

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física

# Estudo sobre a produção de entropia em transições de fase

Carlos Ernesto Fernández Noa

Orientador: Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos - Orientador (IF/USP)

Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade (IFSC/USP)

Prof. Dr. Ronald Dickman (UFMG)

São Paulo  
2019

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

Fernández Noa, Carlos Ernesto

Estudo sobre a produção de entropia em transições de fase. São Paulo, 2019.

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

Orientador: Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos  
Área de Concentração: Física Estatística e Termodinâmica

Unitermos: 1. Entropia; 2. Mudança de fase; 3. Física computacional.

USP/IF/SBI-067/2019

University of São Paulo  
Physics Institute

# A study about entropy production in phase transitions

Carlos Ernesto Fernández Noa

Supervisor: Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos

Dissertation submitted to the Physics Institute of the University of São Paulo in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science.

Examining Committee:

Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos - Supervisor (IF/USP)

Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade (IFSC/USP)

Prof. Dr. Ronald Dickman (UFMG)

São Paulo  
2019

---

## Dedicatória

---

À minha família, em especial à minha mãe.

---

## Agradecimentos

---

Primeiramente, ao meu orientador Dr. Carlos Fiore por todo o apoio e paciência. Também aos meus companheiros do grupo de pesquisa pela ajuda incondicional. À minha família que sempre confiou em mim. À minha namorada Andreza pela compreensão. A vários amigos que, de algum jeito, contribuíram para que este trabalho se tornasse realidade. Finalmente, ao Conselho Nacional de Pesquisa (CNPq) pelo apoio financeiro. Para todos, Muito Obrigado.

---

## Resumo

---

Transições de fase em sistemas fora do equilíbrio podem ser caracterizadas de uma maneira semelhante do caso de equilíbrio, por exemplo, pelo uso do parâmetro de ordem e seus momentos associados. Entretanto, essa caracterização "esconde" (mascara) o caráter irreversível da dinâmica, bem como sua influência na própria transição de fase. Alguns trabalhos tem sugerido que a produção de entropia pode ser uma quantidade importante para preencher esta lacuna, uma vez que ela se anula para sistemas em equilíbrio e é estritamente positiva para sistemas fora do equilíbrio. Com base em argumentos gerais, apresentamos nesta dissertação uma caracterização de transições de fase por meio da produção de entropia. Nosso estudo considera as transições de fase descontínuas, tanto em redes regulares quanto em redes complexas, por meio da aproximação de campo médio e além do campo médio. Transições de fase contínuas também foram consideradas. Exemplificamos nossas previsões no modelo fora do equilíbrio mais simples que apresenta uma transição de fase de ordem-desordem e quebra de simetria espontânea: o modelo do votante majoritário. Acreditamos que nosso trabalho abre o caminho para uma descrição sistemática e classificação de transições de fase fora do equilíbrio através de um importante indicador da irreversibilidade do sistema.

**Palavras-chave:** Produção de entropia; transições de fase; expoentes críticos; modelo do Votante Majoritário.



---

## Abstract

---

Phase transitions in nonequilibrium systems can be typified in a similar way to equilibrium systems, for instance, by the use of the order parameter and its associated momentum. However, this characterization hides the irreversible character of the dynamics, as well as its influence on the phase transition properties. Some works have suggested that entropy production may be an important amount for filling this gap, since it vanishes identically for equilibrium systems and is strictly positive for nonequilibrium systems. Based on general arguments, the characterization of phase transitions through the entropy production is presented in this master's thesis. Our study consider the discontinuous phase transitions, in both regular and complex networks, through the mean field approach and beyond the mean field. Continuous phase transitions have also been considered. We exemplify our predictions in the simpler non-equilibrium model that presents a order-disorder phase transition and spontaneous symmetry breaking: the majority vote model. We believe that our work paves the way to a systematic description and classification of nonequilibrium phase transitions through a key indicator of system irreversibility.

**Keywords:** Entropy production; phase transitions; critical exponents; Majority Vote model.



---

## Conteúdo

---

<b>Dedicatória</b>	<b>i</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Termodinâmica Estocástica</b>	<b>5</b>
2.1 Introdução . . . . .	5
2.2 Produção de entropia . . . . .	6
2.3 Processos markovianos . . . . .	8

2.4	Equação mestra . . . . .	10
2.5	Sistemas com simetria de inversão . . . . .	11
2.6	Produção de entropia de Schnakenberg . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Transições de Fase e Fenômenos Críticos</b>	<b>17</b>
3.1	Introdução . . . . .	17
3.2	Classificação . . . . .	18
3.3	Expoentes Críticos e Classes de Universalidades . . . . .	19
3.4	Teoria de escala de Widom . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Produção de Entropia</b>	<b>23</b>
4.1	Campo Médio em sistemas com simetria de inversão . . . . .	24
4.2	Produção de entropia em transições de fase descontínuas . . . . .	27
4.2.1	Rede Regular . . . . .	27
4.2.2	Redes complexas . . . . .	29
4.3	Produção de entropia em transições de fase contínuas . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Produção de entropia no modelo VM</b>	<b>33</b>
5.1	Definição do modelo . . . . .	33
5.2	Caso com simetria de inversão $\bar{q} = 2$ . . . . .	34
5.3	Resultados de campo médio . . . . .	36
5.4	Resultados numéricos . . . . .	40

5.4.1	Transições de fase descontínuas . . . . .	43
5.4.2	Transições de fase contínuas . . . . .	46
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>49</b>
<b>A</b>	<b>Alguns resultados numéricos</b>	<b>51</b>
A.1	Resultados de campo médio . . . . .	51
A.2	Resultados numéricos . . . . .	52
<b>B</b>	<b>Alguns cálculos analíticos</b>	<b>57</b>
<b>C</b>	<b>Artigo publicado</b>	<b>61</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>72</b>

# CAPÍTULO 1

---

## Introdução

---

As transições de fase sempre despertaram grande interesse na humanidade. Desde a fusão de metais até as transformações da água em gelo ou vapor, elas tem sido intensamente estudadas. Um dos primeiros estudos iniciou-se no ano de 1869 quando Andrews [1] descobriu que no diagrama de fases do dióxido de carbono existe um ponto em torno de  $31^{\circ}\text{C}$  e  $73 \text{ atm}$  no qual as propriedades do líquido e do vapor se tornam indistinguíveis. Este ponto foi denominado por ele como "ponto crítico". Em 1873 Van der Waals fez a primeira tentativa teórica [2] para explicar os resultados de Andrews. Sua teoria previa a existência do ponto crítico e uma região de coexistência entre o líquido e o vapor. Em 1874 a teoria de Van der Waals foi melhorada por Maxwell [3], introduzindo a regra das áreas iguais para corrigir a curva de pressão contra volume na região de coexistência de fases.

Durante os anos seguintes, diferentes cientistas demonstraram que outros sistemas apresentavam um comportamento parecido com aqueles obtidos por Van der Waals. Um caso importante foi o feito por Pierre Curie [4] em 1895 no qual ele notou a existência de um ponto especial (crítico) no ferro. Este ponto é caracterizado, a campo magnético nulo, por

uma temperatura acima da qual o ferro não apresenta mais magnetização espontânea permanente, temperatura denominada como "temperatura de Curie". Em 1907 houve um grande avanço, quando Weiss [5] postulou a existência de um campo interno bastante intenso agindo sobre os spins de materiais ferromagnéticos. Mais tarde (1928) Heisenberg [6], por meio da mecânica quântica, explicou a origem deste campo interno. No seu trabalho Weiss considerou este campo como sendo constante, desprezando flutuações. Hoje em dia, este tipo de abordagem é conhecida como campo médio. Todas as teorias de campo médio fornecem os mesmos expoentes críticos, chamados expoentes críticos clássicos.

Vários modelos simples de spins que desempenharam um papel importante no nosso entendimento de transições de fase foram propostos ao longo dos anos seguintes. O mais famoso é o modelo de Ising [7], introduzido na verdade por Lenz [8] em 1920. Este modelo, ainda hoje, desempenha um papel importante na mecânica estatística e em outras áreas, pelo fato de ser o modelo de equilíbrio mais simples que apresenta uma transição de fase para dimensões iguais ou superiores a dois e ser exatamente solúvel na ausência de campo.

Em 1937, foi proposta por Landau [9] uma teoria fenomenológica que pretendia ir além da teoria de campo médio, mas fornece os mesmos expoentes clássicos. Sua ideia baseia-se no conceito do parâmetro de ordem e na expansão da energia livre em série de potências do parâmetro de ordem. Uma variante da teoria de Landau, que levou a resultados interessantes, foi a chamada teoria de escala, proposta por Widom em 1965 [10]. Esta teoria, que discutiremos em detalhe mais adiante, tem várias consequências importantes, entre elas a existência de relações gerais entre os expoentes críticos. Em 1966 foi publicado por Kadanoff um importante trabalho que introduziu a ideia de "grupo de renormalização" através das chamadas variáveis de bloco para o modelo de Ising [11]. Mas ainda faltava uma teoria matemática concisa para descrever os fenômenos na criticalidade que validara a teoria de Widom. Isto foi feito por K. G. Wilson no ano 1971, quem ofereceu uma primeira abordagem sobre o grupo de renormalização [12].

Nos últimos anos, transições de fase fora do equilíbrio têm despertado um grande interesse na comunidade científica. Várias pesquisas estão encaminhadas na busca de novas ferramentas para caracterizar transições de fase. Um candidato é a produção de entropia, cujas propriedades têm sido objeto de considerável interesse em física [13, 14, 15, 16, 17],

dinâmica populacional [18], sistemas biológicos [19], verificação experimental [20], entre outras. Ela possui diferentes definições e é uma grandeza que distingue sistemas em equilíbrio daqueles fora do equilíbrio.

A entropia é produzida em processos irreversíveis. A importância de estudar esses processos foi reconhecida no ano 1824 por Carnot [21]. Em 1865, Clausius introduziu o conceito de entropia e forneceu a primeira formulação matemática para a segunda lei da termodinâmica [22]. Em 1877, Ludwig Boltzmann visualizou um método probabilístico para medir a entropia de um determinado número de partículas de um gás ideal, na qual ele definiu a entropia como proporcional ao logaritmo neperiano do número de microestados que um gás pode ocupar. O trabalho de Boltzmann consistiu em encontrar uma forma de obter a equação entrópica fundamental a partir de um tratamento matemático-probabilístico [23]. Mais recentemente, no ano 1976, o físico alemão Schnakenberg deduziu uma expressão para a produção de entropia por meio de uma análise estocástica [24].

No presente trabalho faremos um estudo detalhado sobre como a produção de entropia pode ser usada na caracterização de transições de fase em sistemas com simetria de inversão. No próximo capítulo mostraremos alguns dos conceitos básicos da termodinâmica estocástica. Faremos uma análise, com base em argumentos tanto termodinâmicos como estocásticos, sobre produção de entropia. Seguidamente, vamos expor os conceitos estocásticos de processo markoviano, equação mestra e sistema com simetria de inversão, que são de importância em nosso trabalho. No terceiro capítulo faremos um breve resumo sobre as características gerais das transições de fase, dando especial ênfase no comportamento de algumas grandezas nas vizinhanças da criticalidade. No quarto capítulo, utilizando aproximação de campo médio, desenvolveremos uma descrição geral para produção de entropia em transições de fase que ocorrem em sistemas com simetria de inversão. No quinto capítulo, aplicaremos os resultados da teoria ao modelo do Votante Majoritário com inercia, paralelamente compararemos estes resultados com alguns obtidos de simulações numéricas usando o conhecido método de Monte Carlo. Finalmente, são apresentadas as conclusões sobre nosso trabalho.



---

### Termodinâmica Estocástica: Conceitos Básicos

---

#### 2.1 Introdução

Nos últimos anos, a termodinâmica estocástica tornou-se uma teoria consistente e fundamental da termodinâmica fora do equilíbrio. Neste capítulo vamos introduzir alguns dos seus conceitos básicos [25]. Para tal, vamos primeiramente introduzir seus aspectos fundamentais por meio de argumentos "entrópicos", considerando a interação existente entre dois sistemas em contato termodinâmico. Em seguida, obteremos esses mesmos resultados por meio de uma descrição estocástica. Neste caso, definiremos aspectos básicos sobre processos markovianos e as equações dinâmicas que os descrevem, entre elas a Equação Mestra, que descreve a evolução temporal da probabilidade de uma dada configuração. Na seção seguinte, definiremos os sistemas com simetria de inversão e mostraremos as principais características deles, bem como os conceitos mais básicos sobre produção de entropia.



## 2.2 Produção de entropia

O equilíbrio termodinâmico de um sistema isolado é determinado pelo princípio de máxima entropia. Denotemos por  $X_k^A$  e  $X_k^B$  uma dada variável extensiva (pode ser a energia, o número de partículas, etc.) dos sistemas  $A$  e  $B$ , respectivamente. Assumindo que o sistema composto  $A + B$  é isolado, temos que

$$X_k^A + X_k^B = \text{const.} \quad \text{e} \quad dX_k^A = -dX_k^B. \quad (2.1)$$

Por outro lado, a entropia total  $S$  é dada por  $S = S_A + S_B$ , de forma que sua derivada com respeito a  $X_k^A$  (ou  $X_k^B$ ) fica

$$\frac{\partial S}{\partial X_k^A} = \frac{\partial S_A}{\partial X_k^A} + \frac{\partial S_B}{\partial X_k^A}. \quad (2.2)$$

Levando-se em conta a Eq. (2.1) obtemos

$$\frac{\partial S}{\partial X_k^A} = \frac{\partial S_A}{\partial X_k^A} - \frac{\partial S_B}{\partial X_k^B}. \quad (2.3)$$

No equilíbrio termodinâmico  $dS = 0$  (a entropia total é máxima), temos portanto que

$$\frac{\partial S_A}{\partial X_k^A} = \frac{\partial S_B}{\partial X_k^B}. \quad (2.4)$$

Seja  $\frac{\partial S_k}{\partial X_k} \equiv f_k$  uma dada variável termodinâmica intensiva associada a  $X_k$ . No presente exemplo se  $X_k = u$  ou  $X_k = N$ , teremos que

$$f_k = \frac{\partial S}{\partial u} = \frac{1}{T} \quad \text{ou} \quad f_k = \frac{\partial S}{\partial N} = -\frac{\mu}{T} \quad \text{respectivamente.}$$

Consideremos novamente que os dois sistemas  $A$  e  $B$  sejam colocados em contato termodinâmico. A evolução temporal de ambos sistemas será dada por

$$\frac{dS_A}{dt} = \sum_k \frac{\partial S_A}{\partial X_k^A} \frac{dX_k^A}{dt} \quad \text{e} \quad \frac{dS_B}{dt} = \sum_k \frac{\partial S_B}{\partial X_k^B} \frac{dX_k^B}{dt}, \quad (2.5)$$

respectivamente, e portanto

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS_A}{dt} + \frac{dS_B}{dt} = \sum_k \left( \frac{\partial S_A}{\partial X_k^A} \frac{dX_k^A}{dt} + \frac{\partial S_B}{\partial X_k^B} \frac{dX_k^B}{dt} \right). \quad (2.6)$$

Derivando com respeito ao tempo a expressão (2.1) temos que  $\frac{dX_K^A}{dt} = -\frac{dX_K^B}{dt}$ , de forma que Eq. (2.6) torna-se

$$\frac{dS}{dt} = \sum_k \left( \frac{\partial S_B}{\partial X_K^B} - \frac{\partial S_A}{\partial X_K^A} \right) \frac{dX_K^B}{dt}. \quad (2.7)$$

