TÂNIA TOMÉ

IRREVERSIBILIDADE

Modelos de Rede com Dinâmicas Estocásticas

Tese Apresentada ao
Instituto de Física da
Universidade de São Paulo
para a obtenção do grau de
Livre-Docente

São Paulo
1996

SBI-IFUSP
305M810T2713

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
2713
SERVIÇO DE
BIBLIOTECA E
INFORMAÇÃO
ex. 2
INSTITUTO DE FÍSICA

Aos meus pais,

Maria Roza e *Wilson Tomé.*

O afeto que me proporcionaram e
o entusiasmo que sempre tiveram
frente ao conhecimento humano
influenciaram todos os meus trabalhos científicos.

Ao meu pequeno grande filho

Pedro Tomé

que me faz ver como a vida é boa.
Com ele e seu pai desfruto um viver muito agradável.

Agradecimentos

Comecei meus estudos na área de mecânica estatística na USP
com o professor *Sílvio Roberto de Azevedo Salinas.*
As minhas pesquisas na área de mecânica estatística de não-equilíbrio
se iniciaram na UNICAMP
com a professora *Áurea Roza Vasconcellos* e
com o professor *Roberto Luzzi.*
As suas visões amplas e os seus conhecimentos precisos dos diversos
tópicos dessas áreas contribuiram de maneira muito positiva para o
desenvolvimento dos meus trabalhos.

Durante a realização das pesquisas, que estão descritas nesta resenha,
mantive elucidantes discussões e colaborações com os professores
J. R. Drugowich de Felício,
Mário José de Oliveira e
Ronald Dickman.

Faço um agradecimento muito especial ao
Dr. Motaury Moreira Porto
que sempre incetivou a minha carreira científica e depositou em mim
muita confiança.

As pesquisas relatadas nessa resenha tiveram apoio financeiro das
seguintes instituições: FAPESP, CAPES e CNPq.

Abstract

In this report we analyze systems in nonequilibrium stationary states through the use of a statistical mechanics formalism that is founded on the construction of lattice models that evolve in time according to irreversible and stochastic dynamics. Our analysis has been elaborated for models that mimic irreversible processes studied inside the scope of biology, chemistry and physics. In this context we consider several lattice gas models and probabilistic cellular automata which were investigated by means of analytical and numerical methods appropriate for these models. Among the methods we include the dynamical mean field approximation, the time series expansions, the Monte Carlo method, and the time dependent simulations. The models considered in this report are divided into two classes, namely, those with up-down symmetry and those with absorbing stationary states. This monography has in its essence the detailed analysis of kinetic phase transitions and nonequilibrium critical phenomena. We believe that our approach, founded on the elaboration and analysis of lattice models, contributes to the construction of a general theory on nonequilibrium critical phenomena, one of the open problems in the area of nonequilibrium statistical mechanics.

Resumo

Nesta resenha analisamos sistemas que se encontram em estados estacionários de não-equilíbrio através de um formalismo mecânico-estatístico que tem como base a construção de modelos de rede que evoluem no tempo de acordo dinâmicas estocásticas irreversíveis. A nossa análise foi elaborada para modelos que mimetizam processos irreversíveis estudados dentro do escopo da biologia, da química e da física. Dentro desse contexto consideramos vários modelos de gás de rede e autômatos celulares probabilísticos os quais foram investigados por meio de métodos analíticos e numéricos apropriados para esses modelos. Entre os métodos incluem-se as aproximações de campo médio dinâmico, as expansões em série temporal, o método de Monte Carlo e as simulações dependentes do tempo. Os modelos considerados nesta resenha se dividem em duas classes, a saber: aqueles com simetria "up-down" e aqueles com estados estacionários absorventes. A monografia tem na sua essência a análise detalhada das transições de fase cinéticas e fenômenos críticos fora do equilíbrio. Acreditamos que a nossa abordagem, fundamentada na elaboração e análise de modelos de rede, contribui para a construção de uma teoria geral dos fenômenos críticos fora do equilíbrio, um dos problemas ainda em aberto na área da mecânica estatística de não-equilíbrio.

Índice

1 Introdução **3**

1.1 Fundamentação 3

1.2 Estados estacionários de não-equilíbrio e transições de fase cinéticas 6

1.3 Organização da resenha 8

2 Modelos de rede com dinâmicas estocásticas **10**

2.1 Modelos estocásticos de gás de rede 10

2.1.1 Dinâmica de um sítio 11

2.2 Condição de balanceamento detalhado 12

2.3 Autômatos celulares probabilísticos 14

3 Métodos **16**

3.1 Aproximação de campo médio dinâmico 17

3.2 Formalismo de operadores e expansões em séries temporais . . 19

3.3 Simulações de Monte Carlo 23

3.4 Simulações dependentes do tempo 24

4 Modelos de rede com simetria "up-down" **26**

4.1 Modelo de Ising cinético 26

4.2 Modelos de Ising cinéticos com dinâmicas competitivas 30

4.2.1 Auto-organização num modelo de Ising cinético com dinâmicas competitivas 31

4.2.2 Modelo de Ising cinético com dinâmicas de Glauber competitivas 34

4.2.3 O modelo do votante majoritário 36

4.2.4 Irreversibilidade microscópica no modelo do votante majoritário 37
4.3 O modelo ZGB com dessorção de monóxido de carbono: uma reação química irreversível com um ponto crítico que exibe comportamento de Ising 39
4.3.1 O modelo ZGB 39
4.3.2 O modelo ZGB com dessorção 41
4.4 Autômato celular probabilístico para o estudo de um sistema imunológico 44
4.4.1 Introdução 44
4.4.2 O modelo 45

5 Modelos de rede com estados absorventes 53
5.1 Conjectura da percolação direcionada e características de modelos com estados absorventes 53
5.2 O processo de contato e modelos similares 55
5.2.1 O processo de contato 55
5.2.2 Modelo de criação por pares e trincas 62
5.3 Modelo estocástico de gás de rede para um sistema predador-presa 68
5.4 O autômato celular de Domany-Kinzel 73
5.4.1 Definição do autômato 73
5.4.2 Correspondência com a percolação direcionada 78
5.4.3 Deteção da fase caótica 80
5.4.4 Formulação analítica do espalhamento de dano 80
5.4.5 Campo conjugado à distância de Hamming 87
5.4.6 Considerações sobre a classe de universalidade da transição ativo-caótico 89
5.4.7 Transformação de variáveis 90

6 Conclusão 92

Capítulo 1

Introdução

1.1 Fundamentação

Partimos do princípio que a irreversibilidade desempenha papel fundamental em vários fenômenos da natureza. Apesar de podermos em última instância afirmar que todos os fenômenos têm a sua origem microscópica nas interações reversíveis prescritas na física, muitas vezes, como no caso dos processos irreversíveis, não temos acesso ao conhecimento da natureza de todas essas interações microscópicas. Mesmo que tivéssemos acesso a tal nível descritivo, restaria ainda o problema de construir uma teoria macroscópica irreversível a partir de leis microscópicas reversíveis o que representa um passo talvez insuperável. Portanto esse nível descritivo, na sua essência o mais elementar dos níveis, não provê as informações necessárias à descrição dos processos irreversíveis.

Assentada essa concepção nos colocamos frente ao problema concernente ao estabelecimento do nível descritivo em que serão analisados tais fenômenos. Dentro do meu ponto de vista os fenômenos macroscópicos irreversíveis devem ser tratados a partir de uma descrição microscópica que contenha em si mesma a irreversibilidade. O que significa que o nível descritivo que consideramos é aquele em que a *irreversibilidade microscópica* pode ser verificada. O programa que adotamos, o qual traduz o nível descritivo em que elaboramos nossas análises, é realizado pelo formalismo mecânico-estatístico fundamentado na construção de *dinâmicas estocásticas irreversíveis* definidas em *espaços de configurações microscópicas*. Os espaços configuracionais de-

vem ser definidos por conjuntos de variáveis dinâmicas que, em associação com dinâmicas estocásticas, permitam revelar a natureza de processos microscópicos irrreversíveis.

Nessa resenha estudo fenômenos irreversíveis me atendo ao formalismo mecânico-estatístico que tem como base a construção de dinâmicas estocásticas irreversíveis para *sistemas de partículas interagentes residindo em reticulados* [Liggett 1985], [Derrida 1990], [Marro e Dickman 1996], ou seja, *modelos de rede* que evoluem no tempo de acordo com regras locais estocásticas. Esse formalismo, que se insere dentro do programa supra citado, tem como objetivo a caracterização das *transições de fase cinéticas* e dos *estados estacionários de não-equilíbrio*, através de modelos que podem ser tratados matematicamente de uma forma razoavelmente simples e que, assim mesmo, conseguem fornecer descrição microscópica (através de regras locais estocásticas) de alguns dos fatores relevantes aos fenômenos irreversíveis. Dentro desse contexto vários *autômatos celulares* e *modelos estocásticos de gás de rede* têm sido construídos com o objetivo de descrever processos irreversíveis que são analisados no escopo da biologia, da química e da física.

A interdisciplinaridade dessas diversas áreas tem tomado lugar, em parte, devido aos desenvolvimentos da mecânica estatística de não-equilíbrio e da teoria de sistemas dinâmicos. Pode-se dizer que atualmente, muitas vezes, alguns dos assuntos que tradicionalmente foram estudados com formalismos inerentes a áreas específicas são, agora, de fato tratados dentro de formalismos como o supra citado, onde não cabem termos como física aplicada a um problema da biologia mas sim um problema concernente à biologia e à física. Exemplos são a descrição da propagação de epidemias [Bailey 1975], [Grassberger 1983], [Boccara et al 1994], a descrição dos mecanismos microscópicos que levam ao entendimento da dinâmica resultante da competição entre espécies animais [Matsuda et al 1992], [Satulovsky e Tomé 1994] e os diversos problemas inerentes ao estudo da dinâmica de populações [Dickman 1993]. Também são exemplos os problemas pertinentes à descrição das interações celulares no sistema imunológico [Celada e Seiden 1992], [Tomé e Drugowich 1996] e o estudo do transporte ativo em biomembranas [Vieira e Bisch 1993]. Dentro de problemas interdisciplinares que têm sua origem na química, e que têm sido tratados através da construção de modelos de rede estocásticos, estão as reações químicas de caráter irreversível como a oxidação do monóxido de carbono sobre uma superfície catalítica [Ziff et al 1986]. Também são exemplos as oscilações espaço-temporais em reações autocatalíti-

cas [Vlachos et al 1992] e as reações compreendidas no primeiro e no segundo modelo de Schlögl [Schlögl 1972]. No segundo modelo de Schlögl, é realmente interessante notar que a formulação em termos de um modelo estocástico de rede [Grassberger 1982] não só contribuiu para o melhor entendimento dos fenômenos críticos fora do equilíbrio como também conseguiu prever a ordem da transição, a saber, o tratamento por equações da cinética química prediz uma transição descontínua (para uma taxa de reação crítica) enquanto que a formulação estocástica na rede mostra que a transição é de segunda ordem.

Dentro da área da física da matéria condensada, diferentes modelos de rede têm sido construídos objetivando o estudo de sistemas ferromagnéticos abertos, e.g. [Dickman 1987] e [Tomé et al 1991], o estudo de condutores iônicos [Katz et al 1988] e o estudo do processo de difusão dirigida por campo externo [Evans et al 1995]. Esses modelos dão contribuições para o melhor entendimento das transições de fase cinéticas e são verdadeiros "campos de teste" para a formulação de uma teoria para fenômenos críticos que se dão fora do equilíbrio. Comparações com experiências não são evidentes nesses casos.

Ainda na área da física da matéria condensada um importante formalismo mecânico-estatístico, baseado no operador estatístico de não-equilíbrio de Zubarev [Zubarev 1974], tem sido bastante utilizado em particular no estudo de semicondutores excitados continuamente por lasers [Vasconcellos e Luzzi 1984]. Através desse formalismo são analisadas estruturas dissipativas em matéria condensada como a que foi estudada em [Tomé 1987], [Tomé et al 1987]. Nesse caso a auto-organização espacial na forma de ondas de elétrons e buracos prevista teóricamente parece ter comparação com dados experimentais [Britto de Castro 1985]. Do ponto de vista teórico os trabalhos baseados no formalismo de Zubarev têm fornecido importantes contribuições [Galvão Ramos et al 1995], [Luzzi e Vasconcellos 1991] na fundamentação da mecânica estatística de não-equilíbrio. Um dos principais objetivos das pesquisas realizadas dentro desse formalismo é o estabelecimento do conjunto de variáveis (quantas são e quais são) necessárias para descrever o comportamento termodinâmico de um sistema fora do equilíbrio.

O formalismo abordado em [Nicolis e Prigogine 1977] tem como base uma descrição macroscópica dos fenômenos de auto-organização. Nesse caso, a análise de oscilações espaço-temporais auto-ordenadas, como a instabilidade Benárd e as ondas químicas associadas à reação de Belousov-Zhabotinskii, é feita através de equações da cinética química. Esse formalismo, pioneiro

na descrição da auto-organização, tem sido útil na caracterização de alguns dos fatores relevantes na descrição de estados estacionários macroscópicos de não-equilíbrio. Nessa linha têm sido realizados trabalhos que pretendem elucidar muitas questões ainda em aberto, em várias áreas do conhecimento, como por exemplo a predominância de aminoácidos levógiros na natureza. Dentro dessa abordagem os estados com quiralidade bem definida emergem pela quebra de simetria quiral nas equações da cinética química para reações envolvendo reagentes que têm atividade ótica, e. g. [Cattani e Tomé 1993].

Acreditamos que tanto a abordagem que adotamos aqui quanto aquelas descritas nos dois últimos parágrafos contribuem, dentro de suas especificidades, para a formulação da teoria geral da mecânica estatística de não-equilíbrio e da termodinâmica dos processos irreversíveis. Enfatizamos novamente que adotamos a abordagem da mecânica estatística de não-equilíbrio fundamentada na construção de dinâmicas estocásticas irreversíveis definidas em reticulados.

1.2 Estados estacionários de não-equilíbrio e transições de fase cinéticas

Um sistema macroscópico que se encontra em um estado estacionário de não-equilíbrio permanece nesse estado desde que os vínculos externos aos quais está sujeito sejam mantidos inalterados. Aos vínculos de não-equilíbrio estão associados *parâmetros de controle* que uma vez fixados determinam os estados estacionários macroscópicos. Variando os parâmetros, *transições de fase fora do equilíbrio* podem ocorrer e dar lugar à emergência de estados estacionários com *auto-ordenamento* que tem como fonte a própria *irreversibilidade* [Nicolis e Prigogine 1977], [Haken 1983]. Tais transições também podem dar lugar à emergência de estados estacionários de não-equilíbrio que possuem ordenamento semelhante ao encontrado em situações de equilíbrio termodinâmico. Ambos os ordenamentos conseguem descrever fenômenos da natureza onde a irreversibilidade desempenha importante papel e que são objetos de estudo em vários campos do conhecimento.

As transições de fase fora do equilíbrio, frequentemente denominadas *transições de fase cinéticas*, ocorrem entre diferentes estados estacionários de não-equilíbrio caracterizados por parâmetros de ordem bem definidos.

No ponto crítico observa-se que as transições de fase cinéticas apresentam comportamento universal descrito por um conjunto de expoentes críticos. A universalidade nesse caso é analisada através de formalismo, que se assemelha ao utilizado no estudo dos fenômenos críticos em sistemas em equilíbrio, mas realizado em nível descritivo diverso.

Nas transições de fase em modelos estudados dentro da mecânica estatística de equilíbrio os comportamentos críticos são classificados de acordo com as simetrias dos hamiltonianos associados ao modelos bem como da dimensionalidade da rede e do parâmetro de ordem. Nesse caso a teoria de escala e a teoria do grupo de renormalização [Ma 1976] proporcionam a base teórica para o estabelecimento das diversas classes de universalidade. Os fenômenos críticos associados a estados estacionários de não-equilíbrio não podem ser compreendidos dentro da mesma teoria pois esses estados não são descritos por modelos com uma hamiltoniana dada a priori.

Entretanto, o grupo de renormalização pode, em certos casos, ser modificado de modo a prescindir de uma hamiltoniana e então contemplar a análise de alguns modelos irreversíveis. De fato, para certas categorias de modelos de rede definidos por dinâmicas irreversíveis, têm sido propostas conjecturas a respeito das classes de universalidade aplicando-se a técnica do grupo de renormalização à equação de Langevin que leva em conta as simetrias das taxas de transição associadas aos modelos. Essa conjecturas têm sido corroboradas através de cálculos numéricos em uma grande variedade desses modelos. Duas importantes conjecturas são:

1) A conjectura "up-down" de Grinstein, Jayaprakash e He [Grinstein et al 1985]:

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

2) A conjectura da percolação direcionada de Janssen [Janssen 1981] *e Grassberger* [Grassberger 1982]:

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

A segunda conjectura foi generalizada para modelos com mais de uma componente por *Grinstein, Lai e Browne* [Grinstein et al 1989].

Essas são conjecturas, amplamente evidenciadas, e que têm sido úteis na determinação das propriedades críticas de uma diversidade de modelos. Além disso uma grande parte dos modelos de rede de não-equilíbrio tratam de sistemas com características que, quando consideradas ao nível microscópico, os levam a exibir comportamentos compreendidos nessas duas conjecturas. Esses modelos serão examinados em detalhe ao longo dessa resenha.

1.3 Organização da resenha

O formalismo da mecânica estatística de não-equilíbrio que permeia as análises realizadas nessa resenha tem como base a construção de dinâmicas estocásticas irreversíveis com estrutura espacial. Serão delineadas as características e fatores importantes nas transições de fase cinéticas em modelos de rede estocásticos sem reversibilidade microscópica. Na exposição das idéias e resultados provenientes dessa abordagem é necessária, em primeiro lugar, a definição precisa dos modelos de rede estocásticos. Os modelos de rede podem ser classificados em duas categorias, a saber: modelos estocásticos de gás de rede e autômatos celulares probabilísticos. Essas definições são fornecidas no *capítulo* **2** onde também estão desenvolvidas as formulações analíticas usadas na descrição desses modelos. Além disso também enfocamos, nesse mesmo capítulo, o problema da reversibilidade e da irreversibilidade microscópica. Os fundamentos dos métodos analíticos e de simulação numérica, usados no tratamento desses modelos, são descritos no *capítulo* **3**. A seguir procedemos a mais uma subdivisão dos modelos de rede (válida tanto para autômatos quanto para modelos de gás de rede): modelos com simetria *"up-down"* e modelos com *estados absorventes*. As propriedades e os comportamentos críticos exibidos por essas duas classes de modelos, os quais

se enquadram dentro das conjecturas referidas na última subseção, são discutidos nos *capítulos* **4** e **5** respectivamente. Essa classificação engloba uma multiplicidade de modelos que têm como objetivo a descrição de processos irreversíveis na natureza, alguns desses modelos estão analisados detalhadamente nos dois capítulos supra citados. As contribuições provenientes da abordagem de mecânica estatística de não-equilíbrio enfocada nessa monografia são sumarizadas criticamente no *capítulo* **6**.

Capítulo 2

Modelos de rede com dinâmicas estocásticas

2.1 Modelos estocásticos de gás de rede

Consideremos um sistema de partículas interagentes, isto é, uma população de partículas residindo em sítios de uma rede e evoluindo no tempo de acordo com regras estocásticas locais. Consideremos também que a evolução no espaço de configurações seja *contínua* no tempo o que implica que as regras devem ser estabelecidas através de *taxas de transição* (probabilidades de transição por unidade de tempo) entre estados microscópicos.

A representação dos estados microscópicos, ou configurações, desse sistema definido numa rede de N sítios será dada por,

$$\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N),$$

onde σ_i é a variável dinâmica associada ao sítio i da rede. Nessa tese trataremos de casos em que cada variável σ_i assume um número finito M de valores discretos, cada um deles concernente a um estado do sítio. Com o objetivo de usar uma linguagem concisa, muitas vezes nessa tese, nos referiremos a modelos de M estados por sítio, subentendendo que a definição acima está sendo abservada.

Seja $W(\sigma \mid \sigma')$ a taxa de transição do estado σ' para o estado σ, isto é, a probabilidade, por unidade de tempo, de transição do estado σ' para o estado σ, considerando que o sistema esteja no estado σ'. As taxas de transição

$W(\sigma \mid \sigma')$ definem o *modelo estocastico de gás de rede*. A probabilidade $P(\sigma, t)$, de ocorrência do estado σ no instante de tempo t, é governada pela *equação mestra*, [van Kampen 1981]

$$\frac{d}{dt}P(\sigma,t) = \sum_{\sigma'}\{P(\sigma',t)W(\sigma \mid \sigma') - P(\sigma,t)W(\sigma' \mid \sigma)\} \tag{2.1}$$

onde a soma é feita sobre todas as M^N configurações do sistema, com a taxa de transição $W(\sigma \mid \sigma') \geq 0$ para $\sigma \neq \sigma'$.

O valor médio de uma função de estado $f(\sigma)$ é definido por

$$< f(\sigma) >= \sum_{\sigma} f(\sigma)P(\sigma,t). \tag{2.2}$$

Equações de evolução para médias de funções de estado podem ser obtidas a partir da equação acima e da equação mestra. Grandezas de interesse na caracterização dos estados (macroscópicos) estacionários e, consequentemente das transições de fase, são por exemplo, os parâmetros de ordem e funções de correlação.

2.1.1 Dinâmica de um sítio

Consideremos que a dinâmica ocorra por transições entre configurações tais que todos os sítios estejam no mesmo estado *com exceção de um deles*. Denotamos por $\widetilde{w}_i(\sigma_i|\sigma') \geq 0$ a taxa de transição referente ao sítio i do estado σ'_i para o estado σ_i, dado que o sistema esteja na configuração σ'. Como qualquer sítio pode ter seu estado modificado então a taxa de transição $W(\sigma|\sigma')$ deve ser tal que

$$W(\sigma|\sigma') = \sum_{i=1}^{N} \widetilde{w}_i(\sigma_i|\sigma') \prod_{j=1(\neq i)}^{N} \delta(\sigma_j, \sigma'_j), \tag{2.3}$$

onde usamos a notação $\delta(\sigma_j, \sigma'_j)$ para o delta de Kronecker. Dessa maneira, sempre que a dinâmica seja tal que permita que um só sítio possa ter seu estado modificado a cada instante de tempo, a equação mestra será expressa através da equação

$$\frac{d}{dt}P(\sigma,t) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\sigma_i'} \{P(\sigma_1, ..., \sigma_i', ..., \sigma_N, t)\widetilde{w}_i(\sigma_i|\sigma_1, ..., \sigma_i', ..., \sigma_N) - P(\sigma, t)\widetilde{w}_i(\sigma_i'|\sigma)\}. \tag{2.4}$$

Rotulando os estados dos sítios por 0, 1, 2, ..., $M-1$ podemos redefinir a probabilidade de transição através da expressão

$$w_i^{\alpha}(\sigma) = \widetilde{w}_i(\sigma_i + \alpha|\sigma), \tag{2.5}$$

onde α é uma variável que toma os valores $1, 2, ..., M-1$ e a soma $(\sigma_i + \alpha)$ deve ser entendida módulo M. Essa notação permite reescrever *a equação mestra para dinâmicas de um sítio*:

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha} \{P(\sigma_1, ..., \sigma_i - \alpha, ..., \sigma_N, t)w_i^{\alpha}(\sigma_1, ..., \sigma_i - \alpha, ..., \sigma_N) - P(\sigma, t)w_i^{\alpha}(\sigma)\}. \tag{2.6}$$

A equação de evolução para a média de uma função de estado $< f(\sigma) >= \sum_{\sigma} f(\sigma) P(\sigma, t)$ é escrita formalmente, levando em conta (2.6), como:

$$\frac{d}{dt} < f(\sigma) >= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha} < \{f(\sigma_1, ..., \sigma_i + \alpha, ..., \sigma_N) - f(\sigma)\}w_i^{\alpha}(\sigma) > . \tag{2.7}$$

A hierarquia de equações de evolução para as correlações pode ser obtida usando (2.7). As características intrínsecas aos modelos estão contidas nos diversos tipos de transição descritos por $w_i^{\alpha}(\sigma)$. No caso em que são permitidas somente transições cíclicas, como no modelo predador-presa (seção **5.3**), taxas não nulas correspondem ao caso $\alpha = 1$.

As dinâmicas de um sítio são frequentemente utilizadas na simulação de sistemas descritos por modelos estocásticos de gás de rede. Uma das dinâmicas de um sítio mais conhecidas é a dinâmica introduzida por Glauber [Glauber 1963] com objetivo de descrever a relaxação de um sistema de spins de Ising para estados macroscópicos de equilíbrio (ver seção **4.2**).

2.2 Condição de balanceamento detalhado

Dada a taxa de transição $W(\sigma|\sigma')$ para um certo sistema pode-se construir uma equação mestra (2.1). O sistema evolui no tempo e pode atingir estados

estacionários descritos por uma distribuição de probabilidades estacionária P_{est} (σ), independente do tempo, o que implica em

$$\sum_{\sigma'} P_{est}(\sigma')W(\sigma \mid \sigma') - \sum_{\sigma'} P_{est}(\sigma)W(\sigma' \mid \sigma) = 0.$$

Se as taxas são tais que a equação

$$P_{est}(\sigma')W(\sigma \mid \sigma') = P_{est}(\sigma)W(\sigma' \mid \sigma) \tag{2.8}$$

é satisfeita, então o estado estacionário atingido é um estado *estacionário de equilíbrio* (termodinâmico). A condição (2.8) é chamada de *condição de balanceamento detalhado.*

Os modelos que obedecem (2.8) evoluem no tempo até atingir estados estacionários descritos por alguma distribuição de Gibbs, o que significa que é possível associar um hamiltoniano ao modelo. Este fato é usado na construção de dinâmicas que levam sistemas a estados de equilíbrio como é o caso da dinâmica de Metropolis [Metropolis et al 1953] para o modelo de Ising cinético. Ou seja substitui-se $P_{est}(\sigma)$ em (2.8) pela distribuição de Gibbs concernente ao hamiltoniano do modelo e obtém-se $W(\sigma|\sigma')$.

Quando a condição de balanceamento detalhado é satisfeita o sistema possui *reversibilidade microscópica,* pois

> $P_{est}(\sigma')W(\sigma \mid \sigma')\delta t$, que é interpretado como a probabilidade de o sistema se encontrar no estado σ' no instante t e em σ no instante $t + \delta t$, é igual a
>
> $P_{est}(\sigma)W(\sigma' \mid \sigma)\delta t$, que é interpretado como a probabilidade de o sistema se encontrar no estado σ no instante t e em σ' no instante $t + \delta t$.
>
> Ou seja, a probabilidade da transição $\sigma' \longrightarrow \sigma$ num intervalo de tempo δt é igual a sua reversa.

Dada uma dinâmica genérica definida por determinadas taxas de transição, é fundamental verificar a priori se o sistema possui ou não a propriedade da reversibilidade microscópica. Uma maneira de averiguação dessa propriedade seria dada pelo uso direto da condição de balanceamente detalhado (2.8). Entretanto, essa equação não pode ser utilizada quando não temos conhecimento *a priori* da distribuição estacionária $P_{est}(\sigma)$. Nesses casos, pode-se

recorrer a uma análise de trajetórias fechadas no espaço de configurações [Griffiths 1989] que implica na eliminação de $P_{est}(\sigma)$. Esse procedimento será exposto em detalhe na seção **4.2.4** para uma dinâmica que não tem reversibilidade microscópica.

