpha_i(x-x_i;t) - \sum_{j=1}^{N_{out}} \beta_j(x-x_j;t), \quad (3.1)$$

onde o primeiro e o segundo termo do lado direito da equação estão associados às correntes que entram (nos pontos $x_i (i = 1, 2, \dots, N_{in})$) e às correntes que saem (nos pontos $x_j (j = 1, 2, \dots, N_{out})$) ao longo da via respectivamente. Nós podemos escrever $\alpha_i(x-x_i;t)$ e $\beta_j(x-x_j;t)$ como

$$\alpha_i(x-x_i;t) = \alpha_i^0(t)\phi_i(x-x_i) \quad \beta_j(x-x_j;t) = \beta_j^0(t)\phi_j(x-x_j). \quad (3.2)$$

Nas teorias mais simples (32) (conservação do número de veículos), a equação de continuidade é reduzida à

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = 0, \quad (3.3)$$

admitindo que $J(x;t) = n(x;t)v(x;t)$, onde $v(x;t)$ é o campo de velocidade, a equação para o tráfego se reduz a equação

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + v_g \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} = 0, \quad (3.4)$$

onde $v_g = dJ/dn = v(n) + ndv(n)/dn$. A resolução deste sistema leva a soluções para a propagação de ondas de densidade de caráter não linear. Esta abordagem torna-se interessante na medida em que é possível estabelecer uma relação entre a corrente J e a densidade do sistema n .

Teoria Cinética para o Tráfego

No contexto da teoria cinética dos gases, o tráfego é tratado com um gás de partículas interagentes onde cada partícula é representada por um veículo (25), (33–39).

Realizando algumas modificações na equação de Boltzmann (31), o modelo de Prigogine (33) e o modelo de Paveri-Fontana (34) mostram-se fisicamente insatisfatórios, entretanto as modificações propostas por Lehmann (35) apresentam-se interessantes no cenário do limite termodinâmico, pois a partir desta teoria é possível construir equações em nível macroscópico baseando-se em ingredientes microscópicos.

Teoria Newtoniana para o Tráfego

Na teoria Newtoniana para o Tráfego (12), (13), (40), são escritas, para cada veículo, uma equação de movimento Newtoniana de forma análoga a um sistema de partículas interagentes. Nesta abordagem, a aceleração a_j de um determinado veículo j é vista como um estímulo produzido pelos veículos vizinhos $j-1, j+1$. Nas teorias mais simples, a aceleração a_j do veículo j é determinada pela diferença de velocidades dos veículos j e $j-1$, ou seja

$$a_j = \frac{1}{\tau}(v_j - v_{j-1}), \quad (3.5)$$

onde τ é a escala de tempo característica do modelo.

Teoria de Mapa para o Tráfego

Esta teoria é análoga a teoria Newtoniana para o Tráfego. Entretanto, na teoria do Mapa, o tempo é uma variável inteira, enquanto que a aceleração, a velocidade e a posição do veículo continuam sendo variáveis reais. Além disso, a velocidade v_j no instante $t + 1$ do veículo j é dada por uma função Mapa que relaciona quantidades cinéticas do veículo j e do veículo $j - 1$ no tempo t , ou seja,

$$\begin{aligned} v_j(t + 1) &= \text{Map}_j[\text{quantidades cinéticas do veículo } j \text{ e do veículo } j-1 \text{ no instante } t] \\ x_j(t + 1) &= v_j(t) + x_j(t) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Os modelos mais conhecidos nesta linha são os modelos de Yukawa e Kikuchi (41)- (42) e os modelos de Krauss, Wagner e Gawron (43), (44).

Teoria de Automata-Celular para o Tráfego

As teorias de Automatas Celulares são idealizações de sistemas físicos, visto que o tempo e o espaço são postulados para serem variáveis discretas e inteiras (45).

O modelo mais popular de tráfego descrito por um Automata Celular, é sem dúvidas, o modelo de *Nagel-Schreckenberg* (NaSch). Neste, a posição, a velocidade e a aceleração são tratadas como variáveis discretas. A via, onde os veículos se movimentam, é uma rede unidimensional, onde cada sítio pode estar cheio (com um veículo) ou vazio (sem veículo). A velocidade dos veículos v pode assumir apenas um conjunto de valores $v = 0, 1, \dots, v_{max}$. A evolução do instante de tempo t para o instante $t + 1$ é dada de forma síncrona pelo seguinte conjunto de regras:

Passo 1: Aceleração. Se $v_j < v_{max}$, a velocidade do j th veículo é modificada por uma unidade, mas v_j permanece constante se $v_j = v_{max}$, ou seja,

$$v_j \rightarrow \min(v_j + 1, v_{\max}). \quad (3.7)$$

Passo 2: Desaceleração (devido a outros veículos). Se $d_j < v_j$ ($d_j = x_{j+1} - x_j$), a velocidade do j th veículo é modificada para $d_j - 1$, ou seja,

$$v_j \rightarrow \min(v_j, d_j - 1). \quad (3.8)$$

Passo 3: Aleatoriedade. Se $v_j > 0$, a velocidade do j th veículo é modificada aleatoriamente por uma unidade com probabilidade p , mas não muda se $v_j = 0$, ou seja,

$$v_j \rightarrow \max(v_j - 1, 0) \quad \text{com probabilidade } p. \quad (3.9)$$

Passo 4: Movimento dos veículos. Cada veículo se move entre os instantes de tempo t para $t + 1$ de acordo com os passos 1-3, ou seja,

$$x_j \rightarrow x_j + v_j. \quad (3.10)$$

A dinâmica síncrona é governada pelo operador de evolução T , conhecido na literatura por matriz de Transferência. A distribuição de probabilidade $|P(t) \rangle$ num dado tempo t (inteiro) é obtida mediante $t - t_0$ aplicações da matriz de Transferência na distribuição de probabilidade no instante t_0 , ou seja

$$|P(t) \rangle = T^{t-t_0} |P(t_0) \rangle \quad (3.11)$$

Modelos de TASEP para o Tráfego

Os modelos de TASEP (Processos de Exclusão Totalmente Assimétrico) são, provavelmente, os modelos longe do equilíbrio com mais resultados exatos estudados em física. Usando técnicas poderosas como o Bethe Ansatz e o Ansatz do Produto Matricial (MPA), é possível calcular, de forma exata, não apenas valores médios de qauntidades físicas no estado estacionário, como também, o coeficiente de difusão e funções de correlação de muitos pontos (2).

Os modelos de TASEP são definidos numa rede unidimensional onde o espaço é uma variável discreta e inteira. A dinâmica dos modelos de TASEP é realizada de forma assíncrona, ou seja, em cada passo de tempo, apenas uma partícula pode realizar um movimento na rede. A relação com os modelos de Tráfego é realizada através do modelo de NaSch. Fixando $v_{max} = 1$, todo veículo pode se mover (com probabilidade $q = 1 - p$) para o sítio vizinho entre os instantes t e $t + 1$ desde que o sítio vizinho esteja vazio, similar ao modelo de NaSch. Entretanto, os modelos de TASEP são definidos numa dinâmica assíncrona governada pelo operador de evolução H , enquanto que o modelo de NaSch é definido na dinâmica síncrona governada pelo operado de evolução T . A relação entre a dinâmica síncrona e a dinâmica assíncrona se traduz matematicamente pela relação

$$T = e^H. \quad (3.12)$$

Isso não quer dizer que seja trivial encontrar o modelo na dinâmica síncrona, uma vez conhecido o modelo na dinâmica assíncrona, ou vice versa. Como veremos adiante, o hamiltoniano quântico XXZ (que descreve os fenômenos de ferromagnetismo) está relacionado com o modelo de 6 vértices (que descreve os fenômenos de materiais ferroelétricos), através da relação $T_{6\text{-vertices}, \text{Linha-Linha}} = e^{\beta H_{XXZ}}$, com um mesmo parâmetro livre Δ . Apesar desses dois modelos estarem relacionadso por esta relação, o modelo XXZ só pode ser mapeado num ASEP (Processo Estocástico Assimétrico) em delta $\Delta = 1$, enquanto que o modelo de 6-vértices é mapeado num TASEP em $\frac{1}{2} < \Delta < \infty$ definido pelo operador $T_{6\text{-vertices}, \text{Diagonal-Diagonal}}$ (como veremos

adiante.)

3.2 Modelo de 5-Vértices como Modelo de Tráfego

Através de um mapeamento usual feito entre modelos de teoria de campo e mecânica estatística, onde uma das dimensões espaciais é transformada numa dimensão temporal, Brankov e Schreckenberg (do modelo de NaSch) (46) interpretaram o modelo de 5-vértices em duas dimensões espaciais definido na matriz de transferência linha-linha, como um modelo unidimensional de Automata Celular unidimensional probabilístico para descrever o fenômeno de tráfego.

Ao invés de trabalhar com os vértices do modelo de 6-vértices (47), Brankov e Schreckenberg (46), utilizam a interpretação de flechas (veja figura 3.1) para descrever os movimentos no espaço e no tempo dos veículos. As flechas horizontais representam os veículos que se movimentam da esquerda para a direita na via de comprimento L , enquanto que as flechas verticais representam a evolução temporal para os veículos que não se movimentaram, ou seja, permaneceram em repouso no sítio. Para evitar choques entre os veículos num mesmo sítio, o vértice com peso ω_3 é eliminado do modelo.

A evolução temporal é dado pela matriz de transferência linha-linha do modelo de 6-vértices com

$$\omega_1 = x, \quad \omega_2 = \omega_4 = 1, \quad \omega_3 = 0, \quad \omega_5 = \omega_6 = x^{1/2}. \quad (3.13)$$

com $0 \leq x \leq 1$.

Trabalhando com uma densidade fixa n de flechas, os autores de (46) escreveram uma função partição em função do parâmetro livre x (peso de Boltzmann) e em seguida determina-

Figura 3.1. Representação dos 6 vértices na rede *Linha-Linha*.

ram a energia livre do sistema. Eles deduziram que a corrente do sistema seria o número médio (tempo e espaço) do número de flechas na horizontal, e a partir disso eles calcularam a corrente do sistema através de uma derivada da energia livre no limite termodinâmico de forma exata, através de resultados já conhecidos derivados pela técnica de Bethe Ansatz (47).

3.3 Modelo de 6-Vértices na rede Diagonal como um Modelo de tráfego

Ao invés de trabalharmos na rede quadrada com condições de contorno periódica ao longo da horizontal, consideraremos uma rede quadrada com condições de contorno *toroidais especiais*.

Para explicarmos estas condições toroidais especiais precisaremos nomear de uma forma especial os sítios numa rede quadrada formada por M linhas e N colunas. Uma rede com esta geometria possui $N \times M$ sítios. Um sítio é formado pela intersecção de uma linha com uma coluna. Chamaremos as linhas por l ($l = 1, \dots, M$) e as colunas por c ($c = 1, \dots, N$). Vamos agora nomear da esquerda para a direita da folha de papel, os sítios de uma determinada linha l da seguinte forma:

Figura 3.2. Localização dos sítios na rede quadrada.

$$\{s^{(l)}\} \equiv (1^{(l)}, 2^{(l)}, \dots, N^{(l)}). \quad (3.14)$$

Seguindo esta convenção mostramos na figura 3.2 a numeração dos sítios numa rede formada por M linhas e N colunas.