O fator  $\frac{dX_K^B}{dt}$  é o fluxo associado à variável  $X_k^B$  e ele pode ser interpretado como a corrente microscópica  $J_k$ . Por exemplo para  $X_k = u$  temos  $\left(\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A}\right) J_u$ , uma vez que  $\frac{dS}{dt} > 0$  se a temperatura do sub-sistema  $A$  é maior que em  $B$  de forma que  $\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A} > 0$ , a corrente deve sair de  $A$  para  $B$ . Por outro lado, se  $\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A} < 0$  a corrente deve sair de  $B$  para entrar em  $A$ . Podemos então escrever  $\frac{dS}{dt}$  da seguinte forma

$$\frac{dS}{dt} = \sum_k J_k \left( \frac{\partial S_B}{\partial X_K^B} - \frac{\partial S_A}{\partial X_K^A} \right), \quad (2.8)$$

de forma que

$$\frac{\partial S_B}{\partial X_K^B} - \frac{\partial S_A}{\partial X_K^A} \equiv f_k^B - f_k^A \equiv F_k$$

é a força generalizada. Uma vez que  $f_k^A = f_k^B$  (força nula), a corrente deve ser zero (consistente com o equilíbrio térmico), e portanto podemos interpretar  $F_k \equiv f_k^B - f_k^A$  como o responsável por ocasionar a corrente  $J_k$ , de forma que podemos escrever  $J_k = J_k(F_k)$ . Em princípio, a corrente  $J_k$  em um dado instante de tempo  $t$ , poderia depender das forças nos tempos prévios  $t' < t$ . No entanto, vamos assumir que o processo está próximo do equilíbrio e o sistema é suficientemente grande, de modo que  $J_k(t)$  depende apenas da força no mesmo instante  $t$ . Neste caso temos

$$\frac{dS}{dt} = \sum_k J_k F_k, \quad (2.9)$$

o que implica que, ao contrário das variáveis termodinâmicas  $X_k$ , a entropia total não se conserva (de acordo com a segunda lei da termodinâmica), mas é produzida espontaneamente pela variação irreversível das variáveis extensivas (a energia, a quantidade de partículas, etc.). Além disso, como o sistema composto  $A + B$  está isolado e não existe fluxo de entropia para o exterior, podemos associar a variação de entropia com uma produção de entropia. Tal produção de entropia não é uma propriedade de  $A$  ou  $B$ , mas é uma propriedade global de  $A + B$ . Um limite importante é o caso particular em que o sub-sistema  $B$  seja muito maior que  $A$ , isso implica que  $\frac{\partial S_B}{\partial X_k^B}$  é aproximadamente constante e  $B$  sempre permanecerá próximo do equilíbrio, de forma que atuará como reservatório térmico de  $A$ . Nesse caso,

podemos assumir que não existe produção de entropia em  $B$ , uma vez que sua dinâmica é reversível. Reinterpretando cada termo da equação (2.8) como as quantidades:

$$\begin{aligned} \sum_k J_k \frac{\partial S_B}{\partial X_K^B} &= \Phi && \text{(fluxo de entropia do sistema para o reservatório ou vice-versa)} \\ - \sum_k J_k \frac{\partial S_A}{\partial X_K^A} &= \frac{dS_A}{dt} && \text{(variação temporal da entropia do sistema)} \\ \text{e} \quad \frac{dS}{dt} &= \Pi && \text{(produção de entropia)} \end{aligned}$$

temos a partir da Eq. (2.8) que

$$\Pi = \frac{dS_A}{dt} + \Phi, \quad (2.10)$$

e assim, obtemos uma expressão para a variação temporal da entropia do sistema

$$\frac{dS_A}{dt} = \Pi - \Phi. \quad (2.11)$$

A quantidade  $\Pi$  é sempre maior que zero, em quanto  $\Phi$  pode ser positivo ou negativo. No regime estacionário,  $\Pi = \Phi$ , implicando que toda entropia produzida é cedida ao reservatório. Faremos em seguida uma dedução da expressão acima por meio de argumentos microscópicos.

## 2.3 Processos markovianos

Uma variável aleatória que depende do tempo  $t$  é chamada de variável estocástica. Estudaremos aqui processos estocásticos a tempo discreto de tal forma que a variável estocástica também seja discretizada. Portanto suponhamos que uma variável estocástica  $x_t$  assume valores inteiros e  $t$  os valores  $0, 1, 2, 3, \dots$ . Tal processo estocástico fica completamente definido até o instante  $l$  pela distribuição de probabilidade conjunta

$$P_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l), \quad (2.12)$$

de  $x_t$  tomar o valor  $n_0$  no instante  $t = 0$ , o valor  $n_1$  no instante  $t = 1$ , o valor  $n_2$  no instante  $t = 2, \dots$ , e o valor  $n_l$  no instante  $t = l$ .

Em seguida, considere a probabilidade de condicional

$$P_{l+1}(n_{l+1}|n_0, n_1, n_2, \dots, n_l), \quad (2.13)$$

de  $x_t$  tomar o valor  $n_{l+1}$  no instante  $t = l + 1$ , dado que ela tenha tomado o valor  $n_0$  no instante  $t = 0$ , o valor  $n_1$  no instante  $t = 1$ , o valor  $n_2$  no instante  $t = 2, \dots$ , e o valor  $n_l$  no instante  $t = l$ . Um processo markoviano é aquele em que, a probabilidade condicional de  $x_t$  tomar um determinado valor em um determinado instante, depende somente do valor que ela tenha tomado no instante anterior. Em outros termos, se (2.13) for igual à probabilidade condicional

$$P_{l+1}(n_{l+1}|n_l), \quad (2.14)$$

de  $x_t$  tomar o valor  $n_{l+1}$  no instante  $t = l + 1$ , dado que ela tenha tomado o valor  $n_l$  no instante  $t = l$ , então o processo estocástico é um processo markoviano. Neste caso, é possível mostrarmos, a partir da definição de probabilidade condicional, que

$$P_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l) = P_l(n_l|n_{l-1}) \dots P_2(n_2|n_1)P_1(n_1|n_0)P_0(n_0), \quad (2.15)$$

o que implica que o processo markoviano fica completamente definido pelas probabilidades condicionais dadas por (2.14) e pela probabilidade inicial  $P_0(n_0)$ . A probabilidade  $P_l(n_l)$  de que a variável  $x_t$  tome o valor  $n_l$  no instante  $t = l$ , independentemente de quais valores ela tenha tomado nos instantes anteriores é dada por

$$P_l(n_l) = \sum P_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l), \quad (2.16)$$

em que a soma se estende sobre  $n_0, n_1, \dots, n_{l-1}$ , mas não sobre  $n_l$ . Usando a equação (2.15), obtemos a seguinte equação de recorrência para processos markovianos

$$P_l(n_l) = \sum_{n_{l-1}} P_l(n_l|n_{l-1})P_{l-1}(n_{l-1}), \quad (2.17)$$

Portanto, neste caso, dado  $P_0(n_0)$  podemos obter  $P_l(n_l)$  em qualquer instante.

A probabilidade condicional  $P_l(n_l|n_{l-1})$  pode ser interpretada como a probabilidade de transição do estado  $n_{l-1}$  para o estado  $n_l$ . Os processos markovianos com probabilidades de transição que não dependem do tempo ficam completamente definidos pela probabilidade de transição e pela probabilidade inicial. Neste caso escrevemos a equação (2.17) de uma forma mais simplificada

$$P_l(n) = \sum_m T(n, m)P_{l-1}(m), \quad (2.18)$$

onde podemos interpretar  $T(n, m)$  como o elemento de uma matriz  $T$  de transição do estado  $m$  para  $n$  que deve possuir as seguintes propriedades

$$T(n, m) \geq 0 \quad (2.19)$$

pois  $T(n, m)$  é uma probabilidade (condicional) e

$$\sum_n T(n, m) = 1, \quad (2.20)$$

pois ela está normalizada. Ou seja, dado um estado  $m$  qualquer, a probabilidade de permanecer em  $m$  mais a soma das probabilidades de todas as transições do estado  $m$  para outro  $n$  é igual a 1. Em outras palavras, os elementos da matriz  $T$  devem ser não negativos e a soma dos elementos de uma coluna qualquer deve ser igual à unidade. Matrizes quadradas que possuam essas duas propriedades são denominadas matrizes estocásticas.

## 2.4 Equação mestra

Considere a matriz estocástica  $T(n, m)$  e suponha que as transições ocorrem a cada intervalo de tempo  $\tau$ , de forma que

$$T(n, m) = \tau W(n, m) \quad \text{para} \quad n \neq m \quad (2.21)$$

$$\text{e} \quad T(n, n) = 1 - \tau \Omega(n). \quad (2.22)$$

Suponha ainda que  $\tau$  seja pequeno de tal modo que a probabilidade de permanência no mesmo estado seja muito próxima da unidade. O uso da propriedade (2.20) nos permite escrever  $\Omega(n)$  como

$$\Omega(n) = \sum_{m(\neq n)} W(m, n), \quad (2.23)$$

onde a soma se estende sobre os estados  $m \neq n$ . Podemos escrever a probabilidade  $P_l(n)$  de o sistema estar no estado  $n$  no  $l$ -ésimo intervalo de tempo, na forma

$$P_{l+1}(n) = T(n, n)P_l(n) + \sum_{m(\neq n)} T(n, m)P_l(m), \quad (2.24)$$

ou, ainda, usando as equações (2.21) e (2.22),

$$P_{l+1}(n) = P_l(n) - \tau \Omega(n)P_l(n) + \tau \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P_l(m), \quad (2.25)$$

definindo a probabilidade do estado  $n$  no instante  $t = l\tau$  por  $P(n, t) = P_l(n)$ , temos então que

$$\frac{P(n, t + \tau) - P(n, t)}{\tau} = -\Omega(n)P(n, t) + \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P(m, t). \quad (2.26)$$

No limite  $\tau \rightarrow 0$ , o lado esquerdo torna-se a derivada temporal

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = -\Omega(n)P(n, t) + \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P(m, t), \quad (2.27)$$

e usando a equação (2.23), obtemos a relação

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_{m(\neq n)} \{W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t)\}, \quad (2.28)$$

que é a chamada Equação Mestra. Ela descreve a evolução temporal da probabilidade do sistema estar numa dada configuração  $n$ . Note que ela tem dois termos, um "termo de ganho"  $W(n, m)P(m, t)$  associado às configurações  $m \neq n$  que podem se "tornar"  $n$  e um "termo de perda"  $W(m, n)P(n, t)$ , que leva em conta todas as configurações que "emergem" de  $n$ . A grandeza  $W(n, m)$  é a probabilidade de transição de  $m$  para  $n$  por unidade de tempo, ou ainda, taxa de transição de  $m$  para  $n$  e portanto,  $W(m, n)$  é a taxa de transição inversa.

Portanto, um processo estocástico markoviano em tempo contínuo e no espaço discretizado de estados fica completamente definido pelas taxas de transição  $W(n, m)$ , além da distribuição de probabilidades inicial  $P(n, 0)$ .

## 2.5 Sistemas com simetria de inversão

A título de ilustração da equação mestra, consideraremos uma classe importante de sistemas definidos em reticulados, ou redes. Neste caso, cada sítio da rede está associada uma variável estocástica que assume apenas dois valores que escolhemos como sendo  $+1$  e  $-1$ . Estes sistemas obedecem dinâmicas que são invariantes pela inversão dos sinais de todas as variáveis, o seja, são sistemas com simetria de inversão. No estado estacionário, eles podem apresentar uma transição entre dois estados termodinâmicos. Por um lado, temos um estado desordenado onde os sítios não obedecem uma direção preferencial, de forma que, as probabilidades de escolher aleatoriamente um sítio com valor  $+1$  ou  $-1$  são iguais. Por outro lado, essa simetria deixa de existir quando o sistema tem preferência por um dado valor (seja  $+1$  ou  $-1$ ), onde nesse caso estamos na presença de um estado ordenado. Por esta razão a transição se deve a uma quebra espontânea da simetria.

Seja  $\sigma_i$  a variável estocástica associada ao sítio  $i$  que assume os valores  $\pm 1$ . A configuração global do sistema é denotada pelo vetor  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ , em que  $N$  é o número total de sítios. Consideraremos uma dinâmica tal que, a cada instante, apenas um sítio tem seu estado modificado. Podemos escrever a taxa de transição entre duas configurações da seguinte forma

$$W(\sigma', \sigma) = \sum_i \delta(\sigma'_1, \sigma_1) \delta(\sigma'_2, \sigma_2) \dots \delta(\sigma'_i, \sigma_i) \dots \delta(\sigma'_N, \sigma_N) w_i(\sigma), \quad (2.29)$$

onde  $\delta(\sigma'_j, \sigma_j)$  denota o delta de Kronecker, que toma valor 1 ou 0 conforme  $\sigma_j$  e  $\sigma'_j$  sejam iguais ou diferentes, respectivamente. O fator  $w_i(\sigma)$  é interpretado como a taxa de inversão do sinal do  $i$ -ésimo sítio. Assim, a evolução temporal da probabilidade  $P(\sigma, t)$  do estado  $\sigma$  no instante  $t$  fica determinada a partir da equação (2.28) escrita na forma

$$\frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_{i=1}^N \{w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)\}, \quad (2.30)$$

onde a configuração  $\sigma^i$  é aquela que se obtém da configuração  $\sigma$  pela troca de  $\sigma_i$  por  $-\sigma_i$ , ou seja, ela é definida por  $\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)$ , e  $w_i(\sigma^i)$  corresponde a taxa de inversão reversa. O valor esperado da magnetização  $m = \langle \sigma_i \rangle$  pode ser escrito como

$$\langle \sigma_i \rangle = \sum_{\sigma} \sigma_i P(\sigma), \quad (2.31)$$

Como os valores possíveis para  $\sigma$  são  $+1$  e  $-1$  a equação anterior adquire a forma:

$$p_+ - p_- = \langle \sigma_i \rangle, \quad (2.32)$$

onde denotamos  $P(+1)$  e  $P(-1)$  como  $p_+$  e  $p_-$  respectivamente. Ainda levando em conta a condição de normalização  $p_+ + p_- = 1$  temos

$$p_{\pm} = \frac{1 \pm \langle \sigma_i \rangle}{2}. \quad (2.33)$$

Derivando a expressão (2.31) respeito ao tempo e usando a Equação Mestra (2.30) chegamos à equação da evolução temporal de  $\langle \sigma_i \rangle$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = -2 \langle \sigma_i w_i(\sigma) \rangle. \quad (2.34)$$

Note que ela depende apenas de  $\sigma_i$  e da taxa de transição  $w_i(\sigma)$ .