2.3 Autômatos celulares probabilísticos

Consideremos um modelo definido numa rede de N sítios que evoluem no tempo de acordo com regras estocásticas e locais. A cada sítio i da rede é associada uma variável dinâmica σ_i que toma valores discretos. As configurações microscópicas de um sistema assim definido são descritas em termos do conjunto de variáveis dinâmicas $\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N)$. Supomos também que o sistema evolua no tempo através de *passos de tempo discretos.*

A evolução no tempo de $P_\ell(\sigma)$, a probabilidade do estado σ, no passo ℓ, é governada pela equação

$$P_{\ell+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma \mid \sigma') P_\ell(\sigma'), \tag{2.9}$$

onde $W(\sigma \mid \sigma')$ é a *probabilidade de transição (condicional)* do estado σ' para o estado σ e portanto deve obedecer as seguintes prerrogativas

$$W(\sigma \mid \sigma') \geq 0 \qquad \text{e} \qquad \sum_{\sigma} W(\sigma \mid \sigma') = 1. \tag{2.10}$$

Levando em conta o fato de que para um autômato celular todos os sítios são *atualizados simultaneamente,* então a probabilidade de transição $W(\sigma \mid \sigma')$ deve ser expressa da seguinte forma

$$W(\sigma \mid \sigma') = \prod_{i=1}^{N} w_i(\sigma_i \mid \sigma') \tag{2.11}$$

onde $w_i(\sigma_i|\sigma') \geq 0$ é a *probabilidade de transição (condicional)* de que o estado do *sítio* i no passo $\ell + 1$, seja σ_i dado que, no passo ℓ , o estado do *sistema* seja σ' e possui a seguinte propriedade

$$\sum_{\sigma_i} w_i(\sigma_i \mid \sigma') = 1$$

o que implica que (2.10) fique satisfeita.

Um determinado conjunto de probabilidades de transição $w_i(\sigma_i \mid \sigma')$ relacionados com regras estocásticas, aplicadas simultaneamente, define um autômato celular probabilístico que tenha sido introduzido para modelar um sistema específico.

O valor médio de uma função de estado $f(\sigma)$ no passo de tempo ℓ é dado por

$$< f(\sigma) >_\ell = \sum_\sigma f(\sigma) P_\ell(\sigma). \tag{2.12}$$

A evolução temporal de $< f(\sigma) >_\ell$ é obtida a partir de (2.9) e (2.11). Equações de evolução para parâmetros de ordem e correlações podem ser obtidas dessa maneira. É importante notar que as equações de evolução para, por exemplo, a correlação de dois sítios vizinhos vão ser expressas através de uma média do produto de duas probabilidades de transição $w_i(\sigma_i \mid \sigma')$. Isto não é o que se dá para modelos estocásticos de gás de rede onde uma correlação desse tipo é descrita como a soma de duas médias, cada uma delas de uma única probabilidade de transição. Esses aspectos dos formalismos serão melhor compreendidos nos capítulos **4** e **5** onde serão definidos e estudados diferentes modelos de gás de rede e autômatos celulares.

No regime estacionário devemos ter

$$P_{est}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma \mid \sigma') P_{est}(\sigma'),$$

que pode ser escrita na forma

$$\sum_{\sigma'} W(\sigma' \mid \sigma) P_{est}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma \mid \sigma') P_{est}(\sigma'),$$

onde usamos a condição (2.10). Se além disso as probabilidades de transição satisfizerem a equação

$$P_{est}(\sigma) W(\sigma' \mid \sigma) = P_{est}(\sigma') W(\sigma \mid \sigma'), \tag{2.13}$$

então o estado estacionário atingido é um estado *estacionário de equilíbrio* (termodinâmico). A condição (2.13) é chamada de *condição de balanceamento detalhado para o autômato.*

Capítulo 3

Métodos

Em equilíbrio termodinâmico a energia livre de um dado sistema é uma grandeza bem definida, pois sempre devemos ter uma hamiltoniana associada ao modelo específico que está sendo analisado. O maior problema nesse caso é o estabelecimento da expressão da energia livre. De fato, é bem conhecido que poucos sistemas interagentes em equilíbrio têm solução exata. Mas usando os diversos métodos para o estudo de transições de fases em equilíbrio podemos avaliar, por exemplo, qual das fases é estável em certos regimes, pois esta será aquela que minimiza a energia livre com respeito a seus parâmetros extensivos. Nesse caso mesmo métodos aproximados, como a aproximação de campo médio, conseguem prover expressões válidas para a energia livre. O formalismo da desigualdade de Bogoliubov e a solução em redes abertas, e. g. árvore de Cayley, talvez sejam as abordagens mais abrangentes dentro da teoria de campo médio [Wreszinski e Salinas 1993], [Yokoi et al 1981], [Tomé e Salinas 1987], [Tomé e Salinas 1989]. É claro que os resultados de campo médio não fornecem expoentes críticos que não sejam os expoentes clássicos. Mas vários métodos, como o grupo de renormalização e simulações de Monte Carlo, conseguem avaliar os expoentes críticos e determinar a classe de universalidade de um dado modelo. Entretanto, aproximações de campo médio, são relevantes na primeira análise de um modelo.

Modelos que descrevem características de fenômenos fora do equilíbrio termodinâmico são na sua essência definidos como modelos que não possuem uma hamiltoniana e para os quais não é possível, em princípio, definir uma função energia livre que tenha as características desejadas para prever estabilidade de fases. Assim alguns dos métodos da mecânica estatística de

equilíbrio não podem ser aplicados a modelos de não-equilíbrio.

A abordagem da mecânica estatística de não-equilíbrio baseada na construção de modelos de rede tem também como um dos seus objetivos prover e testar métodos adequados à análise de modelos que não têm reversibilidade microscópica. Estes métodos contém características elaboradas e de um ponto de vista didático são, eles mesmos, importantes para o entendimento das transições de fase cinéticas. Neste capítulo descreverei métodos que têm sido utilizados por vários pesquisadores, em particular também utilizados por mim, na caracterização de estados estacionários de não-equilíbrio e transições de fase cinéticas.

3.1 Aproximação de campo médio dinâmico

A análise de modelos da mecânica estatística de equilíbrio ao nível de aproximações de campo médio pode ser realizada de diferentes maneiras. No caso da análise de modelos de não-equilíbrio também não há uma única maneira de aproximações de campo médio serem feitas. Nesta subseção será apresentada a aproximação de campo médio que foi introduzida por Kikuchi [Kikuchi 1951] e por Mamada e Takano [Mamada e Takano 1968] e tem sido utilizada nos últimos anos [Dickman 1986], [Tomé et al 1991], [Tomé 1994].

As equações de evolução para o parâmetro de ordem em qualquer modelo que evolua de acordo com *regras locais* sempre contêm termos relativos às correlações de sítios vizinhos na rede. As equações de evolução para as correlações de determinado número de sítios sempre incluem correlações associadas a aglomerados com mais sítios (correlações entre mais vizinhos). Assim tem-se sempre um conjunto infinito de equações acopladas para as correlações que equivale à propria equação de evolução para a probabilidade $P(\sigma, t)$, como já mencionado no contexto da equação mestra (2.1) e da equação (2.9). O escopo da aproximação de campo médio dinâmico consiste no truncamento desse conjunto infinito de equações acopladas.

Na aproximação de ordem mais baixa a probabilidade de um dado aglomerado de sítios é aproximada pelo produto das probabilidades de cada sítio. Ou seja, todas as correlações entre sítios do aglomerado são desprezadas,

$$P(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, ..., \sigma_N) = \prod_{i=1}^{N} P(\sigma_i).$$

Esta aproximação é muitas vezes chamada de *aproximação de um sítio* ou *aproximação de campo médio simples*. Para alguns casos essa aproximação produz resultados que são muito distintos dos resultados exatos esperados. Aproximações que desprezam todas as correlações mas que são realizadas na própria probabilidade de transição, como a aproximação que foi efetuada em [Tomé e Oliveira 1990], fornecem (para certos casos) resultados mais adequados. A seguir a formulação da aproximação de campo médio dinâmico em ordens superiores a um é exposta.

As aproximações de campo médio incluindo flutuações são feitas de tal modo que quando um truncamento ao nível n é realizado então correlações que levem em conta mais de n sítios são aproximadas por correlações de n ou menos sítios. Com o objetivo de desenvolver o raciocínio utilizado na obtenção da aproximação de campo médio dinâmico a uma ordem n passaremos as explicações que se seguem.

Consideremos um aglomerado C de sítios composto por um "núcleo" A e por uma "borda" B. A probabilidade de uma configuração $\sigma_C = \{\sigma_i,\ i \in C\}$ dos sítios que compõem o aglomerado C é dada formalmente por

$$P(\sigma_C) = P(\sigma_B, \sigma_A) \equiv P(\sigma_B|\sigma_A)\ P(\sigma_A) \tag{3.1}$$

onde $P(\sigma_B|\sigma_A)$ é a probabilidade condicional da configuração $\sigma_B = \{\sigma_i,\ i \in B\}$ dos sítios que compõem o aglomerado B dada a configuração $\sigma_A = \{\sigma_i,\ i \in A\}$ dos sítios que compõem o aglomerado A.

A aproximação é feita sobre a probabilidade condicional desprezando-se as correlações entre os sítios de B, ou seja,

$$P(\sigma_B \mid \sigma_A) = \prod_{i \in B} P(\sigma_i \mid \sigma_A). \tag{3.2}$$

Levando em conta que $P(\sigma_i \mid \sigma_A) = P(\sigma_i, \sigma_A)/P(\sigma_A)$, a probabilidade $P(\sigma_C)$ do aglomerado C é então dada por

$$P(\sigma_C) = P(\sigma_A) \prod_{i \in B} \frac{P(\sigma_i, \sigma_A)}{P(\sigma_A)}, \tag{3.3}$$

onde $P(\sigma_i, \sigma_A)$ é a probabilidade do aglomerado formado pelo sítio i e pelos sítios de A.

A aproximação de campo médio dinâmico que inclui flutuações correspondentes à correlações de dois sítios vizinhos na rede é chamada de *aproximação*

de pares. Fazendo-se uma comparação entre resultados obtidos através de aproximações de campo médio simples e de pares observa-se que na maioria dos casos há uma melhoria qualitativa no diagrama de fases. Aproximações de ordem superior a essa não conseguem, em geral, dar contribuições qualitativamente relevantes. De fato, na maioria dos casos as aproximações de ordem superior à aproximação de pares fornecem somente melhorias ao nível quantitativo e essas, por sua vez, são quase insignificantes com relação às obtidas nas aproximações que incluem só correlações de dois sítios. Entretanto, cabe ressaltar que há casos em que aproximações de ordem superior a $n = 2$ são importantes na obtenção da própria ordem da transição [Dickman e Tomé 1991]. Nesses casos específicos o que aparentemente leva à necessidade de inclusão de correlações de ordem superior é uma propriedade inerente às próprias probabilidades de transição e que não consegue ser levada em conta adequadamente na aproximação de pares. No capítulo **5** um dos tópicos a serem discutidos está relacionado com o modelo de criação por trincas de partículas, que introduzi em colaboração com R. Dickman, no qual foram necessárias aproximações incluindo correlações de quatro sítios para obter resultados comparáveis aos resultados de simulações de Monte Carlo.

A aproximação de campo médio dinâmico também pode ser utilizada na análise dos modelos da mecânica estatística de equilíbrio, desde que seja possível associar uma dinâmica estocástica a tais modelos com é o caso da dinâmica de Glauber associada ao modelo de Ising de equilíbrio. Nesse caso o campo médio dinâmico a nível de pares fornece resultados, para os estados de equilíbrio, que são idênticos aos resultados da aproximação de Bethe-Peierls para o modelo de Ising.

3.2 Formalismo de operadores e expansões em séries temporais

No método de expansões em série a equação mestra para uma distribuição de probabilidades é expressa através do *formalismo de operadores* [Grassberger e Torre 1979], [Dickman 1989], [Dickman et al 1991], [Oliveira et al 1992]. Uma vez tendo a expressão para a equação mestra nesse formalismo pode-se proceder à obtenção de séries temporais para grandezas que caracterizam estados estacionários. A seguir apresentamos, resumidamente, o formalismo

de operadores.

Consideremos uma rede com N sítios para os quais são associadas variáveis dinâmicas σ_i que tomam M valores discretos, a saber $\sigma_i = 0, 1, 2, ..., M-1$. O estado do sistema no instante de tempo t é definido como

$$| \psi(t) >= \sum_{\sigma} P(\sigma, t) \mid \sigma > \tag{3.4}$$

onde $P(\sigma, t)$ é a probabilidade de uma configuração microscópica do sistema,

$$| \sigma >= |\sigma_1 \sigma_2 ... \sigma_i ... \sigma_N >, \tag{3.5}$$

no instante de tempo t. Observe que $| \sigma >$ se comporta como um vetor no espaço das configurações microscópicas do sistema. A evolução temporal de $| \psi(t) >$ para o caso de *dinâmica de um sítio* se obtém a partir de (2.6) e é dada por

$$\frac{d}{dt}|\psi(t) >= \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha} P(\sigma, t) w_i^{\alpha}(\sigma) \{|\sigma_1, ..., \sigma_i + \alpha, ..., \sigma_N > - |\sigma >\}. \tag{3.6}$$

Em seguida passamos à construção de alguns operadores úteis nessa descrição. Definimos o operador $\mathcal{F}_i$ por

$$\mathcal{F}_i |\sigma_i >= |\sigma_i + 1 > \tag{3.7}$$

de modo que α aplicações de $\mathcal{F}_i$ resultam em

$$\mathcal{F}_i^{\alpha} |\sigma_i >= |\sigma_i + \alpha > \tag{3.8}$$

onde $\sigma_i + \alpha$ deve ser entendido modulo M. É claro que $\mathcal{F}_i^M = 1$.

A partir de (3.8) obtemos

$$|\sigma_1 ..., \sigma_i + \alpha, ... \sigma_N >= \mathcal{F}_i^{\alpha} |\sigma_1 ... \sigma_i ... \sigma_N >= \mathcal{F}_i^{\alpha} |\sigma > \tag{3.9}$$

o que permite escrever a equação (3.6) na forma

$$\frac{d}{dt}|\psi(t) >= \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha} P(\sigma, t) w_i^{\alpha}(\sigma) \{\mathcal{F}_i^{\alpha} - 1\} |\sigma > . \tag{3.10}$$

Definindo o operador $\mathcal{Z}_i^{\alpha}$ que possui como autovetores $|\sigma >$ e autovalores $w_i^{\alpha}(\sigma)$,

$$\mathcal{Z}_i^{\alpha} |\sigma >= w_i^{\alpha}(\sigma) |\sigma > \tag{3.11}$$

obtemos

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)>=\sum_i\sum_\sigma\sum_\alpha P(\sigma,t)\{\mathcal{F}_i^\alpha-1\}\mathcal{Z}_i^\alpha|\sigma>$$

ou

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)>=\sum_i\sum_\alpha\{\mathcal{F}_i^\alpha-1\}\mathcal{Z}_i^\alpha\sum_\sigma P(\sigma,t)|\sigma>$$

e finalmente

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)>=\sum_i\sum_\alpha\{\mathcal{F}_i^\alpha-1\}\mathcal{Z}_i^\alpha|\psi(t)>. \tag{3.12}$$

Portanto

$$\frac{d}{dt}|\psi(t>=\mathcal{S}|\psi(t)> \tag{3.13}$$

onde $\mathcal{S}$ é o operador de evolução,

$$\mathcal{S}=\sum_i\sum_\alpha\{\mathcal{F}_i^\alpha-1\}\mathcal{Z}_i^\alpha. \tag{3.14}$$

A equação (3.13) é a equação mestra (2.6) escrita dentro do formalismo de operadores. A solução formal dessa equação é dada por

$$\mid\psi(t)>=\exp\{t\mathcal{S}\}\mid\psi(0)>. \tag{3.15}$$

É de grande relevância observarmos que em geral o operador $\mathcal{S}$ é *não hermitiano* pois

$$\mathcal{S}^\dagger=\sum_i\sum_\alpha\mathcal{Z}_i^\alpha\{\mathcal{F}_i^{M-\alpha}-1\}$$

dado que $(\mathcal{F}_i^\alpha)^\dagger=\mathcal{F}_i^{M-\alpha}$ e portanto $\mathcal{S}^\dagger$ é em geral distinto de $\mathcal{S}$. Somente para os modelos que possuem reversibilidade microscópica é possível transformar $\mathcal{S}$ num operador hermitiano. Os *modelos irreversíveis* correspondem a *operadores intrinsecamente não hermitianos* (um exemplo será dado na seção **5.2.1**).

A partir da equação (3.13) pode-se obter *expansões em séries temporais* para grandezas que caracterizam os estados estacionários. Esse procedimento está exposto abaixo.

Considere por exemplo uma grandeza F definida através da média

$$F=<f(\sigma)>=\sum_\sigma f(\sigma)P(\sigma,t), \tag{3.16}$$

de uma função de estado $f(\sigma)$. Usando a expressão

$$P(\sigma,t) =< \sigma \mid \psi(t) >, \tag{3.17}$$

obtida pela inversão de (3.4), F pode ser escrita na forma

$$F = \sum_{\sigma} f(\sigma) < \sigma \mid \psi(t) > . \tag{3.18}$$

Dessa maneira temos

$$F = \sum_{\sigma} f(\sigma) < \sigma | \exp\{t\mathcal{S}\} \mid \psi(0) > . \tag{3.19}$$

A expansão do operador $\exp\{t\mathcal{S}\}$ resulta em

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n f_n. \tag{3.20}$$

onde

$$f_n = \sum_{\sigma} f(\sigma) < \sigma | \mathcal{S}^n \mid \psi(0) > \tag{3.21}$$

é o coeficiente de ordem n da expansão temporal.

A seguir sumarizamos as características principais do formalismo de operadores e do método da expansão em séries temporais expostos acima. As propriedades de um modelo específico estão contidas no *operador de evolução* $\mathcal{S}$,definido na equação (3.14). A partir da solução formal (3.15) da equação mestra na forma (3.13) são efetuadas expansões de $\exp\{t\mathcal{S}\}$ em potências de t para a obtenção de séries temporais de grandezas necessárias na descrição dos estados estacionários. Obtida a série, isto é, os coeficientes da série através da equação (3.21), esses podem ser analisados usando a técnica dos aproximantes de Padé [Baker 1990].

Este método tem sido utilizado principalmente no estudo de problemas relacionados à adsorção sequencial aleatória irreversível [Nord e Evans 1985] de monômeros, dímeros ou quaisquer outros n-meros sobre uma superfície [Evans 1989], [Dickman et al 1991], [Fan e Percus 1991], [Oliveira et al 1992]. E também no estudo de vários outros modelos de rede irreversíveis como o processo de contato [Dickman 1989]. Nos capítulos seguintes serão expostos modelos onde esta técnica foi aplicada no estudo dos estados estacionários. O operador $\mathcal{S}$ será obtido *explicitamente*, na seção **5.2.1**, para o caso do processo de contato.

3.3 Simulações de Monte Carlo

As simulações de Monte Carlo [Binder 1984] constituem um procedimento numérico amplamente usado na análise de propriedades de sistemas que convergem para um estado de equilíbrio termodinâmico. Os resultados das simulações realizadas para modelos que têm reversibilidade microscópica (evolução para estados de equilíbrio termodinâmico) podem ser analisados através da teoria de escala finita [Fisher 1971], [Privman 1990]. Essa teoria possibilita a obtenção de resultados válidos no limite termodinâmico com base em dados gerados por simulações efetuadas em sistemas finitos de diferentes tamanhos.

O mesmo procedimento simulacional aliado à teoria de escala finita tem sido utilizado no estudo de modelos sem reversibilidade microscópica [Aukrust et al 1990], [Oliveira 1992], [Tomé e Dickman 1993] (evolução para estados de não-equilíbrio). Esse método tem proporcionado excelentes resultados no estudo do comportamento crítico de muitos dos modelos de não-equilíbrio, principalmente para aqueles que não possuem estados absorventes. O sucesso na obtenção desses resultados se deve, em parte, às conjecturas que colocam modelos de não-equilíbrio em classes de universalidade de modelos de equilíbrio. Lembramos que nessas conjecturas sobre comportamento crítico de modelos com regras irreversíveis, que obedecem certas simetrias ou possuem determinadas características, é inferido que os modelos sem reversibilidade microscópica caem nas mesmas classes de universalidade de modelos de equilíbrio que têm as propriedades requeridas. Assim a partir da inspeção das características das probabilidades de transição pode-se inferir quais devem ser os expoentes críticos associados a uma dada transição e então efetuar análises como a de "colapso de dados" ou o estudo do cumulante de quarta ordem [Binder 1984].

É importante notar que simulação de Monte Carlo em sistemas fora de equilíbrio (descritos pela equação de evolução temporal da distribuição de probabilidades dos estados microscópicos), significa simplesmente a realização computacional de uma trajetoria específica no espaço de configurações. O nome Monte Carlo se deve ao fato de a realização fazer uso de números aleatórios para gerar configurações sucessivas.

A simulação de automatos celulares probabilísticos é direta pois eles são definidos pelas *probabilidades* de transição a qual é usada para realizar uma trajetória no espaço de configurações. Por outro lado, os modelos de gás de

rede, os quais são descritos por uma equação mestra, são definidos através de *taxas* e não por probabilidades de transição. Nesse caso, deve-se primeiro discretizar o tempo em intervalo δt e então obter as probabilidades de transição que se dão a cada intervalo de tempo. Assim, dado um estado microscópico σ, num certo instante t, a probabilidade de transição para o estado σ', no instante seguinte $t + \delta t$, é dada por $W(\sigma'|\sigma)/\delta t$ (para δt "suficientemente pequeno") para $\sigma' \neq \sigma$. A probabilidade de permanecer no mesmo estado é dada por

$$1 - \sum_{\sigma'(\neq\sigma)} \frac{W(\sigma'|\sigma)}{\delta t}.$$

Esse é o procedimento computacional usual na simulação de sistemas descritos por uma equação mestra.

3.4 Simulações dependentes do tempo

Este método foi introduzido por Grasberger e de La Torre [Grassberger e Torre 1979] com o objetivo de estudar o comportamento crítico de modelos que apresentam transições de fase cinéticas de um estado ativo para um *estado absorvente.*

Grandezas que são geralmente calculadas no contexto desse método são a probabilidade de sobrevivência P_t e o número médio de partículas num dado instante de tempo n_t. A probabilidade de sobrevivência é definida como sendo a probabilidade de pelo menos uma partícula estar presente na rede num dado instante de tempo t.

Na aplicação do método realiza-se um grande número de simulações sempre partindo de um estado muito próximo ao estado absorvente. Cada simulação só termina quando não houver mais partículas no sistema ou até um tempo máximo pré-fixado. As redes têm de ser suficientemente grandes para que nenhuma partícula atinja a borda da rede durante o tempo de simulação. Analisa-se o comportamento da probabilidade de sobrevivência e do número médio de partículas na rede como função do tempo. No *ponto crítico* a evolução temporal dessas grandezas é governada por leis de potência. A localização do ponto crítico é obtida observando-se para qual valor do parâmetro ocorre o decaimento algébrico das grandezas em questão. Esse procedimento permite a obtenção concomitante dos expoentes críticos.

No ponto crítico P_t e n_t seguem as seguintes leis de potência,

$$n_t \approx t^{\eta} \tag{3.22}$$

e

$$P_t \approx t^{-\delta}. \tag{3.23}$$

Os expoentes η e δ são expoentes críticos. Por exemplo para a percolação dirigida em $(1+1)$ dimensões esses expoentes são dados por $\delta \simeq 0,162$ and $\eta \simeq 0,317$ [Brower et al 1978], [Grassberger e Torre 1979]. Para a percolação dirigida em $(2+1)$ dimensões o método das simulções dependentes do tempo fornece $\delta \simeq 0,460$ e $\eta \simeq 0,214$ [Grassberger 1989]. Exemplos de alguns outros trabalhos onde modelos com estados absorventes foram analisados utilizando essa técnica são: [Grinstein et al 1989], [Dickman 1990], [Dickman e Tomé 1991], [Cornell et al 1991] e [Satulovsky 1995].

Capítulo 4

Modelos de rede com simetria "up-down"

Nesse capítulo descrevemos alguns dos modelos que possuem simetria "up-down" e que têm sido estudados na área de mecânica estatística de não-equilíbrio. A conjectura "up-down" enunciada na introdução é discutida no contexto desses modelos, os quais estão na mesma classe de universalidade do modelo de Ising de equilíbrio.

A conjectura é estabelecida mais formalmente como segue:

" Transições de fase contínuas em modelos irreversíveis, definidos numa rede de dimensão d, com mecanismos de interação expressos por regras locais espacialmente homogêneas que possuam simetria "up-down" caem na mesma classe de universalidade do modelo de Ising de equilíbrio definido numa rede de dimensão d."

4.1 Modelo de Ising cinético

Antes de iniciar a exposição e discussão dos modelos de Ising cinéticos com dinâmicas competitivas (que *não* têm *reversibilidade* microscópica) apresentarei uma breve introdução sobre o modelo de Ising cinético. A denominação *modelo de Ising cinético* é utilizada no tratamento de um sistema de spins de Ising ao qual se acopla uma dinâmica que lhe proporciona relaxamento para *um estado de equilíbrio.* Ou seja a denominação modelo de Ising cinético estará associada, como é usual, a um sistema de spins descrito por

uma dinâmica que possui balanceamento detalhado e que o leva a estados estacionários de equilíbrio, os quais são descritos pela distribuição de Gibbs relacionada à hamiltoniana de Ising. A seguir é apresentado formalmente o modelo de Ising cinético.

Considere uma rede com N spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos ferromagnéticas. A energia de um dado estado

$$\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N), \tag{4.1}$$

com $\sigma_i = \pm 1$ sendo a variável dinâmica associada ao spin i, é dada por

$$E(\sigma) = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j \tag{4.2}$$

onde a somatória é feita sobre pares de spins vizinhos na rede e J é a integral de troca que, para sistemas ferromagnéticos, é positiva e, para sistemas antiferromagnéticos, é negativa.

Façamos a hipótese de que o sistema assim definido obedeça a uma *dinâmica* na qual *somente um spin é invertido a cada instante de tempo.* Uma dinâmica que tem essa característica é muitas vezes chamada de dinâmica tipo Glauber. Consoante ao descrito na subseção **2.1.1** a taxa de transição $W(\sigma \mid \sigma')$ associada a tal dinâmica é

$$W(\sigma \mid \sigma') = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1} \delta(\sigma_1, \sigma_1')\delta(\sigma_2, \sigma_2')....\delta(\sigma_i, -\sigma_i')...\delta(\sigma_N, \sigma_N')w_i(\sigma') \tag{4.3}$$

onde $w_i(\sigma')$ é a probabilidade de inversão do spin i. Esta probabilidade de transição pode ser dada por várias prescrições que obedeçam à condição de balanceamento detalhado. Mostraremos algumas dessas dinâmicas no fim do esboço desse tópico.

