

# Capítulo 4

## Modelo de aglomerados vacantes

### (1)

Nesta seção e nas próximas, vamos estudar alguns modelos estocásticos definidos num reticulado com condições periódicas de contorno, que possuem, para valores altos do parâmetro  $\rho$ , estados estacionários ativos, ergódicos e equiprováveis, e, para valores baixos de  $\rho$ , um número muito grande de estados absorventes. O processo de análise utilizado em cada caso é o mesmo: a partir das regras de transição assumidas para o modelo, deduzimos as características do estado estacionário ativo. Verificamos se esse estado ativo é ergódico. Expressando as características desse estado através de um fator  $\gamma(\eta_i \dots \eta_{i'})$  adequado, utilizamos a formulação de matrizes de transferência para calcular algumas de suas propriedades físicas e realizamos simulações numéricas para conferir a validade desses resultados.

Todos os modelos estudados adiante decorrem do processo de contato conservativo invertido – PCCI. Neste modelo, partículas podem saltar de um sítio a outro da rede se, inicialmente, um de seus vizinhos for um sítio ocupado. O nome provém do fato de que o processo de contato conservativo [6] define-se através da mesma transição, mas mudando-se o sentido, ou seja, um sítio pode vir a ser ocupado se for vizinho de um sítio já ocupado.

O sítio de chegada deve ser um sítio próximo ao sítio de saída, localizado no sentido oposto ao do vizinho ocupado. Supondo que o sítio de chegada seja o  $n$ -ésimo vizinho, o processo obedece à equação-mestra (2.6), com a taxa de transição:

$$w_{r,r'} = w_{i,i+n} + w_{i,i-n} = \frac{1}{2} (\eta_{i-1} \eta_i \bar{\eta}_{i+n} + \bar{\eta}_{i-n} \eta_i \eta_{i+1}) \quad (4.1)$$

onde  $\bar{\eta}_i = 1 - \eta_i$  denota o valor da variável  $\eta_i$  em oposição ao atual. Impomos a periodicidade das condições de contorno tomando  $\eta_0 = \eta_L$  e  $\eta_{L+1} = \eta_1$ .

Para simplificar a notação acima, percebemos que as transições possíveis deixam todos os sítios do reticulado inalterados, exceto uma sequência de sítios. Como os modelos são homogêneos espacialmente, a especificação da posição  $i$  é desnecessária. Assim, vamos representar as transições possíveis através das sequências alteradas de números de ocupação. Por exemplo, para  $n = 1$ , as transições possíveis são:

$$110 \rightarrow 101 \qquad 011 \rightarrow 101 \qquad (4.2)$$

Cada um dos modelos estudados neste trabalho pode ser visto como uma adaptação do PCCI para um dado valor de  $n$ , uma vez que obedece às regras de transição correspondentes a este valor. Além destas regras, vamos definir regras adicionais, de forma que o estado estacionário ativo do modelo tenha a seguinte característica: as configurações microscópicas acessíveis são aquelas nas quais os sítios vacantes agrupam-se em aglomerados de tamanho determinado, imersos em um “mar” de sítios ocupados. Cada tamanho de aglomerados possível constitui uma classe diferente de sítios vacantes, e cada modelo caracteriza-se, portanto, pela presença de algumas classes de sítios vacantes e pela ausência das demais. Tal característica permite que possamos escrever uma matriz de transferência com pequeno grau de complexidade.

Tendo em vista esta característica de cada modelo, vamos nomeá-lo segundo a convenção a seguir: modelo de aglomerados (1) é aquele no qual coexistem sítios vacantes isolados num mar de sítios ocupados, como no exemplo

$$110101110101010111;$$

modelo de aglomerados (1, 2) é aquele no qual coexistem pares de sítios vacantes e sítios isolados, como no exemplo:

$$101110011010100111;$$

e assim por diante.

## 4.1 Apresentação do modelo (1)

O modelo (1) é definido pelas transições (4.2) [7]. Neste modelo, uma partícula é ativa se possui uma vizinha, estando bloqueada se estiver cercada por duas partículas e isolada se estiver cercada por dois sítios vazios, não podendo se movimentar nestas duas situações. Basicamente, este modelo é o PCCI, pra  $n = 1$ .

A densidade de partículas ativas, conforme a discussão anterior, é dada por:

$$\rho_a = P(110) + P(011) = 2P(110), \quad (4.3)$$

uma vez que este modelo é simétrico por inversão espacial. A densidade de partículas bloqueadas é  $\rho_b = P(111)$  e a densidade de partículas isoladas é  $\rho_i = P(010)$ .