Usando esta notação, as condições toroidais especiais de contorno são definidas de forma que um determinado sítio $s^{(l)}$ ($s = 1, 2, \dots, N$) da linha l ($l = 1, 2, \dots, M$) será equivalente ao sítio $s^{(M+l)}$, e ao sítio $(M+s-1)^{(M+l-1)}$, ou seja,

$$s^{(l)} \equiv s^{(M+l)}, \quad (3.15)$$

Figura 3.3. Transformação da rede quadrada para diagonal.

$$s^{(l)} \equiv (M + s - 1)^{(M+l-1)}. \quad (3.16)$$

Para simplificar a nomenclatura, chamaremos esta rede deformada como rede diagonal. Na figura 3.2b mostramos tal representação para a rede $N \times M = 4 \times 5$.

Note que segundo as condições de contorno (3.15) temos para a rede da figura 3.3a a equivalência dos seguintes sítios

$$1^{(1)} \equiv 5^{(5)}, 1^{(2)} \equiv 5^{(6)}, 1^{(3)} \equiv 5^{(7)}, 1^{(4)} \equiv 5^{(8)}, 1^{(5)} \equiv 5^{(9)}, \quad (3.17)$$

enquanto que a condição de contorno (3.16) nos dá

$$1^{(1)} \equiv 1^{(6)}, 2^{(2)} \equiv 2^{(7)}, 3^{(3)} \equiv 3^{(8)}, 4^{(4)} \equiv 4^{(9)}. \quad (3.18)$$

Fazendo um corte na rede da figura 3.3b de tal forma que o contorno seja dado pelos conjuntos

Figura 3.4. Rede diagonal.

de sítios em (3.17) e (3.18) obtemos a rede mostrada na figura 3.4

Percebemos então que a rede escrita na geometria da figura 3.4 tem a virtude de possuir as condições de contorno do tipo “toroidal”.

Mostramos na figura 3.5 as possíveis configurações no caso particular do modelo de seis vértices nesta nova geometria, bem como os pesos de Boltzmann correspondentes.

Na figura 3.6, as intersecções das linhas inclinadas com as linhas verticais, formam os sítios dessa nova rede $(1, \dots, L)$. Em cada sítio pode haver 4 configurações possíveis satisfazendo a regra do gelo. Ou seja, num dado sítio i pode haver uma flecha vertical, que chamaremos de flecha do tipo 1 ($\alpha = 1$), ou uma flecha inclinada, que chamaremos de flecha do tipo 2 ($\alpha = 2$), além do sítio vazio, que corresponde ao vácuo do problema. Neste modelo, permitimos também,

Figura 3.5. Representação dos 6 vértices na rede *Diagonal-Diagonal*.

Figura 3.6. Representação da rede *Diagonal-Diagonal*.

o encontro (choques) entre duas flechas (tipo 1 e tipo 2) num mesmo sítio i . Todos os possíveis estados de uma determinada flechas estão representados na figura 3.7.

As linhas tracejadas r e $r + 1$, da figura 3.6, representam os instantes de tempo t e $t + 1$ na dinâmica do problema. Desta forma, o problema bidimensional espacial de 6 vértices, transforma-se num problema de automata celular, onde as linhas horizontais representam o espaço, e as linhas verticais representam o tempo. Ou melhor, o problema de 2 dimensões espaciais em Mecânica Estatística do Equilíbrio foi transformado num problema Unidimensional de Mecânica Estatística Longe do Equilíbrio.

Nesta rede, as flechas se movimentam de forma estocástica e de forma síncrona (de forma simultânea), ou seja, durante a passagem de tempo $t \rightarrow t + 1$, cada flechas na rede pode se locomover de um sítio para um outro vizinho (a esquerda), ou permanecer no mesmo sítio.

Figura 3.7. Estados das flechas na rede.

Isto vai depender do peso de Boltzmann associado aos vértices do modelo, que neste caso, configuram as probabilidades dos possíveis movimentos das flechas, entre os instantes de tempo $t \rightarrow t + 1$. Nesse sentido, é natural impormos dois parâmetros p, q para caracterizar o problema em sua versão estocástica, ou seja,

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 1, \\
 a_1 &= 1, \\
 c_1 &= p, \\
 c_2 &= q, \\
 b_1 &= 1 - p, \\
 b_2 &= 1 - q,
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

com $0 < p, q < 1$.

Desta forma, uma flecha do tipo 1 que encontra-se no sítio i num dado tempo t , pode mover-se para o sítio $i - 1$ no tempo $t + 1$ com probabilidade $c_2 = q$, ou permanecer no mesmo sítio i no tempo $t + 1$ com probabilidade $b_2 = 1 - q$. Digamos ainda que, se no sítio i no instante de tempo t houver uma flecha do tipo 2, então ela pode mover-se no instante de tempo $t + 1$ para o sítio $i - 1$ com probabilidade $b_1 = 1 - p$, ou permanecer no sítio i no instante $t + 1$ com probabilidade p . E no caso de no sítio i , houver duas flechas (tipo 1 e tipo 2) no instante de

Figura 3.8. Estados dos trens na ferrovia.

tempo t , então com probabilidade 1, a flecha do tipo 1 move-se para o sítio $i - 1$ no instante de tempo $t + 1$, e a flecha do tipo 2 permanece no mesmo sítio i no instante de tempo $t + 1$.

É interessante mencionarmos, que devido a regra do gelo, o número de flechas que "entram" (up) em cada vértice, é o mesmo número de flechas que "saem" (down) em cada vértice, por isso, dizemos que neste modelo, o número total de flechas se conserva. Entretanto, durante a evolução temporal, o número de flechas do estado 1 (vertical) ou do estado 2 (inclinado) varia com o tempo, atingindo o estado estacionário para tempos longos (idealizados por $t \rightarrow \infty$), onde o número médio de flechas de ambos os estados se conservam em valores médios.

De forma pictórica, podemos dizer que a dinâmica estocástica do modelo de 6-vértices, pode ser mapeada em um problema de tráfego de trens numa linha ferroviário com condições periódicas de contorno. Ou seja, se imaginarmos que os sítios da rede fazem o papel das estações de trens, poderíamos associar as flechas do tipo 1 (vertical) aos trens que estão em repouso nas estações, e as flechas do tipo 2 (vertical) ao trens que estão em movimento entre duas estações consecutivas (ver figura 3.8).

Assim, um trem que está em repouso numa estação i no instante t pode continuar em repouso no instante $t + 1$ com probabilidade $1 - q$, ou mover-se em direção a estação $i - 1$ no

Figura 3.9. Possibilidades de movimento.

instante $t + 1$ com probabilidade q (ver figura 3.9). Enquanto que um trem que encontra-se em movimento entre as estações $i + 1$ e i no instante t , pode chegar na estação i no instante $t + 1$ e ficar em repouso com probabilidade p , ou conntinuar seu movimento em direção a estação $i - 1$ com probabilidade $1 - p$ sem realizar a parada na estação i (ver figura 3.10). Isto pode acontecer em situações onde o número de passageiros numa dada estação seja muito maior que o permitido em condições normais. Como exemplo, podemos citar a estação da Sé às 18:00 nos dias úteis. Os trens que saem da estação Barra Funda não costumam parar em algumas estações intermediárias a estação Sé.

Nessa ótica, o problema que envolve a colisão de flechas (quando uma flecha do tipo 1 e uma do tipo 2 estão num sítio i) pode ser interpretado da seguinte forma: O trem que está em repouso na estação i no tempo t deixa a estação i em direção a estação $i - 1$ no tempo $t + 1$ (mudança do estado 1 para o estado 2), e o trem em movimento chega na estação i no tempo $t + 1$ para receber os passageiros da estação (mudança do estado 2 para o estado 1). Veja a figura 3.11.

Figura 3.10. Possibilidades de movimento.

Figura 3.11. Interpretação pictórica dos choques.

Utilizando a teoria de Campo Médio de Cluster $L = 1$ (mais simples possível), correlações apenas de um sítio, computamos a densidade de flechas do tipo 1 e 2 no limite do estado estacionário, a corrente do sistema produzida pelo movimento das flechas, e a densidade de choques entre as flechas do tipo 1 e do tipo 2 num mesmo sítio. O fato mais interessante deste problema, é que através de um cálculo simples de campo médio, pudemos descrever o comportamento exato dos dados obtidos pelas simulações de Monte Carlo (como veremos adiante). Este fato é entendido devido a conservação de carga do modelo (conservação de partículas) e as pequenas flutuações na corrente e na velocidade média das partículas.

Como sabemos da literatura (47), o modelo de 6-vértices está ligado com o modelo XXZ, através da relação $T_{6\text{-vertices}, \text{Linha-Linha}} = e^{-\beta H_{\text{XXZ}}}$, onde T é a matriz de Transferência e H_{XXZ} é o Hamiltoniano Quântico. Em sua versão estocástica (no ponto $\Delta = 1$) (24), este Hamiltoniano (Operador de evolução), descreve as flutuações estocásticas do modelo de difusão assimétrica numa rede unidimensional com apenas um tipo de partícula. Em especial, no ponto $\Delta = 1$, o sistema é caracterizado pelo expoente dinâmico $z = 3/2$, relacionado com o tempo de relaxação para o sistema atingir o estado estacionário. Na versão estocástica do modelo de 6-vértices na rede diagonal-diagonal, o parâmetro Δ é dado por

$$\Delta = \frac{(1-q)(1-p) - pq + 1}{2(1-q)}, \quad (3.20)$$

que para $0 < p, q < 1$ implica em $1/2 < \Delta < \infty$. No ponto $\Delta = 1$ temos que $p = q$, ou seja, é de se esperar que neste ponto, o gap do modelo seja $3/2$ ($z = 3/2$). Na linguagem de materiais ferroelétricos (47), o modelo de 6 vértices estocástico apresenta uma fase desordenada ($1/2 \leq \Delta < 1$) e uma fase ferroelétrica ($1 \leq \Delta < \infty$). Passaremos agora para o estudo de quantidades físicas no limite de $t \rightarrow \infty$.

3.3.1 Concentrações das Flechas no Estado Estacionário

Através da equação mestra em sua forma vetorial

$$\frac{\partial}{\partial t}|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle, \quad (3.21)$$

nós podemos calcular a probabilidade de encontrar uma flecha no sítio i do tipo 1 ($\langle n_{1_i} \rangle$) ou uma flecha do tipo 2 ($\langle n_{2_i} \rangle$). Para tal, é necessário calcularmos o valor médio da concentração destas flechas. A variação no tempo da concentração de flechas do tipo 1 no sítio i ($\langle n_{1_i} \rangle$), é dada por

$$\frac{d\langle n_{1_i} \rangle}{dt} = p\langle n_{2_i}e_{1_i} \rangle - q\langle n_{1_i}e_{2_{i-1}} \rangle \quad (3.22)$$

onde $e_{1_i} = 1 - \langle n_{1_i} \rangle$ e $e_{2_{i-1}} = 1 - \langle n_{2_i} \rangle$. Uma vez que a concentração total é conservada $n = n_1 + n_2$, e considerando a isotropia dos sítios (Campo Médio), a evolução da concentração das flechas do tipo 1 é dada por

$$\frac{dn_1}{dt} = (p - q)n_1^2 - [(p - q)n + p + q]n_1 + pn, \quad p \neq q. \quad (3.23)$$

e

$$\frac{dn_1}{dt} = -2pn_1 + pn, \quad p = q. \quad (3.24)$$

No estado estacionário, temos que $\frac{d\langle n_1 \rangle}{dt} = \frac{d\langle n_2 \rangle}{dt} = 0$, e desta forma, obtemos

$$n_1 = \frac{(p-q)n + p + q + \sqrt{[(p-q)n + p + q]^2 - 4(p-q)pn}}{2(p-q)} \quad p \neq q, \quad (3.25)$$

com

$$n_2 = n - \left\{ \frac{(p-q)n + p + q + \sqrt{[(p-q)n + p + q]^2 - 4(p-q)pn}}{2(p-q)} \right\} \quad p \neq q, \quad (3.26)$$

e

$$n_1 = \frac{n}{2} = n_2 \quad p = q. \quad (3.27)$$

Na figura 3.12 mostramos os resultados das simulações de Monte Carlo para as concentrações das flechas do tipo 1 e do tipo 2 em função do parâmetro q para $L = 1000$, $p = 0.9$ e $n = 0.5$. Na figura 3.13 mostramos o comportamento da densidade de flechas do tipo 1 em função de q , juntamente com a curva de Campo Médio para $L = 1000$, $p = 0.9$ e $n = 0.5$. Repare que a curva de Campo Médio recupera de forma exata os pontos da simulação.