A equação mestra associada a esse problema é

$$\tau \frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{i=1}^{N} \{P(\sigma^i, t) w_i(\sigma^i) - P(\sigma, t) w_i(\sigma)\} \tag{4.4}$$

onde σ^i denota o estado obtido a partir de σ invertendo o spin do sítio i, ou seja

$$\sigma^i \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., -\sigma_i, ..., \sigma_N).$$

A partir da equação mestra (4.4) pode-se construir as equações de evolução para quaisquer correlações de sítios na rede. A correlação $< f(\sigma) >$ possui a seguinte equação de evolução

$$\tau \frac{d}{dt} < f(\sigma) >= \sum_{i=1}^{N} < \{f(\sigma^i) - f(\sigma)\} w_i(\sigma) > \tag{4.5}$$

obtida a partir de (4.4). Observamos que esse é o caso particular da equação (2.7) para dois estados ($M = 2$).

Grandezas relevantes na descrição do estado estacionário do sistema de spins de Ising são a magnetização $< \sigma_i >$ do i-ésimo spin e a correlação $< \sigma_j \sigma_k >$ entre os spins vizinhos j e k. As equações de evolução para essas grandezas são dadas por

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_i >=< (-2\sigma_i)\, w_i(\sigma) > \tag{4.6}$$

e

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_j \sigma_k >=< (-2\sigma_j \sigma_k)[w_j(\sigma) + w_k(\sigma)] > . \tag{4.7}$$

Na prescrição de Glauber [Glauber 1963], que é uma dinâmica para modelos de Ising cinéticos onde um spin é invertido a cada instante de tempo, a probabilidade de transição é

$$w_i(\sigma) = \frac{1}{2}\{1 - \sigma_i \tanh(\beta \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta})\}, \tag{4.8}$$

onde a soma é feita sobre primeiros vizinhos do sítio i e $\beta \equiv J/k_B T$, T é a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann.

Na dinâmica de Glauber, a condição de balanceamento detalhado (2.8) é observada e o sistema evolui no tempo de acordo com essa prescrição até atingir um estado estacionário de equilíbrio, ou seja um estado em que a probabilidade estacionária $P(\sigma)$ é uma distribuição de Gibbs.

Outra prescrição relacionada com uma dinâmica onde somente um spin é invertido a cada instante de tempo e que possui reversibilidade microscópica é a prescrição de Metropolis [Metropolis et al 1953],

$$w_i(\sigma) = \min\{1, \exp(-\beta \Delta E_i)\} \tag{4.9}$$

onde $\Delta E_i = E(\sigma^i) - E(\sigma)$ é a diferença das energias (4.2) associadas aos estados σ^i e σ. É claro que a prescrição de Metropolis obedece (2.8).

A prescrição de Kawasaki [Kawasaki 1972] (a qual será usada na análise de um dos modelos de Ising com dinâmicas competitivas que examinaremos) é também uma prescrição que tem reversibilidade microscópica. Nessa dinâmica *dois spins* vizinhos *são escolhidos ao acaso* e suas variáveis dinâmicas são intercambiadas com um certa probabilidade. A probabilidade de transição de Kawasaki [Kawasaki 1972] é dada por,

$$w_{ij} = \min\{1, \exp(-\beta \Delta E_{ij})\} \tag{4.10}$$

onde ΔE_{ij} é a diferença de energia envolvida na transição. Essa é uma dinâmica na qual a magnetização total é conservada. A probabilidade de transição $W(\sigma|\sigma')$ é dada por,

$$W(\sigma \mid \sigma') = \frac{1}{\tau} \sum_{(ij)} \delta(\sigma_1, \sigma_1')....\delta(\sigma_i, \sigma_j')...\delta(\sigma_j, \sigma_i')...\delta(\sigma_N, \sigma_N') w_{ij}(\sigma'), \tag{4.11}$$

sendo a somatória do lado direito dessa expressão feita sobre pares de sítios que são primeiros vizinhos. A equação de evolução para a magnetização é dada por,

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_i >= \sum_{\delta} < (\sigma_{i+\delta} - \sigma_i)\, w_{i,i+\delta}(\sigma) > \tag{4.12}$$

onde a soma é feita sobre os primeiros vizinhos do spin i na rede. A equação de evolução para a correlação entre dois sítios vizinhos i e j na rede é dada por

$$\begin{aligned} \tau \frac{d}{dt} < \sigma_j \sigma_k >= & \sum_{\delta} < (\sigma_{j+\delta}\sigma_k - \sigma_j\sigma_k) w_{j,j+\delta}(\sigma) > + \\ & + \sum_{\delta} < (\sigma_j \sigma_{k+\delta} - \sigma_j \sigma_k) w_{k,k+\delta}(\sigma) > \end{aligned} \tag{4.13}$$

onde a primeira somatória é feita sobre os primeiros vizinhos de j excetuando o sítio k e a segunda somatória é feita sobre os primeiros vizinhos de k excetuando j.

4.2 Modelos de Ising cinéticos com dinâmicas competitivas

Consideremos um sistema de spins de Ising ao qual aplicamos duas prescrições relacionadas a dois processos que ocorrem independentemente e de acordo com uma dada probabilidade. Consideremos que cada um dos processos diga respeito ao contato térmico do sistema com um banho térmico. Pode-se explicitar e denominar os processos da seguinte maneira:

(A) processo em que o sistema se encontra em contato com um banho térmico à temperatura T_A e

(B) processo em que o sistema se encontra em contato com outro banho térmico a outra temperatura T_B.

Uma equação genérica para a probabilidade de transição $W(\sigma|\sigma')$ associada a tal processo é dada por,

$$W(\sigma|\sigma') = pW_A(\sigma|\sigma') + qW_B(\sigma|\sigma') \tag{4.14}$$

onde $W_A(\sigma|\sigma')$ é uma probabilidade de transição associada ao processo (A) e $W_B(\sigma|\sigma')$ é uma probabilidade de transição associada ao processo (B). O processo (A) ocorre com probabilidade p e o processo (B) ocorre com probabilidade q, com $p + q = 1$.

A equação (4.14) refer-se a uma dinâmica estocástica composta de duas dinâmicas competitivas as quais podem ser duas dinâmicas de Glauber a diferentes temperaturas [Tomé et al 1991] ou uma dinâmica de Metropolis e outra de Kawasaki a diferentes temperaturas [Tomé e Oliveira 1989] ou quaisquer outras combinações de dinâmicas relacionadas ao modelo de Ising cinético. A dinâmica resultante de duas dinâmicas competitivas pode não ter reversibilidade microscópica, mesmo que cada uma das dinâmicas separadamente possua essa propriedade. Recentemente um grande número de trabalhos foram realizados nesse contexto [Bennett e Grinstein 1985], [De Masi et al 1985], [Dickman 1987], [Garrido et al 1987], [Ferrari et al 1988], [Tomé e Oliveira 1989], [Tomé et al 1991], [Oliveira 1992], [Rácz e Zia 1994]. A maioria desses trabalhos tem como principal objetivo a caracterização, do ponto de vista formal, de transições de fase fora do equilíbrio termodinâmico.

Serão discutidos a seguir modelos de Ising cinéticos com dinâmicas competitivas que introduzi juntamente com colaboradores (supra citados).

4.2.1 Auto-organização num modelo de Ising cinético com dinâmicas competitivas

No trabalho [Tomé e Oliveira 1989] tivemos como intuito a introdução de um "protótipo" de modelo de rede que conseguisse reproduzir, com as mínimas prerrogativas possíveis, alguns dos mecanismos relevantes ao fenômeno da auto-organização em sistemas que se encontram fora do equilíbrio termodinâmico. Consideramos que tal modelo seria o mais simples possível se fosse um modelo de dois estados por sítio e que tivesse interações locais somente entre primeiros vizinhos na rede, que é o caso do modelo de Ising com interações entre primeiros vizinhos. A auto-organização só pode ocorrer em sistemas abertos, portanto no modelo levamos em consideração o contato com um banho térmico. Além disso, e aqui está um dos pontos cruciais a serem levados em conta na auto-organização (além da característica, já incluída, do modelo ter interações locais que levam a equações não-lineares para grandezas macroscópicas que caracterizam estados estacionários), o sistema se ordena e mantém esse ordenamento irreversível se estiver em contato com uma fonte externa (de energia, por exemplo) que lhe proporcione um vínculo de não-equilíbrio permanente. De fato o auto-ordenamento pode se estabelecer em tais condições [Tomé et al 1987]: sistema em contato com uma fonte externa e com um banho térmico. A auto-organização [Nicolis e Prigogine 1977] só se mantém se os vínculos externos de não-equilíbrio forem mantidos. A fonte externa de energia foi levada em conta considerando que o sistema estivesse em contato permanente com um outro banho térmico.

Retomando à equação (4.14) devemos ter uma dinâmica estocástica que seja constituída das duas dinâmicas competitivas (A) e (B) que representem os dois processos acima citados:

(A) o contato do sistema com um banho térmico à temperatura T_A e

(B) fluxo contínuo de energia para o sistema.

Para tal consideramos o processo (A) simulado por uma dinâmica de Metropolis (4.9) a uma temperatura T_A e o processo (B) simulado por uma dinâmica de Kawasaki (4.10) na qual, especificamente, supusemos que o parâmetro relacionado com o inverso da temperatura tomasse o valor $\beta_B = -\infty$. Nesse caso $w_{ij}(\sigma)$ da expressão (4.10) só é diferente de zero quando ΔE_{ij} for positivo, ou seja quando o fluxo de energia for positivo (energia entrando no sistema). As probabilidades de transição $W_A(\sigma|\sigma')$ e $W_B(\sigma|\sigma')$ têm as suas propriedades explicitadas formalmente pelas expressões dadas

em (4.3) e em (4.11), respectivamente.

Levando em conta na expressão (4.14) as características das duas dinâmicas (acima citadas) obtêm-se as contribuições devidas aos dois processos para as equações de evolução de correlações. A equação de evolução para a magnetização é escrita através de uma expressão do tipo

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_i >= pF_i + qG_i \,, \tag{4.15}$$

onde F_i e G_i são as funções que aparecem do lado direito das equações (4.6) e (4.12) respectivamente. Analogamente a equação de evolução para a correlação entre pares de sítios vizinhos na rede é dada por

$$\tau \frac{d}{dt} < \sigma_j \sigma_k >= pF_{jk} + qG_{jk}, \tag{4.16}$$

onde F_{jk} e G_{jk} são as funções que aparecem do lado direito das equações (4.7) e (4.13) respectivamente.

Estudamos o modelo através da aproximação de campo médio dinâmico a nível de pares, a *aproximação de pares* citada no capítulo **3.** Assim sendo probabilidades de aglomerados com mais de dois sítios que aparecem na equação (4.16) foram aproximadas, seguindo o esquema mostrado em (3.3), de modo a serem escritas como funções de correlações de pares de spins e de um spin. Após esse truncamento fica-se com um conjunto fechado de equações para a magnetização e para a correlação de pares. Em *uma dimensão* o modelo não exibe transição de fase para nenhum valor dos parâmetros p, q e T_A . O que era esperado, dentro dos pressupostos da *conjectura "up-down"*, pois as regras do modelo possuem simetria "up-down" similares as do modelo de Ising em equilíbrio e portanto devem ter comportamento crítico similar ao do modelo de Ising em equilíbrio, o qual (como é bem conhecido) não exibe transição de fase em uma dimensão.

Consideramos o modelo definido numa rede quadrada bipartida e montamos equações para as magnetizações m_1 e m_2 de duas sub-redes. Verificamos que o sistema evolui no tempo até atingir estados estacionários de não-equilíbrio que podem ser de três tipos: paramagnético, onde $m_1 = m_2 = 0$; ferromagnético caracterizado por $m_1 = m_2 \neq 0$, e antiferromagnético onde $m_1 = -m_2 \neq 0$. Os parâmetros de ordem nesse problema são dois e estão relacionados com a soma e com a diferença das magnetizações em cada sub-rede. A fase ferromagnética é estável para baixos valores de q e para

baixas temperaturas como está mostrado no diagrama de fases da figura 1.

Para $q = 0$ o modelo se reduz a um modelo de equilíbrio e a fase ferromagnética é ordenada até um certo valor crítico da temperatura $k_B T/J = 2/\ln 2 = 2,8854$ que corresponde ao valor crítico obtido na aproximação de *Bethe-Peierls* para a transição ferromagnética-paramagnética num modelo de Ising a campo nulo e definido numa rede quadrada. As linhas de transição foram obtidas através de análise de estabilidade linear. Para altos valores de q observamos que o sistema se organiza numa fase antiferromagnética. O regime em que q é grande quando comparado com p corresponde a uma região não linear dos processos irreversíveis. Nessas condições o sistema recebe um grande fluxo de energia e exibe auto-organização: as interações entre os sítios são ferromagnéticas mas o sistema consegue se auto-organizar numa ordem antiferromagnética. A ordem antiferromagnética se mantém desde que se mantenham os vínculos externos de não-equilíbrio, representados aqui pela dinâmica W_B (ver equação (4.14)). Simulações de Monte Carlo para modelo similar a esse estão sendo realizadas por Grandi e Figueiredo [Grandi e Figueiredo 1995].

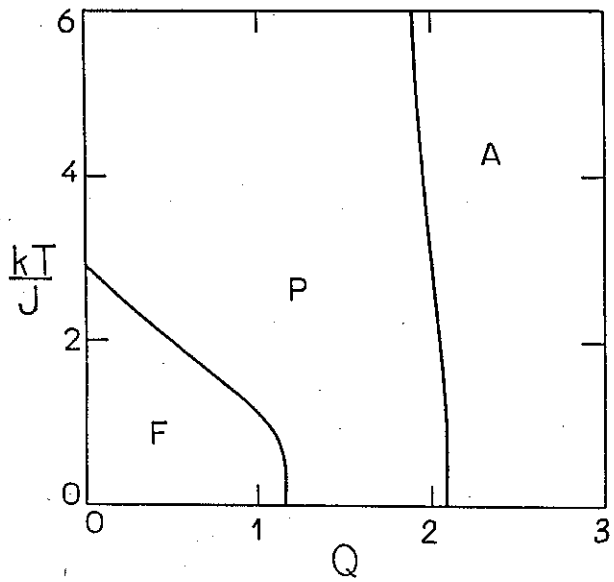


Figura 1. Diagrama de fases para o modelo de Ising cinético com dinâmicas competitivas. T é a temperatura do banho e a variável $Q = q/(1-q)$ está relacionada ao fluxo de energia. O sistema exibe três fases: ferromagnética (F), paramagnética (P) e antiferromagnética (A).

4.2.2 Modelo de Ising cinético com dinâmicas de Glauber competitivas

Com o objetivo de descrever os fatores relevantes no fenômeno da auto-organização de forma mais concisa ainda do que a considerada na seção anterior, propusemos [Tomé et al 1991] um modelo de Ising cinético com evolução temporal compreendendo duas prescrições de Glauber a diferentes temperaturas. O modelo, a ser enunciado, recai no modelo do votante majoritário [Liggett 1985] quando as temperaturas de cada uma das prescrições de Glauber tomam certos valores, os quais explicitaremos na próxima subseção.

O tratamento na *aproximação de pares* desse modelo de Ising cinético com dinâmicas de Glauber competitivas proporciona expressões *fechadas* para as linhas de estabilidade no diagrama de fases. Tal modelo é descrito por uma dinâmica estocástica com probabilidade de transição dada como em (4.14). Consideramos esta dinâmica como sendo constituída de duas prescrições de Glauber (4.8), a temperaturas distintas T_A e T_B, e aplicadas com probabilidade p e q, respectivamente, e de tal modo a permitir que somente um spin seja invertido a cada instante de tempo. Assim W_A e W_B são expressas como em (4.3) e temos a seguinte equação para a probabilidade de transição por sítio,

$$w_i(\sigma) = p\{\frac{1}{2}[1 - \sigma_i \tanh(\beta_A \sum_\delta \sigma_{i+\delta})]\} + q\{\frac{1}{2}[1 - \sigma_i \tanh(\beta_B \sum_\delta \sigma_{i+\delta})]\}, \tag{4.17}$$

onde β_A e β_B são parâmetros inerentes às prescrições de Glauber, e $p+q=1$.

Em uma dimensão esse modelo pode ser mapeado em um modelo descrito por uma única dinâmica de Glauber. Portanto em uma dimensão o sistema evolui no tempo até atingir o estado estacionário de equilíbrio.

Estudando o modelo na rede quadrada e tomando as interações entre primeiros vizinhos como sendo ferromagnéticas podemos constatar que o modelo não apresenta reversibilidade microscópica. A figura 2 mostra o diagrama de fases do modelo no plano (q, T_A) para um valor fixo de T_B onde somente estados paramagnético e ferromagnético de não-equilíbrio são encontrados. Quando permitimos um dos parâmetros, β_B por exemplo, ser negativo, então o sistema pode se encontrar numa fase antiferromagnética para altos valores de q como mostra a figura 3.

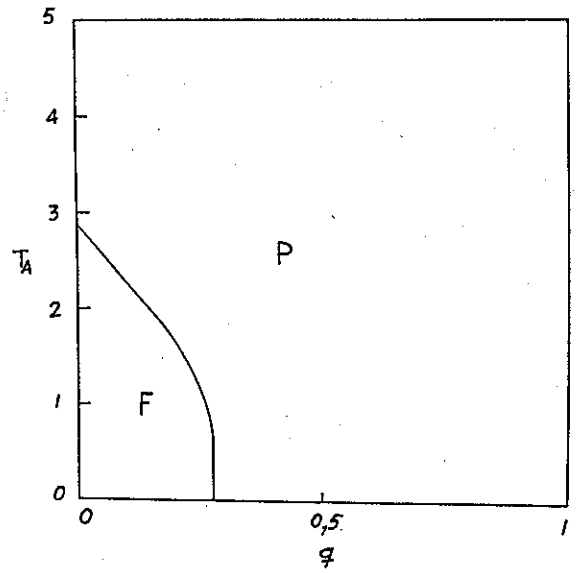


Figura 2. Diagrama de fases no plano (q, T_A) para o modelo de Ising cinético com dinâmicas de Glauber competitivas para o caso $\beta_B = 0$. O sistema exibe uma fase ferromagnética (F) e uma fase paramagnética (P).

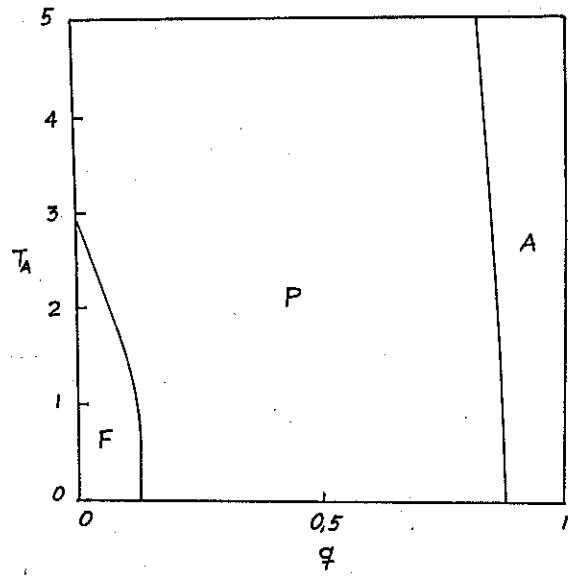


Figure 3. Diagrama de fases no plano (q, T_A) para o modelo de Ising cinético com dinâmicas de Glauber competitivas para o caso $\beta_B = -\infty$. Além da fase ferromagnética (F) e paramagnética (P) o sistema exibe também, nesse caso, a fase antiferromagnética (A).

4.2.3 O modelo do votante majoritário

O modelo supra citado [Tomé et al 1991] recai no modelo do votante majoritário em uma das suas formas [Liggett 1985] quando β_A e β_B são tais que $\beta_A \to \infty$ e $\beta_B \to -\infty$. Tomando *esses limites* na equação que define o nosso modelo, ou seja na equação (4.17), obtemos a prescrição para o modelo do *votante majoritário* definido pela seguinte probabilidade de transição

$$w_i(\sigma) = p\frac{1}{2}[1 - \sigma_i \, \mathrm{f}(\sum_\delta \sigma_{i+\delta})] + q\frac{1}{2}[1 + \sigma_i \, \mathrm{f}(\sum_\delta \sigma_{i+\delta})], \tag{4.18}$$

onde a somatória é sobre os primeiros vizinhos do sítio i e $\mathrm{f}(\sum_\delta \sigma_{i+\delta})$ é uma função que assume o valor 1 (-1) se $\sum_\delta \sigma_{i+\delta}$ for maior (menor) do que zero e o valor 0 se $\sum_\delta \sigma_{i+\delta}$ for nula. Assim sendo se o sítio i é escolhido ao acaso e se sua vizinhança for *na maioria* constituída por spins cujas variáveis dinâmicas assumem o valor $+1$ então no próximo instante de tempo a variável dinâmica associada ao spin i assumirá o valor $+1$ com probabilidade $p = 1 - q$ e o valor -1 (portanto contrário ao sinal da maioria de seus vizinhos) com probabilidade q. Pode-se observar facilmente que este modelo definido pela probabilidade de transição (4.18) possui simetria "up-down".

O modelo, definido numa rede quadrada, exibe fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética. A fase ferromagnética é estável para valores de q menores que um dado valor crítico q_c e a fase antiferromagnética é estável para $q > 1 - q_c$. O modelo é simétrico com relação a $q = 1/2$, o que é esperado dada a completa simetria das prescrições.

Usando a aproximação de pares obtivemos uma expressão analítica para q_c a qual só depende do número de coordenação z. Para $z = 4$, que corresponde à rede quadrada, temos $q_c = 5/37$. Resultados de simulações de Monte Carlo para esse modelo definido na rede quadrada [Oliveira 1992] mostram que o comportamento crítico do modelo está dentro da classe de universalidade do modelo de Ising e que numericamente $q_c = 0,075 \pm 0,001$. Esta é uma evidência convincente de que modelos sem reversibilidade microscópica mas que possuem regras (probabilidades de transição) com simetria "up-down" recaem na classe do modelo de Ising em equilíbrio o que vai ao encontro *da conjectura "up-down"*.

4.2.4 Irreversibilidade microscópica no modelo do votante majoritário

No modelo do votante majoritário a falta de reversibilidade microscópica pode ser vista de maneira bastante clara. Antes de efetuar a comprovação dessa propriedade apresento a seguir uma breve exposição do procedimento a ser utilizado na verificação do balaceamento detalhado.

Para observarmos se um modelo tem ou não reversibilidade microscópica (balanceamento detalhado) podemos considerar uma sucessão de estados pela qual o sistema pode passar retornando ao estado inicial e a sucessão percorrida no sentido inverso. Se a probabilidade de transição para o sistema sair de um estado e retornar a ele mesmo for igual à probabilidade de transição para o sistema sair desse estado e percorrer os estados intermediários na ordem inversa, para qualquer sucessão de estados, então o modelo apresenta reversibilidade microscópica. Se essas probabilidades forem diferentes para pelo menos uma sucessão de estados então o modelo não apresenta reversibilidade microscópica. A necessidade de sairmos de um estado e retornar a ele próprio está relacionada com o próprio fato de não sabermos se o modelo apresenta reversibilidade microscópica e portanto não sabermos *a priori* se uma distribuição de probabilidades de Gibbs pode ser associada aos estados estacionários para os quais o sistema evolui.

Consideremos o seguinte aglomerado de spins e a sucessão de estados pelos quais os spins centrais são invertidos em instantes de tempos consecutivos. Suponhamos que esse aglomerado se encontra no instante inicial no estado A, considerado no desenho abaixo

$$\begin{array}{ccccc} & + & + & & \\ + & + & - & + & \\ & + & - & & \end{array}$$

e que no próximo instante de tempo se encontra no estado B

$$\begin{array}{ccccc} & + & + & & \\ + & - & - & + & \\ & + & - & & \end{array}$$

depois no estado C

$$\begin{array}{ccccc} & + & + & & \\ + & - & + & + & \\ & + & - & & \end{array}$$

no instante seguinte no estado D

$$\begin{array}{ccccc} & + & + & & \\ + & + & + & + & \\ & + & - & & \end{array}$$

e finalmente retorna ao estado A.

Se as regras do modelo do votante majoritário, expressas em (4.18), forem aplicadas na transformação cíclica $A \to B \to C \to D \to A$ então a probabilidade de transição total associada à essa transformação é dada por

$$W(B|A)W(C|B)W(D|C)W(A|D) = (q)(\frac{1}{2})(p)(q) = \frac{1}{2}pq^2. \qquad (4.19)$$

Se os estados forem percorridos na ordem inversa ou seja, $A \to D \to C \to B \to A$ então usando (4.18) obtemos

$$W(D|A)W(C|D)W(B|C)W(A|B) = (p)(q)(\frac{1}{2})(p) = \frac{1}{2}p^2q. \qquad (4.20)$$

Comparando as expressões (4.19) e (4.20) vemos que as probabilidades associadas à sucessão de estados $A \to B \to C \to D \to A$ e à sucessão $A \to D \to C \to B \to A$ são *diferentes*. Portanto *a reversibilidade microscópica* **não é** observada no modelo do votante majoritário. Ou seja ele é um modelo com *regras* locais *irreversíveis* o que consequentemente *não* obedece à condição do balanceamento detalhado. Assim sendo os *estados estacionários ferromagnetico, paramagnético e antiferromagnético* são estados estacionários *de não-equilíbrio* e não é possível associar *de maneira apriorística* nenhuma probabilidade de Gibbs a esses estados estacionários.

A título de comparação verifiquemos quais seriam as probabilidades associadas à sucessão de estados percorridos num sentido e em outro se aplicassemos na atualização dos estados uma dinâmica que obedece ao princípio do balanceamento detalhado. Tomemos essa dinâmica descrita por uma única prescrição de Metropolis (4.9) a uma temperatura T tal que $\beta = 1/k_B\,T$. Nesse caso temos para a sucessão $A \to B \to C \to D \to A$ a seguinte probabilidade de transição,

$$W(B|A)W(C|B)W(D|C)W(A|D) = (e^{-4\beta J})(1)(1)(e^{-4\beta J}) = e^{-8\beta J} \qquad (4.21)$$

e para a sucessão $A \to D \to C \to B \to A$ temos

$$W(D|A)W(C|D)W(B|C)W(A|B) = (1)(e^{-8\beta J})(1)(1) = e^{-8\beta J}. \qquad (4.22)$$

Comparando (4.21) e (4.22) vemos que essas expressões são idênticas e que portanto os caminhos percorridos numa direção e na direção inversa têm a mesma probabilidade associada o que implica que para essa sucessão de estados a reversibilidade microscópica é observada. Não é necessário pensarmos em outros caminhos para comprovar que o modelo de Ising evoluindo de acordo com uma única prescrição de Metropolis evolui para estados estacionários de equilíbrio. De fato essa prescrição obedece à condição de balanceamento detalhado como enunciado em (2.8).

4.3 O modelo ZGB com dessorção de monóxido de carbono: uma reação química irreversível com um ponto crítico que exibe comportamento de Ising

É apresentado a seguir o modelo original de Ziff-Gulari-Barshad (*ZGB*) para depois discutirmos esse modelo levando em conta a reação de dessorção do monóxido de carbono, a qual consegue trazer elementos que tornam as previsões do modelo mais realistas quando comparadas com experiências. O modelo *ZGB* com dessorção é um tópico pertinente a esse capítulo pois apresenta um ponto crítico descrito pela mesma classe de universalidade do modelo de Ising de equilíbrio.