À medida que o sistema evolui,  $\rho_a$  varia, alcançando por fim um valor constante, que pode ser nulo ou não. Um estado absorvente do sistema é aquele no qual  $\rho_a = 0$ , ou seja,

$$P(110) = 0 \quad (4.4)$$

Assim, para que um estado seja absorvente, é necessário que suas partículas estejam bloqueadas e/ou isoladas. Rotulando cada partícula de uma dada configuração como ativa, bloqueada ou isolada, é fácil ver que entre uma partícula bloqueada e uma isolada, deve haver uma partícula ativa. Assim, para que não haja partículas ativas, todas as partículas do sistema devem estar bloqueadas, ou todas devem estar isoladas.

O primeiro caso é atingido quando  $\rho = 1$ , e é de pouco interesse, uma vez que para este valor do parâmetro só existe uma configuração possível. O segundo caso é atingido para  $\rho \leq 0.5$ , como podemos ver a seguir: podemos escrever  $P(1)$  e  $P(0)$  em termos de probabilidades de dois ou mais sítios:

$$P(1) = P(11) + P(10) = P(111) + 2P(110) + P(010) \quad (4.5)$$

$$P(0) = P(10) + P(00) = P(110) + P(010) + P(001) + P(000) \quad (4.6)$$

Tomando  $\rho_a = \rho_b = 0$ , as equações anteriores tomam a forma:

$$P(1) = P(11) + P(10) = P(010) \quad (4.7)$$

$$P(0) = P(10) + P(00) = P(010) + P(001) + P(000) \quad (4.8)$$

Como  $P(1) = \rho$  e  $P(0) = 1 - \rho$ , subtraindo (4.8) de (4.7), temos:

$$\rho - (1 - \rho) = 2\rho - 1 = -[P(001) + P(000)] \leq 0 \rightarrow \rho \leq \frac{1}{2} \quad (4.9)$$

Há ainda outra configuração que pode ser considerada absorvente, embora também seja de pouco interesse: aquela onde não há partículas ( $\rho = 0$ ).

Vamos agora justificar nossa asserção inicial para este modelo – que ele contém, para cada valor do parâmetro de controle  $\rho^1$ , infinitos estados absorventes. Consideremos uma cadeia de tamanho  $L$ , com todas as partículas em posições alternadas (correspondendo a  $\rho = 0.5$ ). Suponhamos que o primeiro sítio da cadeia está ocupado. Extraíndo uma partícula do sistema, obtemos estados absorventes para uma densidade  $\rho^*$  ligeiramente menor que 0.5. O número de possíveis estados absorventes para  $\rho^*$  é dado pelo número de estados diferentes possíveis de ser obtidos nessa operação. Como existem  $L/2$  partículas inicialmente, ao retirar cada partícula, obtemos  $L/2$  estados absorventes distintos. Obtemos outros  $L/2$  estados absorventes tomando o primeiro sítio vacante. Logo, existem  $L$  estados absorventes distintos para este valor de  $\rho^*$ . Tomando o chamado limite termodinâmico ( $N, L \rightarrow \infty$  a uma densidade fixa), o número de estados absorventes também tende a infinito, enquanto  $\rho^* \rightarrow 0.5$ .

Para valores menores de  $\rho$ , o número de estados absorventes tende a aumentar, uma vez que o número de opções possíveis para retirar duas ou mais partículas é maior do que para retirar apenas uma, até atingir um limite máximo, e depois diminuir, uma vez que, à medida que o número de partículas retiradas torna-se muito grande, muitas das opções possíveis tendem a coincidir. Para valores muito baixos de  $\rho$ , o número de estados absorventes pode ser contabilizado considerando-se a colocação de partículas numa rede inicialmente vazia. Supondo que colocamos uma única partícula, o número de estados obtidos é igual a  $L$  (um estado para cada sítio escolhido). Novamente, tomando-se o limite termodinâmico,  $L$  tende a infinito, bem como o número de estados.

Assim, o número de estados absorventes em função de  $\rho$  é, no mínimo, igual a  $L$ , tornando-se infinito no limite termodinâmico.