Já na figura 3.14 e na figura 3.15, mostramos os resultados das simulações da densidade de flechas do tipo 1 e do tipo 2 respectivamente, em função da densidade total da rede n , para $p = 0.7$ e diversos valores de q com $L = 1000$. Como mostraremos adiante, o comportamento da distribuição de flechas do tipo 2 será igual ao comportamento da corrente J do sistema.

Figura 3.12. Concentrações das flechas (de ambos os tipos) na rede com $p = 0.9$. Para $q = 0.9$ temos que $n_1 = n_2 = 1/2$.

Figura 3.13. Concentrações das flechas do tipo 1, para $p = 0.9$. Comparação entre a simulação e o cálculo analítico.

Figura 3.14. Concentrações das flechas do tipo 1 em função da densidade total n do sistema.

Figura 3.15. Concentrações das flechas do tipo 2 em função da densidade total n do sistema.

3.3.2 Corrente J das Flechas no Estado Estacionário

Uma das quantidades computadas e observadas em problemas de tráfego, é o fluxo de veículos no estado estacionário. Contabilizamos o fluxo das flechas pela variação espacial do número de flechas, independentemente do estado (1 ou 2) da flecha que se encontra nos sítios. Ou seja, se a flecha está no estado 2 no sítio i no tempo t e passa para o estado 1 (permanece no sítio i) no tempo $t + 1$, o fluxo neste sítio é 0. Qualquer outra mudança no sítio i é contabilizada para a corrente total do sistema.

Contudo, o deslocamento das flechas na rede, é justamente a própria concentração de flechas do tipo 2 (em valores médios), pois as flechas do tipo 1 não executam movimentos, desta forma, a corrente J é dada por

$$J = n - n_1 = n_2, \quad (3.28)$$

onde n_1 é dada por (3.25) para $p \neq q$ ou (3.27) para $p = q$.

Mostramos na figura 3.16 a corrente J em função da densidade n do sistema para $p = 0.1$, $q = 0.9$ e $L = 1000$. Nesta figura, apresentamos os resultados de Monte Carlo para a medida de fluxo e concentração da densidade de partículas do tipo 2, bem como, a curva de Campo Médio.

Na figura 3.17 apresentamos a corrente J em função da densidade total de flechas n para diversos valores do par (p, q) e $L = 1000$. É fundamental salientarmos os 3 regimes que caracterizam a corrente. Temos o regime com p pequeno e q grande (corrente de cavidade negativa na densidade), o regime com $p = q$ correspondendo a $\Delta = 1$ (corrente linear com a densidade) e o regime com q pequeno e p grande (corrente com cavidade positiva na densidade).

Figura 3.16. Corrente J em função da densidade n . Comparação entre a simulação e o cálculo analítico.

Figura 3.17. Corrente J em função da densidade total n . Resultados das simulações de Monte Carlo para diferentes valores de p, q . Caracterização dos três regimes que o sistema exibe.

3.3.3 Concentração das Colisões entre Flechas do Tipo 1 e 2 no Estado Estacionário

Além de computarmos a concentração de flechas nos estados 1 e 2, podemos também calcular a concentração das flechas em colisão (encontro de flechas do tipo vertical e inclinado no mesmo sítio).

Na abordagem de Campo Médio, a variação do número de pares num sítio i é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d \langle n_{12_i} \rangle}{dt} = & q \langle n_{1_i} n_{1_{i+1}} e_{2_i} \rangle + (1-p) \langle n_{1_i} n_{2_{i+1}} e_{2_i} \rangle \\ & + \langle n_{1_i} n_{1_{i+1}} n_{2_{i+1}} \rangle - \langle n_{12_i} \rangle. \end{aligned} \quad (3.29)$$

No limite isotrópico temos que

$$\frac{dn_{12}}{dt} = qn_1^2(1-n_2) + (1-p)n_1n_2(1-n_2) + n_1^2n_2 - n_{12}. \quad (3.30)$$

Desta forma, a distribuição de probabilidade de encontrar pares de flechas em colisão na rede no estado estacionário é dada por

$$n_{12} = qn_1^2(1-n_2) + (1-p)n_1n_2(1-n_2) + n_1^2n_2. \quad (3.31)$$

Mostramos na figura 3.18 os resultados da distribuição de choques entre flechas do tipo 1 e do tipo 2 em função do parâmetro q . Realizamos simulações de Monte Carlo para uma rede de $L = 1000$ sítios, $p = 0.2$ e com $n = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$ e 0.9 . Repare que os dados de Campo Médio não recuperam os dados das simulações nesses limites.

Já na figura 3.19, apresentamos os resultados das simulações de Monte Carlo para a densidade de choques com $L = 1000$, $p = 0.9$ e $n = 0.6$, bem como a curva de Campo Médio.

Figura 3.18. Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da probabilidade q com $p = 0.1$ e $L = 1000$, para $n = (0.5, 0.6, 0.7, 0.8$ e $0.9)$. As curvas contínuas representam os resultados do Campo Médio.

Observe que nesse limite a curva de Campo Médio se ajusta bem aos dados da simulação. Enquanto que na figura 3.20, mostramos apenas os resultados das simulações da densidade de pares em função da densidade total do sistema, para diversos valores de p e q com $L = 1000$.

3.3.4 Definição do Modelo

Nesta versão do modelo, as flechas são escolhidas “uma a uma” de forma aleatória para executar um movimento. A passagem de tempo t para $t + 1$ é computada mediante $N_1 + N_2$ (número de flechas do tipo 1 e do tipo 2 respectivamente) tentativas para que as flechas possam se movimentar. A diferença entre permitir que todas as flechas se movimentem no mesmo instante (síncrono) ou que cada flecha se movimente em um dado instante (assíncrono), faz com

Figura 3.19. Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da probabilidade q com $p = 0.9$ e $n = 0.6$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.

Figura 3.20. Densidade de choques de pares de flechas (estado 1 com estado 2), em função da densidade total de flechas n com $L = 1000$, para diferentes valores de p, q .

que o movimento efetivo das flechas seja alterado pelo efeito da exclusão nos sítios, que no caso anterior, era mascarado pela dinâmica síncrona. Pois na dinâmica assíncrona, por exemplo, o movimento de uma flecha do tipo 1 no sítio i para o sítio $i - 1$ com a mudança de estado 1 para 2, só é possível se no sítio $i - 1$ não houver uma flecha do tipo 2. Da mesma forma, o movimento de uma flecha do tipo 2 no sítio i para o sítio $i - 1$ é permitido se não houver uma flecha do tipo 1 no sítio i e uma flecha do tipo 2 no sítio $i - 1$. Por fim, para que uma flecha do tipo 2 transicione do estado 2 para o estado 1, é necessário que no instante da transição, não exista uma flecha do tipo 1 no mesmo sítio da flecha do tipo 2. De forma pictórica, todas essas situações podem ser simbolizadas pelas reações abaixo

$$\otimes B_{(i-1)} \quad \emptyset \emptyset_{(i)} \xleftarrow{1-p} \otimes \emptyset_{(i-1)} \quad \emptyset B_{(i)}; \quad (3.32)$$

$$A \emptyset_{(i)} \xleftarrow{p} \emptyset B_{(i)}; \quad (3.33)$$

$$\otimes B_{(i-1)} \quad \emptyset \otimes_{(i)} \xleftarrow{q} \otimes \emptyset_{(i-1)} \quad A \otimes_{(i)}; \quad (3.34)$$

$$A \ominus_{(i)} \xleftarrow{1-q} A \ominus_{(i)}, \quad (3.35)$$

onde A, B e $\emptyset$ representam as flechas do tipo 1 do tipo 2 e os vazios respectivamente, enquanto que $\otimes = \emptyset$ ou $\otimes = A$ e $\ominus = \emptyset$ ou $\ominus = B$.

3.3.5 Corrente J das Flechas no Estado Estacionário

Nesta versão, a corrente J produzida pelo movimento das flechas em função da densidade n , vai apresentar um máximo para um valor de densidade não trivial do sistema. A teoria de Campo Médio em ordem mais baixa não recupera os dados das simulações de Monte Carlo. Esta dificuldade mostra-se ser recorrente em problemas estocásticos unidimensionais assíncronos

Figura 3.21. Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = 0.2$ e $q = 0.8$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.

com mais de uma classe de partículas (48). Entretanto, ao passo que formos aumentado o tamanho do Cluster, veremos a aproximação convergir ao valor exato dos pontos obtidos pela simulação (8), (9). Nas figuras 3.21, 3.22 e 3.23 apresentamos o resultado de nossas simulações para a corrente em função da densidade total do sistema, bem como a aproximação em ordem mais baixa de Campo Médio, referente a expressão abaixo

$$J = (1 - n_2)[(1 - p)(1 - n_1)n_2 + qn_1] \quad (3.36)$$

Enquanto nas figuras 3.24, 3.25 e 3.26 observamos o comportamento da corrente para valores de densidade fixa, em função dos parâmetros p e q .

Podemos interpretar esse modelo como um problema de tráfego onde os veículos possuem dois estados inerciais distintos. Nesse sentido, a reação (3.32) corresponderia ao movimento de um veículo (estado B) na estrada, enquanto a reação (3.33) simularia à uma quebra mo-

Figura 3.22. Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = q$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.

Figura 3.23. Corrente J do sistema em função da densidade total n para $p = 0.9$ e $q = 0.1$. Comparação entre a simulação numérica e os cálculos analíticos.

Figura 3.24. Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.1$ e $p = (0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ e $0.9)$.

Figura 3.25. Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.5$ e $p = (0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ e $0.9)$.

Figura 3.26. Corrente J do sistema em função do parâmetro q com $n = 0.9$ e $p = (0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ e $0.9)$.

mentânea dos veículos ($B \rightarrow A$), já a reação (3.34) representaria o mudança do estado de repouso para o estado de movimento dos veículos ($A \rightarrow B$), e por fim, a reação (3.35) simularia à permanência do veículo no estado de repouso entre dois instantes de tempos consecutivos.

4 *Estudos de Processos de Contato na Aproximação de Campo Médio em Cluster*

4.1 Introdução

Os processos de contato foram originalmente introduzidos por Harris (veja (20)) como um modelo para espalhamento de epidemia sem imunização. Formulado numa dinâmica assíncrona, o modelo é definido numa rede formada por sítios, sendo que cada sítio pode estar infectado ou sadio. Os sítios infectados $\eta_i = 1$ podem tornar-se sadios $\eta_i = 0$ ou infectarem outros sítios (dependendo do modelo). Para determinados valores das taxas de transição, a epidemia pode se espalhar por toda a rede, ou ser extinta por completo.