4.3.1 O modelo ZGB

O modelo *ZGB* [Ziff et al 1986] é um modelo de gás de rede que foi construído com o propósito de simular a reação de oxidação do monóxido de carbono (CO) sobre uma superfície catalítica. As reações concernentes a esse processo, e que são simuladas nesse modelo, são

$$\begin{aligned} CO\ (gas) &\rightarrow CO\ (ads), \\ O_2\ (gas) &\rightarrow 2O\ (ads), \\ O\ (ads) + CO\ (ads) &\rightarrow CO_2\ (gas), \end{aligned} \tag{4.23}$$

onde (ads) indica que uma molécula (ou um átomo) está adsorvida na superfície catalítica que está sendo considerada. Essa superfície é representada

no modelo por uma rede quadrada.

Cada sítio na rede quadrada pode estar ocupado por um átomo de oxigênio (O), ocupado por uma molécula de monóxido de carbono (CO) ou pode estar vazio. As partículas sobre a rede sofrem as reações (4.23) as quais são levadas em conta no modelo pela construção de regras estocásticas locais aplicadas sequencialmente. Na evolução temporal do sistema a adsorção de CO ocorre com probabilidade y e a adsorção de O com probabilidade $1-y$. Escolhe-se um sítio aleatoriamente sobre a rede. Se esse sítio estiver vazio e se o processo de adsorção de CO for escolhido então a molécula de CO será adsorvida. Quando há adsorção, imediatamente olha-se para os primeiros quatro vizinhos do sítio escolhido. Se pelo menos um desses vizinhos estiver ocupado com um átomo de O então a reação $CO\,(ads) + O\,(ads) \rightarrow CO_2\,(gas)$ ocorre instantaneamente deixando dois sítios vazios sobre a rede. Se o processo de adsorção da molécula de oxigênio for escolhido (gera-se um número aleatório e se esse número for maior que y então esse será o processo escolhido) e se o sítio escolhido estiver vazio e um vizinho seu também, então a molécula de oxigênio se dissocia e dois átomos de oxigênio passam a ocupar os dois sítios vazios. Observa-se a vizinhança de cada um dos dois átomos adsorvidos e se houver ao menos uma molécula de monóxido de carbono nessa vizinhança então uma molécula de CO_2 é criada e sai instantaneamente da rede deixando sítios vazios.

Na consideração desses mecanismos do modelo fica transparente o fato de que se a rede em algum instante ficar completamente ocupada só por moléculas de CO ou só por átomos de O nenhuma reação ocorrerá mais e o sistema fica "aprisionado" numa dessa configurações. Então os dois estados estacionários triviais do modelo são os estados *absorvente de carbono* (rede completamente preenchida por CO) e *absorvente de oxigênio* (rede completamente preenchida por O). A denominação estado absorvente diz respeito a um estado relacionado a configurações das quais o sistema não pode escapar. O estado estacionário não trivial, denominado de estado *ativo*, é aquele em que as reações estão continuamente acontecendo. Simulações de Monte Carlo [Ziff et al 1986] e aproximações de campo médio dinâmico [Dickman 1986] revelaram que o modelo exibe duas transições de fase que se dão à medida em que o parâmetro y é variado.

A transição do estado absorvente de oxigênio para o estado ativo é contínua e pertence à classe de universalidade da percolação direcionada [Grinstein et al 1989], [Jensen et al 1990]. A transição do estado ativo para o estado

absorvente de CO é de primeira ordem [Ziff et al 1986]. Apresentarei mais discussões sobre este modelo no capitulo **5** quando considerar os modelos com estados absorventes que forneceram contribuições importantes na concepção da conjectura da percolação direcionada. Essa exposição será utilizada na análise elaborada a seguir, onde introduziremos o modelo ZGB modificado de modo a compreender a reação de dessorção do monóxido de carbono.

4.3.2 O modelo ZGB com dessorção

É observado experimentalmente (e.g. [Ehsasi et al 1989]) que na reação de oxidação do monóxido de carbono sobre uma superfície catalítica ocorrem transições entre estados com alta concentração de CO e estados com baixa concentração de CO. A baixas temperaturas observa-se uma descontinuidade na taxa de produção de CO_2, à medida em que a pressão parcial do monóxido de carbono é aumentada. A descontinuidade na taxa de produção de CO_2 diminui quando a temperatura aumenta e passa a não ocorrer mais a uma dada temperatura crítica.

A interpretação desses dados experimentais leva à conclusão de que na temperatura crítica a taxa de dessorção de CO deve ser suficientemente alta para que não haja mais distinção entre as fases ricas em CO e pobres em CO. Aqui se observa uma analogia com o diagrama de fases de uma substância simples como a água no qual há uma linha de transição líquido-vapor, de primeira ordem, que termina num ponto crítico a partir do qual não há mais distinção entre líquido e vapor.

Com o objetivo de descrever essa observação experimental na reação de oxidação do monóxido de carbono consideramos [Tomé e Dickman 1993] o modelo ZGB modificado de modo a permitir a *dessorção de CO*. Fizemos simulações de Monte Carlo muito detalhadas para analisar o comportamento crítico do modelo.

No modelo a dessorção espontânea de monóxido de carbono ocorre com probabilidade k,

$$CO\ (ads) \xrightarrow{k} CO\ (gas). \tag{4.24}$$

Essa reação juntamente com as reações descritas em (4.23) foram levadas em conta na construção do modelo, que passa então a ter dois parâmetros y e k. Dessa maneira na simulação computacional do novo modelo escolhemos, através da comparação de k e y com um número aleatório, qual dos processos

será realizado num dado instante de tempo: a dessorção de CO ou as reações compreendidas em (4.23). Se a reação de dessorção é a sorteada então escolhemos um sítio ao acaso, se ele estiver ocupado por uma molécula de CO então essa deixa a rede ($CO_{(ads)} \rightarrow CO_{(gas)}$) esvaziando o sítio escolhido. No caso do procedimento de adsorção de CO ou de O_2 ser escolhido então a realização computacional das reações (4.23) é efetuada conforme descrita na subseção que precede essa.

Com a introdução da reação (4.24) a distinção entre uma fase rica em CO e uma fase pobre em CO persiste para baixos valores de k . A partir de uma probabilidade crítica k_c essa distinção deixa de ocorrer. Assim a transição do estado ativo para o estado rico em CO é de primeira ordem para valores de k menores do que k_c e é contínua em k_c (ponto crítico). Para $k > k_c$ não há mais transição. Esses resultados foram obtidos através de simulações numéricas e podem ser apreciados na figura 4.

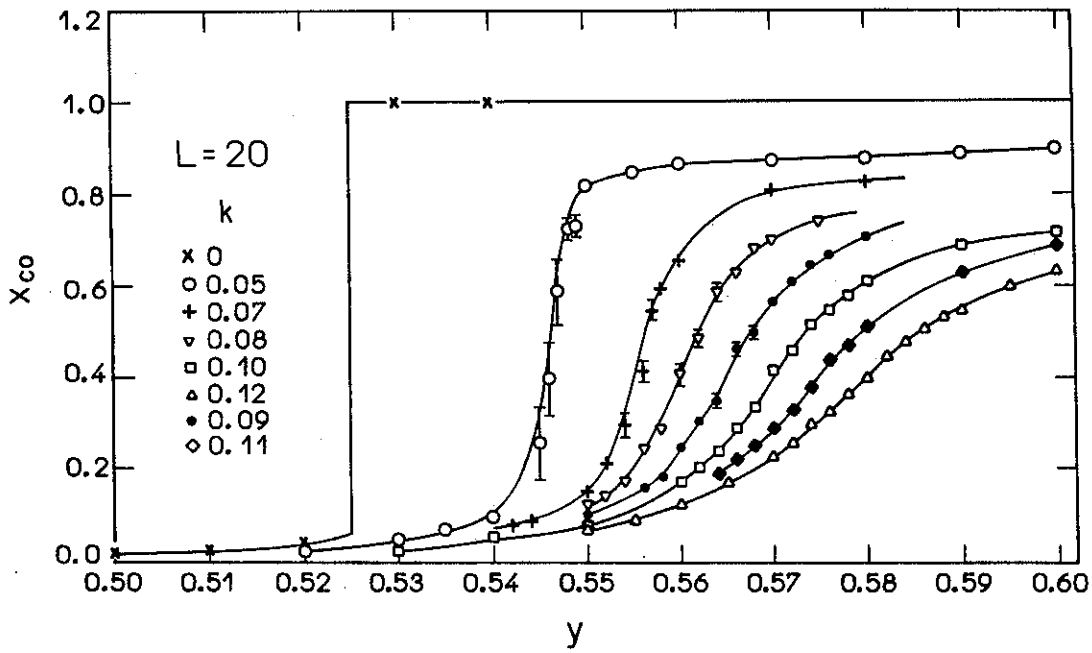


Figura 4. Densidade de CO como função do parâmetro y para vários valores da taxa de dessorção k, para o modelo ZGB com dessorção. Os resultados da figura foram obtidos por simulações numa rede quadrada de 20×20 sítios. O caso $k = 0$ corresponde ao modelo ZGB original.

As simulações de Monte Carlo [Tomé e Dickman 1993] para o modelo ZGB com dessorção conseguem também mostrar que o *ponto crítico* terminal nesse modelo *pertence à classe de universalidade do modelo de Ising* em duas dimensões. Na análise de teoria de escala finita, o valor crítico de k se escala com o tamanho do sistema L na forma

$$k_c(L) - k_c = aL^{-1/\nu} \tag{4.25}$$

onde k_c é a taxa de dessorção crítica no limite $L \to \infty$ e ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação. A análise de "colapso de dados" indica que $\nu = 1$, que é o valor desse expoente crítico para o modelo de Ising em duas dimensões.

Também estudamos o cumulante u_L de quarta ordem [Binder 1984] para a concentração de CO , e encontramos que $u_L = 0.61$ para $k_c \simeq 0.04$. Como é conhecido, o valor 0.61 para o cumulante de quarta ordem é uma propriedade universal na análise de escala finita do modelo de Ising com condições periódicas de contorno.

Uma análise de caráter geral inserida no contexto da conjectura "up-down", conjectura mencionada no início desse capitulo, pode ser feita para o estudo analítico do ponto crítico no modelo ZGB com dessorção.

Consideremos a descrição do modelo fornecida na aproximação de campo médio simples. Nessa aproximação as equações de evolução para as concentrações de CO e de O, X_{CO} e X_O respectivamente, são dadas por,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}X_{CO} &= 2(1-y)(1-X_{CO}-X_O)^2(1-X_{CO})^3 \\ &\quad -y(1-X_O-X_{CO})[1-(1-X_O)^4] \end{aligned} \tag{4.26}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}X_O &= y(1-X_O-X_{CO})(1-X_O)^4 \\ &\quad -2(1-y)(1-X_{CO}-X_O)^2(1-X_{CO})^3 - kX_{CO}. \end{aligned} \tag{4.27}$$

Em seguida fazemos a expansão das equações acima ao redor dos valores críticos de X_O e X_{CO} e dos valores assumidos pelos parâmetros no ponto crítico k_c e y_c. Obtemos então equações para η e ξ, respectivamente, os desvios de X_O e X_{CO} de seus valores críticos. Após uma transformação linear $(\eta, \xi) \to$

(Φ, Ψ) que diagonaliza os termos lineares obtemos a seguinte equação para o modo principal

$$\frac{d}{dt}\Phi = a + b\Phi - c\Phi^3 \tag{4.28}$$

onde

$$a = 0,2879\kappa - 1,0155Y, \qquad b = 1,1823Y - 0,7823\kappa\ , \qquad c = 0,3703,$$

e κ e Y são os desvios de y e de k com relação aos valores y_c e k_c.

Portanto o modo Φ é governado por uma equação similar à equação para a magnetização no modelo de Ising, sujeito a um campo externo, obtida na aproximação de campo médio e expandida ao redor do ponto crítico. A analogia é realizada aqui considerando combinações lineares de κ e Y como análogos da temperatura e do campo magnético externo no modelo de Ising. A simetria "up-down" é aqui obtida ao longo de $a = 0$, caso em que a equação (4.28) é invariante pela transformação $\Phi \rightarrow -\Phi$.

4.4 Autômato celular probabilístico para o estudo de um sistema imunológico

4.4.1 Introdução

Modelos de rede têm sido usados na análise de sistema biológicos há alguns anos. O primeiro modelo proposto nesse contexto é o conhecido autômato de Kauffman [Kauffman 1969] a partir do qual se seguiram vários modelos de rede objetivando a descrição de diferentes sistemas biológicos. Particularmente as várias partes do sistema imune têm sido estudadas, com sucesso, por modelos de rede, muitos desses relatados no artigo de revisão sobre o assunto [Celada e Seiden 1992].

Em trabalho realizado em colaboração com Drugowich de Felício [Tomé e Drugowich 1996] introduzimos um autômato celular probabilístico para estudar a parte do sistema imunológico constituída pelas células "$T - helper$" ou também chamadas de células T_H. A simulação desse sistema por um autômato [Brass et al 1994] leva à consideração de modelos bastante simples e que possuem simetria *"up-down"*. O modelo de [Tomé e Drugowich 1996], definido numa rede quadrada, apresenta transição de fase cinética que se dá

via quebra espontânea de simetria. Do ponto de vista da mecânica estatística de não equilíbrio o modelo consegue dar contribuições para o estudo do comportamento crítico de modelos irreversíveis. Do ponto de vista da imunologia, muitos dos experimentos realizados em laboratórios vão ao encontro dos mecânismos propostos para o estudo do sistema T_H através de autômatos celulares. Como já afirmado por vários pesquisadores [Celada e Seiden 1992], [Brass et al 1994a], [Poo et al 1988] que se dedicam ao estudo do sistema imunológico, os autômatos celulares parecem dar uma boa descrição dessa parte do sistema. Segundo esses pesquisadores as células T_H encontram-se compactadas nos nodos linfáticos e se comunicam por interações de curto alcance. Nesse caso a estrutura espacial dada por uma rede parece ser de fato importante na previsão do tipo de resposta imunológica dada pelo sistema. Modelos de rede, como aquele a ser exposto a seguir, conseguem mostrar que quando a taxa de infecção parasítica for suficientemente alta o sistema imune consegue se organizar de tal maneira a proporcionar imunidade completa ou susceptibilidade com respeito a determinados parasitas. Esse processo, chamado de "polarização" das células T_H, pode ser considerado na análise do "status" imunológico para várias infecções parasíticas [Brass et al 1994].

4.4.2 O modelo

Consideramos [Tomé e Drugowich 1996] um *autômato celular probabilístico* onde células de três tipos: T_H0, T_H1 e T_H2 ocupam os sítios de uma rede. A cada sítio é associada uma variável dinâmica σ_i como indicado na tabela a seguir,

célula	T_H0	T_H1	T_H2
σ_i	0	1	-1

No nosso modelo as regras dinâmicas locais que descrevem as interações entre as células T_H são regras totalísticas [Wolfram 1983] estocáticas e locais. Definimos probabilidade de transição

$$w_i(\sigma_i \mid \sigma_i', S_i')$$

com S_i' definido por

$$S_i' = \sum_{\delta'} \sigma_{i+\delta'},$$

onde a somatória é feita sobre os primeiros vizinhos de um sítio i da rede. A evolução da probabilidade $P_\ell(\sigma)$ é dada como em (2.9) e a probabilidade de transição $W(\sigma|\sigma')$ é dada através de produto de probabilidades $w_i(\sigma_i \mid \sigma'_i, S'_i)$ como em (2.11), pois aqui se trata de um autômato celular (todos os sítios são atualizados simultâneamente).

As probabilidades de transição estão dadas esquematicamente na tabela que segue,

$$
\begin{array}{cccc}
S'_i & \sigma'_i & \sigma_i & w_i \\
 & & 1 & p \\
>0 & 0 & 0 & 1-p \\
 & & -1 & 0 \\
 & & 1 & p/2 \\
=0 & 0 & 0 & 1-p \\
 & & -1 & p/2 \\
 & & 1 & 0 \\
<0 & 0 & 0 & 1-p \\
 & & -1 & p \\
 & & 1 & 1-r \\
\forall & +1 & 0 & r \\
 & & -1 & 0 \\
 & & 1 & 0 \\
\forall & -1 & 0 & r \\
 & & -1 & 1-r
\end{array}
\tag{4.29}
$$

As densidades de células T_H1, T_H2 e T_H0 no passo de tempo ℓ são definidas através das expressões,

$$x_\ell =< \delta(\sigma_i, 1) >_\ell, \qquad y_\ell =< \delta(\sigma_i, -1) > \text{ e } \qquad z_\ell =< \delta(\sigma_i, 0) > . \tag{4.30}$$

As equações de evolução para as densidades de cada tipo de célula são obtidas pela definição dessas grandezas (4.30) como funções de estado e pelo uso da equação de evolução para $P_\ell(\sigma)$. Estas equações são dadas formalmente por,

$$x_{\ell+1} =< w_k(1 \mid \sigma') >_\ell = P_{\ell+1}(1), \tag{4.31}$$

$$y_{\ell+1} =< w_k(-1 \mid \sigma') >_\ell = P_{\ell+1}(-1) \tag{4.32}$$

e

$$z_{\ell+1} = (1-p)z_\ell + r(1-z_\ell). \tag{4.33}$$

A equação para a evolução da correlação de dois sítios i e j vizinhos na rede que estejam ocupados por células T_H1 e T_H0, respectivamente, é dada por,

$$P_{\ell+1}(1,0) =< w_i(-1 \mid \sigma_i, S_i) w_j(0 \mid \sigma_j, S_j) >_\ell . \tag{4.34}$$

Equações similares podem ser deduzidas para todas as outras correlações de dois ou mais sítios vizinhos.

Observando-se (4.29) verifica-se que as regras do modelo apresentam invariância pela troca de todos os sinais das variáveis utilizadas na definição das probabilidades de transição $w_i(\sigma_i \mid \sigma_i', S_i')$. Entretanto os mecanismos de interação entre as células contidos no modelo, através das probabilidades de transição, são tais que os estados -1 e $+1$ são absolutamente simétricos, o que não se dá para o estado 0. Assim o modelo de três estados aqui sendo examinado tem simetria "up-down" da mesma maneira como ocorre no modelo de Blume-Emery-Griffiths [Blume et al 1971] (modelo de equilíbrio). Essa simetria nos permitiu a obtenção de uma dinâmica subjacente àquela considerada no modelo, de onde deduzimos alguns resultados exatos. Essa dinâmica subjacente é definida sobre o espaço de configurações reduzido descrito pelas váriaveis dinâmicas $\{\eta_i\}$ relacionadas com as variáveis σ_i por $\eta_i = \sigma_i^2$. A distribuição de probabilidade marginal das variáveis reduzidas $\{\eta_i\}$ obedece também uma equação de evolução como em (2.9) a qual denominamos de dinâmica subjacente. Isso não é válido para um modelo qualquer; a particularidade das regras do modelo é que permite obter tal dinâmica.

A dinâmica subjacente possui regras simples em que o estado reduzido de um sítio se modifica independentemente dos outros. As probabilidades de transição $w(\eta_i|\eta_i')$ são dadas pela matriz estocástica

$$\begin{pmatrix} w(0|0) & w(0|1) \\ w(1|0) & w(1|1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-p & r \\ p & 1-r \end{pmatrix}, \tag{4.35}$$

que tem como vetor estacionário

$$\begin{pmatrix} P(\eta_i = 0) \\ P(\eta_i = 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r/(p+r) \\ p/(p+r) \end{pmatrix}. \tag{4.36}$$

A densidade estacionária de células T_H 0 pode ser obtida exatamente e é dada por

$$z = P(\sigma_i = 0) = P(\eta_i = 0) = \frac{r}{p+r}. \tag{4.37}$$

Como $x + y + z = 1$, então a soma das concentrações estacionárias de células do tipo T_H1 e T_H2 é dada por

$$x + y = P(1) + P(-1) = \frac{p}{p+r}. \tag{4.38}$$

Também se pode determinar exatamente qual é a probabilidade de encontrarmos aglomerados de K células T_H0

$$P(0, 0, ..., 0) = \left(\frac{r}{p+r}\right)^K. \tag{4.39}$$

A equação (4.37) é um caso particular de (4.39) quando $K = 1$. Os resultados acima referidos, assim como a própria dinâmica subjacente, são relevantes na descrição dos estados estacionários e foram utilizados em várias análises concernentes à caracterização do ordenamento no modelo. Foram importantes, por exemplo, no estudo do comportamento das concentrações de células como função dos parâmetro do modelo, nos limites em que as simulações de Monte Carlo não conseguiram prover resultados definitivos.

O modelo tem uma solução estacionária trivial: evolução do sistema para um estado estacionário em que a concentração de células T_H1 é igual à concentração de células T_H2. Usando (4.38) observamos que neste estado $x = y = \frac{1}{2}(\frac{p}{p+r})$. Assim temos a descrição exata dessa fase a qual denominamos desordenada.

Através de aproximação de campo médio dinâmico e de simulações de Monte Carlo numa rede quadrada observamos que a fase desordenada ($x = y$) deixa de ser estável para valores de r menores do que um valor crítico r_c, para valores fixos de p. Para $r < r_c$ a fase estável é uma fase ordenada onde $x \neq y \neq 0$. Definimos o parâmetro de ordem α como sendo a diferença entre as densidades de células T_H 1 e T_H 2, isto é, $\alpha = x - y$. Na fase ordenada $\alpha \neq 0$ há uma polarização das células T_H ou seja verifica-se que há uma maioria de células T_H1 ou de células T_H2 no sistema. Esses resultados podem ser observados nas figuras 5 e 6. A transição de fase em r_c se dá através de uma quebra espontânea de simetria.

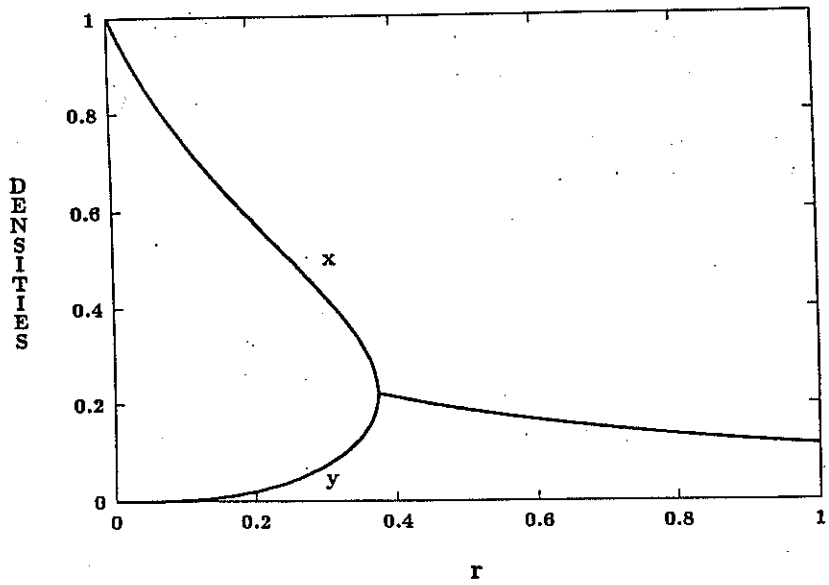


Figura 5. Densidades x e y de células T_H1 e T_H2 como funções do parâmetro r para o caso $p = 0,3$ obtidas por aproximação de pares.

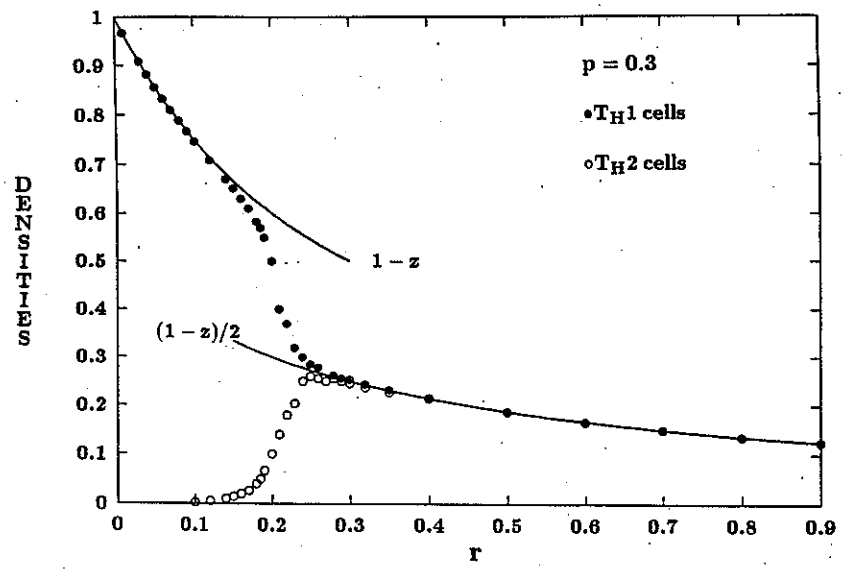


Figura 6. Densidades x e y de células T_H1 e T_H2 como funções do parâmetro r para o caso $p = 0,3$ obtidas por simulações de Monte Carlo. A linha $(1-z)/2$ é o resultado exato para as densidades no estado desordenado. A linha $(1-z)$ corresponde ao resultado assintótico (r pequeno) para x, onde $z = r/(p+r)$.

Acreditamos que o modelo obedeça a conjectura "up-down" e que portanto seu comportamento crítico esteja na classe de universalidade do modelo de Ising em duas dimensões.

Os resultados obtidos através de simulações numéricas e de aproximação de campo médio dinâmico, feita ao nível da aproximação de pares, são análogos como se aprecia na comparação das figuras 5 e 6. Do ponto de vista quantitativo a aproximação de campo médio superestima o valor de r_c com relação ao resultado de simulações. Este é um resultado que sempre se espera quando são comparados resultados de aproximações de campo médio com resultados simulacionais.

Do ponto de vista da *imunologia* [Brass et al 1994] esses resultados têm sua interpretação em termos das diferentes respostas imunológicas. A diferença entre o número x de células T_H1 e o número y de células T_H2 determina o tipo de resposta imunológica que o organismo pode exibir. O parâmetro r está relacionado com o inverso da taxa de infecção (quanto menor r maior será a taxa de infecção). Fixado p, para $r > r_c$ temos $x = y$ e portanto a resposta imunológica é indiferenciada: um organismo pode ter respostas imunológicas do tipo T_H1 ou do tipo T_H 2. A partir do ponto onde ocorre a quebra espontânea de simetria ($r = r_c$ para p fixo) emergem os estados onde um tipo de célula predomina sobre a outra ($\alpha \neq 0$), ou seja onde a resposta imunológica do sistema é diferenciada. Portanto a partir de um limiar crítico de infecção o organismo se torna imune (ou suscetível) com relação a certos parasitas dependendo do tipo de células T_H que, nesse regime ($r < r_c$), predomina sobre a outra. A imunidade e a susceptibilidade, conferidas pela predonimância de um tipo de célula T_H, depende do tipo de parasita a que o indivíduo está exposto, como exposto em [Brass et al 1994].

Do ponto de vista *da mecânica estatística* os resultados *mais relevantes* dessa análise advêm da construção da dinâmica subjacente acima referida. Uma das *contribuições importantes* que segue desse procedimento está relacionada com a análise da formação do estado ordenado nesse modelo. Na dinâmica subjacente obtemos equações de evolução para densidades de sítios ocupados (células T_H1 ou T_H2) e de sítios vazios (células T_H0). A solução estacionária dessa dinâmica corresponde a ocupar sítios com um certa probabilidade $q = p/(p+r)$ (ver equação(4.36)) e deixá-los vazios com probabilidade $1-q$, independentemente da vizinhança. Portanto, esse processo se identifica exatamente com o problema de percolação por sítios [Stauffer 1985]. A diferença, irrelevante para o cálculo de médias de funções de estado no regime

estacionário, está no fato de que o processo aqui é estocástico havendo portanto correlação entre configurações sucessivas enquanto que no problema da percolação as médias são feitas sobre várias configurações geradas de forma independente.