## 2.6 Produção de entropia de Schnakenberg

Conforme vimos anteriormente, no caso geral de um sistema em contato com um reservatório térmico, a segunda lei da termodinâmica estabelece que, apesar de determinadas quantidades como a energia total (sistema + ambiente) sempre serem conservadas, este não é o caso da entropia. Para mostrar isto do ponto de vista "estocástico", vamos denotar por  $E(\sigma, t)$  a energia do sistema com uma dada configuração  $\sigma$  em um instante de tempo  $t$ , portanto, sua média  $U = \langle E(\sigma, t) \rangle$  é dada por

$$U = \sum_{\sigma} E(\sigma, t)P(\sigma, t), \quad (2.35)$$

Cuja variação temporal é dada por

$$\frac{dU}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{\sigma} E(\sigma, t)P(\sigma, t) = \sum_{\sigma} \left[ \frac{d}{dt} E(\sigma, t) \right] P(\sigma, t) + \sum_{\sigma} E(\sigma, t) \left[ \frac{d}{dt} P(\sigma, t) \right]. \quad (2.36)$$

De acordo com a termodinâmica estocástica, o primeiro e segundo termo podem ser identificados como o trabalho mecânico ( $W_{mec}$ ) e o calor ( $Q$ ) trocado com o reservatório, respectivamente, ambos por unidade de tempo [13]. Podemos então escrever a equação acima como

$$\frac{dU}{dt} = \frac{d}{dt} W_{mec}(t) + \frac{d}{dt} Q(t), \quad (2.37)$$

uma expressão que é consistente com a primeira lei da termodinâmica. Em particular, se consideramos que  $E$  não depende explicitamente do tempo o primeiro termo de (2.36) é nulo e fazendo uso da Equação Mestra, obtemos

$$\frac{dU}{dt} = \sum_{\sigma\sigma'} E(\sigma)[W(\sigma, \sigma')P(\sigma', t) - W(\sigma', \sigma)P(\sigma, t)], \quad (2.38)$$

que é o mesmo que

$$\frac{dU}{dt} = \sum_{\sigma\sigma'} E(\sigma)W(\sigma, \sigma')P(\sigma', t) - \sum_{\sigma\sigma'} E(\sigma)W(\sigma', \sigma)P(\sigma, t). \quad (2.39)$$

Se permutamos  $\sigma$  e  $\sigma'$  no segundo termo, a expressão acima fica

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dt} &= \sum_{\sigma\sigma'} E(\sigma)W(\sigma, \sigma')P(\sigma', t) - \sum_{\sigma\sigma'} E(\sigma')W(\sigma, \sigma')P(\sigma', t) \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} [E(\sigma) - E(\sigma')] W(\sigma, \sigma')P(\sigma', t). \end{aligned} \quad (2.40)$$



Podemos novamente interpretar o lado direito como um calor trocado, cuja expressão é dada por meio de uma relação estocástica. Este não é o caso da entropia, que não satisfaz uma relação de conservação. Em seguida, faremos uma análise análoga para entropia. Neste caso a variação temporal de entropia  $\frac{dS}{dt}$  tem duas contribuições: o fluxo para o reservatório  $\Phi$  e a taxa de produção de entropia  $\Pi$  [26, 27]. Matematicamente, de acordo como vimos anteriormente, ela tem a seguinte forma:

$$\frac{dS}{dt} = \Pi(t) - \Phi(t). \quad (2.41)$$

Como no estado estacionário a variação temporal de  $S$  é nula ( $\frac{dS}{dt} = 0$ ), toda a entropia produzida deve ser "entregue" ao reservatório. De acordo com as leis da termodinâmica, a taxa de produção de entropia  $\Pi$  deve ter duas propriedades importantes: 1) ela deve ser positiva ou nula; e 2) ela deve anular-se no regime de equilíbrio termodinâmico, que admitimos com sendo aquele em que há a ocorrência de reversibilidade microscópica. Uma definição microscópica da produção de entropia, no caso dos sistemas descritos por uma equação mestra, é dada pela expressão de Schnakenberg [24]. Dessa forma, admitimos a seguinte expressão para a taxa de produção de entropia

$$\Pi = \frac{k_B}{2} \sum_{nm} \{W(m, n)P(n, t) - W(n, m)P(m, t)\} \ln \left[ \frac{W(m, n)P(n, t)}{W(n, m)P(m, t)} \right]. \quad (2.42)$$

A Eq. (2.42) possui as duas propriedades mencionadas acima. Cada parcela da soma é do tipo  $(x - y) \ln(x/y)$ , que sempre é maior ou igual a zero e, portanto,  $\Pi \geq 0$ . Em equilíbrio termodinâmico temos que  $\Pi = 0$ , isto se deve à condição de reversibilidade microscópica e portanto  $W(m, n)P(n, t) = W(n, m)P(m, t)$  para qualquer par de estados. Assumindo a expressão para a entropia de Boltzmann e Gibbs para sistemas fora do equilíbrio

$$S(t) = -k_B \sum_n P(n, t) \ln P(n, t), \quad (2.43)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann, e derivando-a com respeito ao tempo obtemos

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \sum_n \ln P(n, t) \frac{d}{dt} P(n, t) - k_B \sum_n P(n, t) \frac{d}{dt} \ln P(n, t), \quad (2.44)$$

onde foram permutados a derivada e o somatório. Em seguida, mostraremos que o segundo

termo desta expressão é nulo,

$$\begin{aligned} -k_B \sum_n P(n, t) \frac{d}{dt} \ln P(n, t) &= -k_B \sum_n P(n, t) \left[ \frac{1}{P(n, t)} \right] \frac{d}{dt} P(n, t) \\ &= -k_B \frac{d}{dt} \sum_n P(n, t) = 0, \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde levamos em conta que  $\sum_n P(n, t) = 1$ . Portanto, apenas o primeiro termo da equação (2.44) contribui na variação temporal da entropia do sistema, de forma que utilizando a Equação Mestra obtemos

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \sum_{nm} \ln P(n, t) \{W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t)\}. \quad (2.46)$$

Se efetuamos o somatório no membro direito, vemos que

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \sum_{nm} W(n, m)P(m, t) \ln P(n, t) - k_B \sum_{nm} W(m, n)P(n, t) \ln P(n, t), \quad (2.47)$$

e escrevendo o segundo termo de uma forma equivalente realizando uma troca dos subíndices  $n$  e  $m$ , ou seja

$$-k_B \sum_{nm} W(m, n)P(n, t) \ln P(n, t) = -k_B \sum_{nm} W(n, m)P(m, t) \ln P(m, t), \quad (2.48)$$

de forma que a expressão (2.47) adquire a forma simplificada

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \sum_{nm} W(n, m)P(m, t) \ln \left[ \frac{P(n, t)}{P(m, t)} \right]. \quad (2.49)$$

Podemos escrever a expressão (2.42) de uma forma equivalente fazendo a troca dos subíndices  $n$  e  $m$  no segundo termo (análoga a 2.48), ficando

$$\Pi = k_B \sum_{nm} W(m, n)P(n, t) \ln \left[ \frac{W(m, n)P(n, t)}{W(n, m)P(m, t)} \right]. \quad (2.50)$$

A partir da Eq. (2.49) e da expressão microscópica para a produção de entropia (2.42), vemos que é possível escreve-la da forma  $\frac{dS}{dt} = \Pi - \Phi$ , onde a expressão para o fluxo  $\Phi$  é dada por

$$\Phi = k_B \sum_{nm} W(m, n)P(n, t) \ln \left[ \frac{W(m, n)}{W(n, m)} \right], \quad (2.51)$$

que também pode ser escrita na forma semelhante à taxa de produção de entropia dada por (2.42), ou seja

$$\Phi = \frac{k_B}{2} \sum_{nm} \{W(m, n)P(n, t) - W(n, m)P(m, t)\} \ln \left[ \frac{W(m, n)}{W(n, m)} \right], \quad (2.52)$$

escrito de forma que o fluxo de entropia  $\Phi$  também será nulo no equilíbrio (balanço detalhado verificado). Por outro lado, no estado estacionário, isto é, quando

$$\sum_m \{W(m, n)P(n, t) - W(n, m)P(m, t)\} = 0, \quad (2.53)$$

podemos dizer que  $\Pi = \Phi$  já que  $dS/dt = 0$ . Se estiver no estado estacionário de não equilíbrio, então a taxa de produção de entropia é estritamente positiva,  $\Pi = \Phi > 0$ , ficando

$$\Pi = \Phi = k_B \sum_{nm} W(m, n)P(n, t) \ln \left[ \frac{W(m, n)}{W(n, m)} \right], \quad (2.54)$$

o que constitui uma abordagem alternativa para descrever a produção de entropia no caso estacionário a partir das taxas de transição e será objeto de análise no presente trabalho. Finalmente, usando a definição (2.29), podemos obter a seguinte expressão para sistemas com simetria de inversão:

$$\begin{aligned} \Pi(\sigma) &= k_B \sum_i \sum_{\sigma} w_i(\sigma) \ln \left[ \frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} \right] P_i(\sigma) \\ &= k_B \sum_i \left\langle w_i(\sigma) \ln \left[ \frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.55)$$

---

### Transições de Fase e Fenômenos Críticos

---

#### 3.1 Introdução

Na natureza podemos encontrar as substâncias em diferentes estados de agregação. O exemplo mais típico é o caso da água, onde estamos familiarizados com as suas diferentes formas: líquido, gelo, e vapor, que podem se transformar entre si devido a variações de temperatura e pressão. Tipicamente, uma substância ao ser exposta a baixas pressões e altas temperaturas apresenta-se na forma gasosa. Em baixas temperaturas e altas pressões possivelmente estará na forma sólida, ao passo que a temperaturas e pressões intermediárias pode se apresentar na forma líquida. Em substâncias constituídas por moléculas mais complexas podem surgir outros estados diferentes, além dos três mencionados acima.

Começaremos este capítulo estudando algumas das formas que existem de classificar as transições de fase. Seguidamente, a partir do comportamento de algumas grandezas nas vizinhanças do ponto crítico, introduziremos o conceito de expoente crítico. Finalmente

discutiremos as ideias essenciais da teoria de escala de Widom e calcularemos uma relação entre os expoentes críticos de uma transição de fase líquido-gás.

## 3.2 Classificação

Uma fase termodinâmica está constituída por um sistema homogêneo, isto é, totalmente uniforme em quanto às propriedades específicas. Os estados de agregação líquido, gasoso e alguns sólidos cristalinos são exemplos de possíveis fases termodinâmicas. Nem todos os sistemas são homogêneos, existem alguns que exibem simultaneamente duas ou mais fases, sendo que neste caso estamos em presença de uma coexistência de fases.

As transições de fase dividem-se em duas grandes categorias, transições de fase de primeira e segunda ordem. A primeira classificação foi introduzida por Paul Ehrenfest em 1933, baseada no comportamento da energia livre termodinâmica como uma função de outras variáveis termodinâmicas [28]. De acordo com este esquema, transições de fase de primeira ordem apresentam uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre com respeito a uma determinada variável termodinâmica. Um exemplo deste tipo de transições são as mencionadas acima para água, porque apresentam uma mudança descontínua na densidade, que é proporcional ao inverso da primeira derivada da energia livre respeito à pressão. Segundo essa classificação as transições de fase de segunda ordem são contínuas na primeira derivada mas apresentam descontinuidade na segunda derivada da energia livre.

A classificação de Ehrenfest acabou se tornando incorreta, por não levar em conta o caso em que uma derivada da energia livre diverge (o que só é possível no limite termodinâmico). Por exemplo, na transição ferromagnética a suscetividade magnética diverge para o infinito. Atualmente, existe um esquema de classificação moderno onde as transições de primeira ordem estão associadas com um calor latente. As transições de segunda ordem são também chamadas de transições de fase contínuas. Elas estão relacionadas com conceitos de invariância de escala, onde se introduziu o grupo de renormalização. O comportamento na criticalidade é extraído deste conceito.

Uma maneira alternativa para caracterizarmos uma transição de fase é expressá-la em

termos de uma quantidade denominada parâmetro de ordem  $m$ . Usualmente este parâmetro é diferente de zero em uma fase ( $m \neq 0$ ) e nulo na outra fase ( $m = 0$ ), essas fases são chamadas de fase ordenada e desordenada, respectivamente.

### 3.3 Expoentes Críticos e Classes de Universalidades

Tipicamente em um sistema contendo fases gasosa e líquida, existe um valor notável de pressão e temperatura, conhecido como o ponto crítico, no qual gás e líquido tornam-se indistinguíveis. Nas vizinhanças deste ponto algumas grandezas termodinâmicas possuem um comportamento singular. Tais singularidades são bem representadas em leis de potência dos desvios da temperatura respeito aos seus valores no ponto crítico. Podemos supor que as diferenças entre as densidades se anulam no ponto crítico como uma lei de potência [29],

$$\rho_L - \rho_G \sim (t)^\beta \quad \text{ou} \quad v_G - v_L \sim (t)^\beta, \quad (3.1)$$

onde  $t = \frac{T - T_C}{T_C}$ , sendo  $T_C$  a temperatura crítica. Existem grandezas que divergem no ponto crítico, entre elas a compressibilidade isotérmica. Suponhamos que ao longo da isocórica crítica ( $v = v_c$  ou  $\rho = \rho_c$ ) ela se comporta como

$$\kappa_T \sim |t|^{-\gamma}. \quad (3.2)$$

Por último, suponhamos que a capacidade térmica molar se comporte ao longo da isocórica crítica de acordo com

$$c_v \sim |t|^{-\alpha}. \quad (3.3)$$

Outro sistema importante é um ferromagneto uniaxial típico, onde também existe uma transição de segunda ordem entre as fases ferromagnética e paramagnética. Nas vizinhanças do ponto crítico, certas grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular, mais especificamente o parâmetro de ordem ( $m$ ), a sua suscetibilidade ( $\chi = \frac{1}{k_B T} [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]$ ) e o calor específico ( $c = \frac{1}{k_B T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] = \frac{\partial U}{\partial T}$ ) que apresentam um comportamento dado por

$$m \sim (-t)^\beta \quad , \quad \chi \sim (\pm t)^{-\gamma} \quad \text{e} \quad c \sim (\pm t)^{-\alpha}, \quad (3.4)$$

respectivamente, onde  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\beta$  são chamados expoentes críticos.

Uma série de trabalhos tem mostrado que os expoentes críticos acima dependem de ingredientes mais genéricos ao invés dos “detalhes” sobre as interações dos sistemas. Dentre esses ingredientes, citamos a dimensionalidade do sistema, a simetria do parâmetro de ordem, o alcance das interações, entre outros. É denominada universalidade à propriedade notável dos sistemas críticos poderem ser divididos em um número razoavelmente pequeno de classes, caracterizadas pelo mesmo comportamento (mesmos expoentes críticos). São bem conhecidos os resultados experimentais publicados por Guggenheim em 1945 [30] onde se verifica que diferentes sistemas apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos.

### 3.4 Teoria de escala de Widom

Para estudar as propriedades termodinâmicas de uma substância pura é desejável estabelecer uma forma para o potencial termodinâmico válida ao redor do ponto crítico, a partir da qual se possam deduzir as leis de potências introduzidas acima. O potencial termodinâmico mais adequado para nossa análise é a energia livre de Gibbs molar  $g(T, P)$  que é função natural de  $T$  e  $P$ . Escrevermos esse potencial termodinâmico em termos das variáveis  $t = (T - T_c)/T_c$  e  $p = (P - P_c)/P_c$ , onde  $T_c$  e  $P_c$  são os valores críticos da temperatura e da pressão, respectivamente. Essa mudança de variáveis é mais conveniente pelo fato do ponto crítico ser único no diagrama de fase, de forma que ele possa ser assumido como ponto de referência. Os eixos correspondentes às novas variáveis possuem origem no ponto crítico e um deles coincide com a linha de coexistência. então, temos

$$g(T, P) = \mathcal{G}(t, p). \quad (3.5)$$

Para analisar o comportamento crítico, é conveniente separar a energia livre de Gibbs molar em uma parte regular  $\mathcal{G}_r(t, p)$  e uma parte singular  $\mathcal{G}_s(t, p)$  que contenha as anomalias relativas ao ponto crítico bem como as descontinuidades ao longo da linha de coexistência. Dessa forma, escrevemos

$$\mathcal{G}(t, p) = \mathcal{G}_r(t, p) + \mathcal{G}_s(t, p), \quad (3.6)$$

de acordo com essa separação, qualquer grandeza termodinâmica terá também uma parte

regular e uma parte singular. A parte regular das grandezas que são finitas no ponto crítico deve ver ser escolhida de modo que se anule nesse ponto, o que sempre pode ser feito pela adição de termos apropriados em  $\mathcal{G}_r(t, p)$ .