---

<sup>1</sup> $\rho < 0.5$ . Para  $\rho = 0.5$ , existe apenas um estado absorvente, para qualquer valor de  $L$ , no qual todas as partículas se encontram em posições alternadas

## 4.2 Caracterização do estado ativo

A partir do nome dado ao modelo, podemos intuir que, em seu estado estacionário ativo, existem somente sítios vacantes isolados, como no exemplo:

$$110101110101011011 .$$

A seguir, vamos argumentar como as demais classes de vacâncias extinguem-se conforme o sistema evolui, e vamos provar que, aplicando-se as regras do modelo a uma configuração do sistema que contenha apenas esta classe, ele pode alcançar qualquer outra configuração que contenha apenas esta classe, e apenas elas (ou seja, esse estado é realmente estacionário).

Para provar que as demais classes se extinguem no estado estacionário ativo, só precisamos verificar o comportamento da densidade de pares de sítios vacantes  $P(00)$ , uma vez que, se esta densidade se anula, todos os sítios vacantes são isolados e todas as classes superiores desaparecem.

Para analisar a variação das densidades de pares, vamos desdobrar as transições (4.2) para abranger quatro sítios consecutivos. Obtemos:

$$1100 \rightarrow 1010 \qquad 0011 \rightarrow 0101 \qquad (4.10)$$

$$1101 \rightarrow 1011 \qquad 1011 \rightarrow 1101 \qquad (4.11)$$

Nas transições (4.10),  $P(11)$  e  $P(00)$  diminuem, enquanto  $P(10)$  aumenta. Nas transições (4.11), todas as densidades de pares permanecem constantes. Assim, dada uma condição inicial, este sistema evolui de modo que  $P(11)$  e  $P(00)$  diminuem continuamente, podendo ser nulas, ou não, no estado estacionário. Entretanto, se  $P(11)$  for nula, nenhuma das transições listadas acima pode ocorrer: o sistema encontra-se num estado absorvente, e não é possível aplicar a idéia de ensembles estatísticos. Assim, devemos procurar por condições iniciais tais que  $P(11)$  alcance um valor mínimo não-nulo.

É fácil notar que, para  $\rho > 1/2$ , não existem configurações tais que  $P(11)$  seja nula, enquanto para  $\rho \leq 1/2$  tais configurações existem, como visto na seção anterior. Assim, vamos restringir o nosso estudo para valores de densidade suficientemente altos.

Primeiramente, notamos que as transições (4.11) são reversas uma da outra,

logo, é possível sair de uma configuração e voltar a ela por meio dessas transições. Entretanto, não há reversas para as transições (4.10), assim, a taxa de ocorrência dessas transições deve ser nula no equilíbrio, o que acontece se  $P(00) = 0$ . Logo, atingimos a condição (2.4), a qual implica no resultado (2.5)  $P(\eta) = \text{const.}$ , desde que o processo seja ergódico, o que será mostrado mais adiante.

### 4.3 Ergodicidade

É fácil ver que as configurações que satisfazem a restrição  $P(00) = 0$  são formadas por seqüências de sítios ocupados separadas por sítios vazios isolados. Para que possamos utilizar a formulação de ensembles estatísticos, precisamos ver se, dada uma configuração, podemos atingir qualquer outra pertencente ao estado ativo, e só aquelas. Equivalentemente, podemos verificar se, a partir de qualquer configuração, podemos alcançar uma configuração específica  $\eta^0(\rho)$ , que definiremos abaixo.

Vamos fixar o tamanho da rede  $L$  e a densidade  $\rho$ . Assim, fixamos o número de sítios vazios (que é igual a  $(1 - \rho)L$ ). Agora, seja  $\eta^0$  a configuração dividida em duas partes: uma cadeia  $\eta_a^0$ , formada por  $(1 - \rho)L$  pares 10, seguida por uma cadeia  $\eta_b^0$  de sítios ocupados. Uma cadeia  $\eta^0$  típica é mostrada abaixo:

$$\eta^0 = \underbrace{\langle 1010 \dots 10 \rangle}_{\eta_a^0} \underbrace{\langle 11 \dots 1 \rangle}_{\eta_b^0} \quad (4.12)$$

Para incluir os valores extremos  $\rho = 0.5$  e  $\rho = 1$ , podemos estender a definição de  $\eta^0$  para abrigar os casos  $\eta^0 = \eta_a^0$  e  $\eta^0 = \eta_b^0$ .