A partir dessa identificação concluímos que acima da probabilidade de ocupação crítica q_c o sistema original deve apresentar aglomerados infinitos de sítios ocupados por células T_H1 ou T_H2. Os valores de p e r para os quais esses aglomerados ocorrem são dados por $q_c < p/(p+r)$. O sistema só pode se ordenar dentro dessa região dos parâmetros p e r o que significa que a linha crítica deve ocorrer dentro dessa região. Esse resultado é de fato verificado a partir de nossos resultados tanto pela aproximação de campo médio quanto pelas simulações. Assim o mecanismo de ordenamento no nosso modelo é tal que primeiro devemos ter a formação de um aglomerado infinito formado por células T_H1 ou T_H2. Diminuindo o valor do parâmetro de controle r temos a transição que de fato é observada no modelo onde devem haver aglomerados infinitos de células T_H1 *ou* de células T_H2.

A partir de uma análise de campo médio simples e da introdução de um campo de quebra de simetria é possível estabelecermos uma analogia, a nível de uma análise de campo médio, entre o modelo de rede para as células T_H aqui apresentado e o modelo de Ising. Este procedimento é esboçado a seguir.

Consideremos que as regras de transição sejam modificadas como segue

$$T_H0 \xrightarrow{p_1} T_H1$$

e

$$T_H0 \xrightarrow{p_2} T_H2$$

onde p_1 e p_2 são probabidades relacionadas às probabilidades de transição $w_i(\sigma_i = 1 \mid \sigma_i' = 0, S_i' > 0)$ e $w_i(\sigma_i = -1 \mid \sigma_i' = 0, S_i' < 0)$. Em todas as análises do modelo, realizadas acima, tomamos $p_1 = p_2 = p$. No procedimento exposto a seguir é considerado um pequeno campo h que quebra a simetria "up-down",

$$p_1 = p + h \qquad \text{e} \qquad p_2 = p - h.$$

Então $p = p_1 + p_2$ e $h = (p_1 - p_2)/2$.

A equação para o parâmetro de ordem α incluindo o campo h é dada na aproximação de campo médio simples por

$$\alpha' \sim (1 - r - pA)\alpha - pB\alpha^3 + 2hC_0$$

onde A e B são funções de r e p e C_0 é uma constante. Termos não lineares em h foram desprezados nessa equação. Essa expansão é similar à obtida na análise de campo médio para o modelo de Ising, na presença de um campo externo, nas vizinhanças de um ponto crítico.

Podemos definir uma susceptibilidade generalizada da forma [Tsallis e Martins 1994], [Tomé 1994]

$$\chi = \frac{\partial \alpha}{\partial h}$$

e calculá-la na vizinhança do ponto crítico em $h = 0$, obtendo

$$\chi \approx |r - r_c|^{-1}$$

para p fixo. Esse resultado assinala uma transição contínua com expoente crítico clássico $\gamma = 1$. Estamos procedendo simulações numéricas onde deveremos determinar definitivamente a classe de universalidade a que pertence o presente modelo.

Capítulo 5

Modelos de rede com estados absorventes

5.1 Conjectura da percolação direcionada e características de modelos com estados absorventes

Os modelos de rede com estados absorventes são modelos com características intrinsecamente irreversíveis. As probabilidades de transição que os definem impedem que eles obedeçam à condição do balanceamento detalhado. Um estado absorvente é aquele tal que a transição dele para qualquer outro estado é proibida embora a transição de outros estados para ele seja permitida. Uma vez em tal configuração o sistema não pode escapar mais dela.

O comportamento crítico de tais modelos é bastante robusto e tem demonstrado que a classe de universalidade a eles associados é a da percolação direcionada em $d+1$ dimensões, onde d é a dimensão da rede em que está definido o modelo. A conjectura da percolação direcionada foi proposta por Janssen [Janssen 1981] e independentemente por Grassberger [Grassberger 1982] e generalizada por Grinstein, Lai e Browne [Grinstein et al 1989]. Esta conjectura é enunciada como segue:

"Se um modelo exibe transições contínuas para estados absorventes então o comportamento crítico do modelo é o mesmo da classe de universalidade da percolação direcionada".

Modelos de uma espécie: o processo de contato e sua interpretação como um modelo para processos epidêmicos

A conjectura foi proposta inicialmente para modelos de uma única componente. Ou seja para um sistema de partículas interagentes residindo sobre os sítios de uma rede que podem estar ocupados por uma partícula ou podem estar vazios. Este é o caso do processo de *contato* [Harris 1974] o qual pode ser interpretado como um processo *epidêmico simples* [Bailey 1975]. O processo é definido numa rede onde os sítios podem ser vistos como sendo "indivíduos" que podem estar *sãos* (sítio vazio) ou *infectados* (sítios ocupados). Os indivíduos sãos se tornam infectados se estiverem próximos a eles pelo menos um indivíduo infectado. A taxa de infecção é tanto maior quanto maior for o número de infectados vizinhos ao indivíduo são. O outro processo que é levado em conta no modelo se refere à recuperação dos infectados: esses se tornam sãos espontaneamente. Entretanto a recuperação não proporciona imunidade aos indivíduos. Uma vez sãos, se tiverem como vizinhos indivíduos infectados têm novamente possibilidade de ficarem infectados. Como se vê, é um processo dinâmico em que indivíduos são infectados e se recuperam continuamente. Entretanto, na sua evolução temporal o sistema pode atingir um estado no qual *todos os indivíduos estão sãos.* Nesse caso a epidemia não tem mais meios para se propagar e esse estado será um estado estacionário *absorvente.* O sistema também pode evoluir para o estado estacionário *ativo* onde a *epidemia nunca cessa completamente mas também não contamina a totalidade dos indivíduos* pois eles sempre podem se recuperar espontâneamente. Na subseção **5.2.1** será dada definição formal do modelo e suas propriedades.

Generalização da conjectura para modelos com mais de duas espécies: o modelo ZGB

Uma das motivações que levaram Grinstein, Lai e Browne à construção da *generalização* dessa conjectura está relacionada com as próprias análises que esses autores fizeram sobre o comportamento crítico do modelo *ZGB.* Esse é um modelo de gás de rede introduzido por Ziff e colaboradores [Ziff et al 1986] com o objetivo de simular a reação de oxidação do monóxido de carbono sobre uma superfície catalítica. No modelo (exposto detalhadamente na subseção **4.3.1**) são consideradas duas espécies de partículas que represen-

tam moléculas de CO e átomos de O que adsorvem e reagem sobre uma rede quadrada. O comportamento crítico do modelo, que apresenta uma transição de fase contínua de um estado absorvente para um estado ativo, foi estudado ainda com mais precisão por Jensen, Fogedby e Dickman [Jensen et al 1990]. Através de simulações dependentes do tempo (método exposto na seção **3.4**) esses autores obtiveram expoentes críticos precisos para a probabilidade de sobrevivência (3.23), e para outras grandezas necessárias à caracterização do comportamento crítico do modelo, e verificaram que esses são consistentes com os expoentes críticos associados à percolação direcionada em $(2+1)$ dimensões. É importante notar que esse modelo (ZGB) apresenta similaridade com o modelo de contato mas diz respeito à uma reação onde *dois tipos* de partículas estão envolvidos. Além disso o modelo contém regras locais que não são idênticas às consideradas no processo de contato, como a aniquilação por pares de partículas. A *generalização da conjectura* mostra que essas *particularidades* são *irrelevantes* na caracterização *do comportamento crítico* de modelos *que contém estados absorventes.*

5.2 O processo de contato e modelos similares

5.2.1 O processo de contato

Definição

O processo de contato é definido através de um modelo estocástico de gás de rede que tem um estado absorvente. Esse parece ser o modelo mais simples que exibe *transição de fase* em *uma dimensão.* O modelo foi proposto por Harris [Harris 1974] que *provou que no limite termodinâmico o modelo apresenta um estado ativo estável* além do estado absorvente. Fato esse de relevante importância dado que para sistemas *finitos*, os quais são estudados em simulações numéricas, o estado absorvente é sempre atingido para tempos suficientementes longos. O processo de contato pode também ser visto como um modelo para a propagação de uma epidemia simples, como foi explicado na seção **5.1**.

Conforme definido em [Liggett 1985] o processo de contato consiste num sistema de partículas interagentes residindo sobre os sítios de uma rede e

evoluindo de acordo com regras locais e markovianas. A cada sítio da rede associa-se uma variável dinâmica σ_i que pode assumir dois valores: 0 se o sítio estiver vazio e 1 se o sítio estiver ocupado. Na evolução do sistema escolhe-se ao acaso um sítio i sobre a rede.

i) Se o sítio estiver vazio ele passa a ser ocupado com uma taxa que depende do número de primeiros vizinhos dele que estejam ocupados. Assim, no caso unidimensional, se somente um dos vizinhos estiver ocupado a taxa com que o sítio i passa a ser ocupado no próximo instante de tempo é $\lambda/2$. Se os dois sítios vizinhos estiverem ocupados o sítio escolhido passa a ser ocupado com taxa λ. Se não houver vizinhos ocupados então o sítio permanece vazio.

ii) Se o sítio escolhido estiver ocupado ele é esvaziado com taxa igual a um.

O primeiro dos processos corresponde a um processo de criação autocatalítica de partículas e o segundo a um processo de aniquilação espontânea de partículas.

Como a criação de uma partícula num sítio vazio só ocorre se pelo menos um dos vizinhos do sítio estiver ocupado conclui-se que o sistema pode evoluir para um *estado estacionário absorvente* onde a densidade de partículas sobre a rede é nula. Uma vez alcançado este estado o sistema não evolui mais no tempo e fica "aprisionado" na configuração microscópica onde $\sigma_i = 0$, para qualquer sítio i da rede. O outro estado estacionário para o qual o sistema pode evoluir é o *estado ativo* onde partículas estão continuamente sendo criadas e aniquiladas de tal modo que sua concentração é não nula. O parâmetro de ordem associado à transição absorvente ativo é a densidade ρ de sítios ocupados ("indivíduos infectados").

Classe de universalidade

O comportamento crítico do modelo, que pertence à classe de universalidade da percolação direcionada em $(d+1)$ dimensões, foi estabelecido através de simulações dependentes do tempo e expansões em séries. A transição do estado ativo para o estado absorvente é contínua e o parâmetro de ordem ρ se comporta na vizinhança do ponto crítico de acordo com a lei

$$\rho \propto (\lambda - \lambda_c)^{\beta} \tag{5.1}$$

onde β é o expoente crítico convencionalmente [Ma 1976] associado ao parâmetro de ordem e λ_c é a taxa crítica na qual a transição ocorre. As expansões em séries temporais [Dickman 1989], fornecem

$$\lambda_c = 3,298 \quad \text{e} \quad \beta = 0,277 \quad \text{para} \quad d = 1.$$

Expansões em séries e simulações [Brower et al 1978] [Dickman 1993] provêem

$$\lambda_c = 1,647 \quad \text{e} \quad \beta = 0,58, \quad \text{para a rede quadrada,} \quad d = 2.$$

Formulação analítica

Pode-se fazer uma formulação analítica do processo de contato definido numa rede regular de N sítios com número de coordenação z. Denotando uma configuração microscópica por

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N)$$

onde $\sigma_i = 0$ ou 1 conforme o sitio i esteja vazio ou ocupado, respectivamente, a evolução temporal de $P(\sigma, t)$ é governada pela equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\sigma,t) = \sum_i \{w_i\left(\sigma^i\right)P(\sigma^i,t) - w_i\left(\sigma\right)P(\sigma,t)\} \tag{5.2}$$

onde o estado σ^i é

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

A taxa de transição $w_i\left(\sigma\right)$ é dada por

$$w_i\left(\sigma\right) = \frac{\lambda}{z}(1 - \sigma_i)\sum_\delta \sigma_{i+\delta} + \sigma_i \ , \tag{5.3}$$

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

O parâmetro de ordem ρ para o processo de contato (a densidade de sítios ocupados) é definido formalmente pela média

$$\rho =< \sigma_i >= P(1). \tag{5.4}$$

A equação de evolução para ρ é obtida usando a definição de função de estado dada em (2.2) e a equação mestra (5.2). Através desse procedimento obtemos a equação

$$\frac{d}{dt}P(1) = \lambda P(10) - P(1) \tag{5.5}$$

onde $P(10) =< \delta(\sigma_{i-1}, 0)\, \delta(\sigma_i, 1) >$.

Usando-se aproximação de *campo médio simples* (ver seção **3.1**) a equação (5.5) é escrita da seguinte forma

$$\frac{d\rho}{dt} = \lambda\ \rho\ (1-\rho) - \rho. \tag{5.6}$$

As soluções dessas equações, as quais caracterizam os estados estacionários do modelo, são $\rho = 0$, que se refere ao estado absorvente de vácuo, e $\rho = (\lambda - 1)/\lambda$, que está relacionada com o estado estacionário ativo. A segunda solução é estável para $\lambda > \lambda_c$, com $\lambda_c = 1$ e $\beta = 1$, nessa aproximação.

A equação (5.5) envolve termos referentes à correlação de dois sítios, $P(10)$. A equação de evolução para essa correlação é dada através da expressão exata

$$\frac{d}{dt}P(10) = P(1) + \{\lambda\frac{z-2}{z} - 2\}P(10) - 2\lambda\frac{z-1}{z}P(101). \tag{5.7}$$

Na análise do problema através da *aproximação de pares*, a correlação de três sítios $P(101)$ é calculada em termos de correlações de dois sítios e de um sítio da seguinte forma

$$P(101) = \frac{P^2(10)}{1-P(1)}.$$

Através desse procedimento as equações (5.5) e (5.7) se tornam equações fechadas para $P(1) = \rho$ e $P(10) = u$. Explicitamente tem-se

$$\frac{d}{dt}\rho = \lambda u - \rho \tag{5.8}$$

e

$$\frac{d}{dt}u = \rho + (\lambda\frac{z-2}{z} - 2)u - 2\lambda\frac{z-1}{z}\frac{u^2}{(1-\rho)}. \tag{5.9}$$

Uma solução estacionária é dada por $\rho = u = 0$ (estado absorvente). A outra solução estacionária (estado ativo) é dada por

$$\rho = \frac{\lambda(z-1) - z}{(z-1)\lambda - 1} \qquad \text{e} \qquad u = \frac{\rho}{\lambda}$$

válida para $\lambda > \lambda_c$, onde

$$\lambda_c = \frac{z}{z-1} \tag{5.10}$$

é a taxa crítica na aproximação de pares. Essa *estimativa para a taxa crítica* se aproxima melhor do valor exato de λ_c à medida que o número de coordenação z aumenta. É claro que o expoente crítico continua sendo o expoente clássico $\beta = 1$.

Conexão com uma reação química

A equação (5.6) é idêntica à equação de cinética química associada ao primeiro modelo de Schlögl [Schlögl 1972]. Neste modelo é considerado o seguinte esquema de reações

$$\begin{aligned} X + A &\xrightarrow{k_1} 2X, \\ 2X &\xrightarrow{k_2} X + A, \\ X &\xrightarrow{k_3} B, \end{aligned} \tag{5.11}$$

onde A e B são reagentes cujas concentrações $[A]$ e $[B]$, respectivamente, são mantidas constantes e X é o componente químico que pode ter sua concentração $[X]$ variada. As equações da cinética química provêm de uma aproximação de campo médio sem dependência espacial: as interações entre componentes químicos são tomadas como não locais. A equação da cinética química para as reações (5.11) é dada por

$$\frac{d}{dt}[X] = k_1[X][A] - k_2[X]^2 - k_3[X]. \tag{5.12}$$

Pode-se reescalar o tempo de maneira a obter

$$\frac{k_1[A] - k_3}{k_2} = \frac{\lambda - 1}{\lambda},$$

o que torna a equação (5.12) equivalente à equação (5.6).

Grassberger e de La Torre [Grassberger e Torre 1979] construíram a versão do primeiro modelo de Schlögl numa rede. A construção tinha como objetivo estudar o comportamento crítico do modelo de rede baseado nos mecanismos dessa reação. A reação $2X \rightarrow X$ foi levada em conta na construção do modelo de rede impondo que cada sítio pudesse conter no máximo uma

partícula. A reação de autocatálise $X + 0 \rightarrow 2X$ e a reação espontânea $X \rightarrow 0$ foram consideradas como no modelo de contato. É claro então que nessa interpretação o primeiro modelo de Schlögl está relacionado diretamente com o modelo de contato. O comportamento crítico do modelo de Schlögl numa rede de dimensão d é descrito dentro da classe da percolação direcionada em ($d+1$) dimensões. No trabalho [Grassberger e Torre 1979] foi mostrado que esse modelo está na mesma classe de universalidade de teoria de campos de Regge [Brower et al 1978]. Posteriormente Cardy e Sugar [Cardy e Sugar 1980] estabeleceram a conexão entre a teoria de campos de Regge e a percolação direcionada, mostrando que o comportamento crítico nos dois casos é o mesmo.

Expansão em séries para o processo de contato

Para o processo de contato $W(\sigma'|\sigma)$ é dado como função de $w_i(\sigma)$ definido em (5.3). A equação mestra para esse modelo escrita em (5.2) pode ser reescrita em termos do formalismo de operadores como em (3.13). Usando esse procedimento, exposto na seção **3.2,** obtemos

$$\frac{d \mid \psi(t) >}{dt} = \mathcal{S} \mid \psi(t) > \tag{5.13}$$

onde o operador de evolução $\mathcal{S}$ é dado por

$$\mathcal{S} = \sum_{i=1}^{N} (\mathcal{F}_i - 1)\mathcal{Z}_i$$

onde aqui

$$\mathcal{F}_i|\sigma >= |\sigma_1 ... 1 - \sigma_i ... \sigma_N >$$

e

$$\mathcal{Z}_i|\sigma >= w_i(\sigma)|\sigma >= \{\frac{\lambda}{2}(1-\sigma_i)(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \sigma_i\}|\sigma > .$$

Os operadores $\mathcal{F}_i$ e $\mathcal{Z}_i$ podem ser escritos em termos de operadores de criação e aniquilação $\mathcal{A}_i$ e $\mathcal{A}_i^+$ definidos por

$$\mathcal{A}_i|\sigma >= \sigma_i \, |\sigma_1 ... 1 - \sigma_i ... \sigma_N >$$

e

$$\mathcal{A}_i^+|\sigma >= (1 - \sigma_i)|\sigma_1 ... 1 - \sigma_i ... \sigma_N > .$$

Vemos que

$$\mathcal{F}_i = \mathcal{A}_i + \mathcal{A}_i^+$$

e que

$$\mathcal{Z}_i = \frac{\lambda}{2}(1 - \mathcal{N}_i)(\mathcal{N}_{i-1} + \mathcal{N}_{i+1}) + \mathcal{N}_i$$

onde

$$\mathcal{N}_i = \mathcal{A}_i^+ \mathcal{A}_i$$

é o operador número. Portanto

$$\mathcal{S} = \sum_{i=1}^{N} (\mathcal{A}_i + \mathcal{A}_i^+ - 1)\{\frac{\lambda}{2}(1 - \mathcal{N}_i)(\mathcal{N}_{i-1} + \mathcal{N}_{i+1}) + \mathcal{N}_i\}$$

ou

$$\mathcal{S} = \sum_{i=1}^{N} \{\frac{\lambda}{2}(\mathcal{A}_i^+ - \mathcal{A}_i\mathcal{A}_i^+)(\mathcal{A}_{i-1}^+\mathcal{A}_{i-1} + \mathcal{A}_{i+1}^+\mathcal{A}_{i+1}) + (\mathcal{A}_i - \mathcal{A}_i^+\mathcal{A}_i)\}. \quad (5.14)$$

A partir dessa expressão pode-se obter séries temporais (ver seção **3.2**) para grandezas como a probabilidade de sobrevivência e analisar o comportamento crítico do modelo. Este procedimento foi desenvolvido por Dickman [Dickman 1989].

Com o objetivo de comparar o operador de evolução $\mathcal{S}$ do processo de contato com o operador de evolução, que também não é hermitiano, associado aos processos levados em conta na teoria de campos de Regge [Grassberger 1978] fazemos a seguinte transformação unitária

$$\mathcal{H} = -\mathcal{V}\ \mathcal{S}\ \mathcal{V}^{-1} \quad (5.15)$$

com

$$\mathcal{V} = \prod_{i=1}^{N}(\ 1 + \mathcal{A}_i) \qquad \text{e} \qquad \mathcal{V}^{-1} = \prod_{i=1}^{N}\ (1 - \mathcal{A}_i). \quad (5.16)$$

Então o operador $\mathcal{H}$ definido em (5.15)é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{A}_i^+\mathcal{A}_i + \frac{\lambda}{2}\sum_{i=1}^{N} \mathcal{A}_i^+(\mathcal{A}_i - 1)[(\mathcal{A}_{i-1}^+ + 1)\mathcal{A}_{i-1} + (\mathcal{A}_{i+1}^+ + 1)\mathcal{A}_{i+1}]. \quad (5.17)$$

Este operador está relacionado com operadores de evolução que descrevem processos na teoria de campos de Regge.

A correspondencia do operador $\mathcal{H}$ obtido para o primeiro modelo de Schlögl na rede e os modelos de spin de Regge [Brower et al 1978] foi feita pela primeira vez por [Grassberger e Torre 1979] dentro de formalismo semelhante ao acima apresentado.

5.2.2 Modelo de criação por pares e trincas

Os mecanismos de interação contidos no processo de contato são base para formulação de uma multiplicidade de modelos de rede que têm como objetivo a descrição da propagação de epidemias, a análise da dinâmica de populações e o estudo de reações químicas. Além disso, nos últimos anos uma série de modelos baseados no processo de contato têm sido utilizados em pesquisas que procuram estudar os fatores microscópicos relevantes para a caracterização das transições de fase cinéticas em modelos que possuem estados absorventes [Dickman 1989a].

A própria elaboração de um modelo de rede compreendendo as reações do segundo modelo de Schlögl [Schlögl 1972] levou Grassberger a enunciar a conjectura da percolação direcionada [Grassberger 1982]. No modelo a criação de partículas envolve a autocatálise por pares de partículas: $2X \rightarrow 3X$. Na análise de Schlögl, a qual se baseia em equações da cinética química, uma transição descontínua é prevista no modelo. No procedimento de Grassberger são introduzidas flutuações nesse modelo, pois é construído um modelo de rede que evolui de acordo com regras locais markovianas que compreendem as reações do modelo de Schögl. Essa formulação permitiu observar que o modelo de fato exibe uma transição de fase cinética mas essa é uma transição contínua. Portanto a introdução de um tratamento local com evolução estocástica altera de um modo bastante sensível as predições da equações da cinética química para esse modelo. O primeiro e o segundo modelo de Schlögl na rede são modelos que evoluem no tempo de acordo com diferentes regras locais markovianas, entretanto ambos são modelos de uma única componente e que possuem um único estado absorvente. A transição do estado ativo para o estado absorvente nos dois modelos é contínua e pertence à classe de universalidade da percolação direcionada.

Possíveis generalizações do modelo de contato, inspiradas no segundo modelo de Schlögl, consistem na consideração de que a autocatálise só possa

ocorrer quando houver um certo número mínimo de partículas participantes da reação. Para o modelo de contato, o número mínimo é igual a um. Modelos de criação por pares correspondem a um número mínimo de dois, de criação por trincas de três, e asim por diante. Além da autocatálise e da aniquilação espontânea de partículas, pode-se acrescentar também o processo difusivo. Em geral não se acrescenta o processo difusivo ao modelo de contato pois ele já possui uma difusão própria. Essa difusão intrínseca ocorre em dois passos quando um processo autocatalítico é seguido de uma aniquilação espontânea como no exemplo: 01000 $\rightarrow$ 01100 $\rightarrow$ 00100. Todas essas generalizações são modelos de uma componente que possuem estado absorvente correspondente à ausência completa de partículas (vácuo).

Em trabalho realizado com R. Dickman [Dickman e Tomé 1991] introduzimos um modelo com um estado absorvente e que apresenta um transição descontínua para o estado ativo. O modelo que denominamos de modelo *de criação por trincas* representa um processo difusivo com criação autocatalítica por trincas de partículas. O critério de simplicidade usado na construção do modelo está baseado na consideração de que o modelo mais simples deve exibir transição de fase em uma dimensão e deve estar relacionado a um sistema de uma só componente. Modelos mais simples onde há criação por pares de partículas não produzem a transição de primeira ordem [Dickman e Tomé 1991].

O modelo de criação por trincas é um modelo estocástico de gás de rede com regras locais irreversíveis. Consideramos um sistema de partículas interagentes ocupando sítios de uma cadeia e evoluindo de acordo com regras locais estocásticas. Como o modelo é de uma só componente a cada sítio da rede está associada uma variável dinâmica σ_i que pode assumir dois valores: $\sigma_i = 0$ (sítio vazio) e $\sigma_i = 1$ (sítio ocupado por uma partícula).

A evolução do sistema no tempo é obtida pela aplicação sequencial e aleatória de três subprocessos, a saber: criação, aniquilação e difusão. Um sítio i da rede é escolhido aleatoriamente.

i) Se o sítio i estiver vazio $\sigma_i = 0$ ele passa a ser ocupado com uma taxa λ no instante de tempo seguinte se a situação, descrita esquematicamente a seguir, ocorrer

$$\begin{array}{ccccccc} \sigma_{i-3} & \sigma_{i-2} & \sigma_{i-1} & \sigma_i & \sigma_{i+1} & \sigma_{i+2} & \sigma_{i+3} \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} .$$

Se três dos primeiros vizinhos à direita (esquerda) do sítio i estiverem ocu-

pados mas o mesmo não suceder com os vizinhos à esquerda (direita) então uma partícula pode ser criada em i no instante de tempo seguinte com taxa $\lambda/2$. Se não hover nenhum agrupamento de três partículas que seja vizinho ao sítio i então a reação de criação não se realiza.

ii) A aniquilação de partículas é espontânea: $1 \rightarrow 0$. Se o sítio escolhido estiver ocupado ele é esvaziado com taxa 1.

iii) A difusão é representada por um processo em que dois sítios vizinhos na rede têm suas variáveis dinâmicas intercambiadas a uma taxa D

$$\begin{array}{cccc} \sigma_i & \sigma_{i+1} & \xrightarrow{D} & \sigma'_i & \sigma'_{i+1} \\ 1 & 0 & & 0 & 1 \end{array}$$

e

$$\begin{array}{cccc} \sigma_i & \sigma_{i+1} & \xrightarrow{D} & \sigma'_i & \sigma'_{i+1} \\ 0 & 1 & & 1 & 0 \end{array} .$$

A competição entre a difusão e a criação por trincas de partículas leva a transição nesse modelo a ser descontínua para altos valores da taxa de difusão D.