Para cada passo no tempo é seleccionado de forma aleatória um sítio na rede. Dependendo do estado do sítio na rede e do número dos vizinhos que estão ativos, um novo valor $\eta_i(t+1) = 0, 1$ é atribuído ao sítio de acordo com uma determinada taxa de transição. No modelo Ordinário de processos de contato, estas taxas de transição são definidas por

$$\begin{aligned} w[0 \rightarrow 1, n] &= \frac{\lambda n}{2d}, \\ w[1 \rightarrow 0, n] &= 1, \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde n é o número de sítios vizinhos ocupados, com relação ao sítio escolhido para mudar de estado.

Se denotarmos uma configuração microscópica por (49)

$$\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_L), \quad (4.2)$$

onde $\eta_i = 0$ ou 1 conforme o sítio esteja sadio ou infectado respectivamente, e por L o número total de sítios na rede. A evolução temporal da probabilidade $P(\eta, t)$ do estado η é governada pela equação mestra

$$\frac{\partial P(\eta, t)}{\partial t} = \sum_i w_i(\eta^i) P(\eta^i, t) - w_i(\eta) P(\eta, t), \quad (4.3)$$

onde η^i denota a configuração microscópica

$$\eta^i = (\eta_1, \eta_2, \dots, 1 - \eta_i, \dots, \eta_L). \quad (4.4)$$

A taxa de transição $w_i(\eta)$ é dada por

$$w_i(\eta) = \left(\frac{\lambda}{q} (1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} \right) + \eta_i, \quad (4.5)$$

onde q é o número de coordenação e a soma se estende sobre os q primeiros sítios vizinhos do sítio i .

Este modelo simples de processo de contato foi bastante estudado por diferentes técnicas numéricas e analíticas (para uma consulta mais detalhada veja (20) e (50)). Todavia, é indispensável mencionarmos que neste modelo, existe uma transição de fase contínua longe do equilíbrio do estado sadio para o estado infectado. Esta transição de fase é caracterizada por expoentes críticos dinâmicos calculados via teoria de campos, diagonalizações numéricas do operador de evolução (DMRG), expansões em séries e por simulações numéricas (20), (50),

(5) e (6).

Não realizaremos nesta tese uma revisão sobre os expoentes críticos dinâmicos, bem como, seus significados físicos, visto que não necessitaremos inicialmente de tais conhecimentos para expor nossos resultados. Todavia, é interessante destacar o seguinte resultado sobre os modelos de processos de contato, cuja classe de universalidade é a dos modelos de *Percolação Direcionada*

Conjectura sobre os Modelos de Percolação Direcionada

As características pertinentes de modelos de percolação direcionada, levou Janssen e Gruber (veja (20)) à fazer a seguinte conjectura: Modelos longe do equilíbrio que estejam na mesma classe de universalidade dos modelos de percolação direcionada teriam que satisfazer as seguintes condições:

- (1) O modelo tem que apresentar uma transição contínua da fase ativa para a fase de estado absorvente, sendo que, este estado tem que ser único.
- (2) A transição é caracterizada por um parâmetro de ordem positivo.
- (3) As regras microscópicas do modelo envolvem apenas sítios vizinhos.
- (4) O sistema não apresenta atributos especiais, como por exemplo, simetrias adicionais

4.2 Aproximação em Cluster para Campo Médio

A grande dificuldade de se trabalhar analiticamente com sistemas estocásticos interagentes, se deve ao fato de que muitos desses sistemas não apresentam soluções exatas (2). Todavia, o uso de técnicas aproximadas e simulações numéricas, são de bom uso para se obter informações quantitativas sobre tais problemas.

No espectro das teorias aproximativas, podemos citar, como por exemplo, o uso de séries (5) e teorias de perturbações dependente do tempo (análogas aquelas em Mecânica Quântica)

(6), teoria efetivas de campo no contínuo (7), diagonalização numérica do operador de evolução estocástico (4), desenvolvidas e aplicadas para se obter informações dos expoentes críticos de determinados processos estocásticos.

Como toda técnica de aproximação, esses métodos não são viáveis quando o número de sítios envolvidos no problema é suficientemente grande (á exceção das teorias efetivas de campo), visto que, o tempo computacional empregado na técnica cresce exponencialmente com o número de sítios.

É bem verdade que inúmeros problemas estocásticos que apresentam transições de fases críticas, possuem dimensão crítica inferior ou igual a 2, e dimensão crítica superior ou igual a 4, ou seja, é de se esperar que cálculos de Campo Médio em uma dimensão ($d=1$), forneçam resultados completamente incorretos comparados com os resultados de simulações numéricas. Por isso, torna-se extremamente interessante desenvolver algoritmos eficientes que sejam capazes de computar propriedades de sistemas críticos unidimensionais estocásticos.

4.2.1 Aproximação Configuracional da Equação Mestra

Escrevendo a equação mestra na sua forma diferencial em tempo contínuo, temos que

$$\partial_t |P(\beta, t)\rangle = \sum_{\beta'} w_{(\beta' \rightarrow \beta)} |P(\beta', t)\rangle - w_{(\beta \rightarrow \beta')} |P(\beta, t)\rangle \quad (4.6)$$

onde β, β' representam duas configurações distintas do espaço de fase do problema. Reescrevendo a equação (4.6) na sua forma vetorial, teremos que

$$\partial_t |P\rangle = -H|P\rangle, \quad (4.7)$$

onde H é um operador matricial, responsável por conectar configurações distintas do espaço vetorial. É importante mencionarmos também que, em geral, este operador não é hermitiano, ou seja, possui autovalores complexos. Tais autovalores correspondem às oscilações existentes no problema (parte imaginária), enquanto que o decaimento exponencial está contido na parte real desses autovalores.

Para uma rede unidimensional formada por L sítios, podemos representar uma dada configuração β utilizando a seguinte forma matricial

$$|\{\beta\}\rangle = |\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_L\rangle. \quad (4.8)$$

Numa base ortonormal temos que $\langle \{\beta'\} | \{\beta\} \rangle = \delta_{\beta', \beta}$. Isto nos sugere escrever $|P\rangle$ como

$$|P\rangle = \sum_{\{\beta\}} P(\{\beta\}, t) |\{\beta\}\rangle, \quad (4.9)$$

se ainda denotarmos o estado inicial do sistema por $|P_o\rangle = \sum_{\{\beta\}} P_o(\{\beta\}) |\{\beta\}\rangle$, a solução formal do problema é

$$|P\rangle = e^{Ht} |P_o\rangle. \quad (4.10)$$

Devido à conservação de probabilidade, tem-se que $\langle 0 | H = 0$, onde $\langle 0 | = \sum_{\{\beta\}} \langle \{\beta\} |$. Com isso qualquer observável pode ser calculado da seguinte forma

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_t &= \sum_{\{\beta\}} X(\{\beta\}) P(\{\beta\}, t) |\{\beta\}\rangle = \\ &= \langle 0 | X | P \rangle = \langle 0 | X e^{Ht} | P_o \rangle. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Utilizamos a seguinte aproximação para as componentes do vetor probabilidade $|P\rangle$ (veja (51))

$$P_M(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_M, t) \approx \frac{P_{M-1}(\beta_2, \beta_3, \dots, \beta_M, t) P_{M-1}(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{M-1}, t)}{P_{M-2}(\beta_2, \dots, \beta_{M-1}, t)}, \quad (4.12)$$

onde α , corresponde a todos os valores possíveis de β .

Nesta aproximação, estamos impondo que o conhecimento da distribuição de probabilidade de um sistema com simetria translacional formado por $M + 1$ sítios, pode ser computado mediante o conhecimento da distribuição de probabilidade de M sítios. Verificamos que este tipo de aproximação é um caso particular dos diferentes tipos de aproximações discutido em (51), e que por sinal, é a melhor proposta de aproximação no conjunto das possíveis aproximações esquematizadas em (51).

Trabalhando apenas com sistemas com invariância espacial, podemos ainda impor (outra aproximação) homogeneidade no conjunto ordenado dos M sítios da rede, e desta forma, computar a evolução temporal para as componentes do vetor probabilidades, que juntas formam um conjunto de equações diferenciais não lineares (resultantes destas aproximações), para um dado modelo em questão. Com as soluções deste conjunto, podemos calcular valores esperados para o sistema *truncado*.

4.3 Modelos K

4.3.1 Introdução

Os modelos K , podem ser vistos como uma primeira tentativa de generalizar o modelo Ordinário de processos de contato apresentado anteriormente. Para nós, K representa um número natural ($K = 0, 1, 2, \dots, N$), i.e, o número de sítios ativos na vizinhança da vizinhança de um sítio vazio em evolução. Ou seja, para que um sítio vazio possa ser preenchido nesse novo modelo, é necessário que não apenas um sítio vizinho esteja preenchido, mas também, a soma dos sítios vizinhos deste sítio vizinho, seja igual a K . Em outras palavras, a nova taxa de transição

desses novos modelos é definida pela função

$$w_i(\eta) = \gamma\eta_i + \frac{1}{2}s(1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} \Theta[\sum_{\delta'} \eta_{(i+\delta)+\delta'} - K], \quad (4.13)$$

onde Θ é a função que determina se a vizinhança de $i + \delta$, a soma dos sítios ativos, deve ser maior ou igual a K . O modelo padrão de processo de contato é recuperado fazendo $K = 0$ (20).

4.3.2 Modelos K com Difusão

No modelo com difusão, a partícula localizada num sítio i pode trocar de posição com o vazio no sítio $i + 1$ ou no sítio $i - 1$, ou ainda, o próprio sítio vazio pode trocar de posição com uma partícula em sua vizinhança. A taxa de transição para o modelo K com difusão é dado por

$$w_i(\eta) = \gamma\eta_i + \frac{1}{2}s(1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} \Theta[\sum_{\delta'} \eta_{(i+\delta)+\delta'} - K] + \frac{D}{2}\eta_i \sum_{\delta} \eta_{i+\delta}^*, \quad (4.14)$$

Onde D é o coeficiente de difusão e s, γ e D são tais que $s + \gamma + D = 1$. Aqui, $\eta_i^* = 1 - \eta_i$

4.3.3 Modelo $K = 0$ com Difusão

Como já dissemos acima, o modelo $K = 0$ com $D = 0$, recupera o modelo A de processos de contado. Em uma dimensão, a taxa de transição é dada por

$$w_i(\eta) = \gamma\eta_i + \frac{1}{2}s(1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} \Theta[\sum_{\delta'} \eta_{(i+\delta)+\delta'}] + \frac{D}{2}\eta_i \sum_{\delta} \eta_{i+\delta}^*, \quad (4.15)$$

De forma didática, iremos nesta seção e nas seguintes aplicar a teoria de Campo Médio em Cluster nos modelos $K = 0, 1$ e 2 em uma dimensão ($d = 1$), e comparar com simulações de

Monte Carlo. Nossa proposta neste momento, é fazer com que o leitor perceba, de forma clara, a construção das equações de evolução para as componentes do vetor probabilidade associado a equação mestra do problema estocástico. Com essa prática, não só mostraremos a dificuldade inerente do processo computacional, mas sim, os grandes problemas que surgem na tentativa de utilizar a teoria do Campo Médio em Cluster para resolver problemas onde existem transições de fase longe do equilíbrio.