A teoria de escala de Widom consiste em supor que  $\mathcal{G}_s$  seja uma função homogênea generalizada das variáveis  $t$  e  $p$ . Portanto, consideramos a seguinte transformação de escala

$$(t, p) \rightarrow (\lambda^a t, \lambda^b p), \quad (3.7)$$

que liga os dois pontos do diagrama de fase. Dessa forma, as partes singulares da energia livre de Gibbs correspondentes a esses dois pontos, também estão ligadas por uma transformação de escala, ou seja

$$\mathcal{G}_s(t, p) = \lambda \mathcal{G}_s(\lambda^a t, \lambda^b p), \quad (3.8)$$

onde  $a$  e  $b$  são dois expoentes bem definidos que, como veremos a continuação, estão relacionados com os expoentes clássicos. O parâmetro  $\lambda$  é um fator de ampliação arbitrário, sem perda de generalidade podemos escrever  $\lambda = t^{-1/a}$  de modo que

$$\mathcal{G}_s(t, p) = t^{-1/a} \mathcal{G}_s\left(1, \frac{p}{t^{b/a}}\right) = t^{-1/a} \mathcal{F}\left(\frac{p}{t^{b/a}}\right). \quad (3.9)$$

Supondo agora que  $\mathcal{F}(x)$  é bem comportada, podemos usar as ferramentas usais da termodinâmica para obter as relações entre os expoentes críticos ( $\alpha, \beta, \gamma$  e  $\delta$ ) em termos de  $a$  e  $b$ . Temos, então

$$v = \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{P_c} \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial p}\right)_t = \frac{1}{P_c} \left(\frac{\partial \mathcal{G}_r}{\partial p}\right)_t + \frac{1}{P_c} \left(\frac{\partial \mathcal{G}_s}{\partial p}\right)_t, \quad (3.10)$$

o primeiro termo representa a parte regular do volume e efetuando a derivada do segundo termos obtemos

$$v = v_r + t^{-(1+b)/a} \mathcal{F}'\left(\frac{p}{t^{b/a}}\right), \quad (3.11)$$

onde  $\mathcal{F}'(x) = d\mathcal{F}/dx$ . Ao longo da linha de coexistência, o volume molar do vapor  $v_G$  e o volume molar do líquido  $v_L$  são obtidos tomando os limites  $p \rightarrow 0^-$  e  $p \rightarrow 0^+$ , respectivamente, na expressão (3.11), ou seja

$$v_G = v_r + t^{-(1+b)/a} \mathcal{F}'(0^-) \quad \text{e} \quad v_L = v_r + t^{-(1+b)/a} \mathcal{F}'(0^+), \quad (3.12)$$

portanto, a diferença entre os volumes molares do líquido e do vapor fica

$$v_G - v_L = t^{-(1+b)/a} [\mathcal{F}'(0^-) - \mathcal{F}'(0^+)] \sim t^{-(1+b)/a}, \quad (3.13)$$



essa última expressão, ao ser comparada com (3.1), fornece a seguinte relação entre os expoentes

$$\beta = -\frac{1}{a} - \frac{b}{a}. \quad (3.14)$$

Para obter a relação com o expoente  $\alpha$ , consideramos a capacidade térmica molar isobárica  $c_p$ , tomando a segunda derivada em relação à temperatura, temos

$$c_p = T \left( \frac{\partial^2 \mathcal{G}_s}{\partial T^2} \right)_p = \frac{T}{T_c^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{G}_s}{\partial t^2} \right)_p, \quad (3.15)$$

levando em conta que  $T = T_c(t+1)$  e efetuando a derivada na isobárica crítica ( $p = 0$ ) temos

$$c_p = \frac{t+1}{T_c} \left( \frac{1+a}{a^2} \right) t^{-\frac{1}{a}-2} \mathcal{F}(0), \quad (3.16)$$

que comparando com a expressão (3.3) obtemos

$$\alpha = \frac{1}{a} + 2. \quad (3.17)$$

Finalmente, para obter uma última relação associada ao expoente  $\gamma$ , consideraremos a compressibilidade isotérmica

$$\kappa_T = \frac{1}{vP_c^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{G}_s}{\partial p^2} \right)_T = \frac{1}{vP_c^2} t^{-\frac{1}{a}-\frac{2b}{a}} \mathcal{F}'' \left( \frac{p}{t^{b/a}} \right), \quad (3.18)$$

portanto, na isobárica crítica temos

$$\kappa_T(p=0) = \frac{1}{vP_c^2} t^{-\frac{1}{a}-\frac{2b}{a}} \mathcal{F}''(0) \sim t^{-\frac{1}{a}-\frac{2b}{a}}, \quad (3.19)$$

comparando com a expressão 3.2 temos

$$\gamma = \frac{2b}{a} + \frac{1}{a}. \quad (3.20)$$

A partir das equações (3.14), (3.17) e (3.20) temos a chamada relação de escala

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (3.21)$$

pois apenas dois expoentes determinam todos os demais. Esta é uma relação de escala, que tem sido sistematicamente verificada por meio da análise de dados experimentais e de cálculos exatos ou numéricos. Analogamente, podemos obter a mesma relação para o caso do sistema ferromagneto uniaxial [31]. Nesta dissertação, iremos testar esta relação de escala, com o expoente  $\alpha$  medido a partir da produção de entropia.

---

# Produção de Entropia como uma Ferramenta para o estudo de Transições de Fase

---

Uma questão fundamental é entendermos se a produção de entropia pode, de fato, ser utilizada como uma ferramenta útil e consistente para caracterizar as transições de fase em sistemas fora do equilíbrio. Nos últimos anos, alguns estudos têm sido realizados, indicando que transições de fase contínuas podem ser identificadas por uma divergência da primeira derivada de  $\Pi$ , cujo expoente associado desempenha um papel análogo ao calor específico. No entanto, tais trabalhos restringem-se a transições de fase contínuas em topologias regulares ou análise de campo médio para exemplos específicos [14, 17, 18, 32].

Neste capítulo faremos uma descrição detalhada sobre a produção de entropia em transições de fase. Na seção (4.1) faremos uma descrição geral do campo médio para sistemas com simetria de inversão. Na seção (4.2) apresentamos uma descrição geral para produção de entropia em transições de fase descontínuas. A análise será dividida em duas partes: transições em redes regulares e em redes complexas. Na seção (4.3) exporemos algumas características da produção de entropia em transições de fase contínuas.

## 4.1 Aproximação de Campo Médio para sistemas com simetria de inversão

Heuristicamente, uma transição de fase contínua pode ser descrita pela equação logística, que descreve a evolução do parâmetro de ordem  $m = \langle \sigma_i \rangle$  da seguinte forma

$$\frac{d}{dt}m = a(q - q_c)m - bm^3, \quad (4.1)$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes e  $q$  é o parâmetro de controle. Existem duas soluções estáveis:  $m^{(D)} = 0$  para valores baixos de  $q$  e  $m^{(S)} = \pm \sqrt{a(q - q_c)/b}$  para valores altos de  $q$ , descrevendo as fases desordenadas e ordenadas, respectivamente. A transição de fase segue o expoente de campo médio  $\beta_{mf} = 1/2$  e  $m(t)$  anula-se exponencialmente como  $m(t) \sim e^{a(q-q_c)t}$  para  $q < q_c$  quando  $m(t) \ll 1$ . Por outro lado, para descrever heurísticamente transições de fase descontínuas, é necessário incluir um termo adicional  $+cm^5$ , levando à seguinte expressão [33]:

$$\frac{d}{dt}m = a(q_b - q)m - bm^3 + cm^5, \quad (4.2)$$

onde a constante  $c > 0$ . A equação acima exibe três soluções independentes do tempo:  $m^{(D)} = 0$  (fase desordenada),  $m^{(S)}$  (fase ordenada) e  $m^{(U)}$  (fase instável). Para  $q = q_f = (b^2/4ac) - q_b$ ,  $m$  salta de  $m_1 \equiv m^{(S)}(q_f)$  para  $m^{(D)} = 0$ . Para  $q > q_f$ ,  $m(t)$  comporta-se como  $m(t) \sim e^{a(q_b-q)t}$  para  $m_0 \ll 1$ , de forma que ela se anula exponencialmente independentemente da condição inicial  $m_0 > 0$ . A fronteira  $q = q_b$  separa o decaimento exponencial de  $m(t) \sim e^{a(q_b-q)t}$  ( $q > q_b$ ) da convergência para um valor bem definido de magnetização  $m_2 \equiv m^{(S)}(q)$  ( $q < q_b$ ) quando  $m_0 \ll 1$ . Para  $q_b < q < q_f$  (faixa de histereses),  $m(t)$  se comporta da seguinte maneira:  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(D)}$  se  $m_0 < m^{(U)}$ ,  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(S)}$  se  $m_0 > m^{(U)}$  e só para  $m_0 = m^{(U)}$  tem  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(U)}$ . Por este motivo  $m^{(U)}$  é uma solução instável. A figura (5.1) do próximo capítulo resume este comportamento para transições de fase descontínuas.

Uma vez que as relações fenomenológicas acima ocultam o caráter irreversível do qual estamos interessados, derivamos nesta tese uma expressão geral para a produção de entropia levando em conta um sistema irreversível qualquer com simetria de inversão. Neste caso, podemos escrever a taxa de transição pela expressão  $w(\sigma_i) = \frac{1}{2}[1 - q\sigma_i g(X)]$ , onde  $q$  é o parâmetro de controle genérico e  $g(X)$  expressa uma dependência genérica de uma vizinhança

local com  $k$  spins. Apenas duas suposições relativas a  $g(X)$  são necessárias. A primeira é que, devido à simetria de inversão,  $w(\sigma_i)$  depende do sinal da vizinhança do spin local, de forma que a função  $g(X)$  é ímpar. Além disso, levando em conta que  $w(\sigma_i)$  é restrita entre 0 e 1 (taxa de transição), a condição  $|qg(x)| \leq 1$  é necessária para todos os valores de  $X$ . Esses pontos nos permitem reescrever  $g(X)$  como  $g(X) = |g(X)|S(X)$ , onde  $S(X)$  é a função sinal definida por  $\text{sign}(X) = 1(-1)$  ou  $0$ , de acordo com  $X > 0(< 0)$  ou  $X = 0$ , respectivamente, onde  $|g(X)|$  fica restrita entre 0 e  $|g(k)|$ .

A partir das considerações acima, vemos que (de acordo com a Eq. (2.34)) a evolução temporal do parâmetro de ordem  $m = \langle \sigma_i \rangle$  tem a seguinte expressão para o estado estacionário

$$m = q \langle g(X)S(X) \rangle. \quad (4.3)$$

Para a obtenção de  $\Pi$  no estado estacionário é necessário calcularmos  $w_i(\sigma) \ln[w_i(\sigma)/w_i(\sigma^j)]$  dado por

$$\frac{1}{2} [\sigma_i S(X) - qg(X)S^2(X)] \ln \frac{1 - qg(X)}{1 + qg(X)}, \quad (4.4)$$

onde a taxa de transição reversa  $w_i(\sigma^j)$  é obtida por meio da transformação  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$  ficando  $w_i(\sigma^j) = \frac{1}{2}[1 + q\sigma_i g(X)]$ . A aproximação de campo médio (de um sitio) consiste em reescrever a probabilidade conjunta  $P(\sigma_i, \dots, \sigma_{i+k})$  como um produto de probabilidades de um sitio  $P(\sigma_i) \dots P(\sigma_{i+k})$ , da qual se derivam relações fechadas para as principais quantidades como função dos parâmetros de controle. Uma vez que as principais características das transições de fase (críticas e descontínuas), não devem depender das particularidades de  $g(X)$ , é razoável, dentro da aproximação de campo médio, reescrever as médias em termos de um valor efetivo de  $\bar{g}$  dado por

$$m = q \langle g(X)S(X) \rangle \rightarrow q\bar{g} \langle S(X) \rangle, \quad (4.5)$$

$$\frac{1}{2} \left\langle \sigma_i S(X) \ln \frac{1 - qg(X)}{1 + qg(X)} \right\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} \langle \sigma_i S(X) \rangle, \quad (4.6)$$

e

$$\frac{1}{2} \left\langle g(X)S^2(X) \ln \frac{1 - qg(X)}{1 + qg(X)} \right\rangle \rightarrow \frac{\bar{g}}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} \langle S^2(X) \rangle. \quad (4.7)$$

Neste nível de aproximação, a expressão para  $\Pi$  torna-se

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} [m \langle S(X) \rangle - q\bar{g} \langle S^2(X) \rangle]. \quad (4.8)$$

As médias acima são calculadas decompondo a média da função sinal em duas partes:

$$\langle S(X) \rangle = P(X_+) - P(X_-) \quad \text{e} \quad \langle S^2(X) \rangle = P(X_+) + P(X_-), \quad (4.9)$$

respectivamente, sendo  $P(X_{\pm})$  a probabilidade do sistema ter alguma configuração que faça a função sinal assumir o valor  $\pm 1$ . Podemos aproximar esta probabilidade como

$$P(X_{\pm}) \approx \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n}, \quad (4.10)$$

onde  $\lceil \dots \rceil$  é a função teto (em inglês "ceiling function") e para  $P(X_+)[P(X_-)]$  o fator  $C_n^k$  representa uma combinatória que leva em conta o número de possibilidades de uma vizinhança com  $n$  spins nos estados  $+1[-1]$ , com as probabilidades associadas  $p_{\pm}$  dadas pela equações (2.33). Portanto, para um dado valor de  $k$  a Eq. (4.10) mostra como obtemos  $\langle S(X) \rangle$  e  $\langle S^2(X) \rangle$  para um modelo qualquer com simetria de inversão.

As equações (4.9) tornam-se mais simples no regime de grandes conectividades. Para vermos isto, notamos que cada termo da distribuição binomial se aproxima a um termo gaussiano com média  $kp_{\pm}$  e variância  $\sigma^2 = kp_+p_-$ , portanto

$$\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n} \rightarrow \int_{k/2}^k \frac{e^{-\left(\frac{\ell - kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}} d\ell = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left[ \frac{k(1 - p_{\pm})}{\sqrt{2}\sigma} \right] - \operatorname{erf} \left[ \frac{k(1/2 - p_{\pm})}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\},$$

donde  $\operatorname{erf}(x) = 2 \int_0^x e^{-t^2} dt / \sqrt{\pi}$  denota a função erro [34]. Para grandes valores de  $k$  temos que  $\operatorname{erf}[k(1 - p_{\pm})/\sqrt{2}\sigma] \rightarrow 1$  (já que  $\langle S^2(X) \rangle \rightarrow 1$ ) e a expressão para  $m$  e  $\Pi$  torna-se

$$m = q\bar{g} \left[ \operatorname{erf} \left( m\sqrt{\frac{k}{2}} \right) \right] \quad \text{e} \quad \Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} \left[ \frac{m^2}{q\bar{g}} - q\bar{g} \right], \quad (4.11)$$

respectivamente. Na vizinhança do ponto crítico a Eq. (4.1) mostra que  $m$  se comporta como  $m \sim (q - q_c)^{1/2}$  e portanto obtemos as seguintes expressões para a produção de entropia:

$$\Pi \sim \frac{1}{2} \ln \frac{1 + q\bar{g}}{1 - q\bar{g}} \left[ \frac{q_c - q}{q\bar{g}} + q\bar{g} \right] \quad \text{quando } q < q_c \quad (4.12)$$

e

$$\Pi = \frac{q\bar{g}}{2} \ln \frac{1 + q\bar{g}}{1 - q\bar{g}} \quad \text{quando } q > q_c, \quad (4.13)$$

respectivamente. Assim, a produção de entropia é contínua no ponto crítico  $q_c$ ,  $\Pi_c = \frac{q_c\bar{g}}{2} \ln \frac{1+q_c\bar{g}}{1-q_c\bar{g}}$ . No entanto, sua primeira derivada  $\Pi' = \frac{d\Pi}{dq}$  é descontínua, saltando de

$$\Pi' = \frac{q_c\bar{g}^2}{1 - q_c^2\bar{g}^2} + \frac{1 - q_c\bar{g}^2}{2q_c\bar{g}} \ln \frac{1 - q_c\bar{g}}{1 + q_c\bar{g}}, \quad \text{quando } q \rightarrow q_c^- \quad (4.14)$$

para

$$\Pi' = \frac{q_c \bar{g}^2}{1 - q_c^2 \bar{g}^2} - \frac{\bar{g}}{2} \ln \frac{1 - q_c \bar{g}}{1 + q_c \bar{g}}, \quad \text{quando } q \rightarrow q_c^+, \quad (4.15)$$

cuja descontinuidade de  $-\frac{1}{2q_c \bar{g}} \ln \frac{1 - q_c \bar{g}}{1 + q_c \bar{g}}$  está associada ao expoente crítico  $\alpha_{mf} = 0$ . De posse dos expoentes clássicos  $\beta_{mf}$  e  $\gamma_{mf}$  (obtidos a partir da variância do parâmetro de ordem [25]), vemos que a relação de escala  $\alpha_{mf} + 2\beta_{mf} + \gamma_{mf} = 2$  é satisfeita, ilustrando que a criticalidade é caracterizada pelo salto na primeira derivada de  $\Pi$ , em similaridade com a descontinuidade do calor específico para sistemas de equilíbrio. No próximo capítulo ilustraremos estas características para o modelo do votante majoritário (ver figura 5.2).