A equação de evolução para a densidade de partículas $\rho =< \sigma_i >= P(1)$ é dada por

$$\frac{d\rho}{dt} = \lambda P(1110) - \rho \ . \tag{5.18}$$

Esta equação envolve uma correlação de quatro sítios vizinhos $P(1110)$. A equação de evolução para essa correlação é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(1110) &= \lambda[P(1110) + P(11101) + P(1110111)] + \\ &\quad +2D[P(1011) - P(1110)] - 3P(1110). \end{aligned} \tag{5.19}$$

Realizamos análise de campo médio dinâmico para esse modelo onde desacoplamos aglomerados de cinco sítios ou mais em termos de correlações de quatro sítios e três sítios. Esse procedimento equivale a um truncamento de ordem $n = 4$ na hierarquia de equações de evolução para correlações e leva o problema à análise de um conjunto de sete equações não-lineares acopladas. A solução dessas equações prevê resultados que estão em acordo qualitativo com as simulações de Monte Carlo que realizamos e que estão reportadas em [Dickman e Tomé 1991].

Verificamos que o sistema evolui no tempo para dois estados estacionários. Um estado absorvente onde todos os sítios sobre a rede estão vazios e outro

em que partículas são criadas e aniquiladas e difundem contínuamente de modo que a densidade ρ de partículas sobre a rede é diferente de zero.

Quando a taxa de difusão é nula a transição do estado absorvente para o estado ativo é contínua. Na aproximação de campo médio acima reportada essa transição deixa de ser contínua para um valor de D muito pequeno, mas diferente de zero. Em simulações numéricas a transição só passa a ser descontínua para altos valores de D. Estes resultados podem ser apreciados nas figuras 7, 8, 9 e 10.

A aproximação de campo médio a nível de pares e a aproximação incluindo correlações de três sítios não conseguem prever esse comportamento. De fato aproximações inferiores à aproximação de campo médio a nível de quadras resultam na previsão de transição descontínua mesmo para a taxa de difusão $D = 0$, que não está de acordo com as previsões de simulações numéricas. A difusão e a criação por trincas que têm papéis essenciais na determinação da ordem da transição nesse modelo só conseguem ser descritas adequadamente na aproximação de campo médio que leva em conta ao menos o aglomerado de quatro partículas intrínseco aos mecanismos de interação locais que definem o modelo.

No limite de alta difusão, o sistema se torna completamente descorrelacionado. Por exemplo devemos esperar que $P(11001) = P(10101) = P^3(1)P^2(0)$. Para modelos que levam em conta a difusão devemos esperar portanto que o comportamento de campo médio seja verificado no limite $D \rightarrow \infty$. Este limite foi obtido rigorosamente para um modelo de rede difusivo considerado por DeMasi, Ferrari e Lebowitz [DeMasi et al 1985].

Finalmente cabe ressaltar que quando a transição de fase no modelo de criação por trincas é contínua, baixos valores de D, essa transição pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. Através de simulações dependentes do tempo obtivemos os expoentes críticos δ e η associados à probabilidade de sobrevivência P_t e ao número médio de partículas sobre a rede n_t (grandezas definidas em(3.23) e (3.22)) compatíveis com os valores desses expoentes para a percolação direcionada em $(1+1)$ dimensões. Assim sendo a conjectura da percolação direcionada é observada nesse modelo.

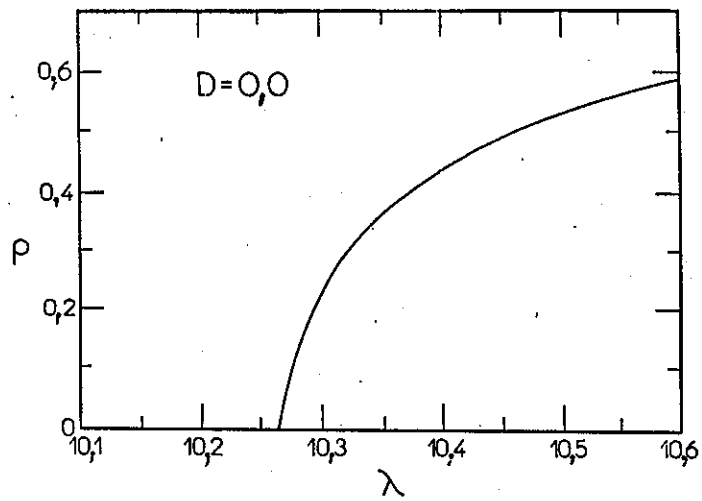


Figura 7. Densidade de sítios ocupados como função da taxa de criação λ, para $D = 0$. Resultados obtidos na aproximação de campo médio a nível de quadras.

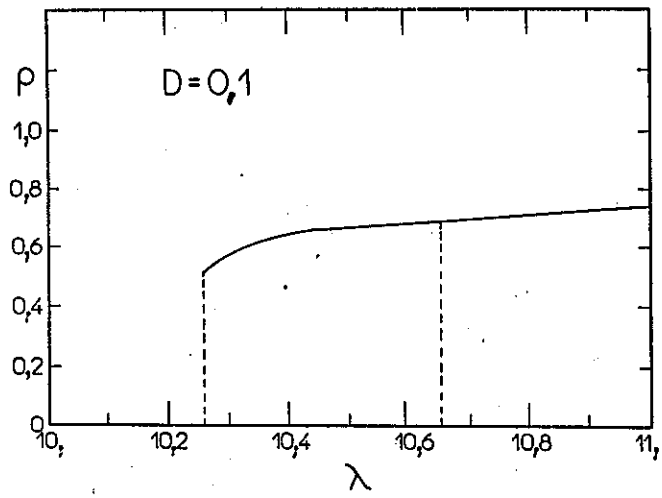


Figura 8. Densidade de sítios ocupados como função da taxa de criação λ, para $D = 0,1$. Resultados obtidos na aproximação de quadras.

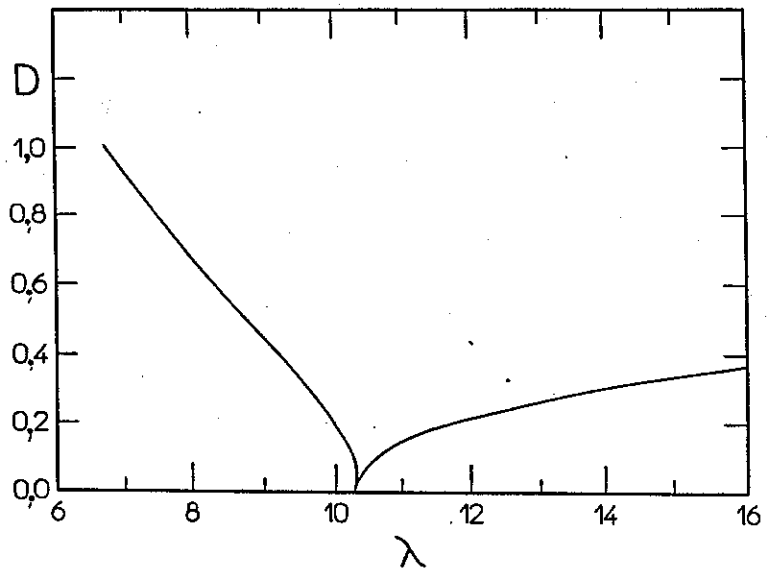


Figura 9. Diagrama de fases no plano (λ, D) para o modelo de criação por trincas na aproximação de campo médio a nível de quadras. O modelo exibe uma fase ativa e uma fase absorvente. A transição é contínua para $D \leq 0,017$ e descontínua acima desse valor.

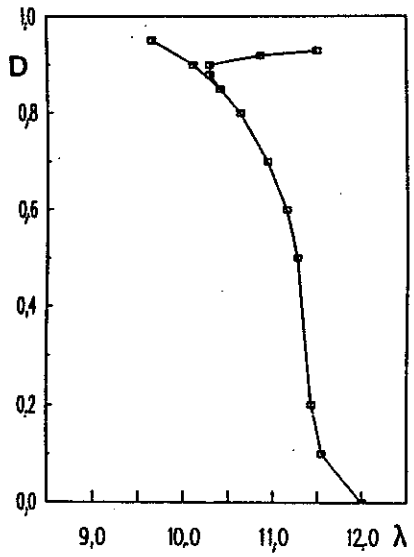


Figura 10. Diagrama de fases no plano (λ, D) para o modelo de criação por trincas obtido por simulações de Monte Carlo. O modelo exibe uma fase ativa e uma fase absorvente. A transição é contínua para $D \leq 0,87$ e descontínua acima desse valor.

5.3 Modelo estocástico de gás de rede para um sistema predador-presa

Dentro do contexto da dinâmica de populações uma série de modelos têm sido propostos com o objetivo de descrever os mecanismos de competição entre populações de animais. Dentro desse mesmo enfoque são tratados os problemas de propagação de epidemias. O modelo que introduzimos e analisamos [Satulovsky e Tomé 1994], [Satulovsky 1995], [Satulovsky e Tomé 1996] se insere nessa área. Na construção desse modelo tivemos como objetivo a descrição microscópica dos processos inerentes à dinâmica do modelo de Lotka-Volterra [Lotka 1920], [Volterra 1931]. Para tanto propusemos um modelo estocástico de gás de rede que descreve a dinâmica predador-presa através de regras locais markovianas, as quais simulam interações similares às interações locais do processo de contato. Portanto o nosso modelo compreende *mecanismos* de interação *locais* que levam em conta a *estrutura espacial de uma rede.*

Consideramos uma rede quadrada com N sítios que podem estar ocupados por presas, ocupados por predadores ou vazios. A cada sítio associamos uma variável dinâmica σ_i como segue

espécie	presa	predador	vazio
σ_i	1	2	0

A equação mestra para esse modelo é dada por

$$\tau \frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{i=1}^{N} [w_i(A_i(\sigma)) P(A_i(\sigma), t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)],$$

onde $P(\sigma, t)$ é a probabilidade do estado $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N)$ no instante t e

$$A_i(\sigma) = (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i', ..., \sigma_N)$$

com $\sigma_i' = \mathrm{mod}(\sigma_i + 2, 3)$ e $w_i(\sigma)$ é a probabilidade de transição por sítio.

A probabilidade de transição $w_i(\sigma)$ compreende os processos de interação entre as espécies. A saber:

i) Nascimento de presas: se um sítio i está vazio ($\sigma_i = 0$) então uma presa pode ser criada nesse sítio com uma probabilidade $(a/4) \sum_j \delta(\sigma_j, 1)$. Isto é, uma presa nasce só se houver ao menos uma presa vizinha ao sítio

vazio escolhido. Além disso a probabilidade de nascimento é proporcional ao número de presas vizinhas ao sítio i na rede.

ii) Nascimento de predadores e morte de presas: se um sítio i estiver ocupado por uma presa ($\sigma_i = 1$) então um predador passa a ocupar o sítio i com probabilidade $(b/4)\sum_j \delta(\sigma_j, 2)$ e a presa desaparece instantaneamente. Assim o predador só nasce se houver ao menos um predador na vizinhança da presa. Como a presa "se torna" um predador por estar ao lado dele o modelo pode ser visto de fato como um modelo para "predadores vampiros". Além disso a probabilidade de a presa morrer e o predador nascer é proporcional ao número de sítios vizinhos na rede ocupados por predadores.

iii) Morte espontânea de predadores: se um sítio i estiver ocupado com um predador ($\sigma_i = 2$) então o sítio se torna vazio com probabilidade c independentemente dos vizinhos. A morte de predadores é espontânea.

Estas regras de evolução são similares às regras do processo de contato: as duas primeiras são completamente análogas à criação autocatalítica de partículas no processo de contato e a última é análoga ao processo de aniquilação no processo de contato (seção **5.2.1**). A diferença nos modelos está no fato de o processo de contato ser um modelo de dois estados por sítio e o modelo predador-presa ser um modelo de três estados por sítios. Há também uma assimetria a mais nesse modelo: só uma espécie de partículas pode ser aniquilada espontaneamente.

O modelo possui três parametros: a, b e c. Entretanto, reescalando o tempo é possível descrever o modelo com apenas dois parâmetros. Assim, fazemos uma nova parametrização tal que $a + b + c = 1$ escrevendo $a = (1 - 2p - c)/2$, e $b = (1 + 2p - c)/2$, onde c e p são os novos parâmetros.

Esse modelo pode também ser interpretado em termos de uma epidemia genérica, da seguinte maneira: *presas* são interpretadas como *indivíduos sãos*, *predadores* como *infectados*. Os sítios vazios são aqueles em que indivíduos sãos podem nascer. Modelo exatamente similar a esse foi formulado independentemente por Andjel e Schinazi [Andjel e Schinazi 1995]. Esses autores mostraram rigorosamente que em uma dimensão o modelo só apresenta um fase estável. Essa é a fase em que todos os sítios da rede estão preenchidos por indivíduos sãos. Nós obtivemos esse resultado através de simulações de Monte Carlo [Satulovsky e Tomé 1994].

Esse modelo irreversível possui dois estados absorventes: um em que todos os sítios da rede estão ocupados por presas e outro em que todos os sítios estão vazios. Além disso o sistema exibe também estados estacionários

ativos que possuem densidades não nulas de predadores e de presas. Estudamos o modelo através da aproximação de pares e de simulações de Monte Carlo. As previsões de campo médio são muito boas para esse modelo e conseguem fornecer um diagrama de fases muito semelhante ao obtido através de simulações numéricas. Estes resultados estão mostrados nas figuras 11 e 12.

A transição de fase no modelo entre o estado ativo e um dos estados absorventes pertence à classe de universalidade da percolação direcionada em $(2+1)$ dimensões conforme está relatado na tese de doutoramento de Satulovsky [Satulovsky 1995]. Portanto a conjectura da percolação direcionada é mais uma vez evidenciada. Ao redor do ponto $b = c = 0$, (canto esquerdo do diagrama de fases) uma das espécie é criada muito rapidamente e o modelo se mapeia exatamente, nessa região, no modelo de contato definido com $\lambda = b/c$. Portanto a linha crítica é dada assintoticamente por $b = \lambda_c c$ ou

$$c = \frac{2}{2\lambda_c + 1}\left(p + \frac{1}{2}\right)$$

onde λ_c é o valor crítico da taxa de criação de partículas do modelo de contato definido numa rede quadrada, nominalmente $\lambda_c = 1,647$ [Brower et al 1978], de modo que $2/(2\lambda_c + 1) = 0,46577$.

O *resultado mais importante* desse trabalho, do ponto de vista de *dinâmica de populações*, é a previsão de um estado estacionário ativo com comportamento oscilante no espaço e no tempo. Os estados estacionários ativos são aqueles em que predadores e presas estão continuamente nascendo e morrendo. Numa certa região do diagrama de fases, a região II nas figuras 11 e 12, os estados ativos são caracterizados por densidades de presas e de predadores constantes (ver figura 13-a). Já em outra porção desse diagrama, região IV da figura 11 e região III da figura 12, as densidades de presas e de predadores oscilam no tempo e no espaço. Na análise de campo médio, figura 11, as oscilações passam a ocorrer a partir de um limiar crítico onde se dá uma bifurcação de Hopf. As oscilações obtidas por simulações numéricas, aqui apresentadas na figura 13-b, são muito semelhantes às oscilações temporais no número de animais pertencentes a duas populações competitivas (predador e presa) relatadas em dados estatísticos registrados ao longo de vários anos [Haken 1983]. O modelo de Lotka-Volterra como enunciado originalmente prediz oscilações nas populações, mas o modelo é determinístico e as oscilações resultam de ciclos limite instáveis [Nicolis e Prigogine 1977].

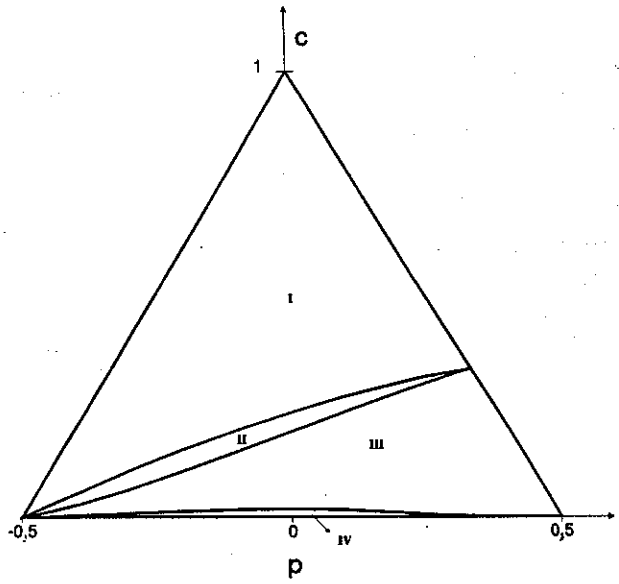


Figura 11. Diagrama de fases no plano (p, c) para o modelo predador-presa de acordo com a aproximação de pares. A região I representa o estado absorvente de presa. As região II e III correspondem a estados ativos que são nós e focos assintoticamente estáveis. A região IV corresponde a ciclos limites.

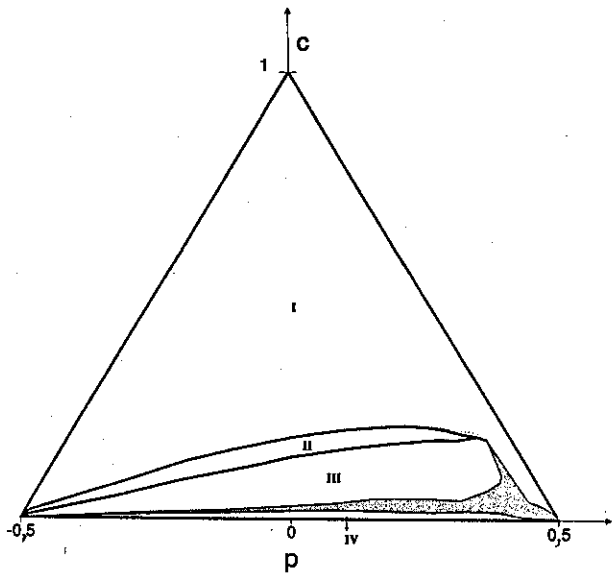


Figura 12. Diagrama de fases no plano (p, c) para o modelo predador-presa obtido por simulações de Monte Carlo. As regiões I e IV representam estados absorventes de presa e de vazio e as regiões II e III estados ativos não oscilantes e oscilantes, respectivamente.

Assim a introdução de organização espacial e de flutuações no modelo trazem contribuições para o entendimento da dinâmica de populações de espécies competitivas.

As oscilações observadas nesse modelo, quando definido numa rede quadrada, parecem ser locais. Isto é, para sistemas suficientemente grandes essas oscilações não devem ser coletivas, mas sim restritas a pequenas regiões do espaço. Assim temos que o sistema pode ser dividido em subsistemas que estão descorrelacionados entre si. Essa suposição está baseada na observação do comportamento da amplitude de oscilação do número de presas e de predadores, a qual decai como $1/\sqrt{N}$, onde N é o número de sítios da rede. Esse resultado vai ao encontro da conjectura de Grinstein [Grinstein 1988] que argumenta que modelos isotrópicos com interações de curto alcance não exibem comportamentos coletivos não-triviais. Os argumentos de Grinstein se fundamentam na afirmação de que flutuações tornam qualquer estado coletivo instável nesses modelos.

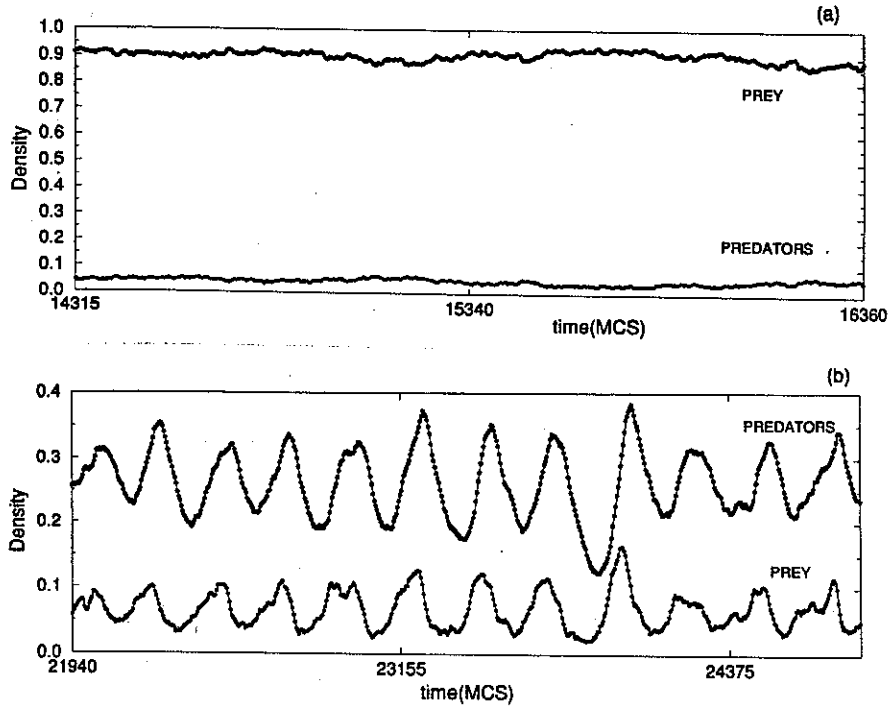


Figura 13. Evolução temporal das densidades de presas e predadores para um ponto na região II (a) e para um ponto na região III (b) da figura 12.

5.4 O autômato celular de Domany-Kinzel

5.4.1 Definição do autômato

O modelo de Domany-Kinzel [Domany e Kinzel 1984], [Kinzel 1985], [Martins et al 1991] é um autômato celular probabilístico (seção **2.3**) que é definido por probabilidades de transição irreversíveis e locais. O modelo de dois estados por sítio (uma única componente) apresenta transição de fase cinética de um estado absorvente para um estado ativo que pertence à *classe da percolação direcionada* em $(1+1)$ dimensões. O autômato e sua evolução temporal são de fato mapeados na percolação direcionada. Do ponto de vista da mecânica estatística de não-equilíbrio esse autômato e o processo de contato (definido em **5.2.1**) são fundamentais tanto quanto o modelo de Ising o é para mecânica estatística de equilíbrio. Ou seja são modelos com interações de curto alcance que contém os elementos básicos de irreversibilidade e que têm a propriedade de exibir transições de fase mesmo em uma dimensão. Ou melhor formulando a analogia, são modelos básicos mas que têm uma propriedade a mais que o modelo de Ising: transição de fase em uma dimensão não é observada para o modelo de Ising nem para outros modelos de equilíbrio com interações de curto alcance.

O autômato de Domany-Kinzel é definido em uma cadeia de N sítios aos quais são associadas variáveis dinâmicas σ_i que assumem dois valores: $\sigma_i = 0$, denotando que o sítio i está vazio, e $\sigma_i = 1$, denotando que o sítio está ocupado por uma partícula. A evolução da probabilidade $P_\ell(\sigma)$ do estado microscópico $\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N)$ no passo de tempo ℓ é dada por uma equação de evolução como a definida em (2.9). Como todos os sítios são atualizados simultaneamente, a probabilidade de transição $W(\sigma|\sigma')$ é dada como um produto de probabilidades de transição por sítio como em (2.11).

Denotemos as probabilidades de transição por sítio no autômato de Domany-Kinzel por w_{DK} as quais são escritas na forma

$$w_j(\sigma_j \mid \sigma') = w_{DK}(\sigma_j \mid \sigma'_{j-1}, \sigma'_{j+1}), \tag{5.20}$$

onde fica explicita a dinâmica de evolução do sistema: o estado do sítio j no passo de tempo $\ell+1$ depende dos estados dos sítios $j-1$ e $j+1$ (primeiros vizinhos de j na rede) no instante de tempo ℓ. Vamos considerar somente o caso isotrópico desse modelo para o qual as probabilidades de transição

podem ser resumidas na tabela que se segue

$$\begin{array}{ccccc} w_{DK} & 1,1 & 1,0 & 0,1 & 0,0 \\ 1 & p_2 & p_1 & p_1 & 0 \\ 0 & 1-p_2 & 1-p_1 & 1-p_1 & 1 \end{array} \tag{5.21}$$

onde as linhas dizem respeito aos valores assumidos pelas variáveis dinâmicas dos sítio $j-1$ e $j+1$ no passo ℓ , a primeira das colunas diz respeito ao valor assumido pela variável dinâmica do sítio i no passo $\ell+1$ e as outras colunas se referem às probabilidades de transição w_{DK} .

Na evolução temporal desse automato (para N par), é conveniente dividir o reticulado espaço-tempo em duas sub-redes como abaixo

$$\begin{array}{cccccccccc} & & & & & j & \rightarrow & & & \\ & & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ & 1 & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * \\ & 2 & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit \\ \ell\downarrow & 3 & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * \\ & 4 & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit \\ & 5 & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * \\ & 6 & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit \\ & 7 & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * & \heartsuit & * \end{array}$$

Pode-se observar que as regras do autômato de Domany-Kinzel permitem a separação em dois sistemas residindo em sub-redes distintas e evoluindo no tempo independentemente. A observação dessa propriedade permite-nos escrever as probabilidade de transição w_{DK} para a sub-rede [$\heartsuit$] como $w_{DK}(\sigma_i|\,\sigma'_i, \sigma'_{i+1})$, onde os sítios são reenumerados de modo que $i = (j-\ell)/2$, mod $N/2$. Nenhuma aproximação está sendo feita; simplesmente a evolução do autômato é tal que permite a simplificação da notação utilizada nas probabilidades de transição. Daqui por diante, iremos nos referir sempre a uma das subredes, por exemplo, a sub-rede [$\heartsuit$].

Domany e Kinzel observaram que esse autômato evolui para estados estacionários que podem ser ativos ou absorvente. Na notação desses autores o estado absorvente, que no caso vem dado por $\sigma_i = 0$ $(\forall i)$, é denominado de *congelado*. A seguir está exposta a formulação analítica do autômato de Domany-Kinzel a qual será utilizada na análise de campo médio que fizemos do modelo.

A densidade de sítios ocupados é definida como:

$$P_\ell(1) =< \sigma_i >_\ell = \sum_\sigma \sigma_i P_\ell(\sigma).$$

A equação de evolução para $< \sigma_i >_\ell$ é obtida a partir da equação de evolução para $P_\ell(\sigma)$ e das probabilidades de transição $w_{DK}(\sigma_i|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1})$ conforme segue

$$P_{\ell+1}(1) = \sum_\sigma \sigma_i \sum_{\sigma'} \prod_i w_{DK}(\sigma_i|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1}) P_\ell(\sigma').$$

ou seja

$$P_{\ell+1}(1) = \sum_{\sigma'} w_{DK}(1|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1})\, P_\ell(\sigma') =< w_{DK}(1|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1}) >_\ell \,. \qquad (5.22)$$

Explicitando as probabilidades de transição dadas em (5.21) obtém-se

$$P_{\ell+1}(1) = p_2\, P_\ell(\,11) \,+ 2\, p_1\, P_\ell(\,1\,0), \qquad (5.23)$$

onde $P_\ell(\,11)$ e $P_\ell(\,1\,0)$ são correlações de dois sítios vizinhos na rede.