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 1 (L=1)

Para um único sítio (Cluster 1) teremos que computar 2^1 equações de evolução para as probabilidades. Com o objetivo de não carregar a notação, vamos omitir a variável tempo t das funções de probabilidade. Desta forma, temos a seguinte equação diferencial não linear

$$\frac{dP(1)}{dt} = -\gamma P(1) + \frac{(1-\gamma)}{2}P(01) + \frac{(1-\gamma)}{2}P(10). \quad (4.16)$$

Uma vez que $P(01) = P(10)$, e além disso, se fizermos a aproximação $P(xy) = P(x)P(y)$ e usarmos o fato que $P(0) = 1 - P(1)$, ao invés de escrevermos duas equações (para $P(1)$ e $P(0)$), teremos somente que computar a seguinte equação para calcular a densidade de partículas média no estado estacionário, pois, $P(1) = \rho$.

$$\frac{d\rho}{dt} = -\gamma\rho + (1-\gamma)\rho(1-\rho). \quad (4.17)$$

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 2 (L=2)

Para dois sítios (Cluster 2) teremos que computar 2^2 equações de evolução para as probabilidades. Entretanto, se usarmos a simetria $P(01) = P(10)$, teremos apenas o seguinte conjunto

de equações

$$\begin{aligned}
\frac{2dP(11)}{dt} &= -2\gamma P(11) + sP(10) + s\frac{P(10)^2}{P(0)} + D\frac{P(10)^2}{2P(0)} \\
&\quad - D\frac{P(10)P(11)}{2P(1)} + D\frac{P(10)^2}{2P(0)} - D\frac{P(11)P(10)}{2P(1)} \\
\frac{2dP(10)}{dt} &= -\gamma(P(10) + P(11)) + \frac{s}{2}\frac{P(10)P(00)}{P(0)} - \frac{s}{2}P(10) \\
&\quad - \frac{s}{2}\frac{P(10)^2}{P(0)} - D\frac{P(10)^2}{2P(1)} - D\frac{P(10)^2}{2P(0)} + D\frac{P(11)P(10)}{2P(1)} + D\frac{P(10)P(00)}{2P(0)}
\end{aligned} \tag{4.18}$$

$$\begin{aligned}
\frac{2dP(00)}{dt} &= -s\frac{P(10)P(00)}{P(0)} + 2\gamma P(10) - D\frac{P(00)P(10)}{2P(0)} + D\frac{P(10)^2}{2P(1)} \\
&\quad - D\frac{P(00)P(11)}{2P(0)} + D\frac{P(10)^2}{2P(1)}.
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Usando o fato de que $P(0) = P(01) + P(00) = P(10) + P(00)$, poderemos integrar este conjunto de equações para determinar a densidade $\rho = P(10) + P(11)$.

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 3 (L=3)

Para um conjunto de 3 sítios (Cluster 3) teremos que computar 2^3 equações de evolução para as probabilidades. Desta forma, temos o seguinte conjunto de equações

$$\begin{aligned}
3\frac{dP(111)}{dt} &= -3\gamma P(111) + s\left[P(101) + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{P(101)}{(P(101) + P(001))}\right)\right] + \\
&\quad s\left[\frac{1}{2}P(110)\left(1 + \frac{P(101)}{(P(101) + P(100))}\right)\right] - D\frac{P(111)P(110)}{2P(11)} \\
&\quad - D\frac{P(011)P(111)}{2P(11)} + D\frac{P(110)P(101)}{2P(10)} + D\frac{P(101)P(011)}{2P(01)}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

$$\begin{aligned}
3\frac{dP(110)}{dt} &= -2\gamma P(110) - s\frac{1}{2}P(110)\left[1 + \frac{P(101)}{(P(101) + P(100))}\right] + \\
&\quad \gamma P(111) + \frac{s}{2}P(100) + \frac{s}{2}P(010)\left[1 + \frac{P(101)}{(P(101) + P(001))}\right] \\
&\quad - DP(110) - D\frac{P(110)P(101)}{2P(10)} - D\frac{P(011)P(110)}{2P(11)} \\
&\quad + DP(101) + D\frac{P(111)P(110)}{2P(11)} + D\frac{P(101)P(010)}{2P(01)}
\end{aligned} \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(101)}{dt} = & -2\gamma P(101) - sP(101) + \gamma P(111) \\
& + \frac{1}{2}sP(100) \frac{P(001)}{(P(001) + P(000))} - \frac{1}{2}sP(001) \frac{P(100)}{(P(100) + P(000))} \\
& - 2DP(101) - D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} - D \frac{P(010)P(101)}{2P(10)} + DP(110) + DP(011) \\
& + D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)} + D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(100)}{dt} = & -\gamma P(100) - \frac{1}{2}sP(100) - \frac{s}{2}P(100) \frac{P(001)}{(P(001) + P(000))} \\
& + \frac{s}{2}P(000) \frac{P(100)}{(P(100) + P(000))} + \gamma(P(110) + P(101)) - DP(100) - D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)} \\
& - D \frac{P(010)P(100)}{2P(10)} + DP(010) + D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} + D \frac{P(100)P(000)}{2P(00)}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(010)}{dt} = & -\gamma P(010) - \frac{s}{2}P(010) \left[2 + \frac{P(101)}{(P(101) + P(001))} + \frac{P(101)}{(P(101) + P(100))} \right] \\
& + \gamma P(110) + \gamma P(011) - 2DP(010) - D \frac{P(010)P(101)}{2P(10)} - D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} \\
& + 2DP(100) + D \frac{P(011)P(110)}{2P(11)}
\end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(000)}{dt} = & -\frac{\gamma}{2}P(000) \left[\frac{P(001)}{(P(001) + P(000))} + \frac{P(100)}{(P(100) + P(000))} \right] \\
& + \gamma(P(100) + P(010) + P(001)) - D \frac{P(000)P(001)}{2P(00)} - D \frac{P(100)P(000)}{2P(00)} \\
& + D \frac{P(001)P(010)}{2P(01)} + D \frac{P(010)P(100)}{2P(10)}.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Não é necessário construirmos as equações para $P(001)$ e $P(011)$, pois devido a simetria de invariância translacional, temos que $P(001) = P(100)$ e $P(011) = P(110)$. Na figura 4.1 apresentamos os resultados de nossas simulações, bem como os resultados obtidos pela aproximação em Cluster com $D = 0$. Desenvolvemos um programa em fortran que gera e resolve as equações para um tamanho arbitrário de Cluster L . Repare que todas as soluções em Cluster preveem uma transição de fase contínua entre o estado ativo e o absorvente. Na figura 4.2 apresentamos os resultados obtidos de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $5 \leq L \leq 14$, com $D = 0$. Enquanto que na figura 4.3 apresentamos os resultados da densidade estacionária ρ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots, 0.9)$. Como veremos a seguir, o efeito da difusão leva à uma transição de

Figura 4.1. Densidade Estacionária ρ em função de γ . Comparação entre a simulação numérica e o método de Campo Médio em Cluster.

Figura 4.2. Dependência de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $D = 0$.

fase descontínua nos modelos $K = 1$ e $K = 2$.)

4.3.4 Modelo $K = 1$ com Difusão

Neste modelo, a condição de um sítio i vazio tornar-se preenchido, dependerá não só de seus vizinhos próximos $i + 1$ e $i - 1$, mas também, dos vizinhos desses vizinhos $i + 2$ e $i - 2$.

Em uma dimensão a taxa de transição é definida pela função

$$w_i(\eta) = \gamma\eta_i + \frac{1}{2}s(1 - \eta_i) \sum_{\delta} \eta_{i+\delta} \Theta[\sum_{\delta'} \eta_{(i+\delta)+\delta'} - 1] + \frac{D}{2}\eta_i \sum_{\delta} \eta_{i+\delta}^*, \quad (4.26)$$

Figura 4.3. Densidade estacionária ρ em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots, 0.9.)$

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 1 (L=1)

Para um único sítio (Cluster 1) teremos que computar 1 equação de evolução para a probabilidade $P(1)$ (análogo ao caso $K = 0$). Ou seja, temos a seguinte equação diferencial não linear

$$\frac{d\rho}{dt} = -\gamma\rho + (1 - \gamma)[1 - \rho]\rho^2. \quad (4.27)$$

Uma vez que $P(01) = P(10)$, $P(xy) = P(x)P(y)$ (Cluster $L = 1$), $P(0) = 1 - P(1)$ e $P(1) = \rho$.

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 2 (L=2)

Para dois sítios (Cluster 2) teremos que computar $2^2 - 1$ equações de evolução para as probabilidades. Ou seja,

$$\begin{aligned}
\frac{2dP(11)}{dt} &= -2\gamma P(11) + s\left[\frac{P(10)P(11)}{P(1)} + \frac{P(10)^2P(11)}{P(0)P(1)}\right] + D\frac{P(10)^2}{2P(0)} \\
&\quad - D\frac{P(10)P(11)}{2P(1)} + D\frac{P(10)^2}{2P(0)} - D\frac{P(11)P(10)}{2P(1)}, \\
\frac{2dP(10)}{dt} &= \gamma P(11) - \gamma P(10) - \frac{s}{2}\left[\frac{P(10)P(11)}{P(1)} - \frac{P(10)P(11)P(00)}{P(1)P(0)}\right] \\
&\quad - D\frac{P(10)^2}{2P(1)} - D\frac{P(10)^2}{2P(0)} + D\frac{P(11)P(10)}{2P(1)} + D\frac{P(10)P(00)}{2P(0)}, \\
\frac{2dP(00)}{dt} &= -s\left[\frac{P(10)P(00)P(11)}{P(0)}\right] + 2\gamma P(10) - D\frac{P(00)P(10)}{2P(0)} \\
&\quad + D\frac{P(10)^2}{2P(1)} - D\frac{P(00)P(11)}{2P(0)} + D\frac{P(10)^2}{2P(1)}.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Equações de Evolução de Probabilidade para Cluster 3 (L=3)

Como fizemos anteriormente para $K = 0$, estaremos computando as $2^3 - 2$ equações da evolução de probabilidades para este novo modelo.