Além disso, é importante mostrarmos que os resultados para a produção de entropia usando a aproximação de campo médio também prevê corretamente as características em transições de fase descontínuas. De acordo com a Eq. (4.2),  $m$  salta de  $m_1 \equiv m^{(S)}(q_f)$  a 0 em  $q = q_f = (b^2/4ac) - q_b$  e de acordo com a Eq. (4.11),  $\Pi$  salta de

$$\frac{1}{2} \left( q_f \bar{g} - \frac{m_1^2}{q_f \bar{g}} \right) \ln \left[ \frac{1 + q_f \bar{g}}{1 - q_f \bar{g}} \right] \quad \text{para} \quad \frac{q_f \bar{g}}{2} \ln \left[ \frac{1 + q_f \bar{g}}{1 - q_f \bar{g}} \right]. \quad (4.16)$$

Inversamente,  $m$  salta de 0 para  $m_2 \equiv m^{(S)}(q_b)$  em  $q = q_b$  e, portanto,  $\Pi$  saltará de

$$\frac{q_b \bar{g}}{2} \ln \left[ \frac{1 + q_b \bar{g}}{1 - q_b \bar{g}} \right], \quad \text{para} \quad \frac{1}{2} \left( q_b \bar{g} - \frac{m_2^2}{q_b \bar{g}} \right) \ln \left[ \frac{1 + q_b \bar{g}}{1 - q_b \bar{g}} \right]. \quad (4.17)$$

Portanto, vemos que o comportamento biestável na produção de entropia não só distingue as transições de fase contínuas das descontínuas, mas também localiza apropriadamente a faixa de histerese.

## 4.2 Produção de entropia em transições de fase descontínuas

### 4.2.1 Rede Regular

Diferentes trabalhos [33, 35, 36, 37] atestaram que transições de fase descontínuas em sistemas fora do equilíbrio apresentam grandes diferenças entre redes regulares e complexas. No primeiro caso, ela é caracterizada por mudanças "abruptas" no comportamento do parâmetro

de ordem  $|m|$ , de sua variância  $\chi = N[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]$  e outras quantidade, cujo comportamento escala com o volume do sistema  $N$  (veja, por exemplo, painéis (b) - (d) na Fig. 5.5 do próximo capítulo) [33, 35, 36]. Nas proximidades da coexistência de fases, onde o comprimento de correlação é finito, a distribuição de probabilidade pode ser escrita (aproximadamente) como uma soma de duas gaussianas independentes, a partir da qual se extrai um comportamento de escala com o volume do sistema [33, 36, 38, 39]. Mais especificamente, a distribuição de probabilidades é dada por  $P_N(m) = P_N^{(o)}(m) + P_N^{(d)}(m)$ , onde cada termo  $P_N^{(\alpha)}(m)$  está associado à fase  $\alpha$  (com o parâmetro de ordem  $m_\alpha$ ):

$$P_N^{(\alpha)}(m) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[N\{\Delta q m - (m - m_\alpha)^2/(2\chi_\alpha)\}]}{[F'_o(\Delta q; N) + F'_d(\Delta q; N)]}. \quad (4.18)$$

Os parâmetros  $\chi_\alpha$  e  $\Delta q \equiv q_N - q_0$  correspondem à largura da distribuição e à "distância" ao ponto de coexistência de fases  $q_0$ , respectivamente. Embora, em princípio, a suposição de duas gaussianas independentes não possa descrever adequadamente uma transição de fase descontínua "fraca", na qual uma sobreposição entre  $P_N^{(o)}(m)$  e  $P_N^{(d)}(m)$  é esperada, sua confiabilidade foi verificada em vários exemplos de transições de fase em sistemas fora do equilíbrio com propriedades distintas [36, 38]. A partir das considerações acima, mostrou-se que o ponto, onde a variância é máxima e o cumulante de quarta ordem  $1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$  é mínimo, escala com o volume.

Nosso objetivo consiste em usarmos a relação acima para derivar adequadamente a produção de entropia nas proximidades da transição. Isto porque apesar da produção de entropia estacionária apresentar uma dependência não trivial com as correlações genéricas do tipo  $\langle \sigma_i \rangle$ ,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ ,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} \rangle$  e assim por diante, cabe notar que a equação (2.55) a descreve como a média associada a uma variável aleatória, o que nos permite recorrer às ideias do teorema central do limite. A generalidade na forma da distribuição do parâmetro de ordem para descrever a coexistência de fase [36] bem como Eq. (2.55) descrevendo  $\langle \phi \rangle$  como a média do ensemble, nos sugere a extensão de uma relação similar para a produção de entropia. Mais concretamente, assumimos que  $P_N(\phi) = P_N^{(o)}(\phi) + P_N^{(d)}(\phi)$ , onde  $P_N^{(\alpha)}(\phi)$  é dada por

$$P_N^{(\alpha)}(\phi) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[N\{\Delta q \phi - (\phi - \phi_\alpha)^2/(2\bar{\chi}_\alpha)\}]}{[F_o(\Delta q; N) + F_d(\Delta q; N)]},$$

onde cada gaussiana é centrada em  $\phi_\alpha$  com  $\bar{\chi}_\alpha$  sendo a largura do  $\alpha$ -ésimo pico. Dado que  $P_N(\phi)$  é normalizado, cada termo  $F_{o(d)}$  é dado por

$$F_{o(d)}(\Delta q; N) = \sqrt{\bar{\chi}_{o(d)}} \exp \left\{ N \Delta q \left[ \phi_{o(d)} + \bar{\chi}_{o(d)} \Delta q / 2 \right] \right\}. \quad (4.19)$$

Tendo em vista que a produção de entropia (estacionária) é a média de uma quantidade flutuante, ela pode ser calculada diretamente uma vez que  $\langle \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi P_N(\phi) d\phi$ , o que resulta na expressão

$$\Pi = \sum_{\sigma=o(d)} \frac{(\phi_{\sigma} + \bar{\chi}_{\sigma} \Delta q) F_{\sigma}(\Delta q; N)}{F_o(\Delta q; N) + F_d(\Delta q; N)}. \quad (4.20)$$

Próximo da coexistência de fases, onde  $\Delta q$  deve ser pequeno, os termos  $O(\Delta q)$  devem dominar sobre  $O(\Delta q)^2$  de forma que Eq. (4.20) pode ser reescrita (aproximadamente) como

$$\Pi = \frac{\sqrt{\bar{\chi}_o} \phi_o + \sqrt{\bar{\chi}_d} \phi_d e^{-N[(\phi_o - \phi_d) \Delta q]}}{\sqrt{\bar{\chi}_o} + \sqrt{\bar{\chi}_d} e^{-N[(\phi_o - \phi_d) \Delta q]}}. \quad (4.21)$$

Note que a Eq. (4.21) reproduz o salto de  $\phi_o$  ( $\phi_d$ ) quando  $\Delta q \rightarrow 0_{-(+)}$  e  $N \rightarrow \infty$  (uma terceira razão para supor  $P_N(\phi)$  como soma de duas gaussianas independentes). Notavelmente, as curvas para diferentes valores de  $N$  cruzam no ponto de transição  $\Delta q = 0$  com

$$\Pi^* = \frac{\sqrt{\bar{\chi}_o} \phi_o + \sqrt{\bar{\chi}_d} \phi_d}{\sqrt{\bar{\chi}_o} + \sqrt{\bar{\chi}_d}}. \quad (4.22)$$

O ponto de cruzamento distingue claramente as transições de fase contínuas das descontínuas e pode ser usado como um indicador da coexistência de fases, como se mostra no próximo capítulo nas figuras (5.5) e (5.8), também na Ref. [40] (Figs. 7 e 8) para um modelo de reação química.

## 4.2.2 Redes complexas

Diferentes trabalhos [33, 35, 37, 41] têm mostrado que, diferentemente das estruturas regulares, a coexistência de fase é semelhante ao campo médio em redes complexas (ver, por exemplo, Fig. 5.1 do próximo capítulo), cujo comportamento é genericamente caracterizado pela existência de um "ramo" (em inglês "loop") spinodal com biestabilidade. Mais especificamente, o parâmetro de ordem apresentará uma região espinodal na qual, ao longo do "loop" histerético, o sistema converge para um dos estados estacionários possíveis, dependendo da configuração inicial. Para localizar o ponto de transição  $q_f$  (referente à trajetória de "ida") o sistema é inicialmente colocado em uma configuração ordenada e o parâmetro de ajuste  $q$  é aumentado em um incremento  $\Delta q$ , cujo estado final em  $q$  é usado como a condição



inicial em  $q + \Delta q$  até que a descontinuidade do parâmetro de ordem seja visualizada. Inversamente, o ponto de transição  $q_b$  (referente à trajetória de "volta") é identificado diminuindo o valor de  $q$  (também pelo incremento  $\Delta q$ ) começando pela fase desordenada até que o salto no parâmetro de ordem ocorra. Essas características também estarão presentes na produção de entropia, o que pode ser entendido como um argumento geral para transições de fase de ordem-desordem.

O parâmetro de ordem comporta-se na fase desordenada como  $\langle \sigma_i \rangle \sim N^{-1/2}$  [42], então, a  $n$ -ésima correlação se comportará como  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_{i+n} \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+1} \rangle \dots \langle \sigma_{i+n} \rangle \sim N^{-n/2}$ . Assim, no limite termodinâmico, todas as correlações anulam-se na fase desordenada e  $\Pi$  dependerá somente dos parâmetros de controle quando  $N \rightarrow \infty$ . Por outro lado,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_{i+n} \rangle$  apresenta um valor bem definido (diferente de zero) na fase ordenada, de forma que  $\Pi$  depende não apenas do parâmetro de controle, mas também das correlações. Assim, as mudanças abruptas em  $q_f$  (de  $m_1 \equiv m(q_f) \neq 0$  para 0) e  $q_b$  (de 0 para  $m_2 \equiv m(q_b) \neq 0$ ), comumente vistas em termos do parâmetro de ordem, também estarão presentes na produção de entropia. A presença da biestabilidade implica que  $\Phi(t)$  convergirá para um dos dois valores bem definidos, uma vez que, ao longo da faixa de histerese, o sistema se comporta exatamente como a fase desordenada ou ordenada dependendo da condição inicial.

Embora o argumento acima seja válido para transições de fase do tipo ordem-desordem, acreditamos que ele descreva também transições de fase diferentes que não sejam do tipo ordem-desordem, contanto o parâmetro de ordem e as correlações também apresentem um comportamento histerético. Assim, finalizamos a análise mostrando que o comportamento da produção de entropia também caracteriza a coexistência de fases, comumente tratada em termos do parâmetro de ordem.

### 4.3 Produção de entropia em transições de fase contínuas

Apesar de serem caracterizadas pelo anulamento do parâmetro de ordem  $|m|$  e pela divergência algébrica da variância  $\chi$  na criticalidade, o comportamento das grandezas torna-se "arredondado" devido aos efeitos de tamanho finito. Conforme vimos anteriormente com a teoria de escala finita (em inglês "finite size scaling"), eles se comportam como

$|m| = N^{-\beta/2\nu} \tilde{f}(N^{1/2\nu}|\epsilon|)$ ,  $\chi = N^{\gamma/2\nu} \tilde{g}(N^{1/2\nu}|\epsilon|)$  sendo  $\tilde{f}$  e  $\tilde{g}$  funções de escalonamento e  $\epsilon$  denota a "distância" para o ponto crítico  $\epsilon = (q - q_c)/f_c$ . Normalmente,  $q_c$  é localizado identificando uma quantidade apropriada que se cruza (é invariante) para diferentes tamanhos do sistema. Para transições de fase de ordem-desordem, a quantidade  $U_4$  preenche o requisito acima, cujo valor de cruzamento  $U_0^*$  depende da topologia da rede e das propriedades de simetria. Alguns trabalhos [14, 15] descreveram uma relação de escala semelhante para a produção de entropia, na qual perto da criticidade  $\Pi$  e sua primeira derivada  $\Pi' \equiv d\Pi/dq$  se comportam como  $\Pi - \Pi_c \sim (q_c - q)^{1-\alpha}$  e  $\Pi' \sim (q_c - q)^{-\alpha}$ , respectivamente, com  $\alpha$  denotando seu expoente crítico associado. Apesar da continuidade de  $\Pi$ , a expressão acima afirma que a derivada  $\Pi'$  diverge na transição. Aqui estendemos a análise de produção da entropia em transições de fase contínua para topologias complexas aleatórias. Devido a efeitos de tamanho finito, é razoável supor que  $\Pi'$  se comporta como

$$\Pi' = N^{\alpha/2\nu} \tilde{h}(N^{1/2\nu}|\epsilon|), \quad (4.23)$$

com  $\tilde{h}$  sendo uma função de escala apropriada. Desejamos verificar se a relação de escala  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ , verificada em nível de campo médio, está presente além do campo médio.



---

 Produção de entropia no modelo do Votante Majoritário
 

---

## 5.1 Definição do modelo

O modelo do Votante Majoritário (VM) é um dos modelos mais simples fora do equilíbrio que exibem uma transição de fase do tipo ordem-desordem [35, 42]. Ele é definido a seguir: Cada sítio  $i$  de uma rede arbitrária pode assumir  $\bar{q}$  possíveis valores inteiros ( $\sigma_i = 0, 1, \dots, \bar{q} - 1$ ). Com probabilidade  $1 - f$  (sendo  $f$  o parâmetro de controle) o spin local  $\sigma_i$  muda para o spin da vizinhança majoritária  $\sigma'_i$  e com probabilidade complementar  $f$  a regra da maioria não é seguida. A dinâmica é descrita por meio da quantidade  $\bar{w}_X$ , chamada taxa de transição, que depende dos valores dos nós vizinhos. Recentemente, [43] estenderam o modelo considerando a influência do próprio spin local  $\sigma_i$  na taxa de transição. Esta influência se chamou de inercia. Portanto,  $\bar{w}_X$  está definida exatamente pela expressão

$$\bar{w}_{\sigma'_i} = \frac{1 - \theta}{k} \sum_{j=1}^k \delta(\sigma'_i, \sigma_j) + \theta \delta(\sigma'_i, \sigma_i), \quad (5.1)$$

com  $\sigma_j$  denotando o spin de cada um dos  $k$  vizinhos mais próximos do sítio  $i$ . Para o caso mais simples,  $\bar{q} = 2$  e  $\theta = 0$ , o MV se torna equivalente ao modelo de Ising em contato com dois reservatórios térmicos, sendo um deles uma fonte de calor, a uma temperatura infinita, e o outro um sumidouro de calor, à temperatura zero [42]. O contato com o primeiro ocorre com uma determinada probabilidade e com o segundo com a probabilidade complementar.

Estudos recentes [33, 35, 37] mostraram que elevadas frações de inércia mudam, para todos os valores de  $\bar{q}$ , a transição de fase de contínua para descontínua. Uma transição de fase ordem-desordem surge aumentando  $f$ , cuja classificação depende de  $\theta$  e da conectividade de rede  $k$ . Para pequenos valores de  $\bar{q}$  ( $\bar{q} < 4$ ) e  $\theta = 0$  (regime sem inércia), é sempre contínuo [37, 42, 43], mas o aumento de  $\bar{q}$  modifica as propriedades de simetria ( $Z_2$  e  $C_{3v}$  para  $\bar{q} = 2$  e 3, respectivamente), levando a diferentes conjuntos de expoentes críticos. A transição de fase se torna descontínua para valores maiores de  $k$  quando  $\theta$  aumenta [33, 37]. Um dado  $n$ -ésimo momento do parâmetro de ordem  $\langle m^n \rangle$  é calculado através da quantidade  $\langle m^n \rangle = \langle |\sum_{i=1}^N e^{2\pi i \sigma_i / \bar{q}} / N|^n \rangle$ , com  $\langle \dots \rangle$  denotando a média do ensemble. O caso  $n = 1$  é um parâmetro de ordem apropriado uma vez que  $m > 0$  ( $m = 0$ ) na fase ordenada (desordenada).