A equação de evolução para as correlações de dois sítios vizinhos podem ser obtidas por procedimento similar ao que foi desenvolvido acima e resulta em equações do tipo,

$$P_{\ell+1}(\,1\,0) \;=< w_{DK}(1|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1})\, w_{DK}(0|\, \sigma'_{i+1},\, \sigma'_{i+2}) >_\ell$$

e

$$P_{\ell+1}(\,1\,1) \;=< w_{DK}(1|\, \sigma'_i,\, \sigma'_{i+1})\, w_{DK}(1|\, \sigma'_{i+1},\, \sigma'_{i+2}) >_\ell \,. \qquad (5.24)$$

Substituindo as regras (5.21) nas equações (5.24) obtém-se a equação de evolução para $P_{\ell+1}(\,1\,1)$,

$$P_{\ell+1}(\,10) = p_2^2\, P_\ell(111) + 2\, p_2\, p_1 P_\ell(110) + p_1^2[P_\ell(101) + P_\ell(010)], \qquad (5.25)$$

e a equação de evolução para $P_{\ell+1}(\,1\,0)$ pode ser obtida de (5.24) ou somando as equações (5.23) e (5.25), e observando que

$$P_\ell(\,1\,0) + P_\ell(\,1\,1) = P_\ell(1).$$

As equações de evolução para as probabilidades relativas a três sítios, como $P_\ell(111)$ que aparece na equação (5.25), vão envolver correlações de quatro

sítios e assim por diante de modo que um conjunto infinito de equações de evolução para correlações é gerado.

O tratamento dessas equações a partir de aproximação de campo médio dinâmico será aqui obtido na aproximação de campo médio simples. Aproximação de campo médio a nível de pares, aproximação de pares, está feita em [Tomé 1994]. A equação (5.22) avaliada nessa aproximação é expressa pela equação,

$$P_{\ell+1}(1) = p_2 P_\ell^2(1) + 2\,p_1\,P_\ell(1)[1 - P_\ell(1)]. \tag{5.26}$$

No estado estacionário as soluções dessa equação são: $P(1) = 0$ e $P(1) = (2p_1 - 1)/(2p_1 - p_2)$. A primeira dessas soluções corresponde à fase congelada e a segunda a fase ativa. A transição da fase congelada para a ativa ocorre para $p_1 = 1/2$, nessa aproximação. O diagrama de fases do autômato avaliado nessa aproximação e o diagrama de fases do autômato avaliado na aproximação de pares (obtido em [Tomé 1994]) estão mostrados nas figuras 14 e 15. Observa-se nesses diagramas também uma fase *caótica*. Essa fase foi detetada por Martins, Verona de Rezende, Tsallis e Magalhães [Martins et al 1991] através de simulações numéricas. O procedimento utilizado por esses autores está relatado na subseção **5.4.3**. A formulação analítica, introduzida por nós provê equações de evolução para as grandezas de interesse no estudo da fase caótica, será exposta na subseção dedicada ao estudo do espalhamento de dano (subseção **5.4.4**). Antes de descrevermos as características dessa nova fase, vamos (a seguir) expor mais duas análises de interesse ao estudo das fases ativa e congelada do autômato de Domany-Kinzel.

Campo conjugado à densidade

O campo conjugado à densidade de sítios ocupados foi considerado nesse contexto por [Martins et al 1994]. O campo conjugado à densidade de sítios ocupados x é definido por $p_0 = w(1|00)$,o qual leva em conta a probabilidade do sistema sair do estado congelado. Pode-se definir a susceptibilidade generalizada como $\chi_x \equiv \partial x/\partial p_0$. Obtivemos expressões para essa grandeza através de análises de campo médio simples [Tomé 1994] e a nível de pares [Gueuvoghlanian 1995]. A susceptibilidade a $p_0 = 0$ diverge no ponto crítico, o que é uma característica de uma transição de segunda ordem.

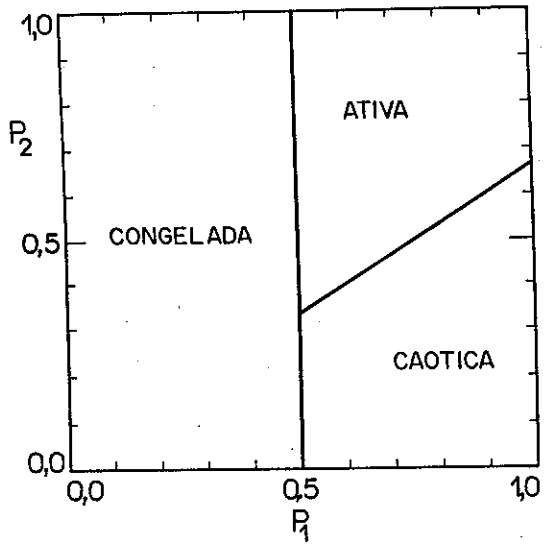


Figura 14. Diagrama de fases do autômato de Domany-Kinzel no plano (p_1, p_2) na aproximação de campo médio simples. A fase caótica foi obtida usando a prescrição (5.39).

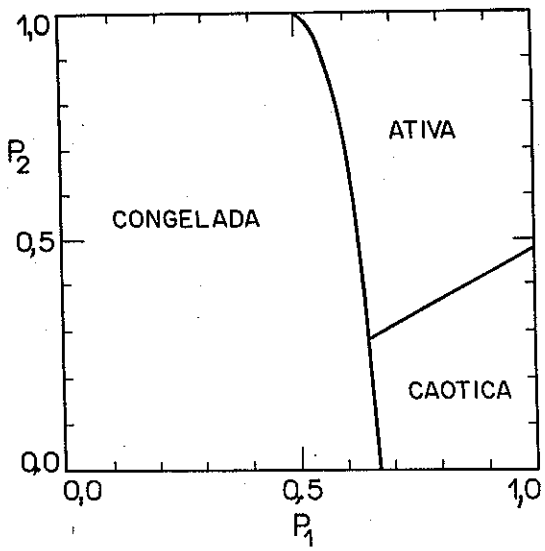


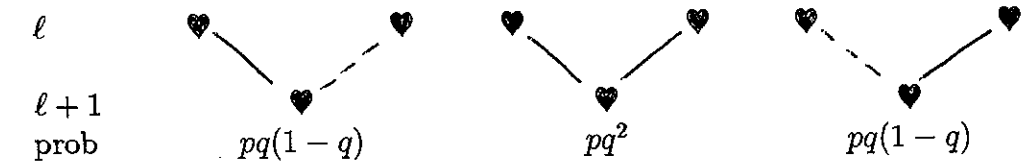
Figura 15. Diagrama de fases do autômato de Domany-Kinzel no plano (p_1, p_2) na aproximação de pares. A fase caótica foi obtida usando a prescrição (5.39).

5.4.2 Correspondência com a percolação direcionada

A transição entre os estados congelado e ativo no autômato de Domany-Kinzel pertence à classe de universalidade da percolação direcionada, resultado que novamente vai ao encontro da conjectura da percolação direcionada. Este resultado, obtido pelos autores do autômato [Domany e Kinzel 1984], pode ser evidenciado através da conexão direta que há entre esse autômato e a percolação direcionada. Esta analogia está estabelecida abaixo.

Na percolação direcionada generalizada são consideradas ligações que conectam dois sítios vizinhos numa rede em duas dimensões e também é levado em conta o fato de os sítios estarem ocupados ou vazios (a rede a ser considerada é uma das sub-redes mencionada anteriormente, por exemplo a sub-rede[♡]). Consideremos que a probabilidade de uma ligação estar presente (ativa) seja q e que portanto a probabilidade de a ligação não estar presente seja $1-q$. Consideremos que a probabilidade de ocupação de um sítio seja p e a probabilidade de não estar ocupado seja $1-p$. A questão que se coloca nesse problema está relacionada com o cálculo da probabilidade de um dado sítio (i,ℓ) da ℓ-ésima geração estar conectado com o sítio $(i,1)$ da primeira geração. Nesse problema se usa muitas vezes a nomenclatura sítio molhado significando que ele está conectado ao sítio $(i,1)$. Associa-se uma variável dinâmica $\sigma_{i\ell}$ a cada sítio que toma o valor 1 se o sítio está conectado e 0 se o sítio não está conectado. Dois sítios estão conectados se ambos estiverem ocupados e a ligação entre eles estiver presente.

Dado os estados $\sigma_{i,\ell}$ e $\sigma_{i+1,\ell}$ deseja-se saber qual é a probabilidade (condicional) $w(\sigma_{i,\ell+1}|\sigma_{i,\ell},\sigma_{i+1,\ell})$ de o sítio $(i,\ell+1)$ estar no estado $\sigma_{i,\ell+1}$. As seguintes situações podem ocorrer



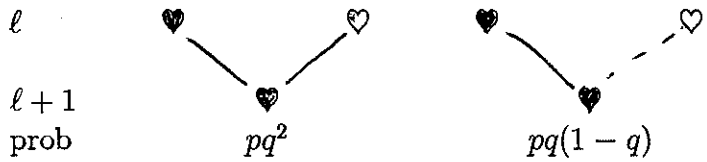
Então,

$$w(1 \mid 11) = pq^2 + 2pq(1-q) = pq(2-q). \tag{5.27}$$

Os processos aqui considerados são exatamente aqueles que têm probabilidade p_2 de ocorrer (relatado em (5.21)) no autômato de Domany-Kinzel, tomando ℓ como o passo de tempo nesse autômato. Portanto,

$$w(1 \mid 11) = pq(2-q) = p_2. \tag{5.28}$$

A outra situação a ser considerada é



Então

$$w(1|10) = pq. \tag{5.29}$$

Que tem correspondência com o processo que ocorre com probabilidade p_1 no autômato de Domany-Kinzel. Assim,

$$w(1|10) = pq = p_1. \tag{5.30}$$

Através desse procedimento a correspondência entre o autômato de Domany-Kinzel e a percolação direcionada fica estabelecida. A correspondência se realiza dado ao tipo de regra de transição considerada por Domany e Kinzel mas também porque o modelo sendo considerado é um autômato. Se fosse um modelo estocástico de gás de rede com atualização assíncrona este mapeamento não poderia ser realizado. Essas considerações estão feitas mais resumidamente no artigo de Domany e Kinzel.

Com essa correspondência vemos que a probabilidade de percolação se identifica com $P = \lim_{\ell\to\infty} P_\ell(1)$. Usando a aproximação de campo médio a equação para $P_\ell(1) = x_\ell$ dada em (5.26) obtemos

$$P = p_2 P^2 + 2 p_1 P (1 - P).$$

Uma solução é $P = 0$ e a outra é

$$P = \frac{2p_1 - 1}{2p_1 - p_2} = \frac{2pq - 1}{pq^2}$$

válida para $2p_1 = 2pq > 1$. Para a percolação direcionada por sitios ($q = 1$)

$$P = \frac{2p - 1}{p}$$

de onde obtemos $p_c = 1/2$, nessa aproximação, e para a percolação direcionada por ligações ($p = 1$)

$$P = \frac{2q - 1}{q^2}$$

de onde obtemos $q_c = 1/2$, nessa aproximação.

5.4.3 Deteção da fase caótica

Em 1991 *Martins, Verona de Resende, Tsallis e Magalhães* detetaram uma nova fase no autômato de Domany-Kinzel [Martins et al 1991]. Essa fase denominada de fase *caótica* corresponde a estados estacionários ativos ($P(1) \neq 0$) para os quais a distância de Hamming ψ (a ser definida abaixo) é diferente de zero.

Os autores supra citados realizaram simulações de Monte Carlo com o objetivo de investigar o possível espalhamento de dano no autômato de Domany-Kinzel. Consideraram o autômato numa dada configuração microscópica inicial e criaram uma configuração com um pequeno dano com relação à primeira, ou seja com alguns sítios em estados distintos ao da configuração considerada. O sistema assim criado é chamado de réplica do sistema original. O sistema e sua réplica passam a evoluir de acordo com o mesmo ruído. Se há espalhamento do dano produzido então a distância de Hamming é diferente de zero e o sistema é dito ser sensível às condições iniciais, o que evidencia um estado estacionário caótico. Os resultados provenientes das simulações numéricas de Martins et al [Martins et al 1991] e de simulações feitas, posteriormente, por outros autores [Zebende e Penna 1994], [Grassberger 1995] indicam que o diagrama de fases do autômato de Domany-Kinzel exibe três fases: *congelada*, *ativa* e *caótica*.

5.4.4 Formulação analítica do espalhamento de dano

Em [Tomé 1994] formulei analíticamente prescrição para a evolução conjunta (sujeita ao mesmo ruído) de dois sistemas e estudei, através de aproximação de campo médio, o espalhamento de dano no autômato de Domany-Kinzel.

Na descrição dos estados estacionários caóticos é necessário considerar as configurações microscópicas para dois sistemas, i.e. o sistema e sua réplica. Estes devem evoluir sujeitos ao mesmo ruído mas também devem manter a sua (deles) identidade. Assim se $\sigma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i, ..., \sigma_N)$ e $\tau \equiv (\tau_1, \tau_2, ..., \tau_i, ..., \tau_N)$ denotam as configurações microscópicas do sistema e da réplica, respectivamente, então o sítio i do sistema deve ser atualizado segundo $w_{DK}(\sigma_i|\sigma'_i, \sigma'_{i+1})$ e o sítio i da réplica deve ser atualizado segundo $w_{DK}(\tau_i|\tau'_i, \tau'_{i+1})$, as quais são as regras explicitadas em (5.21). Este procedimento compreende a individualidade na evolução. O fato de a evolução dos dois sistemas ser governada pela geração do mesmo ruído, ou, computa-

cionalmente, pela mesma sequência de números aleatórios, requer formulação analítica muito mais elaborada. A distância de Hamming, a qual caracteriza o estado caótico, é um exemplo de uma grandeza que só pode ser avaliada, do ponto de vista analítico, através do estabelecimento da prescrição para a evolução conjunta (sistema e réplica evoluindo segundo mesmo ruído).

A distância de Hamming ψ é definida através da expressão

$$\psi_\ell =< (\sigma_i - \tau_i)^2 >_\ell . \tag{5.31}$$

onde a média considerada em (5.31) é feita sobre uma *distribuição de probabilidades conjunta* $P_\ell\ (\sigma\,;\tau\,)$ definida como a probabilidade de o sistema e a réplica estarem, no passo de tempo ℓ, nas configurações σ e τ , respectivamente. Para obter a equação de evolução temporal de ψ_ℓ, ou seja $\psi_{\ell+1}$ em função de uma média no passo ℓ da variável microscópica $(\sigma_i - \tau_i)^2$, precisa-se da equação de evolução para $P_{\ell+1}(\sigma\,;\tau)$.

A equação de evolução para a distribuição de probabilidades conjunta $P_\ell(\sigma;\tau)$ é escrita através da expressão

$$P_{\ell+1}(\sigma\,;\,\tau) = \sum_{\sigma',\tau'} W\,(\sigma\,;\tau\,|\,\sigma'\,,\tau')\,P_\ell(\sigma'\,;\tau'), \tag{5.32}$$

onde

$$W\,(\sigma\,;\tau\,|\,\sigma'\,,\tau') = \prod_i w\,(\sigma_i;\tau_i\,|\,\sigma'_i\,,\sigma'_{i+1}\,;\tau'_i\,,\tau'_{i+1}\,)\,, \tag{5.33}$$

é a *probalidade de transição conjunta*, a probabilidade de o sistema e a réplica estarem no passo $\ell+1$ nos estados σ e τ , respectivamente, dado que no passo ℓ estavam nos estados σ' e τ'.

A equação de evolução para ψ_ℓ é dada formalmente através da definição (5.31) e usando (5.32) e (5.33) por

$$\psi_{\ell+1} = P_\ell(1\,;\,0) =< w\,(1;0\,|\,\sigma'_i\,,\sigma'_{i+1}\,;\tau'_i\,,\tau'_{i+1}\,) >_\ell . \tag{5.34}$$

Essa equação poderá ser avaliada uma vez que tenhamos expressões para as probabilidades de transição conjuntas.

O *cerne* da questão está exatamente no estabelecimento da prescrição para a probabilidade de transição conjunta ou em outras palavras na construção de uma prescrição para $w(\sigma_i;\tau_i|\sigma'_i,\sigma'_{i+1};\tau'_i,\tau'_{i+1})$ a qual seja capaz de levar em conta a evolução dos dois sistemas sujeitos ao mesmo ruído. É claro

que a equação (5.33) já contém elementos essencias para a descrição desejada. Entretanto ela só estabelece como se dá a atualização dos dois sistemas que deve ser sincronizada, dado que estamos analisando um autômato, por isso temos o produto das probabilidades de transições. Na construção da prescrição para $w(\sigma_i;\tau_i|\sigma'_i,\sigma'_{i+1};\tau'_i,\tau'_{i+1})$ as seguintes propriedades devem ser observadas:

i) a probabilidade $w(\sigma_i;\tau_i|\sigma'_i,\sigma'_{i+1};\tau'_i,\tau'_{i+1})$ deve ser normalizada, isto é, a soma sobre σ_i e τ_i deve ser igual a um;

ii) a probabilidade marginal obtida pela soma de $w(\sigma_i;\tau_i|\sigma'_i,\sigma'_{i+1};\tau'_i,\tau'_{i+1})$ sobre a variável da réplica τ_i deve reproduzir a probabilidade $w_{DK}\left(\sigma_i|\sigma'_i,\sigma'_{i+1}\right)$ e vice-versa;

iii) as regras devem refletir a simetria de invariância da rede e do modelo original;

iv) os dois sistemas devem ser atualizados segundo o mesmo ruído.

Levando em conta essas propriedades as regras são dadas na tabela (5.35).

w	$(11;11)$	$(10;10)$	$(00;00)$	$(11;00)$	$(10;00)$	$(11;10)$
$(1;1)$	p_2	p_1	0	0	0	a
$(1;0)$	0	0	0	p_2	p_1	b
$(0;1)$	0	0	0	0	0	c
$(0;0)$	$1-p_2$	$1-p_1$	1	$1-p_2$	$1-p_1$	d

(5.35)

A título de exemplificação analisemos a probabilidade de transição conjunta $w(1;1|11;11)$. Para tal consideremos, no passo ℓ, a seguinte configuração local

$$\begin{pmatrix} \sigma'_{i-1} & \sigma'_{i+1} \\ \tau'_{i-1} & \tau'_{i+1} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Gerando um número aleatório ζ uniformemente distribuído entre 0 e 1 temos: se $\zeta < p_2$ então em $\ell+1$ o sítio i do sistema e da réplica estarão no estado

$$\begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

e se $\zeta \geq p_2$ estarão no estado

$$\begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

A transição para os estados

$$\begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{e} \qquad \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

está proibida. Aí está um exemplo de que só um ruído ζ foi gerado e os sistema evoluiram acopladamente de acordo com esse ruído.

A definição dos parâmetros a, b, c e d deve ser estabelecida criteriosamente, pois essas são probabilidades de transição que envolvem estados para os quais a propriedade de evolução conjunta sujeita ao mesmo ruído não provém de uma definição única e que decorre fácilmente como consequência dessa propriedade.

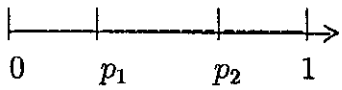
A definição de a, b, c e d que proponho [Tomé 1994] é feita como segue.

Consideremos a seguinte configuração local no passo ℓ:

$$\begin{pmatrix} \sigma'_{i-1} & \sigma'_{i+1} \\ \tau'_{i-1} & \tau'_{i+1} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.36}$$

e suponhamos que $p_1 < p_2$.

A atualização do sítio i de cada sistema é realizada através da geração de um número aleatório ζ entre 0 e 1 e considerando as três seguintes situações



i) Se $\zeta < p_1 \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$,

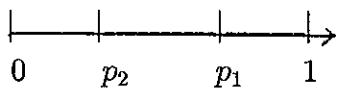
ii) se $p_1 \leq \zeta < p_2 \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e

iii) se $p_2 \leq \zeta \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Portanto uma possível escolha para os parâmetros a, b, c e d da tabela (5.35) que consegue levar em conta o fato de a evolução conjunta estar sujeita ao mesmo ruído é

$$a = p_1, \quad b = p_2 - p_1, \quad c = 0, \quad d = 1 - p_2 \qquad \text{se} \qquad p_1 < p_2. \tag{5.37}$$

No caso em que $p_2 < p_1$ então gera-se o número aleatório ζ,



e as três seguintes situações devem ser consideradas:

i) Se $\zeta < p_2 \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$,

ii) se $p_2 \leq \zeta < p_1 \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e

iii) se $p_1 \leq \zeta \Longrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_i \\ \tau_i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Portanto nesse caso

$$a = p_2\,, \quad b = 0, \quad c = p_1 - p_2, \quad d = 1 - p_1 \qquad \text{se} \qquad p_2 < p_1. \tag{5.38}$$

A partir de (5.37) e de (5.38) conclui-se que

Prescrição de Tomé

$$a = \min(p_1, p_2), \quad b = p_2 - a, \quad c = p_1 - a, \quad d = 1 - p_2 - p_1 - a. \tag{5.39}$$

A prescrição para a evolução conjunta e sujeita ao mesmo ruído fica satisfeita com a escolha de probabilidades de transição dada em (5.39) conjuntamente com as outras probabilidades dadas em (5.35).

A equação de evolução para a distancia de Hamming (5.34) pode agora ser avaliada, através da prescrição acima introduzida (5.35-5.39) ,

$$\psi_{\ell+1} = P_{\ell+1}(10) = p_2 P_\ell(11;00) + 2p_1 P_\ell(10;00) \; + 2(b+c)\, P_\ell(11;10). \tag{5.40}$$

Definimos $P_\ell(\sigma_i, \sigma_{i+1}; \tau_i, \tau_{i+1})$ como a função de correlação de pares na qual dois sítios vizinhos do sistema e da réplica estão, respectivamente, nos estados (σ_i, σ_{i+1}) e (τ_i, τ_{i+1}). Em geral faremos uso das notações $P_\ell(11;10)$, $P_\ell(11;00)$, $P_\ell(11;10)$, etc. A equação de evolução para $P_\ell(11;10)$ é dada formalmente por,

$$P_{\ell+1}(11;00) =< w\,(1;0\,|\,\sigma'_i\,,\sigma'_{i+1}\,;\tau'_i\,,\tau'_{i+1}\,)w\,(1;0\,|\,\sigma'_i\,,\sigma'_{i+1}\,;\tau'_i\,,\tau'_{i+1}\,)>_\ell . \tag{5.41}$$

Equações similares podem ser deduzidas para as outras funções de correlações. O desenvolvimento da equação (5.41) mostra que o lado direito dessa envolve as correlações de ordem superior:

$$
\begin{aligned}
P_{\ell+1}(11;00) &= (b^2+c^2)[P_\ell(111;101)+P_\ell(111;010)] \\
&+p_1^2\,[P_\ell(101;000)+P_\ell(010;000)] \\
&+2b\,p_2\,P_\ell(111;100)+2b\,p_1 P_\ell(110;100) \\
&+2b\,c\,P_\ell(110;011)+p_2^2\,P_\ell(111;000) \\
&+2p_1\,p_2\,P_\ell(110;000).
\end{aligned} \tag{5.42}
$$

A equação para $P_\ell(111;101)$, por exemplo, irá conter termos de ordem ainda superior. Portanto a equação de evolução para ψ_ℓ, a qual desejamos resolver e assim descrever o estado estacionário caótico, não parece ter solução analítica exata.

No estudo da evolução conjunta podemos verificar que agora temos de considerar um novo espaço no qual cada ponto tem associado duas variáveis $(\sigma_i;\tau_i)$. Em [Tomé 1994] analisamos as equações para as correlações recorrendo a uma aproximação de truncamento a nível de correlações de pares de sítios no sistema e na réplica, aproximação muito similar a (já definida) *aproximação de pares.*

Os diagramas de fases das figuras 14 e 15 advêm da formulação acima exposta e de aproximações de campo médio. Trucamento de ordem superior aos considerados na obtenção desses diagramas (levando em conta correlações de até três sítios) desenvolvido em colaboração com E. P. Gueuvoghlanian [Gueuvoghlanian 1995], [Gueuvogh. and Tome] mostra que, à medida que correlações são incluídas na análise de campo médio, os resultados obtidos se aproximam cada vez mais dos resultados de simulações [Martins et al 1991], [Zebende e Penna 1994], [Grassberger 1995]. Exceção é feita ao ponto de encontro das três linhas de transição. Nas simulações essas linhas se encontram no eixo $p_2 = 0$, nas aproximações de campo médio esse resultado não é obtido apesar de o ponto de encontro se dar para valores ligeiramente inferiores de p_2 a cada aproximação sucessiva.

Comento agora um procedimento analítico realizado por outros autores [Kohring e Schreck. 1992] onde é estudado analíticamente o espalhamento de dano no autômato de Domany-Kinzel. Entretanto a prescrição dada por esses autores para a evolução conjunta do sistema e sua réplica *não está totalmente correta.* Para esses autores os parâmetros a, b, c e d da tabela (5.35) são dados por

Prescrição de Kohring & Schreckenberg

$$a = p_1 p_2, \quad b = p_2(1-p_1), \quad c = p_1(1-p_2), \quad d = (1-p_2)(1-p_1).$$

Essa prescrição prevê probabilidades de transição, como as escritas acima, onde não pode haver atualização sujeita ao mesmo ruído para os dois sistemas. De fato para o caso considerado em (5.36) há multiplicação de probabilidades, como está mostrado acima, ou seja os sistemas para essa prescrição evoluem sem estarem sujeitos ao mesmo ruído. Outras probabilidades de transição como $w(1;1|11;11)$ são consideradas como na prescrição que propus em (5.35) , o que está correto. Assim os autores atualizam o sistema e a réplica algumas vezes sujeitos ao mesmo ruído e outras vezes sem levar em conta esse vínculo. Com base nos argumentos que acima apresentei a prescrição de Koring e Schreckenberg não parece ser adequada para a descrição da evolução de dois sistemas que evoluem sujeitos ao mesmo ruído. Os resultados analíticos desses autores são obtidos por uma aproximação de campo médio numa árvore [Cook e Derrida 1990]. Através dessa aproximação os autores supra citados encontram diagramas de fase para o autômato onde são verificadas as fases: congelada, ativa e caótica. Entretanto nesse estudo as fases mostram comportamento reentrante, o qual não é observado nas simulações de Martins e colaboradores. Esta reentrância é consequencia dos resultados desses autores serem obtidos pela prescrição para dinâmica conjunta introduzida por eles, a qual se baseia em hipóteses que não são corretas. Essa aproximação na ávore, que é uma aproximação de campo médio, é muito pobre no sentido em que ela não consegue reproduzir nem as características topológicas da linha de transição do estado congelado para o estado ativo como foram obtidas por Domany-Kinzel. Entretanto efetuando aproximações de campo médio no mesmo esquema utilizado (ver seção **3.1**) na delineação do diagrama de fases da figura 15, as quais conseguem reproduzir perfeitamente a topologia da linha congelado-ativo, a reentrância por eles obtida persiste [Gueuvoghlanian 1995], [Rieger et al 1994], mostrando assim que essa anomalia é um problema proveniente da prescrição de Kohring e Schreckenberg.

É importante observar que a dinâmica conjunta de dois sistemas deve ser entendida como uma dinâmica de *um único sistema* com um número maior de estados por sítio. Nesse sentido prescrições (conjuntas) distintas definem modelos distintos. Portanto, a priori, as duas prescrições acima podem fornecer resultados distintos para a linha ativo-caótica. Está claro que

a linha congelada-ativa não será distinta pois qualquer dinâmica conjunta, por construção, se reduz ao autômato de Domany-Kinzel (ver a propriedade *ii* da subseção anterior). Isto significa que o espalhamento de dano não seria univocamente definido e portanto haveria várias maneiras de simular esse processo. Entretanto, se uma simulação do espalhamento de danos for realizada com *uma única sequência* de números aleatórios, como a realizada em [Martins et al 1991], então a prescrição analítica a ser utilizada deve conter os elementos da prescrição introduzida por esta autora. Considere o exemplo dado em (5.36). Gerando-se um único número aleatório, somente três dos quatro possíveis estados conjuntos podem se realizar, o que está de acordo com a prescrição (5.37). Na outra prescrição quaisquer desses quatro estados podem ocorrer o que implica na geração de dois números aleatórios. Simulação onde issso ocorre é feita em [Rieger et al 1994].