$$\begin{aligned}
3\frac{dP(111)}{dt} &= -3\gamma P(111) + sP(110)\left[1 + \frac{P(101)}{P(10)} + \right. \\
&\quad \left. \frac{P(101)P(101)P(110)}{P(10)^2}\right] - D\frac{P(111)P(110)}{2P(11)} \\
&\quad - D\frac{P(011)P(111)}{2P(11)} + D\frac{P(110)P(101)}{2P(10)} + D\frac{P(101)P(011)}{2P(01)}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(110)}{dt} = & -2\gamma P(110) + \gamma P(111) - s \frac{1}{2} P(110) \left[1 + \frac{P(101)P(011)}{P(10)P(01)} \right] + \\
& \frac{s}{2} \frac{P(100)P(110)}{P(10)} + \frac{s}{2} \frac{P(010)P(101)P(110)}{P(01)P(10)} \\
& - DP(110) - D \frac{P(110)P(101)}{2P(10)} - D \frac{P(011)P(110)}{2P(11)} + DP(101) \\
& + D \frac{P(111)P(110)}{2P(11)} + D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)}, \tag{4.30}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(101)}{dt} = & -2\gamma P(101) + \gamma \frac{P(101)P(110)}{P(10)} + s \frac{P(100)P(100)P(110)}{P(10)P(00)} \\
& - 2DP(101) - D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} - D \frac{P(010)P(101)}{2P(10)} + DP(110) + DP(011) \\
& + D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)} + D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)}, \tag{4.31}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(100)}{dt} = & -\gamma P(100) + \gamma(P(100) + P(101)) - \frac{s}{2} \frac{P(100)P(110)}{P(10)} - \\
& \frac{s}{2} \frac{P(100)P(100)P(110)}{P(00)P(10)} + \frac{s}{2} \frac{P(000)P(100)P(110)}{P(00)P(10)} \\
& - DP(100) - D \frac{P(100)P(001)}{2P(00)} - D \frac{P(010)P(100)}{2P(10)} + DP(010) \\
& + D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} + D \frac{P(100)P(000)}{2P(00)}, \tag{4.32}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(010)}{dt} = & -\gamma P(010) + 2\gamma P(110) - s \frac{P(010)P(101)P(110)}{P(10)P(10)} \\
& - 2DP(010) - D \frac{P(010)P(101)}{2P(10)} - D \frac{P(101)P(010)}{2P(01)} \\
& + 2DP(100) + D \frac{P(011)P(110)}{2P(11)}, \tag{4.33}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3 \frac{dP(000)}{dt} = & \gamma(2P(100) + P(010)) - s \frac{P(000)P(110)P(100)}{P(10)P(00)} \\
& - D \frac{P(000)P(001)}{2P(00)} - D \frac{P(100)P(000)}{2P(00)} \\
& + D \frac{P(001)P(010)}{2P(01)} + D \frac{P(010)P(100)}{2P(10)}, \tag{4.34}
\end{aligned}$$

com

Modelo K=1

Figura 4.4. Densidade Estacionária ρ em função de γ . Comparação entre a simulação numérica e o método de Campo Médio em Cluster.

$$P(10) = P(101) + P(100),$$

$$P(01) = P(001) + P(101),$$

$$P(00) = P(001) + P(000). \quad (4.35)$$

Na figura 4.4 apresentamos os resultados de nossas simulações, bem como, os resultados obtidos pela aproximação em Cluster com $D = 0$. Desenvolvemos um programa em fortran que gera e resolve as equações para um tamanho arbitrário de Cluster L .

Na figura 4.5 apresentamos os resultados obtidos de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $5 \leq L \leq 14$, com $D = 0$. Enquanto que na figura 4.6 apresentamos os resultados da densidade estacionária ρ para $L = 6$ e $D = (0, 0.1, \dots, 0.9)$. Repare agora que neste modelo, o efeito da difusão indica uma transição de fase descontínua, ou seja, se a teoria de Campo

Figura 4.5. Dependência de γ_c em função do tamanho do Cluster L para $D = 0$.

Médio estiver correta, deve haver um ponto tricrítico nesse modelo. Entretanto, como veremos no modelo $K = 2$, a teoria de Cluster também prevê uma transição descontínua, porém quando $L \rightarrow \infty$ a probabilidade de decaimento γ_t do ponto tricrítico assume um valor negativo (não físico). Por esse motivo, a teoria de Campo Médio em Cluster não pode ser usada como um forte argumento para indicar a existência de uma transição dessa natureza.

Por hora, iremos abrir mão de fazer um estudo mais detalhado do modelo $K = 1$, para nos concentrar apenas no estudo do modelo $K = 2$, pois como veremos adiante, os resultados da literatura sobre este modelo são conflitantes com relação a existência de um ponto tricrítico, o que justifica uma investigação mais minuciosa.

Figura 4.6. Densidade Estacionária ρ em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots, 0.9)$

4.3.5 Modelo $K = 2$ com Difusão: O Modelo de Criação por Tripleto

A ocupação de uma população residente por uma pequena colônia de replicadores mutantes ou, de forma mais simples, o assentamento de uma colônia de replicadores geradores no vácuo, é uma questão problemática na evolução pré-biótica (52), à qual, mostrou-se recentemente exibir uma transição de fase longe do equilíbrio (18). A caracterização de diversos tipos de replicadores de acordo com as condições necessárias para as suas replicações (19), assemelha-se a uma variedade de sistemas dinâmicos irreversíveis que são similares a física estatística de comunidades (50), (20), (53). De particular importância, para o cenário pré-biótico dos processos de invasão, que podem ser descritos pelo expoente crítico dinâmico e estático associado à probabilidade de invasão (54).

A caracterização das transições de fase descontínuas é sem dúvida um grande problema da mecânica estatística longe do equilíbrio de modelos na rede. Apesar das poderosas técnicas,

tais como análise por espalhamento (54) e “ensemble” conservativo (55), esta caracterização apresenta reais dificuldades para determinar os valores corretos dos expoentes críticos, devido ao enorme tempo necessário para se alcançar o equilíbrio (56). Devido a esse motivo, não é realmente claro se a dependência temporal da probabilidade de sobrevivência é uma lei de potência com expoentes dados pelo campo médio (57), (21) ou uma exponencial (58). Os expoentes corretos são obtidos pela técnica de “ensemble” conservativo, ao passo que a técnica de análise por espalhamento mostra-se inapropriada para transições de fase descontínuas.

Para tentar resolver esta dificuldade, usaremos a abordagem analítico da teoria de n Cluster de Campo Médio (59), (51), (60–62) para estudar um modelo que apresenta uma transição de fase descontínua longe do equilíbrio, conhecido na literatura (63) como modelo unidimensional de criação por trincas (Dikman e Tomé). Neste modelo, uma condição necessária para a criação de uma partícula em um sítio é dado pela existência de três partículas ocupando posições subjacentes vizinhas ao sítio vazio ($K=2$). Um outro ingrediente deste modelo é o decaimento de partículas e a difusão com sítios vizinhos. O modelo exhibe um único estado absorvente, chamado de vácuo, caracterizado pela ausência de partículas. O rico comportamento crítico do modelo triplete de criação reside na competição entre os processos de criação e difusão. Por outro lado, as simulações de Monte Carlo, na ausência de difusão, indicam uma transição de fase contínua para o estado absorvente. Transição esta, caracterizada pela classe de universalidade da Percolação Direcionada, veja [(50), (20), (53) para uma revisão das classes de universalidades de sistemas que apresentam transições de fase longe do equilíbrio]. Todavia, para valores grandes da taxa de difusão, existem fortes evidências que detectam uma transição de fase descontínua longe do equilíbrio (21), (63), (64), (65). Estas conclusões, entretanto, estão em conflitos com os argumentos que descartam a possibilidades de transições de fase descontínuas em certas classes de modelos unidimensionais (56).

Como veremos adiante, a teoria de Cluster de Campo Médio não mostra-se satisfatória para resolver este maravilhoso problema. Todavia, mostraremos que o diagrama de fase, está em boa concordância com as Simulações Numéricas. Partiremos então, para uma definição mais precisa do modelo, e subsequentemente, iremos apresentar os resultados pertinentes de nossas

análises.

Definição do Modelo de Criação por Tripleto

A ocupação de uma cadeia de L -sítios pode ser descrita em termos de variáveis binárias de ocupação $\eta_i = 1, 0$ para $i = 1, \dots, L$ com a convenção de que η_i assumo o valor 1 se o sítio contiver uma partícula ou η_i assumo o valor 0, caso esteja vazio. As regras de evolução são as mesmas de (63).

Um sítio i é escolhido aleatoriamente entre os L sítios da cadeia. Suponha que $\eta_i = 1$. Então existem duas possibilidades de ações: a partícula pode decair com probabilidade γ , então o sítio i torna-se vazio, ou a partícula move-se ao próximo sítio com probabilidade D . Neste último caso, as variáveis η_i e η_{i+1} ou η_i e η_{i-1} são trocadas de valor (processo de difusão). Ambos os vizinhos de η_i são escolhidos com igual probabilidade, ou seja, a probabilidade que a partícula do sítio i mova-se para o sítio $i + 1$ é $D/2$. Obviamente, o sítio i permanece inalterado com probabilidade $s - D$.

Suponha agora que o sítio i está vazio, $\eta_i = 0$. Com igual probabilidade é escolhido a vizinhança do sítio i que será analisado, ou seja, se por exemplo o lado esquerdo do sítio i for escolhido. Então existirão duas possibilidades: a ocupação do sítio i com probabilidade s , uma vez que os sítios η_{i+1}, η_{i+2} e η_{i+3} estejam ocupados (esse é o motivo do nome do modelo) ou uma difusão da partícula do sítio i com o vazio do sítio $i + 1$. O procedimento similar é aplicado ao lado direito do sítio i , caso seja escolhido na evolução da dinâmica.

Esta descrição do modelo de Tripleto por Criação é completamente equivalente a formulação original de Dickman e Tomé (63), e é mais conveniente para tratar este modelo de forma analítica usando o formalismo da equação Mestra.

Aproximação de Cluster 1 (L=1)

$$\frac{dP(1)}{dt} = -\gamma P(1) + s[1 - P(1)]P(1)^3. \quad (4.36)$$

Uma vez que $\rho = P(1)$, temos para o estado estacionário

$$s(1 - \rho)\rho^3 - \gamma\rho = 0. \quad (4.37)$$

As soluções não triviais no estado estacionário são dadas pelas raízes da equação cúbica $\rho^2(1 - \rho) = \frac{\gamma}{s}$. No regime físico, sempre existirá uma raiz negativa. As outras duas raízes positivas desaparecem quando elas coincidem, e neste ponto (ponto espinoidal) surge um $\Delta\rho$ entre a fase ativa e a fase absorvente, neste caso $\Delta\rho = 2/3$. (veja a figura 4.7). Neste ponto temos que $\gamma_c = 4(1 - D)/31$.

Aproximação de Cluster 2 (L=2)

No caso $L = 2$ temos as seguintes equações para a evolução de probabilidade

$$\begin{aligned} \frac{2dP(11)}{dt} = & -2\gamma P(11) + sP(10) \left[\frac{P(11)^2}{P(1)^2} + \frac{P(01)P(11)^2}{P(0)P(1)^2} \right] + D \frac{P(10)^2}{2P(0)} - D \frac{P(10)P(11)}{2P(1)} \\ & + D \frac{P(10)^2}{2P(0)} - D \frac{P(11)P(10)}{2P(1)} \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{2dP(10)}{dt} = & -\gamma P(10) + \gamma P(11) + \frac{s}{2} \frac{P(10)P(00)P(11)^2}{P(0)P(1)^2} - \\ & \frac{s}{2} P(10) \left[\frac{P(11)^2}{P(1)^2} \frac{P(10)P(11)^2}{P(0)P(1)^2} \right] \\ & - D \frac{P(10)^2}{2P(1)} - D \frac{P(10)^2}{2P(0)} + D \frac{P(11)P(10)}{2P(1)} + D \frac{P(10)P(00)}{2P(0)} \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{2dP(00)}{dt} = & -s \left[\frac{P(10)P(00)P(11)^2}{P(0)P(1)^2} \right] + 2\gamma P(10) - D \frac{P(00)P(10)}{2P(0)} + D \frac{P(10)^2}{2P(1)} \\ & - D \frac{P(00)P(11)}{2P(0)} + D \frac{P(10)^2}{2P(1)} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Uma vez que $P(01) = P(10)$, e $P(0) = P(01) + P(00) = P(10) + P(00)$. Estas ainda podem ser reduzidas a duas equações apenas, pois usando o fato de que $\rho = P(11) + P(10)$ e $\phi = P(11)$, este conjunto de equações pode ser reescrito como

$$s(\rho - \phi) \frac{\phi^2}{\rho^2} - \gamma\rho = 0 \quad (4.41)$$

$$-2\gamma\phi + s(\rho - \phi) \frac{\phi^2}{\rho^2} \left[1 + \frac{\rho - \phi}{1 - \rho} \right] - D(\phi - \rho^2) \frac{\rho - \phi}{\rho(1 - \rho)} = 0 \quad (4.42)$$

Em contraste com a aproximação de Cluster 1, agora o parâmetro de difusão D é introduzido de uma forma não trivial na equação mestra. Introduzindo a variável reduzida $\tilde{\phi} = \phi/\rho$ nós podemos resolver este conjunto de equações de forma análoga como fizemos na aproximação para $L = 1$. Na figura 4.8 mostramos as soluções do estado estacionário para a densidade nesta aproximação.