## 5.2 Caso com simetria de inversão $\bar{q} = 2$

A seguir exemplificaremos os resultados do capítulo anterior para o modelo VM com  $\bar{q} = 2$ . Neste caso, podemos reescrever a taxa de transição acima de uma forma mais conveniente considerando a transformação  $\sigma_i \rightarrow 2\sigma_i - 1$ , de modo que  $w_i(\sigma)$  fica  $w_i(\sigma) = \frac{1}{2}[1 - (1 - 2f)\sigma_i S(X)]$ , onde  $S(X)$  denota novamente a função sinal avaliada sobre a vizinhança local mais a inércia  $X = (1 - \theta) \sum_{j=1}^k \sigma_j / k + \theta \sigma_i$ . Note que o modelo VM representa um caso particular daquele examinado na seção (4.1), portanto, os resultados (gerais) obtidos podem ser aplicados diretamente substituindo na taxa de transição  $q$  e  $g(X)$  por  $1 - 2f$  e  $S(X)$ , respectivamente. Assim, nesse caso,  $X$  não depende apenas da vizinhança, mas também do spin local  $\sigma_i$ .

Para  $\theta = 0.5$  o modelo é dominado pela inércia, onde nesse caso não há presença de uma magnetização espontânea. Apenas para  $\theta = 0.5$  e  $f = 0$  os spins ficam "congelados" na configuração inicial. Introduzindo a taxa de transição microscópica na expressão (2.34) e

lembrando que  $m = \langle \sigma_i \rangle$  obtemos

$$\frac{dm}{dt} = -m + (1 - 2f)\langle S(X) \rangle. \quad (5.2)$$

Usando a própria definição da media estatística no segundo termo e usando as expressões (2.33) obtemos:

$$\frac{dm}{dt} = -m + (1 - 2f) \left[ \langle S(X_+) \rangle \left( \frac{1+m}{2} \right) + \langle S(X_-) \rangle \left( \frac{1-m}{2} \right) \right], \quad (5.3)$$

onde neste caso

$$\langle S(X_{\pm}) \rangle = \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_k} S \left( \sum_{j=1}^k \sigma_j \pm \frac{k\theta}{1-\theta} \right). \quad (5.4)$$

Portanto a expressão do estado estacionário ( $\frac{dm}{dt} = 0$ ) para o valor absoluto da magnetização torna-se

$$m = (1 - 2f)\langle S(X) \rangle = (1 - 2f) \left[ \langle S(X_+) \rangle \left( \frac{1+m}{2} \right) + \langle S(X_-) \rangle \left( \frac{1-m}{2} \right) \right]. \quad (5.5)$$

Conforme descrevemos anteriormente, a produção de entropia é calculada a partir da eq. (2.55) através da expressão

$$\Pi = k_B \sum_i \left\langle w_i(\sigma) \ln \frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} \right\rangle, \quad (5.6)$$

onde a razão entre  $w_i(\sigma)$  e sua reversa  $w_i(\sigma^i)$  é dada por

$$\frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} = \frac{1 - (1 - 2f)\sigma_i S[\sum_{j=1}^k \sigma_j + \frac{k\theta}{1-\theta}\sigma_i]}{1 + (1 - 2f)\sigma_i S[\sum_{j=1}^k \sigma_j - \frac{k\theta}{1-\theta}\sigma_i]}. \quad (5.7)$$

A inspeção da razão acima revela que apenas configurações locais com  $|\sum_{j=1}^k \sigma_j|$  maior que  $k\theta/(1-\theta)$  irão contribuir para  $\Pi$ , já que somente nestes casos a razão é diferente de 1. Assim, em similaridade com a Eq. (4.4), ela pode ser reescrita como

$$\frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} = \sigma_i S'(X) \ln \left( \frac{f}{1-f} \right), \quad (5.8)$$

com  $S'(X)$  sendo a função sinal avaliada apenas sobre o subespaço de configurações locais em que a proporção é diferente de 1 (para  $\theta = 0$ , reduz para a função de sinal usual). Assim, a expressão para  $\Pi$  é dada por

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1-f} [\langle \sigma_i S'(X) \rangle - (1 - 2f)\langle S'^2(X) \rangle], \quad (5.9)$$

de tal forma que depende das médias  $\langle \sigma_i S'(X) \rangle$  e  $\langle S'^2(X) \rangle$ .

### 5.3 Resultados de campo médio

Embora se espere que os principais aspectos das transições de fase não dependam de  $\theta$ , nesse caso é mais conveniente usar Eq. (5.9) ao invés dos resultados (gerais) da seção 4.1, devido à dependência do spin local. Em nível de campo médio de um sitio, a expressão para  $\Pi$  é obtida substituindo  $\langle \sigma_i S'(X) \rangle$  por  $\langle \sigma_i \rangle \langle S'(X) \rangle$ , de forma que

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1-f} \left[ m \langle S'(X) \rangle - (1-2f) \langle S'^2(X) \rangle \right]. \quad (5.10)$$

Conforme vimos anteriormente, para grandes valores de  $k$ , podemos calcular  $\langle S'(X) \rangle$  e  $\langle S'^2(X) \rangle$  a partir da Eq. (4.9), mas agora a probabilidade  $P(X_{\pm})$  está dada aproximadamente por

$$P(X_{\pm}) \approx \sum_{n=\lceil n_+ \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^{n+1} p_{\mp}^{k-n} + \sum_{n=\lceil n_- \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n+1} \quad (5.11)$$

onde os limites inferiores  $n_{\pm}$  dependem de  $\theta$  (ver apêndice B) e são dados por

$$n_+ = \frac{k(1-2\theta)}{2(1-\theta)} \quad \text{e} \quad n_- = \frac{k}{2(1-\theta)}.$$

Note que ambos  $n_{\pm}$  se reduzem para  $k/2$  quando  $\theta = 0$ . Ao realizar cálculos semelhantes aos feitos na seção (4.1), vemos que no regime de grandes conectividades a Eq. (5.5) se torna

$$m = \frac{(1-2f) [\operatorname{erf}(a) - \operatorname{erf}(b)]}{2 - (1-2f) [\operatorname{erf}(a) + \operatorname{erf}(b)]}, \quad (5.12)$$

onde  $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$  denota a função erro, com  $a$  e  $b$  dados por

$$a = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left[ \frac{\theta}{1-\theta} + m \right] \quad \text{e} \quad b = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left[ \frac{\theta}{1-\theta} - m \right]. \quad (5.13)$$

A figura 5.1 resume os principais resultados para o primeiro caso com  $k = 12$  e valores de inércia distintos. Conforme descrevemos na seção (4.1), o parâmetro de ordem salta em  $f_f$  e  $f_b$  e essas discontinuidades também são vistas na produção de entropia. Ao longo da faixa  $f_b < f < f_f$  com "histereses" (spinodal), o fluxo de entropia  $\Phi(t)$  converge para dois valores bem definidos,  $\Pi_1 \equiv \Pi(f, \theta)$  e  $\Pi_0 \equiv \Pi(m^{(S)}, f, \theta)$ . A evolução temporal de  $m(t)$  segue a previsão teórica  $m(t) \sim e^{a(f_b-f)t}$  para  $m_0 \ll 1$  (ver "inset") reforçando nossos resultados gerais (em nível de campo médio) para transições descontínuas. A figura 5.2 exemplifica os principais resultados para transições de fase contínuas. Em todos os casos, a produção de

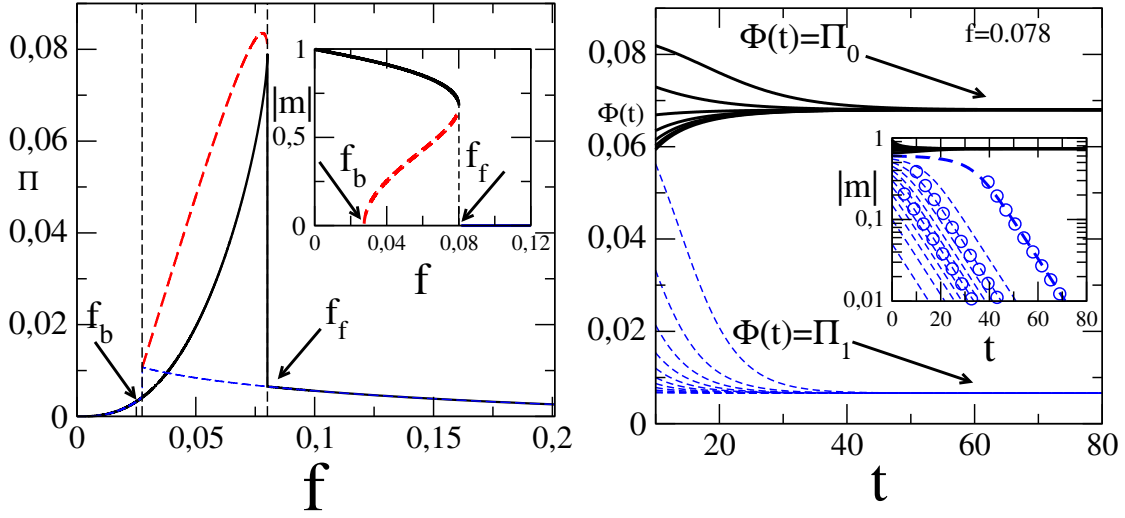


Figura 5.1: O painel à esquerda descreve o comportamento biestável de  $\Pi$  para  $\theta = 0.43$  e  $k = 12$ . As curvas pretas (azuis) denotam as soluções estáveis para  $m_0 > m_\infty^{(U)}$  ( $m_0 < m_\infty^{(U)}$ ). Elas coincidem entre si para  $f > f_f$  e  $f < f_b$  e são diferentes para  $f_b < f < f_f$ . As curvas vermelhas correspondem às soluções instáveis de  $f_b < f < f_f$  com  $m = m_\infty^{(U)}(f)$  se  $m_0 = m_\infty^{(U)}(f)$ . "Inset": O mesmo comportamento, mas em termos do parâmetro de ordem. No painel à direita mostramos a evolução temporal do fluxo de entropia  $\Phi(t)$  para diferentes configurações iniciais e  $f = 0,078$ . "Inset": A evolução temporal de  $m(t)$ , onde os círculos correspondem à função  $m(t) \sim e^{a(f_b - f)t}$ , válida por  $m_0 \ll 1$ .

entropia aumenta até um máximo em  $f = f^*$  e depois diminui para  $f > f^*$ . Para o caso sem inércia ou mesmo para pequenos valores de  $\theta$ ,  $f^* = f_c$ . Isto pode ser entendido recorrendo novamente aos resultados da seção 4.1 [para  $q = 1 - 2f$  e  $g(X) = S(X)$ ] em que no regime de grandes  $k$ ,  $m$  e  $\Pi$  são dados por

$$m = (1 - 2f)\text{erf}\left(m\sqrt{\frac{k}{2}}\right) \quad \text{e} \quad \Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1-f} \left[ \frac{m^2}{1-2f} - (1-2f) \right] \quad (5.14)$$

respectivamente. Nas proximidades do ponto crítico, onde se espera que  $m$  seja pequeno, o lado direito da Eq. (5.14) pode ser expandido na série de Taylor, permitindo-nos reescrever  $m$  unicamente em termos de  $k$  e  $f$ :

$$m \sim \sqrt{\frac{12}{k}}(f_c - f)^{\beta_{mf}}, \quad (5.15)$$

onde  $\beta_{mf} = 1/2$  é o expoente crítico e

$$f_c = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \right\}, \quad (5.16)$$



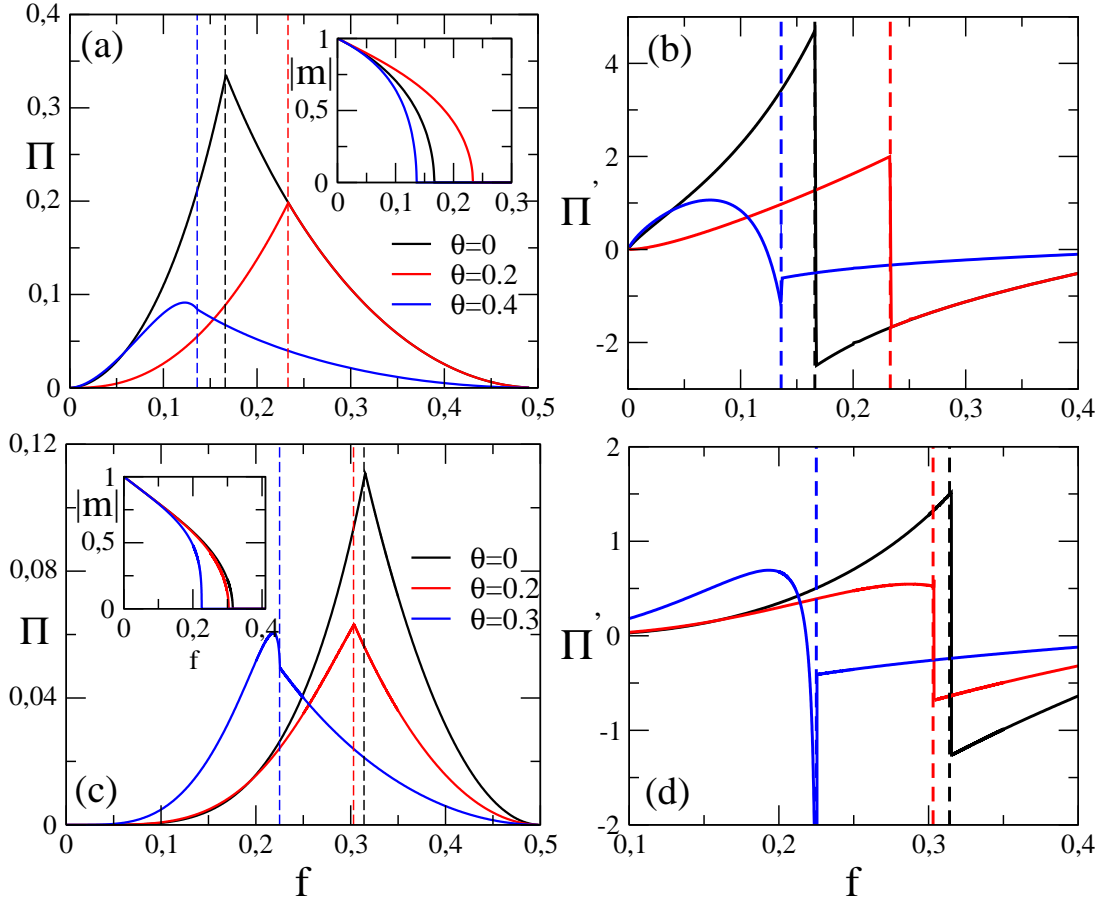


Figura 5.2: Painéis esquerdo e direito: produção de entropia estável  $\Pi$  e sua derivada  $\Pi'$  contra  $f$  para pequenos valores de  $\theta$ ,  $k = 4$  (superior) e  $k = 12$  (inferior), respectivamente. "Inset": o parâmetro de ordem correspondente contra  $f$ . Linhas tracejadas denotam os pontos críticos associados.