Qualquer cadeia de densidade  $\rho$  pode ser descrita pelas posições dos sítios vacantes  $\{i_n\}$ ,  $1 \leq n \leq (1 - \rho)L$ . Para  $0.5 < \rho < 1$ , sempre é possível encontrar dois sítios ocupados seguidos de um sítio vazio. Para transformar esta cadeia arbitrária em  $\eta^0$ , fazemos o procedimento a seguir:

1. Seja  $i_1$  a posição do primeiro sítio vacante na cadeia. Renomeamos toda a cadeia de forma que  $i_1 = 2$ , obtendo o começo da cadeia  $\eta_a^0$ . Havendo outros sítios vacantes, vamos ao passo seguinte. Senão, vamos ao passo 5.
2. Procuramos o primeiro sítio vacante que não pertence a  $\eta_a^0$ . Se não houver, vamos ao passo 5.
3. Pelo item anterior, existem ao menos dois sítios ocupados entre o sítio vacante

$n$  e o anterior, e é possível aplicar a primeira transição (4.11), que desloca o sítio vacante uma unidade à esquerda:

$$\begin{array}{c} \dots 10 1 \dots 1 10 1 \dots \\ \downarrow \\ \dots 10 1 \dots 10 1 1 \dots \end{array} \quad (4.13)$$

Neste processo,  $i_n = i_n^{ant} - 1$ .

4. Repete-se o item 3 enquanto houver ao menos dois sítios ocupados entre o sítio vacante  $n$  e o sítio  $n - 1$ . Quando houver apenas um sítio ocupado separando  $n$  e  $n - 1$ , conectamos a seqüência 10 a  $\eta_a^0$ , e voltamos ao item 2.
5. Quando não houver mais sítios vacantes fora de  $\eta_a^0$ , a seqüência restante é igual a  $\eta_b^0$ , e obtivemos  $\eta$ .

Devemos ainda mostrar que não é possível, saindo de uma configuração permitida, alcançar uma configuração que não pertence ao estado ativo. Para verificar esta questão, vemos que as transições (4.11) não mudam a classe de um sítio vacante. Assim, se começamos com uma configuração  $\eta$  onde todos os sítios vacantes são isolados, aplicando uma das transições (4.11) alcançamos uma outra configuração  $\eta'$  onde todos os sítios vacantes são isolados.

Assim, provamos que o estado ativo é ergódico. Como discutido no capítulo 2 deste trabalho, este fato, mais a constatação de que todas as transições possíveis ocorrem com a mesma taxa, implica que esse conjunto de configurações forma um ensemble microcanônico, e podemos utilizar a técnica de matriz de transferência para calcular as grandezas físicas do modelo.

## 4.4 Cálculo da matriz de transferência

Como visto acima, no estado ativo, a densidade de pares deve se anular. Para o cálculo da matriz de transferência, essa restrição pode ser traduzida pelo seguinte fator  $\gamma(\eta_i, \eta_{i+1})$ :

$$\gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = \eta_{i+1} = 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.14)$$

o qual torna proibida a ocorrência da seqüência 00.

Como  $\gamma$  é função de apenas dois sítios, poderíamos realizar os cálculos a seguir usando uma matriz de transferência de dimensão 2. Entretanto, com essa matriz, só conseguimos calcular probabilidades de até dois sítios em função da densidade. Como já conhecemos o valor de uma probabilidade de dois sítios ( $P(00) = 0$ ), as demais podem ser calculadas diretamente, sem o intermédio da matriz de transferência. Temos:

$$P(10) = P(0) - P(00) = 1 - \rho \quad (4.15)$$

$$P(11) = P(1) - P(10) = \rho - (1 - \rho) = 2\rho - 1 \quad (4.16)$$

Impondo que  $P(11)$  deve ser não-nula, de forma que nos encontramos no estado ativo, temos que:

$$2\rho - 1 > 0 \rightarrow \rho > 0.5 \quad (4.17)$$

Com esse resultado, mostramos que o estado ativo deve existir no intervalo  $0.5 < \rho < 1$ .

Para que possamos confrontar os resultados analíticos com simulações, devemos calcular probabilidades de três ou mais sítios. Assim, vamos utilizar uma matriz de dimensão 4, definindo um novo fator  $\gamma$ :

$$\gamma(\eta_i \eta_{i+1} \eta_{i+2}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = \eta_{i+1} = 0 \text{ ou } \eta_{i+1} = \eta_{i+2} = 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.18)$$

A matriz de transferência em forma matricial é dada por:

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

onde  $z$ , como nos capítulos anteriores, é a atividade associada ao parâmetro  $\rho$  (equações (2.12) e (2.13)).