Figura 4.8. Soluções para densidade estacionária na aproximação de $L = 2$ para $D = (0, 0.1, \dots, 0.9.)$

Aproximação de Cluster L

Para computarmos as equações de evolução das componentes do vetor probabilidade de uma determinada aproximação (L) de Cluster, elaboramos um programa em fortran, capaz de construir e integrar as equações de evolução das componentes da probabilidade, para qualquer valor de L . Evidentemente, por razões de limitação numérica, $L \leq 20$. Na ausência de difusão, $D = 0$, ambas as aproximações de Cluster 1, 2 e 3, falham na predição de uma transição de fase contínua entre a fase ativa e o estado absorvente. Entretanto, quando aumentamos o valor de L observamos uma concordância qualitativa do espaço de fase. Na figura 4.9 mostramos os resultados das aproximações da densidade no estado estacionário em função de γ para $L = 1, 2, \dots, 10$. Repare que para $L \geq 4$ a transição de fase é contínua. O esquema de aproximação converge razoavelmente com os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo. Na realidade, perto do ponto crítico (valores pequenos de ρ), a densidade de campo médio converge a zero na forma $\rho \sim [\gamma - \gamma_c(L)]$, enquanto que os resultados do Monte Carlo indicam que $\rho \sim [\gamma - \gamma_c]^{0.2}$ (50), (20), (53). Mais problemático ainda, é o fato de que para $L \geq 11$, γ_c começa a crescer, e aparentemente tende ao γ_c calculado pela análise de espalhamento (veja figura 4.10). Uma questão importante, é o efeito da difusão na teoria de Cluster aplicada ao modelo de Criação por Triplete. Para valores de $D \geq 0$ com $L \geq 4$ observamos a existência de um ponto tricrítico, já observados por outros autores na literatura (21), (63), ou seja, o ponto no espaço (γ, D) onde a densidade de partículas no estado estacionário torna-se descontínua. Na figura 4.11 mostramos o comportamento da densidade no estado estacionário para diversos valores de D com $L = 6$. Repare a existência do ponto tricrítico, dado pelos pontos $D_t = 0.2602 \pm 10^{-5}$ e $\gamma_t = 0.0544 \pm 10^{-5}$.

Finalmente, nas figuras 4.12 e 4.13 nós plotamos a estimativa do ponto tricrítico como função da ordem L da aproximação de Cluster L . Considerando nossas experiências prévias com o ponto crítico apresentadas na figura 4.7, o ponto tricrítico é fitado pelas curvas $D_t = D_t^\infty + a_D L^{-1/\nu_\perp}$ e $\gamma_t = \gamma_t^\infty + a_\gamma L^{-1/\nu_\perp}$, onde $\nu_\perp = 1.101$ é o expoente crítico do comprimento

de correlação (50). A estimativa não física para γ_l^∞ implica que no limite de $L \rightarrow \infty$ existe uma transição contínua entre a fase absorvente e a fase ativa para qualquer valor do coeficiente D .

Crítica à Teoria de Campo Médio em Cluster

Em virtude do que foi apresentado nesta Tese, juntamente com outros resultados da literatura sobre modelos descritos por teoria de Campo Médio em Cluster, pudemos perceber com clareza em quais situações essa teoria pode ser útil no entendimento de fenômenos onde os efeitos espaciais são relevantes. Desta forma, de uma maneira geral, podemos conjecturar que:

1- A dimensão espacial, bem como, as dimensões críticas inferiores e superiores do problema, são fundamentais para que os resultados do Campo Médio estejam de acordo com os dados das Simulações Numéricas: quanto menor for a dimensão, maior será o tamanho do Cluster L a ser considerado.

2- As quantidades conservadas no problema: quanto mais cargas conservadas, menor será o valor de L do Cluster da teoria.

3- A natureza da evolução temporal: As dinâmicas síncronas apresentam menos flutuações estocásticas do que as dinâmicas assíncronas, e desta forma, são mais robustas a teorias de Campo Médio em Cluster.

4- O anulamento das derivadas temporais das funções de correlações: Sempre admitimos que as derivadas temporais das funções de correlação, produzidas pela Teoria de Cluster, fossem nulas no estado estacionário. Entretanto isso nem sempre é verdade, pois quando a variação da densidade ρ do sistema no estado estacionário é nula, não necessariamente outras quantidades (funções de correlação de ordem mais alta) são nulas.

5- Modelos que não possuem cargas conservadas e(ou) apresentam pontos críticos: As teorias de Campo Médio em Cluster divergem assintoticamente dos valores no limite Termodinâmico.

Figura 4.9. Soluções para densidade estacionária em função de γ para $D = 0$ para diversos valores do Cluster L .

Através de algumas reflexões, entendemos que os motivos pelo qual a teoria de Cluster de Campo Médio diverge nos modelos que apresentam criticalidade são decorrentes dos seguintes ingredientes:

a-) Os termos não lineares introduzidos na teoria não são adequados para capturar as flutuações do modelo ao redor do ponto crítico, levando a série divergir quando $L \rightarrow \infty$.

b-) Os esquemas de aproximação das componentes das probabilidades (50) não simulam com eficiência os efeitos da auto-similaridade, característicos do ponto crítico.

Figura 4.11. Dependência da densidade estacionária em função de γ para $L = 6$ com $D = (0, 0.1, \dots, 0.9)$

Figura 4.13. Dependência de γ no ponto tricrítico em função do tamanho do Cluster L .

5 *Conclusão*

Neste trabalho apresentamos três modelos para processos estocásticos unidimensionais. Através do ansatz do Produto Matricial (MPA), nós obtemos a solução exata de um novo modelo que descreve a difusão de partículas (tipo 1) numa cadeia unidimensional sob o efeito de impurezas, ou seja, sob o efeito de outra classe de partículas (tipo 2) que difundiam na rede em virtude dos choques com as partículas do tipo 1. Mediante a análise das equações do Bethe ansatz (equações que fixam os espectro do operador de evolução), pudemos computar o expoente crítico dinâmico z desse novo modelo. Constatamos que em $\Delta = 0$ (apêndice A) o expoente $z = 3$, enquanto que em $\Delta = 1$ (região estocástica) $z = \frac{5}{2}$, mostrando que o tempo de relaxação do sistema sob o efeito das impurezas é maior em comparação com o sistema sem impurezas ($z = \frac{3}{2}$).

No segundo problema abordado nesta tese, nós interpretamos o modelo de 6-vértices bidimensional, definido na matriz de transferência diagonal-diagonal, como um modelo de tráfego de dinâmica síncrona unidimensional. Através da teoria de Campo Médio em Cluster ($L = 1$), computamos a densidades de flechas no estado estacionário e a corrente J do sistema de forma exata. Percebemos que os resultados obtidos pela teoria de Campo Médio descreve com fidelidade os resultados obtidos pelas simulações de Monte Carlo. Entretanto, quando estudamos as mesmas reações na dinâmica assíncrona, notamos que a expressão para a corrente não recuperava os dados das simulações (apenas de forma qualitativa). Tal discrepância é perfeitamente justificável pela existência da transição do regime de circulação livre para o sistema congestionado que a dinâmica assíncrona produz.

No terceiro e último problema exposto nesta tese, nós examinamos alguns modelos de

processos de contato com difusão (modelos K com difusão). Em particular, nos fixamos na análise do modelo de Criação por Trincas ($K=2$) através da teoria de Campo Médio em Cluster. Diferentemente dos outros modelos apresentados nessa tese, o modelo de Criação por Trincas possui um estado absorvente caracterizado pela densidade total nula. Devido à esse estado, o sistema sem difusão ($D = 0$) apresenta uma transição de fase contínua entre o estado ativo e o estado absorvente, fato este bem aceito em toda a literatura. Entretanto, quando $D \neq 0$, o cenário muda de figura. Pois na literatura (21), (63), (64), (65) existem resultados a favor de uma transição descontínua (ponto tricrítico) e resultados que descartam a possibilidades de transições de fase descontínuas em certas classes de modelos unidimensionais (56).

Através da teoria de Campo Médio em Cluster, verificamos a existência do ponto tricrítico para um cluster finito (L). Contudo, os resultados das nossas extrapolações para Cluster infinito ($L \rightarrow \infty$) são completamente insatisfatórios, pois a probabilidade de decaimento do ponto tricrítico é menor que zero ($\gamma_t < 0$). Desta maneira, este modelo ainda necessita de uma investigação fundamentada em outros métodos utilizados e mencionados até aqui. Talvez uma análise através da diagonalização numérica do operador de evolução, para um conjunto de redes finitas, tornar-se-á promissor na resolução de tal impasse.

Com base na experiência desse doutorado, pretendemos continuar investigando outros processos estocásticos unidimensionais. A princípio, estudaremos o primeiro problema apresentado nesta tese como um modelo de tráfego. Pretendemos também examinar o problema dos motores moleculares utilizando o MPA, e para dar continuidade ao problema dos modelos K (principalmente para $K = 2$), tentaremos diagonalizar o operador de evolução estocástico via técnica de DMRG. E assim, fornecer uma resposta cabal a questão da existência de um ponto tricrítico em uma dimensão.

Referências

- 1 ALCARAZ, F. C.; LAZO, M. J. The Bethe ansatz as a matrix product ansatz. *Journal Physics A*, v.37, n. 1, p. L1–L7, 2004.
- 2 SCHULTZ, G. M. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. San Diego: Academic Press, 2001.
- 3 BLYTHE, R. A.; EVANS, M. R. Nonequilibrium steady states of matrix-product form: a solver's guide. *Journal Physics A*, v.40, n. 46, p. R333–R441, 2007.
- 4 CARLON, E.; HENKEL, M.; SCHOLLWOCK, U. Density matrix renormalization group and reaction-diffusion processes. *European Physical Journal B*, v.12, n. 1, p. 99–114, 1999.
- 5 ESSAM, J. W. et al. Analysis of extended series for bond percolation on the directed square lattice. *Physical Review B*, v.33, n. 3, p. 1982–1986, 1986.
- 6 DICKMAN, R.; JENSEN, I. Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models. *Physical Review Letters*, v.67, n. 17, p. 2391–2394, 1991.
- 7 WIJLAND, F. V. Field theory for reaction-diffusion processes with hard-core particles. *Physical Review E*, v. 63, n. 2, p. 022101/1–022101/4, 2001.
- 8 SCHADSCHNEIDER, A.; SCHRECKENBERG, M. Cellular-automaton models and traffic flow. *Journal Physics A*, v.26, n. 15, p. L679–L683, 1993.
- 9 SCHADSCHNEIDER, A. The Nagel-Schreckenberg model revisited. *European Physical Journal B*, v.10, n. 3, p. 573–582, 1999.
- 10 WOLF, D. E.; SCHRECKENBERG, M.; BACHEM, A. *Traffic and Granular Flow*. Singapore: World Scientific, 1996.