Em artigo recente Grassberger [Grassberger 1995] advoga que as duas prescrições [Tomé 1994] e [Kohring e Schreck. 1992] estão corretas e que a linha de transição ativo-caótico obtida em [Martins et al 1991] não é definida de maneira unívoca, uma vez que poderiam ser feitas simulações baseadas na prescrição de Kohring e Schreckenberg as quais levariam a linha a *não* ser localizada exatamente no mesmo *locus*. Com isto Grassberger quer dizer que o autômato apresenta as fases ativa e caótica mas elas ocupam regiões distintas no diagrama de fases dependendo das diferentes maneiras de realizar o espalhamento de dano. No meu entender o espalhamento de danos deve ser estudado, numericamente, utilizando-se a mesma sequência de números aleatórios (somente um número aleatório para a atualização de sítios correspondentes no sistema e na sua réplica) como feito pioneiramente por Martins, Resende, Tsallis e Magalhães, para o autômato de Domany-Kinzel. Isso implica na utilização, do ponto de vista analítico, de uma prescrição como a dada por esta autora.

5.4.5 Campo conjugado à distância de Hamming

O campo conjugado h à distância de Hamming tem sua formulação mais elaborada do que a que foi feita para o campo conjugado à densidade x. Tsallis e Martins [Tsallis e Martins 1994] introduziram o conceito do campo conjugado h à distância de Hamming e avaliaram numericamente, para o autômato de Domany-Kinzel, a susceptibilidade generalizada associada a esse campo.

Formulei [Tomé 1994] tratamento analítico para o campo conjugado h e para a susceptibilidade generalizada associada a h. A probabilidade de transição para a evolução conjunta foi modificada de modo a introduzir um termo, linear em h,que leva em conta o desacolamento na evolução temporal dos dois sistemas sujeitos ao mesmo ruído. Portanto o campo toma valores entre 0 e 1 e serve como uma medida do quanto os sistemas estão acoplados. Se $h = 1$ então os sistemas estão totalmente desacoplados e se $h = 0$ então os sistemas evoluem sujeitos ao mesmo ruído exatamente como na prescrição dada em (5.35). Propus uma forma analítica para a probabilidade de transição conjunta na qual tal campo é introduzido:

$$W_M = W\,(\sigma\,;\tau\,|\,\sigma'\,,\tau') - h[W\,(\sigma\,;\tau\,|\,\sigma'\,,\tau') - W(\sigma|\sigma'\,)\,W(\tau|\tau')], \quad (5.43)$$

onde $W\,(\sigma\,;\tau\,|\,\sigma',\tau')$ é a probabilidadede transição conjunta definida em (5.33) e $W(\sigma|\sigma')$ e $W(\tau|\tau')$ são as probabilidades de transição para cada um dos autômatos de Domany-Kinzel dadas pela expressão (2.11) acompanhada da expressão (5.21). Observe que o segundo termo em (5.43) é nulo quando a condição de evolução sujeita ao mesmo ruído é observada. A susceptibilidade generalizada é definida nesse caso como $\chi_\psi \equiv \partial\psi/\partial h$.

Construímos a equação de evolução para a distância de Hamming ψ_ℓ usando a prescrição (5.43) e a analisamos na aproximação de campo médio simples [Tomé 1994] e na aproximação de pares [Gueuvoghlanian 1995]. Expandindo a equação resultante da aproximação de campo médio simples nas vizinhanças do ponto crítico, e considerando somente termos lineares em h temos,

$$\psi' = A\psi - C\psi^2 + B\,h, \quad (5.44)$$

onde B e C são funções positivas dos parâmetros e A é tal que $(A-1)$ se anula sobre a linha crítica. A susceptibilidade calculada a partir da expressão (5.44) e a campo nulo diverge no ponto crítico como

$$\chi_\psi \sim |A-1|^{-1}\,. \quad (5.45)$$

Caracterizando a transição da fase ativa para a caótica como uma transição de segunda ordem.

5.4.6 Considerações sobre a classe de universalidade da transição ativo-caótico

A linha de transição do estado ativo para o estado caótico do autômato de Domany-Kinzel deve pertencer à classe de universalidade da percolação direcionada. Essa afirmativa está baseada na análise da evolução conjunta do sistema e sua réplica no espaço de configurações $(\sigma;\tau)$ associado à essa evolução.

Quando o sistema-conjunto atinge uma configuração tal que o sistema e réplica possuem configurações idênticas então a evolução passa a se dar de tal maneira que as configurações σ e τ serão sempre idênticas. Isto é consequência do fato de a evolução conjunta estar sujeita ao mesmo ruído. Consideremos uma possível sequência temporal de configurações como a dada por

$$\begin{array}{cccccccccc}
\sigma & \ldots & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & \ldots \\
\tau & \ldots & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & \ldots \\
 & & & & \downarrow & & & & \\
\sigma & \ldots & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\
\tau & \ldots & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\
 & & & & \downarrow & & & & \\
\sigma & \ldots & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \ldots \\
\tau & \ldots & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \ldots
\end{array}$$

e assim por diante. Esse é um exemplo de uma trajetória que está confinada ao subespaço onde $\sigma = \tau$. Esse subspaço é um conjunto absorvente de estados no espaço da evolução conjunta, pois uma vez que o sistema-conjunto atinja um estado contido nesse subespaço dele não escapará: esse portanto é um subespaço *absorvente*. Esse subespaço possui 2^N configurações que são aquelas que possuem distância de Hamming identicamente nula. Observamos que o número total de configurações no espaço (σ,τ) é 4^N.

A evolução conjunta dentro do subespaço absorvente está relacionada com a fase ativa do diagrama de fases. A fase caótica não pode estar relacionada com tal evolução absorvente pois a distância de Hamming é diferente de zero nessa fase. Assim a transição do estado ativo para o estado caótico é uma transição que pode ser vista como uma transição onde estados absorventes têm um papel relevante. Segundo a conjectura da percolação direcionada

tais transições devem pertencer à classe de universalidade da percolação direcionada.

As considerações expostas acima estão implicitas nos trabalhos [Tomé 1994] e [Gueuvoghlanian e Tomé 1996]. Recentemente Grassberger realizou simulações numéricas para analisar o comportamento crítico da transição ativo-caótico as quais indicam que essa transição, que é denominada por ele de uma transição de espalhamento de dano, está na classe da percolação direcionada [Grassberger 1995].

5.4.7 Transformação de variáveis

Vamos considerar aqui uma transformação de variáveis que permita uma melhor descrição do subespaço absorvente. Para isso definimos novas variáveis η_i e ϵ_i definidas por

$$\eta_i = |\sigma_i - \tau_i| \qquad \text{e} \qquad \epsilon_i = \tau_i \tag{5.46}$$

de onde obtemos a transformação inversa

$$\sigma_i = |\eta_i - \epsilon_i| \qquad \text{e} \qquad \tau_i = \epsilon_i. \tag{5.47}$$

Essa transformação é biunívoca e pode ser resumida na tabela

$$\begin{array}{cccc} \sigma_i & \tau_i & \eta_i & \epsilon_i \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \tag{5.48}$$

portanto podemos considerar a evolução do sistema-conjunto no novo espaço (η, ϵ) em vez de (σ, τ). Com essas novas variáveis a distância de Hamming é dada por

$$\psi = < \eta_i > .$$

A evolução temporal no espaço é dada pela probabilidade de transição conjunta $\widehat{w}(\eta_i; \epsilon_i | \eta'_i, \eta'_{i+1}; \epsilon'_i, \epsilon'_{i+1})$ que deve ser obtida a partir da probabilidade de transição conjunta $w(\sigma_i; \tau_i | \sigma'_i, \sigma'_{i+1}; \tau'_i, \tau'_{i+1})$ pela transformação acima e

está mostrada na tabela abaixo

$\widehat{w}$	$(00;11)$	$(00;10)$	$(00;00)$	$(11;00)$	$(10;00)$	$(01;10)$
$(0;1)$	p_2	p_1	0	0	0	a
$(1;0)$	0	0	0	p_2	p_1	b
$(1;1)$	0	0	0	0	0	c
$(0;0)$	$1-p_2$	$1-p_1$	1	$1-p_2$	$1-p_1$	d

(5.49)

Se somarmos em η_i vemos que o resultado não depende de η'_i e η'_{i+1} o que deve ser esperado pois sendo $\epsilon_i = \tau_i$ a dinâmica resultante se identifica com a dinâmica de um autômato de Domany-Kinzel. Entretanto se somarmos sobre a variável ϵ_i o resultado depende, em geral, de ϵ'_i e ϵ'_{i+1}. Mas existe um caso em que isto não ocorre, a saber, o caso $p_2 = 0$. Nesse caso $\widetilde{w}(\eta_i|\eta'_i, \eta'_{i+1})$ definido por

$$\widetilde{w}(\eta_i|\eta'_i, \eta'_{i+1}) = \sum_{\epsilon_i} \widehat{w}(\eta_i; \epsilon_i|\eta'_i, \eta'_{i+1}; \epsilon'_i, \epsilon'_{i+1}) \tag{5.50}$$

será dado por

$$\widetilde{w}(\eta_i|\eta'_i, \eta'_{i+1}) = p_1(2\eta_i - 1)[(1-\eta'_i)\eta'_{i+1} + \eta'_i(1-\eta'_{i+1})] + (1-\eta_i) \tag{5.51}$$

que está mostrado explicitamente na tabela abaixo

$\widetilde{w}$	00	01	10	11
1	0	p_1	p_1	0
0	1	$1-p_1$	$1-p_1$	1

(5.52)

Essa regras são identicas às regra de transição para o autômato de Domany-Kinzel para $p_2 = 0$ (ver tabela (5.21)). Conclui-se que para $p_2 = 0$ o seguinte resultado é válido

$$\psi =< \eta_i >=< \sigma_i >= x$$

isto é, a distância de Hamming é igual ao parâmetro de ordem do estado ativo do autômato de Domany-Kinzel.

Capítulo 6

Conclusão

A irreversibilidade é manifestamente uma característica relevante de multíplices fenômenos da natureza. A mecânica estatística de não-equilíbrio tem tentado, há aproximadamente trinta anos, dar descrições desses fenômenos, com relativo sucesso. Podemos distinguir diferentes abordagens dentro da área, as quais têm em comum, pelo menos, um centro de atenção: a própria fundamentação mecânico-estatística dos fenômenos irreversíveis. Nesta monografia nos ativemos ao estudo de fenômenos irreversíveis através da construção de dinâmicas estocásticas irreversíveis definidas em reticulados. Como exposto na introdução a abordagem aqui adotada parte do princípio de que a análise dos fenômenos irreversíveis deve ser feita no nível descritivo onde a irreversibilidade microscópica é verificada. Esse tratamento tem sido considerado em inúmeras pesquisas realizadas na área de mecânica estatística de não-equilíbrio. Dentro desse enfoque os fenômenos irreversíveis são descritos por modelos de rede que não obedecem à condição de balanceamento detalhado.

A abordagem apresentada nessa resenha tem como um dos seus objetivos fornecer contribuições para o estabelecimento de uma teoria geral das transições de fase em sistemas que se encontram fora do equilíbrio termodinâmico. Como é bem conhecido o desenvolvimento da teoria dos fenômenos críticos em sistemas que se encontram em equilíbrio termodinâmico culminou na década de 70 com a sistematização introduzida pelo grupo de renormalização de Wilson. Nessa teoria as simetrias das hamiltonianas dos modelos desempenham importante papel na determinação da classe de universalidade desses modelos. Em situações onde os sistemas não estão em

equilíbrio termodinâmico não temos uma hamiltoniana, dada a priori, que seja capaz de descrever os estados estacionários de tais sistemas. A universalidade nas transições de fase cinéticas talvez possa ser prevista a partir das simetrias e propriedades das probabilidades de transição. Nesse sentido algumas conjecturas sobre classes de universalidade têm sido formuladas com base em equações de Langevin. Este é o caso da conjectura "up-down" e da conjectura da percolação direcionada, várias vezes citadas aqui.

Apresentamos, e utilizamos frequentemente nesta monografia, quatro métodos de estudo dos processos irreversíveis modelados por dinâmicas estocásticas definidas em retículados. Do ponto de vista analítico podemos estudar os modelos de rede através da aproximação de campo médio dinâmico e do método das expansões em séries temporais. Esse último método provém da equação mestra dada dentro do formalismo de operadores. Como visto nesta resenha, tal formalismo provê operadores de evolução que revelam as propriedades das regras locais dos modelos de rede. A partir dessa análise podemos obter expansões em séries temporais de grandezas de interesse na caracterização da criticalidade. Os métodos numéricos aqui expostos dizem respeito às simulações de Monte Carlo e às simulações dependentes do tempo. A primeira dessas se identifica com as simulações realizadas no estudo de fenômenos críticos em equilíbrio termodinâmico. O método das simulações dependentes do tempo foi introduzido, e é utilizado, com o objetivo de determinar o comportamento crítico de modelos intrinsecamente irreversíveis, como os modelos com estados absorventes.

Os procedimentos feitos nas construções de modelos de rede, sejam autômatos celulares ou modelos de gás de rede, pretendem dar embasamento microscópico para o comportamento de sistemas que sofram processos irreversíveis. A concepção dos modelos de rede leva em conta, muitas vezes, os mecanismos de reações contidos em modelos que não possuem estrutura espacial e que são definidos por um conjunto de equações da cinética química. Esse procedimento fica claro quando consideramos o caso do modelo de rede para um sistema predador-presa e do autômato celular para sistema imunológico que foram expostos nessa monografia. Os modelos que construimos são modelos com estrutura espacial e que possuem regras locais e irreversíveis, elementos essencias na descrição microscópica dos processos irreversíveis. Entretanto considero que pode haver outros fatores importantes a serem incluídos para a descrição mais realista dos processos irreversíveis e da auto-organização na natureza. Concluindo: os modelos de rede, os quais

simulamos em computadores, embora nem sempre consigam levar em conta todos os fatores relevantes na auto-organização na natureza e nos processos irreversíveis em geral, fornecem uma sistemática capaz de prover contribuições para o avanço de pesquisas sobre sistemas que se encontram fora do equilíbrio termodinâmico.

Bibliografia

[Andjel e Schinazi 1995] E. Andjel and R. Schinazi, "A complete convergence theorem for an epidemic model", preprint (1995).

[Aukrust et al 1990] T. Aukrust, D. A. Browne, and I. Webman, *Phys. Rev. A* **41** 5294, (1990).

[Bailey 1975] N. T. J. Bailey, *The Mathematical Theory of Infectious Diseases and its Applications*, Charles Griffin & Company Limited, London, 1975.

[Baker 1990] G. A. Baker Jr., *Quantitative Theory of Critical Phenomena*, Academic Press, New York, 1990.

[Bennett e Grinstein 1985] C. H. Bennett and G. Grinstein, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 657 (1985).

[Binder 1984] K. Binder, *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 1984.

[Blume et al 1971] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, *Phys. Rev. A* **14** 1071, (1971).

[Boccara et al 1994] N. Boccara, K. Cheong and M. Oram, *J. Phys. A* **27**, 1585 (1994).

[Brass et al 1994] A. Brass, A. J. Bancroft, M. E. Clamp, R. K. Grencis and K. J. Else, *Phys. Rev. E* **50,** 1589 (1994).

[Brass et al 1994a] A. Brass, R. K. Grencis and K. J. Else, *J. Theor. Biol.* **166,** 189 (1994).

[Britto de Castro 1985] G. L. Borba, F. C. Prince, N. Patel and A. R. Britto de Castro, *Solid State Commun.* **55**, 521 (1985).

[Brower et al 1978] R. C. Brower, M. A. Furman and M. Moshe, *Phys. Lett. B* **76**, 213 (1978).

[Cardy e Sugar 1980] J. L. Cardy and R. L. Sugar, *J. Phys. A* **13**, L423 (1980).

[Cattani e Tomé 1993] M. Cattani and T. Tomé, *Origens of Life and Evolution of the Biosphere* **23,** 125 (1993).

[Celada e Seiden 1992] F. Celada and P. E. Seiden, *Imun. Today* **13**, 56 (1992).

[Cook e Derrida 1990] J. Cook and B. Derrida, *J. Phys. A* **23**, 1523 (1990).

[Cornell et al 1991] S. Cornell, M. Droz, R. Dickman and M. C. Marques, *J. Phys. A* **24**, 5605 (1991).

[DeMasi et al 1985] A. DeMasi, P. A. Ferrari and J. L. Lebowitz, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1947 (1985).

[Derrida 1990] B. Derrida, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII*, edited by H. van Beijeren, North Holland, Amsterdam, 1990, p. 273.

[Dickman 1986] R. Dickman, *Phys. Rev. A* **34**, 4246 (1986).

[Dickman 1987] R. Dickman, *Phys. Lett. A* **122**, 463 (1987).

[Dickman 1989] R. Dickman, *J. Stat. Phys.* **55**, 997 (1989).

[Dickman 1989a] R. Dickman, *Phys. Rev. B* **40**, 7005 (1989).

[Dickman 1990] R. Dickman, *Phys. Rev. A* **42**, 6985 (1990).

[Dickman e Tomé 1991] R. Dickman and T. Tomé, *Phys. Rev. A* **44**, 4833 (1991).

[Dickman et al 1991] R. Dickman, J.-S. Wang and I. Jensen, *J. Chem Phys.* **94**, 8252 (1991).

[Dickman 1993] R. Dickman, *Int. J. Mod. Phys. C* **4**, 271 (1993).

[Domany e Kinzel 1984] E. Domany and W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 447 (1984).

[Ehsasi et al 1989] M. Ehsasi, M. Matloch, O. Frank, J. H. Block, K. Christmann, F. S. Rys and W. Hirschwald, *J. Chem. Phys.* **91**, 4949 (1989).

[Evans 1989] J. W. Evans, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2642 (1989).

[Evans et al 1995] M. R. Evans, D. P. Forster, C. Godrèche and D. Mukamel, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 208 (1995).

[Fan e Percus 1991] Y. Fan and J. K. Percus, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1677 (1991).

[Ferrari et al 1988] P. A. Ferrari, J. L. Lebowitz and C. Maes, *J. Stat. Phys.* **53**, 295 (1988).

[Fisher 1971] M. E. Fisher, in *Critical Phenomena*, Proceeding of 1970 E. Fermi Summer School of Physics, edited by M. S. Green, Academic Press, New York, 1971, vol. 51.

[Galvão Ramos et al 1995] J. Galvão Ramos, A. R. Vascomcellos and R. Luzzi, *Forschr. Phys.* **43**, 265 (1995).

[Garrido et al 1987] P. L. Garrido, A. Labarta and J. Marro, *J. Stat. Phys.* **49**, 551 (1987).

[Glauber 1963] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).

[Grandi e Figueiredo 1995] B. Grandi e W. Figueiredo, "Simulações de Monte Carlo em um sistema com dinâmicas competitivas de Glauber e Kawasaki", Livro de Resumos do XVIII ENFMC, 1995.

[Grassberger 1978] P. Grassberger and K. Sundermeyer, *Phys. Lett.* **77**, 220 (1978).

[Grassberger e Torre 1979] P. Grassberger and A. de la Torre, *Ann. Phys.* **122**, 373 (1979).

[Grassberger 1982] P. Grassberger, *Z. Phys. B* **47**, 365 (1982).

[Grassberger 1983] P. Grassberger, *Math. Biosc.* **63**, 157 (1983).

[Grassberger 1989] P. Grassberger, *J. Stat. Phys.* **22**, 3673 (1989).

[Grassberger 1995] P. Grassberger, *J. Phys. A* **22**, 13 (1995).

[Griffiths 1989] R. B. Griffiths, comunicação privada, 1989.

[Grinstein et al 1985] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Yu He, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2527 (1985).

[Grinstein 1988] G. Grinstein, *J. Stat. Phys.* **5**, 803 (1988).

[Grinstein et al 1989] G. Grinstein, Z.-W. Lai and D.A. Browne, *Phys. Rev. A* **40**, 4820 (1989).

[Gueuvoghlanian 1995] E. P. Gueuvoghlanian, *Um Estudo sobre o Autômato Celular de Domany-Kinzel,* Tese de Mestrado, **Instituto de Física**, **Universidade de São Paulo**, São Paulo, 1995.

[Gueuvogh. and Tome] E. P.Gueuvoghlanian and T. Tomé, preprint (1996).

[Haken 1983] H. Haken, *Synergetics: an Introduction*, Springer-Verlag, Berlin, 1983.

[Harris 1974] T. E. Harris, *Ann. Probab.* **2**, 969 (1974).

[Janssen 1981] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **42**, 151 (1981).

[Jensen et al 1990] I. Jensen, H. C. Fogedby and R. Dickman, *Phys. Rev. A* **41**, 3411 (1990).

[Katz et al 1988] S. Katz, J. L. Lebowitz and H. Spohn, *Phys. Rev. B* **28**, 1655 (1988).

[Kauffman 1969] S. A. Kauffman, *J. Theor. Biol.* **22**, 437 (1969).

[Kawasaki 1972] K. Kawasaki, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M. S. Green, Academic, London, 1972, vol. 2, p. 443.

[Kikuchi 1951] R. Kikuchi, *Phys. Rev.* **81**, 988 (1951).

[Kinzel 1985] W. Kinzel, *Z. Phys. B* **58**, 229 (1985).

[Kohring e Schreck. 1992] G. A. Kohring and M. Schreckenberg, *J. Physique I* **2**, 2033 (1992).

[Lotka 1920] A. J. Lotka, *Proc. Nat. Acad. Sci. (USA)* **6**, 410 (1920); *J. Amer. Chem. Soc.* **42**, 1585 (1920).

[Liggett 1985] T. M. Liggett, *Interacting Particle Systems*, Springer-Verlag, New York, 1985.

[Luzzi e Vasconcellos 1991] R. Luzzi and A. R. Vasconcellos, *Ciência e Cultura* **43**, 423 (1991).

[Ma 1976] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin, Reading, 1976.

[Mamada e Takano 1968] H. Mamada and F. Takano, *J. Phys. Soc. Japan* **25**, 675 (1968).

[Marro e Dickman 1996] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions*, Cambridge University Press, Boston, 1996 (a ser publicado).

[Martins et al 1991] M. L. Martins, H. F. Verona de Rezende, C. Tsallis and A. C. N. de Magalhães, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2045 (1991).

[Martins et al 1994] M. L. Martins, G. F. Zebende, T. J. P. Penna and C. Tsallis, *J. Phys. A* **27**, 1 (1994).

[Matsuda et al 1992] H. Matsuda, N. Ogita, A. Sasaki and K. Sato, *Prog. Theor. Phys.* **6**, 1035 (1992).

[Metropolis et al 1953] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).

[Nicolis e Prigogine 1977] G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, Wiley, New York, 1977.

[Nord e Evans 1985] R. S. Nord and J. W. Evans, *J. Chem. Phys.* **82**, 2795 (1985).

[Oliveira et al 1992] M. J. de Oliveira, T. Tomé and R. Dickman, *Phys. Rev. A* **46**, 6294 (1992).

[Oliveira 1992] M. J. de Oliveira, *J. Stat. Phys.* **66**, 273 (1992).

[Poo et al 1988] W.-J. Poo, L. Conrad and C.A. J. Janeway, *Nature* **332**, 379 (1988).

[Privman 1990] V. Privman, *Finite Size Scaling and Numerical Simulaiton of Statistical Systems*, World Scientific, Singapore, 1990.

[Rácz e Zia 1994] Z. Rácz and R. K. P. Zia, *Physical Review E* **49**, 139 (1994).

[Rieger et al 1994] H. Rieger, A. Schadschneider and M. Schreckenberg, *J. Phys. A* **27**, L423 (1994).

[Satulovsky e Tomé 1994] J. E. Satulovsky and T. Tomé, *Phys. Rev. E* **49**, 5073 (1994).

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
2713
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
ex. 2
INSTITUTO DE FÍSICA

[Satulovsky 1995] J. E. Satulovsky, *Modelo Estocástico para Sistema Predador-Presa*, Tese de Doutoramento, **Instituto de Física, Universidade de São Paulo**, São Paulo,1995.

[Satulovsky e Tomé 1996] J. E. Satulovsky and T. Tomé, *J. Math. Biol.* **00**, 000 (1996).

[Schlögl 1972] F. Schlögl, *Z. Phys.* **253** ,147 (1972).

[Stauffer 1985] D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1985.

[Tomé 1987] T. Tomé, *Fundamentação Mecânico-Estatística da Teoria das Estruturas Dissipativas em Matéria Condensada*, Tese de Doutoramento, **Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas**, Campinas, 1987.

[Tomé et al 1987] T. Tomé, A. R. Vasconcellos and R. Luzzi, *Physica B* **144**, 376 (1987).

[Tomé e Salinas 1987] T. Tomé and S. R. Salinas, *Rev. Bras. Fis.* **17**, 39 (1987).

[Tomé e Salinas 1989] T. Tomé and S. R. Salinas, *Phys. Rev. A* **39**, 2206 (1989).

[Tomé e Oliveira 1989] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **40**, 6643 (1989).

[Tomé e Oliveira 1990] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. A* **41**, 4251 (1990).

[Tomé et al 1991] T. Tomé, M. J. de Oliveira and M. A. Santos, *J. Phys. A* **24**, 3677 (1991).

[Tomé e Dickman 1993] T. Tomé and R. Dickman, *Phys. Rev. E* **47**, 948 (1993).

[Tomé 1994] T. Tomé, *Physica A* **212**, 99 (1994).

[Tomé e Drugowich 1996] T. Tomé and J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* **53**, 000 (1996).

[Tsallis e Martins 1994] C. Tsallis and M. L. Martins, *Europhys. Lett.* **27**, 415 (1994).

[van Kampen 1981] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1981.

[Vasconcellos e Luzzi 1984] A. R. Vasconcellos and R. Luzzi, *Phys. Status Solidi B* **126**, 63 (1984).

[Vieira e Bisch 1993] F. M. C. Vieira and P. M. Bisch, *Physica A* **199**, 40 (1993).

[Vlachos et al 1992] D. G. Vlachos, F. Schüth, R. Aris and L. D. Schmidt, *Physica A* **188**, 302 (1992).

[Volterra 1931] V. Volterra, *Leçons sur la Théorie Mathématique de la Lutte pour la Vie*, Gauthier-Villars, Paris, 1931.

[Wolfram 1983] S. Wolfram, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 601 (1983).

[Wreszinski e Salinas 1993] W. F. Wreszinski and S. R. A. Salinas, *Disorder and Competition in Soluble Lattice Models*, World Scientific, Singapore, 1993.

[Yokoi et al 1981] C. S. O.Yokoi, M. D. Coutinho-Filho and S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **24**, 4047 (1981).

[Zebende e Penna 1994] G. F. Zebende and T. J. P. Penna, *J. Stat. Phys.* **74**, 1273 (1994).

[Ziff et al 1986] R. M. Ziff, E. Gulari and I. Barshad, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553 (1986).

[Zubarev 1974] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Consultants Bureau, New York, 1974.