O polinômio característico da matriz  $T$  é:

$$\lambda^2 (-\lambda^2 + z\lambda + z) = 0 \quad (4.20)$$



de forma que obtemos:

$$z = \frac{\lambda^2}{\lambda + 1} \quad (4.21)$$

Utilizando a equação (3.15), obtemos:

$$\rho = \frac{\lambda + 1}{\lambda + 2} \quad (4.22)$$

e, invertendo este resultado:

$$\lambda = \frac{2\rho - 1}{1 - \rho} \quad (4.23)$$

Concluimos na seção 4.2 que  $\rho = 0.5$  é o valor mínimo da densidade para o qual é possível encontrar uma configuração  $\eta$  cujos sítios vacantes sejam todos isolados. Utilizando a primeira parte de (4.23), notamos que variando o autovalor  $\lambda$  entre 0 e  $\infty$ , a densidade varia entre os valores extremos 0.5 e 1. Assim, podemos agora afirmar que, dentro do intervalo  $0.5 \leq \rho \leq 1$ , o estado estacionário ativo do modelo (1) é composto de sítios vacantes isolados num mar de sítios ocupados.

Como visto na seção 4.1, a densidade de sítios ativos é igual a  $2P(110)$ . Para calcular  $P(110)$ , vamos introduzir uma variável  $v$ , de forma que:

$$\frac{1}{P(110)} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln v(z, \lambda) \quad (4.24)$$

A matriz de transferência que produz esse resultado é:

$$T' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & vz & z \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

O polinômio característico desta matriz é:

$$-\lambda^3 + z\lambda^2 + z\lambda - z^2 + vz^2 = 0 \quad (4.26)$$

de forma que

$$v = \frac{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda + z^2}{z^2} \quad (4.27)$$

Usando a equação (4.24), obtemos:

$$\frac{1}{P(110)} = \frac{\lambda(3\lambda^2 - 2z\lambda - z)}{\lambda^3 - z\lambda^2 - z\lambda + z^2} \quad (4.28)$$

Usando (4.21) e (4.23) para eliminar  $z$  e  $\lambda$ , obtemos:

$$P(110) = \frac{\lambda}{\lambda^2 + 3\lambda + 2} = \frac{(2\rho - 1)(1 - \rho)}{\rho} \quad (4.29)$$

## 4.5 Resultados numéricos

Realizamos uma simulação do modelo (1), a partir de condições iniciais aleatórias, numa rede de 4000 sítios com densidade variando entre 0.5 e 1. Para evoluir o sistema, sorteamos um sítio e verificamos se ele continha uma partícula ativa. Caso contivesse, escolhíamos a direção do deslocamento aleatoriamente. O deslocamento era efetuado se fosse possível e, a seguir, passávamos ao próximo passo. Tomando um passo de Monte Carlo igual a 4000 passos (ou seja, igual ao tamanho da rede), evoluímos o sistema durante 25000 passos de Monte Carlo, para a maioria dos valores de  $\rho$ . Para valores de  $\rho$  próximos de 1/2, foi necessário evoluir o sistema durante