- 11 WOLF, D. E.; SCHRECKENBERG, M.; BACHEM, A. *Traffic and Granular Flow*. Singapore: Springer, 1998.
- 12 HERMAN, R.; GARDELS, K. vehicular traffic flow. *Scientific American*, v.209, n. 6, p. 35, 1963.
- 13 GAZIS, D. C. Mathematical theory of automobile traffic . *Science*, v.157, n. 3786, p. 273, 1967.
- 14 CHOWDHURY, D. et al. *Traffic phenomena in biology: from molecular motors to organisms*. Berlin: Springer-Verlag Berlin, 2007.
- 15 CSABAI, I. 1/F Noise in computer network traffic. *Journal Physics A*, v. 27, n. 12, p. L417–L421, 1994.
- 16 TAKAYASU, M. et al. Critical behaviors and 1/f noise in information traffic. *Physica A*, v. 233, n. 3-4, p. 824–834, 1996.
- 17 MEAKIN, P. *Fractal, scaling and growth far from equilibrium*. Melbourne: Cambridge University Press, 1998.
- 18 FERREIRA, C. P.; FONTANARI, J. F. Nonequilibrium phase transitions in a model for the origin of life. *Physical Review E* , v. 65, n. 2, p. 021902/1–021902/10, 2002.
- 19 MICHOD, R. E. Population biology of the 1st replicators - on the origin of the genotype, phenotype and organism. *American Zoologist*, v. 23, n. 1, p. 5–14 , 1983.
- 20 HINRICHSSEN, H. Non-equilibrium critical phenomena and phase transition into absorbing states. *Advances in Physics*, v.49, n. 7, p. 815–958, 2000.
- 21 CARDOZO, G. O.; FONTANARI, J. F. Revisiting the nonequilibrium phase transition of the triplet-creation model. *European Physical Journal B*, v. 51, n. 4, p. 555–561, 2006.
- 22 GWA, L. H.; SPOHN, H.; GWA, G. W. Bethe solution for the dynamic-scaling exponent of the noisy burgers-equation. *Physical Review A* , v.46, n. 1, p. 844–854, 1992.

- 23 GOLINELLI, O.; MALLICK, K. Connected operators for the totally asymmetric exclusion process. *Journal Physics A* , v.40, n. 44, p. 13231–13236 , 2007.
- 24 ALCARAZ, F. C.; BARIEV, R. Z. Exact solution of the asymmetric exclusion model with particles of arbitrary size. *Physical Review E*, v.60, n. 1, p. 79–88, 1999.
- 25 PRIGOGINE, I.; HERMAN, R. *Kinetic theory of vehicular traffic*. New York: American Elsevier, 1971.
- 26 MACDONALD, J. T. et al. Protein Synthesis . *Biopolymeris*, v. 7, n. 3, p. 707–710, 1969.
- 27 JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Physics of the granular state. *Science*, v. 255, n. 5051, p. 1523–1531, 1992.
- 28 O’LOAN, O. J. et al. Jamming transition in a homogeneous one-dimensional system: The bus route model. *Physical Review E* , v. 58, n. 2, p. 1404–1418, 1998.
- 29 VANDEWALLE, N. *Traffic and Granular Flow*. Singapore: World Scientific, 1996. p. 81.
- 30 OHIRA, T.; SAWATARI, R. Phase transition in a computer network traffic model. *Physical Review E* , v. 58, n. 1, p. 193–195 , Jul 1998.
- 31 HUANG, H. *Statistical Mechanics*. New York: Wiley, 1987.
- 32 GOLDSTEIN, S.; LIGHTHILL, M. J.; CRAGGS, J. W. On the hodograph transformation for high-speed flow .1. a flow without circulation. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, v. 1, n. 3, p. 344–357, 1948.
- 33 PRIGOGINE, I.; ANDREWS, F. C. A boltzmann-like approach for traffic flow. *Operations Research*, v. 8, n. 6, p. 789–797, 1960.
- 34 PAVERI-FONTANA, S. L. Kinetic Theory for Veicular Traffic. *Transportation Research*, v. 9, n. 4, p. 225–235, 1975.

- 35 LEHMANN, H. Distribution function properties and the fundamental diagram in kinetic traffic flow theory. *Physical Review E*, v. 54, n. 6, p. 6058–6064, 1996.
- 36 WAGNER, C. et al. Second-order continuum traffic flow model. *Physical Review E*, v. 54, n. 5, p. 5073–5085, 1996.
- 37 WAGNER, C. A Navier-Stokes-like traffic model . *Physica A*, v. 245, n. 1-2, p. 124–138, 1997.
- 38 HELBING, D.; TREIBER, M. Gas-Kinetic-Based Traffic Model Explaining Observed Hysteretic Phase Transition. *Physical Review Letters* , v. 81, n. 14, p. 3042–3045, 1998.
- 39 NAGATANI, T. Phase transition and critical phenomenon in the power-law model of traffic. *Physica A* , v. 55, n. 3-4, p. 353–364, 1998.
- 40 ROTHERY, R. W. Traffic Flow Theory. *Transportation Research*, v. 32, n. 4, p. 183–195, 1998.
- 41 YUKAWA, S.; KIKUCHI, M. Coupled-map modeling of one-dimensional traffic flow. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 64, n. 1, p. 35–38, 1995.
- 42 YUKAWA, S.; KIKUCHI, M. *Traffic and Granular Flow*. Singapore: World Scientific, 1996. p. 319.
- 43 KRAUSS, S. et al. Continuous limit of the Nagel-Schreckenberg model. *Physical Review E*, v. 54, n. 4, p. 3707–3712, 1996.
- 44 KRAUSS, S. *Traffic and Granular Flow*. Singapore: World Scientific, 1996. p. 269.
- 45 STAUFFER, D. Computer-simulations of cellular automata. *Journal Physics A* , v. 24, n. 5, p. 909–927, 1991.
- 46 BRANKOV, J. G.; SCHRECKENBERG, M. A five-vertex model interpretation of one-dimensional traffic flow. *Journal Physics A* , v.31, n. 9, p. 2133–2140 , 1998.

- 47 BAXTER, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. San Diego: Academic Press, 1989.
- 48 FOULADVAND, M. E. Reaction-diffusion models describing a two-lane traffic flow. *Physical Review E*, v.62, n. 5, p. 5940–5947, 2000.
- 49 TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. de. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. São Paulo: EDUSP, 2001.
- 50 MARRO, J.; DICKMAN, R. *Nonequilibrium phase transitions in lattice models*. New York: Cambridge University Press, 1999.
- 51 BEN-AVRAHAM, D.; KOHLER, J. Mean-field (n,m)-cluster approximation for lattice models. *Physical Review A*, v.45, n. 12, p. 8358–8370, 1992.
- 52 SMITH, J. M.; SZATHMARY, E. *The major transitions in evolution*. New York: Oxford, 1995.
- 53 ODOR, G. Universality classes in nonequilibrium lattice systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 76, n. 3, p. 663–724, 2004.
- 54 GRASSBERGER, P.; DELATORRE, A. Reggeon field-theory (schlogl 1st model) on a lattice - monte-carlo calculations of critical behavior. *Annals of Physics*, v. 122, n. 3, p. 373–396, 1979.
- 55 TOME, T.; OLIVEIRA, M. J. de. Nonequilibrium model for the contact process in an ensemble of constant particle number. *Physical Review Letters*, v. 86, n. 25, p. 5643–5646, 2001.
- 56 HINRICHSEN, H. First-order transitions in fluctuating 1+1-dimensional nonequilibrium systems. *Journal of Statistical Physics*, v. 99, n. 5, p. 1365–1396, 2006.
- 57 CARDOZO, G. O.; FONTANARI, J. F. First-order transitions in a two-dimensional nonequilibrium replicator model. *Physica A*, v. 359, n. 1, p. 478–494, 1997.

- 58 MONETTI, R. A.; ALBANO, E. V. Revisiting the first-order irreversible phase transition of the Ziff-Gulari-Barshad model. *Journal Physics A*, v. 34, n. 6, p. 1103–1108, 2001.
- 59 KONNO, N.; KATORI, M. Applications of the cam based on a new decoupling procedure of correlation-functions in the one-dimensional contact process. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 59, n. 5, p. 1581–1592, 1990.
- 60 FERREIRA, A. L. C.; MENDIRATTA, S. K. Mean-field approximation with coherent anomaly method for a nonequilibrium model. *Journal Physics A*, v. 26, n. 4, p. L145–L150, 1993.
- 61 DICKMAN, R. n-site approximations and coherent-anomaly-method analysis for a stochastic sandpile. *Physical Review E*, v. 66, n. 3, p. 036122/1–036122/6, 2002.
- 62 SZOLNOKI, A. Dynamical mean-field approximation for a pair contact process with a particle source. *Physical Review E*, v. 66, n. 5, p. 057102/1–057102/4, 2002.
- 63 DICKMAN, R.; TOME, T. 1st-order phase-transition in a one-dimensional nonequilibrium model. *Physical Review A*, v. 44, n. 8, p. 4833–4838, 1991.
- 64 FIORE, C. E.; OLIVEIRA, M. J. de. Phase transition in conservative diffusive contact processes. *Physical Review E*, v. 70, n. 4, p. 046131/1–046131/6, 2004.
- 65 MAIA, D. S.; DICKMAN, R. Diffusive epidemic process: theory and simulation. *Journal Physics A*, v. 19, n. 1, p. 065143/1–065143/16, 2007.

APÊNDICE A – Gap $\Delta = 0$

Parar $\Delta = 0$ nós temos, para n_1 par,

$$\varepsilon_{n_1, n_2} = -2 \sum_{j=-\frac{n_1}{2}}^{-1} \cos(k_j) - 2 \sum_{j=1}^{\frac{n_1}{2}} \cos(k_j) \quad (\text{A.1})$$

$$= -2 \sum_{j=1}^{\frac{n_1}{2}} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L}j + \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) - 2 \sum_{j=1}^{\frac{n_1}{2}} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L}j - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right), \quad (\text{A.2})$$

onde $\alpha = 1(2)$ para n_1 par (ímpar). Para grandes valores de n_1 nós obtemos, através da expressão (2.37)

$$\varepsilon_{n_1, n_2} = -2 \int_1^{\frac{n_1}{2}} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L}t + \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) dt - 2 \int_1^{\frac{n_1}{2}} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L}t - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) dt \quad (\text{A.3})$$

$$-2 \cos\left(\frac{\alpha\pi\rho_1}{2} + \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) - 2 \cos\left(\frac{\alpha\pi\rho_1}{2} - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) \quad (\text{A.4})$$

$$-2 \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L} + \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) - 2 \cos\left(\frac{\alpha\pi}{L} - \frac{2\pi}{L^2(1-\rho_1)}m\right) - 4I_+ - 4I_-, \quad (\text{A.5})$$

onde

$$I_{\pm} = \frac{\alpha\pi}{24} \sin\left(\frac{\alpha\pi\rho_1}{2}\right) \frac{1}{L} - \frac{(\alpha\pi)^2}{24} \frac{1}{L^2} + O(\pm m/L^{-3}). \quad (\text{A.6})$$

A partir de (A.3) nós obtemos o gap espectral para $m \ll L$:

$$\Delta\varepsilon_{n_1, n_2} = \frac{4\pi m^2}{(1-\rho_1)^2} \sin\left(\frac{\pi\rho_1}{2}\right) \frac{1}{L^3} + O(L^{-4}). \quad (\text{A.7})$$