é o ponto crítico. Da Eq. (5.15), vemos que  $\Pi$  se comporta como  $\Pi \approx \frac{1-2f}{2} \ln \frac{1-f}{f} \left[ 1 - \frac{12}{k} \frac{f_c-f}{(1-2f)^2} \right]$  e  $\Pi = \frac{1-2f}{2} \ln \frac{1-f}{f}$  para  $f \rightarrow f_c^-$  e  $f > f_c$ , respectivamente e, portanto, a produção de entropia é contínua na criticalidade. Apesar disso, novamente conforme mostramos na seção 4.1, sua primeira derivada  $\Pi'$  salta de

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \ln \frac{1 + \sqrt{\frac{\pi}{2k}}}{1 - \sqrt{\frac{\pi}{2k}}} \quad \text{para} \quad \frac{12}{\pi} \ln \frac{1 + \sqrt{\frac{\pi}{2k}}}{1 - \sqrt{\frac{\pi}{2k}}},$$

e portanto seu comportamento é consistente com o expoente  $\alpha_{m,f} = 0$ . Ao aumentarmos a inércia (veja, por exemplo,  $\theta = 0.4$  e  $0.3$  para  $k = 4$  e para  $k = 12$  respectivamente), o máximo de  $\Pi$  não coincide com o salto de  $\Pi'$  nem com o anulamento do parâmetro de

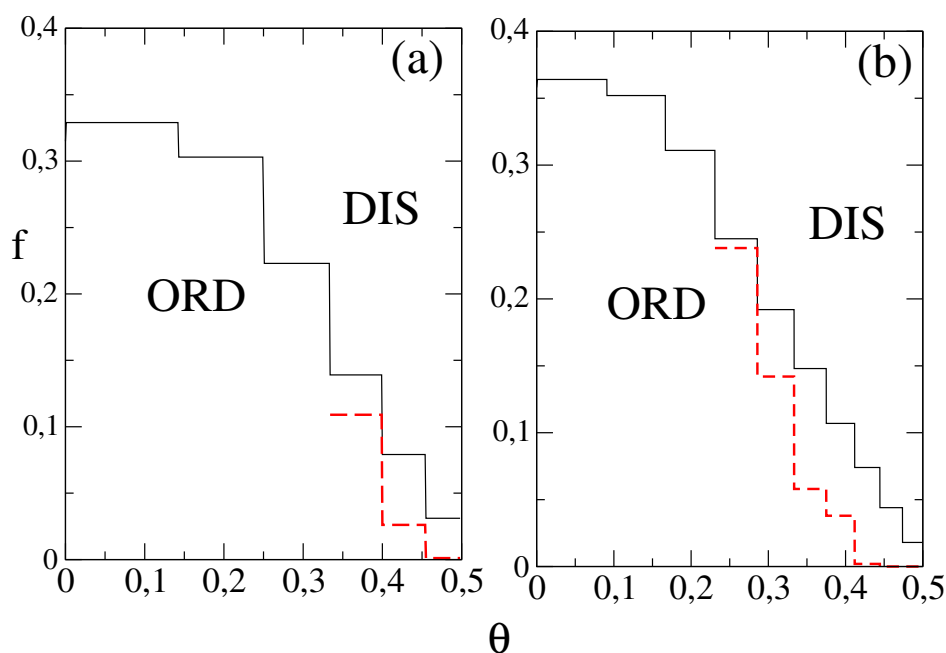


Figura 5.3: Os painéis (a) e (b) mostram os diagramas de fase em nível de campo médio para  $k = 12$  e  $k = 20$  através da análise de produção de entropia. ORD (DIS) denotam as fases ordenadas (desordenadas), enquanto linhas contínuas e tracejadas, correspondem aos valores de  $f_f$  e  $f_b$ , respectivamente. Eles coincidem para transições contínuas, mas são diferentes para as transições descontínuas.

ordem. Assim, nem sempre a a criticalidade é marcada pelo máximo na produção de entropia. Porém em todos os casos o ponto crítico é caracterizado por um salto (em nível de campo médio) em  $\Pi'$ . Acreditamos que os presentes resultados (juntamente da descrição geral na seção 4.1) unificam a descrição no contexto do campo médio, no qual a criticalidade não é necessariamente marcada por um pico na produção de entropia, mas relacionada a um comportamento peculiar de sua primeira derivada.

Finalmente, na Fig. 5.3 mostramos os diagramas de fase para  $k = 12$  e  $k = 20$  avaliados por meio das diferentes características da produção de entropia. Vemos que a localização da transição de fase bem como sua classificação estão em total concordância com as obtidas a partir da análise associado ao parâmetro de ordem (ver, por exemplo, a Fig. 1 em Refs. [37]). Encerraremos a presente análise de campo médio considerando o caso  $k \rightarrow \infty$ , correspondente

ao regime de grafo completo. Nesse limite, a expressão para  $m$  e  $\Pi$  torna-se

$$m = \frac{(1 - 2f) [S(\frac{\theta}{1-\theta} + m) - S(\frac{\theta}{1-\theta} - m)]}{2 - (1 - 2f) [S(\frac{\theta}{1-\theta} + m) + S(\frac{\theta}{1-\theta} - m)]}, \quad (5.17)$$

e

$$\Pi = \ln \frac{f}{1-f} \{m - (1 - 2f)Y_p\}, \quad (5.18)$$

respectivamente, onde  $Y_p = \{(1+m)S[m+\theta/(1-\theta)] - (1-m)S[m-\theta/(1-\theta)]\}/2$ . Combinando a relação acima com Eq. (5.17), segue-se que  $\Pi = 0$ , implicando que não há produção de entropia no caso grafo completo. O caráter reversível do VM sem inercia no grafo completo já foi apresentado na Ref. [44] e nossa análise não apenas o confirma, mas também se estende para o regime inercial.

## 5.4 Resultados numéricos

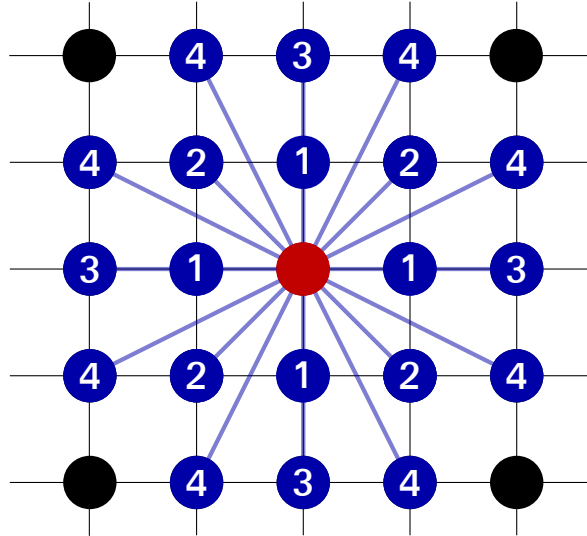


Figura 5.4: Configuração local para uma rede bidimensional com o sitio central (vermelho) e seus primeiros (1), segundos (2), terceiros (3) e quartos (4) vizinhos próximos.

Nesta seção, exemplificaremos os resultados obtidos por meio da teoria apresentada no capítulo anterior considerando a versão do VM por simulações numéricas. Para isto, mostraremos resultados para diferentes estruturas de redes e vizinhanças. Todas as estruturas estudadas estão fixas, ou seja, não se alteram durante a simulação do modelo. Para uma determinada topologia de rede, ou seja  $N$ ,  $f$  e  $\theta$  mantidos fixos, um sitio  $i$  é escolhido

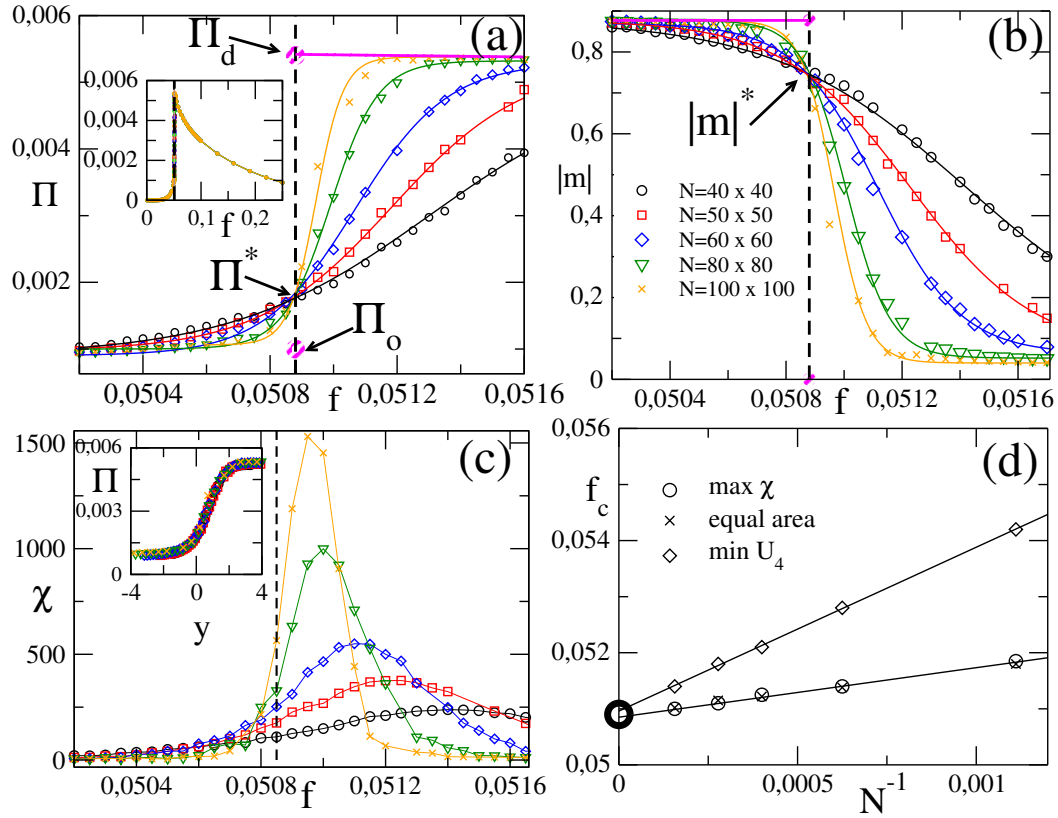


Figura 5.5: Transição descontínua: rede bidimensional com  $k = 20$  e  $\theta = 0,375$ . Painéis (a) - (c) mostram a produção de entropia, o parâmetro de ordem  $|m|$  e sua variância  $\chi = \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2$  respectivamente, em função de  $f$  para diferentes tamanhos do sistema nas proximidades da coexistência de fases  $f_0$ . Linhas tracejadas: ponto de cruzamento entre as curvas da produção de entropia em (a) e do parâmetro de ordem em (b). Linhas contínuas em (a) e (b) correspondem às previsões teóricas a partir da Eq. (4.21). "Inset" superior e inferior:  $\Pi$  para um conjunto de valores maiores de  $f$  e o colapso dos dados usando a relação  $y = (f - f_0)N$ , respectivamente. Em (d), o gráfico do máximo de  $\chi$ , mínimo de  $U_4$  e da distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem de área igual contra  $N^{-1}$ .

aleatoriamente e seu valor de spin  $\sigma_i$  é atualizado ( $\sigma_i \rightarrow \sigma'_i$ ) de acordo com  $w_i(\sigma)$ . Com probabilidade  $1 - f$ ,  $\sigma_i$  muda para o spin da vizinhança majoritária  $\sigma'_i$  e com probabilidade complementar  $f$  a regra da maioria não é seguida. Um passo de Monte Carlo corresponde a  $N$  testes de atualização dos spins. Após repetirmos a dinâmica acima um número suficiente de passos de Monte Carlo (na ordem de  $10^5$ ), o sistema converge para um estado estável de não-equilíbrio. Redes regulares aleatórias foram geradas através de um esquema de modelo de configuração [45] descrito da seguinte forma: Para um sistema com  $N$  nós e conectividade

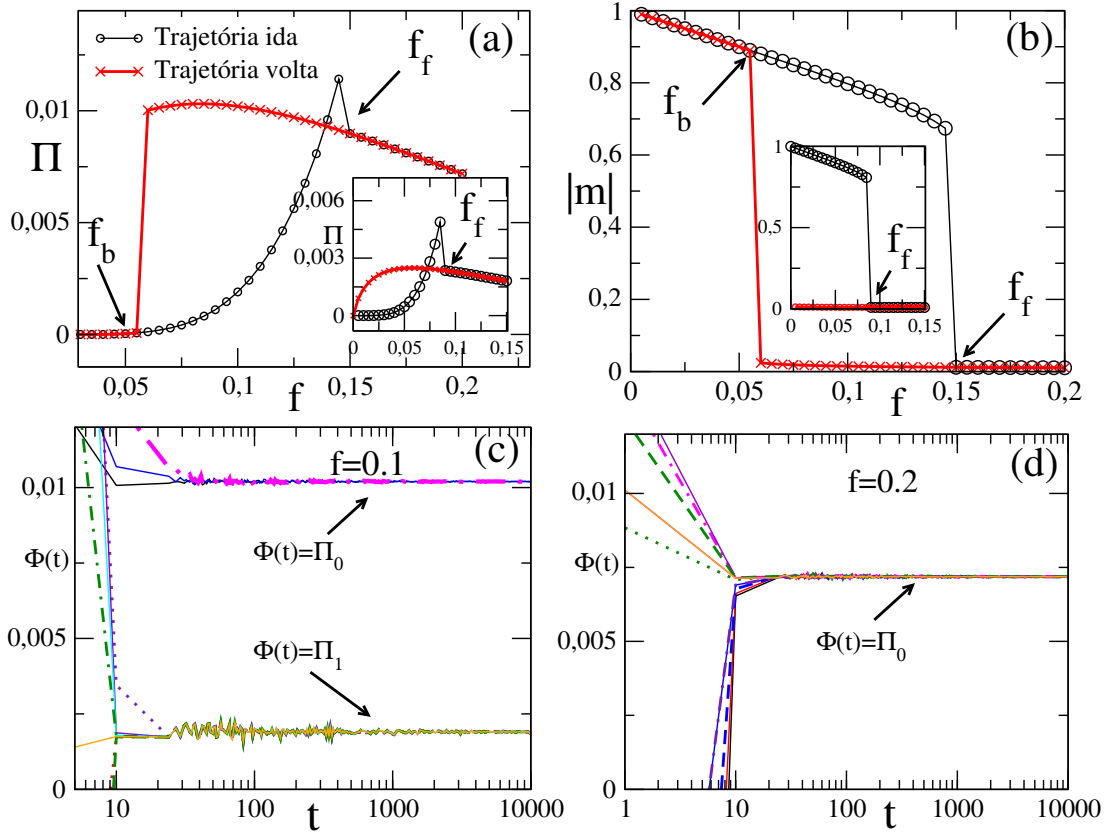


Figura 5.6: Painéis (a) e (b) mostram a produção de entropia  $\Pi$  e  $|m|$  contra  $f$  para  $k = 20$ ,  $\theta = 0.3$  para a rede regular aleatória com  $N = 10^4$ . Curvas pretas e vermelhas correspondem às "trajetórias" de ida e de volta, respectivamente. "Inset": A mesma análise mas para  $\theta = 0,375$ . Painéis (c) e (d) mostram a evolução temporal do fluxo de entropia  $\Phi(t)$  para distintas condições iniciais  $m_0$  com  $f_b < f = 0.10 < f_f$  e  $f = 0.20 > f_f$ , respectivamente. Para valores de inércia maiores ("inset"), a biestabilidade se estende por  $0 \leq f \leq f_f$ , também visualizada a partir do comportamento da produção de entropia.