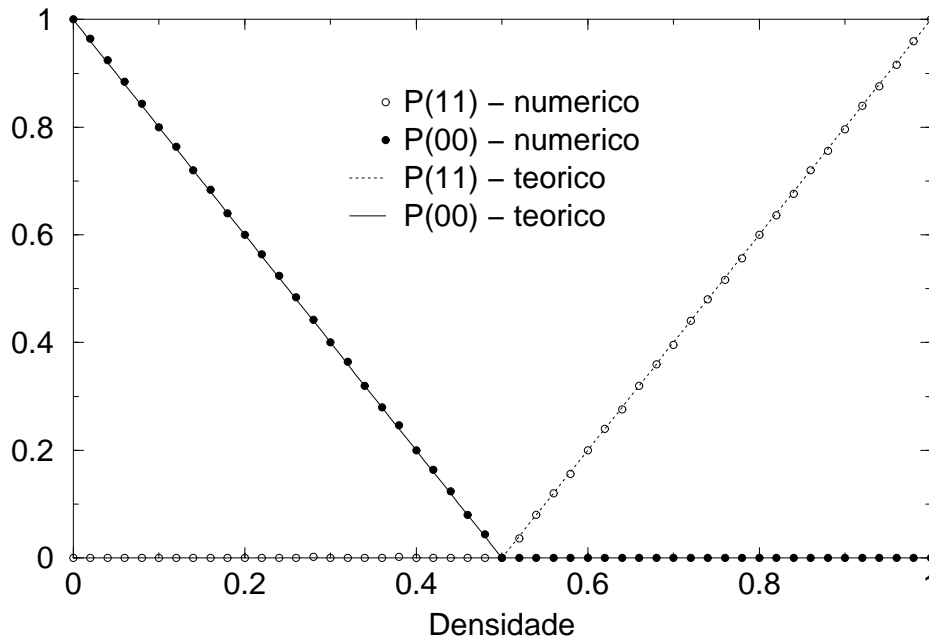


Figura 4.1: Densidades de pares de sítios  $P(11)$  e  $P(00)$  para o modelo (1).

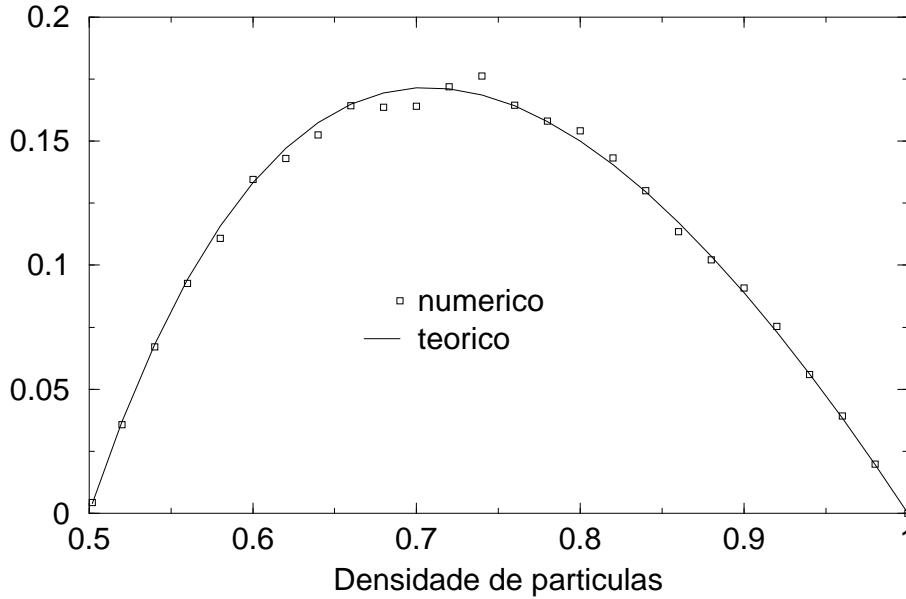


Figura 4.2: Densidade de partículas ativas  $\frac{P(110)+P(011)}{2}$  para o modelo (1).

$4 \cdot 10^5$  passos de Monte Carlo.

De acordo com o raciocínio da seção 4.2, o estado estacionário ativo é aquele onde  $P(00)$  é nula, condição equivalente a dizer que  $P(11) = 2\rho - 1$ . Assim, temos um critério simples para aferir se realmente alcançamos o estado ativo. Como uma regra geral, nas simulações feita durante este trabalho, nos pontos onde a atividade é muito baixa (perto de  $\rho = 0.5$  para este modelo), foi necessário simular um número maior de passos de Monte Carlo até o sistema alcançar o estado estacionário. Isso ocorre porque no ponto  $z = 0$ , que corresponde a  $\rho = 0.5$ , ocorre uma transição de fase ativo-absorvente, e o tempo de relaxação do sistema aumenta indefinidamente.

O gráfico 4.1 exhibe as densidades estacionárias de pares 11 e 00. Podemos ver que, para  $\rho < 0.5$ ,  $P(11) = 0$ , o que mostra que o sistema realmente encontra-se no estado absorvente, uma vez que não há sítios ativos. Para  $\rho > 0.5$ ,  $P(00) = 0$  e  $P(11) = 2\rho - 1$ , conforme esperado.

O gráfico 4.2 compara a densidade de sítios ativos  $\rho_a = P(110) + P(011)$  dividida por dois, medida numericamente, com a curva analítica para  $P(110)$ . Como todos os modelos abordados neste trabalho são simétricos via reflexão espacial, sempre mediremos a densidade de sítios ativos dividida por dois para posterior comparação com as curvas analíticas correspondentes, sem uma menção explícita.

Analisando os gráficos, podemos ver uma boa concordância entre os resultados

numéricos e analíticos, como esperado: o estado estacionário ativo do modelo (1) é constituído por configurações microscópicas equiprováveis.