$k$ , primeiro começamos com um conjunto de  $Nk$  pontos distribuídos em  $N$  grupos, em que cada um contém exatamente  $k$  pontos. Em seguida, escolhe-se um emparelhamento aleatório dos pontos entre grupos e, em seguida, cria-se uma rede ligando os nós  $i$  e  $j$  se houver um par contendo pontos nos conjuntos  $i$ -ésimo e  $j$ -ésimo até  $Nk/2$  pares (ligações) são obtidos. Se a configuração de rede resultante apresentar um loop ou pares duplicados, o processo acima será reiniciado. O aumento de conectividade  $k$  em topologias bidimensionais é realizado pela ampliação do alcance da vizinhança de interação. Por exemplo,  $k = 4, 8, 12$  e  $20$  incluem a interação entre o primeiro, primeiro e segundo, primeiro a terceiro e primeiro a quarto

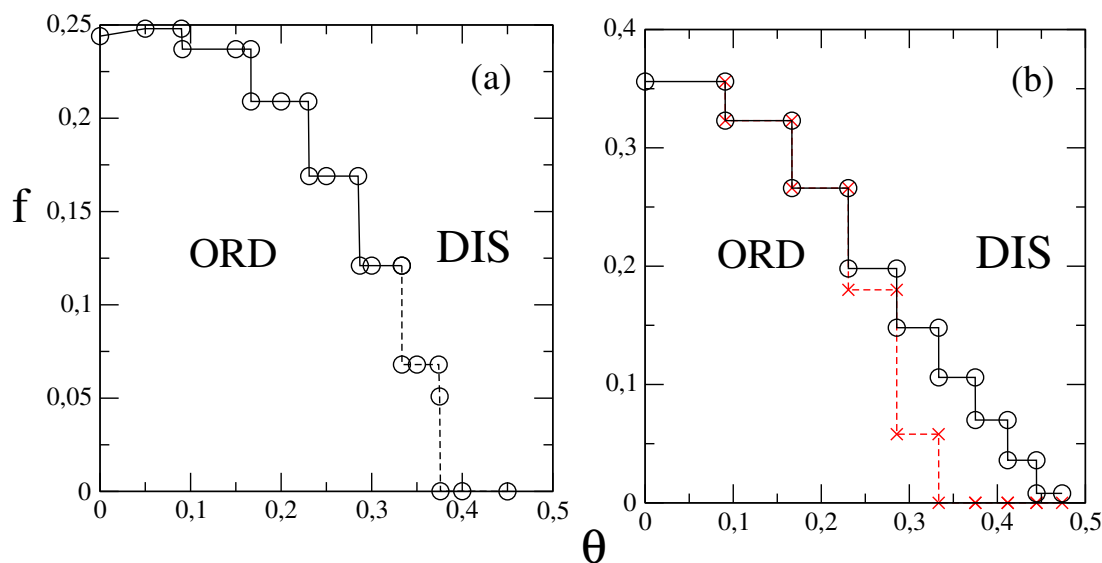


Figura 5.7: Os painéis (a) e (b) mostram os diagramas de fase para  $k = 20$  para as estruturas regular e RR, respectivamente, através da análise da produção de entropia. ORD (DIS) denotam as fases ordenadas (desordenadas) e as linhas contínuas (tracejadas) correspondem às transições de fase contínuas e descontínuas, respectivamente. Em (b), círculos ( $\times$ ) correspondem ao aumento (decréscimo) de  $f$  a partir duma fase ordenada (desordenada).

próximos vizinhos, respectivamente, conforme esboçado na Fig. 5.4.

### 5.4.1 Transições de fase descontínuas

A figura 5.5 exemplifica as previsões teóricas para o modelo do votante majoritário em redes bidimensionais (regulares) com  $k = 20$  e  $\theta = 0,375$ . Note que as curvas de produção de entropia seguem as previsões teóricas (linhas contínuas nos painéis (a) e (b)) das Eqs. (4.21) e (4.22), cuja intersecção entre as curvas ocorre a  $f_0 = 0,05084(5)$ , em excelente concordância com as estimativas obtidas usando análise de tamanho finito,  $0,0509(1)$  (máximo da variância  $\chi$ ),  $0,0510(1)$  (mínimo de  $U_4 = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2$ ) e  $0,0509(1)$  (condição de áreas iguais entre as curvas de  $P_N(m)$ ). Note que todas essas estimativas escalam com  $N^{-1}$ , em conformidade com a teoria de tamanho finito [36], ver por exemplo painel (d). O colapso dos dados usando a transformação  $y = (f - f_0)N$  ("inset") reforçam a confiabilidade da Eq. (4.21) para descrever  $\Pi$  na região da coexistência de fases. Fora do regime de escalonamento ( $f > f_0$  para grandes  $N$ ),  $\Pi$  depende somente dos parâmetros de controle ( $f$  e  $\theta$  para o MV), como pode ser

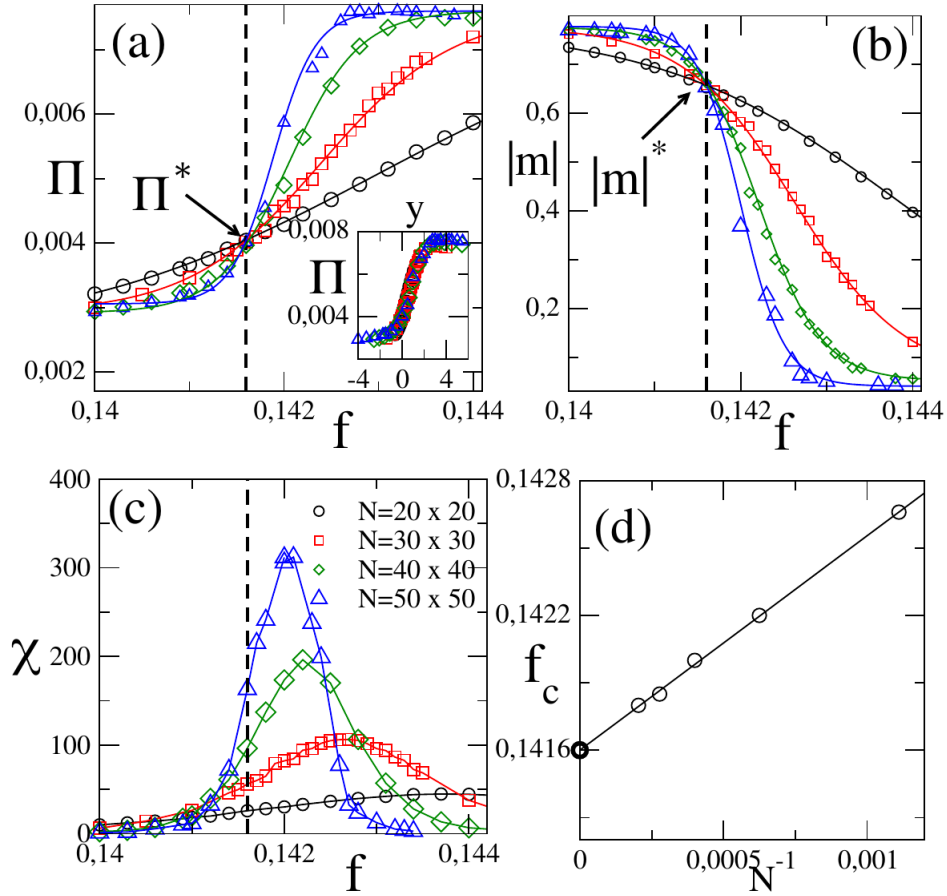


Figura 5.8: Rede regular para  $k = 20$  e  $\theta = 0.32$ : Painéis (a) - (c) mostram a produção de entropia, o parâmetro de ordem  $|m|$  e sua variância  $\chi = \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2$  contra  $f$ , respectivamente, para diferentes tamanhos do sistema nas proximidades da coexistência de fases. Linhas tracejadas: ponto de cruzamento entre as curvas de produção de entropia. Linhas contínuas em (a) e (b) são os ajustes da Eq. (4.21). "Inset": O colapso dos dados usando a relação  $y = (f - f_0)N$ . Em (d), o gráfico do máximo de  $\chi$  contra  $N^{-1}$ .

visto no "inset" superior da Fig. 5.5. O cruzamento tanto no parâmetro de ordem como na produção de entropia não apenas distingue o comportamento das topologias regulares das complexas (ver, por exemplo, Fig. 5.6), mas também as transições de fase contínuas das descontínuas (ver, por exemplo, Fig. 5.11).

A análise na rede complexa é exemplificado na Fig. 5.6 considerando a rede aleatória regular com os valores  $k = 20$ ;  $\theta = 0,3$  e  $N = 10^4$ . Nesse caso, a produção de entropia revela características típicas das redes complexas acima mencionadas: a existência de um loop histe-

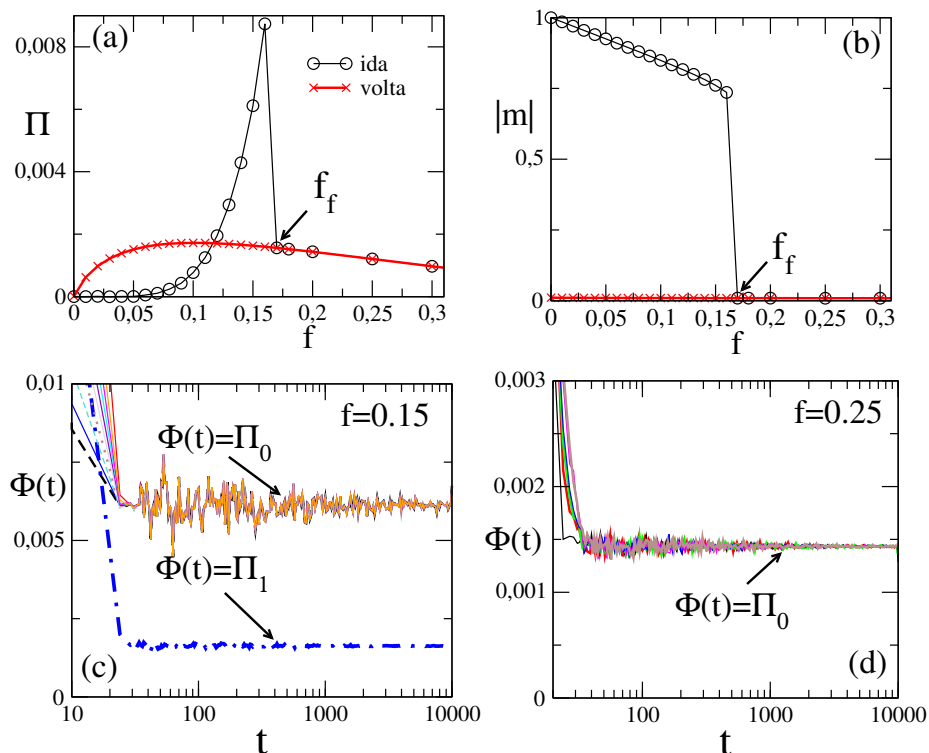


Figura 5.9: Para a estrutura RR, os painéis (a) e (b) mostram a  $\Pi$  estacionária e  $|m|$  contra  $f$  para  $k = 20$  e  $\theta = 0,35$ . Em (c) e (d), a evolução temporal de  $\Phi(t)$  para condições iniciais distintas para  $f = 0,15$  (loop biestável) e  $f = 0,25$  (fase desordenada), respectivamente.

rético [painel (a)] localizado no intervalo  $f_b = 0,055 < f < f_f = 0,15$ , cuja descontinuidade está em equivalência total com a faixa associada ao parâmetro ordem [painel (b)] [37, 33]. Na Fig. 5.7 são mostrados os diagramas de fase para redes regulares e complexas, calculados a partir da análise de produção de entropia. Para fazer isto, estudamos o comportamento da derivada da produção de entropia com respeito ao parâmetro de controle  $f$ , em sistemas com diferentes tamanhos e valores de inercia. Escolhemos como ponto crítico o valor de  $f$  onde essa derivada apresenta uma divergência (ver apêndice A). As figuras 5.8 e 5.9 descrevem os principais resultados para as estruturas bidimensionais e aleatórias regulares para  $\bar{q} = 3$ , em que a simetria  $C_{3v}$  leva a um comportamento crítico completamente diferente do caso  $\bar{q} = 2$ . No entanto, o panorama da coexistência de fases é análogo aos anteriores, incluindo a existência de biestabilidade (redes complexas), cruzamento entre curvas no ponto de transição ( $f_0 = 0,14160(5)$ ) e escalonamento com o volume do sistema (estruturas regulares), reforçando assim a robustez dos nossos resultados em transições de fase descontínuas.



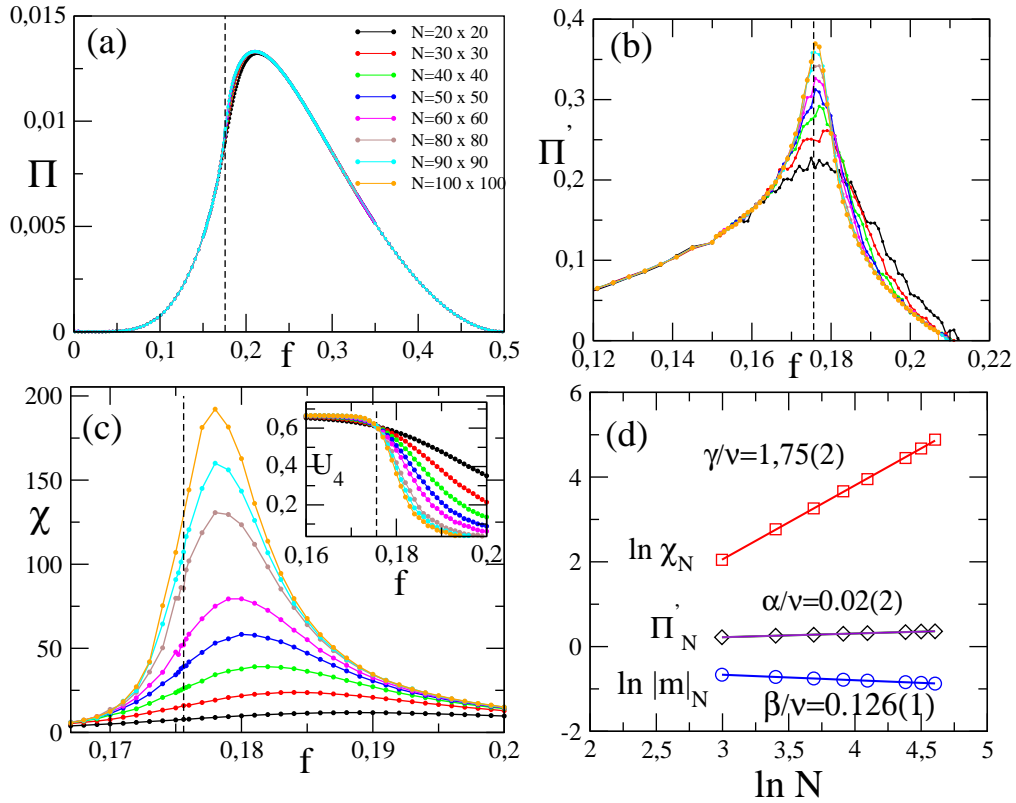


Figura 5.10: Rede regular para interações entre os primeiros, segundos e terceiros vizinhos ( $k = 12$ ) e inércia  $\theta = 0.2$ : Painéis (a), (b) e (c) mostram a produção de entropia  $\Pi$ , sua primeira derivada  $\Pi'$  e sua variância  $\chi = \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2$  contra  $f$ , respectivamente para diferentes tamanhos do sistema. "Inset": A mesma análise mas para o cumulante reduzido de quarta ordem  $U_4$  do parâmetro de ordem. Linhas tracejadas denotam o ponto crítico  $f_c$  avaliado através do cruzamento entre as curvas  $U_4$ . O painel (d) descreve o gráfico dos logaritmos de  $\chi_N$  e  $|m|_N$ , além de  $\Pi'_N$  contra o logaritmo de  $N$  em  $f = f_c$ .

### 5.4.2 Transições de fase contínuas

De acordo com as referências [33] veremos que, independentemente do valor de  $\theta$ , a transição de fase permanece contínua em estruturas regulares quando  $k < 20$  cujos expoentes críticos são consistentes com os valores  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = 7/4$  e  $1/\nu = 1$  (Ref. [42]). A figura 5.10 ilustra as características da transição de fase contínua em termos da produção de entropia. Embora a produção de entropia seja finita no ponto crítico [painel (a)], sua primeira derivada  $\Pi'$

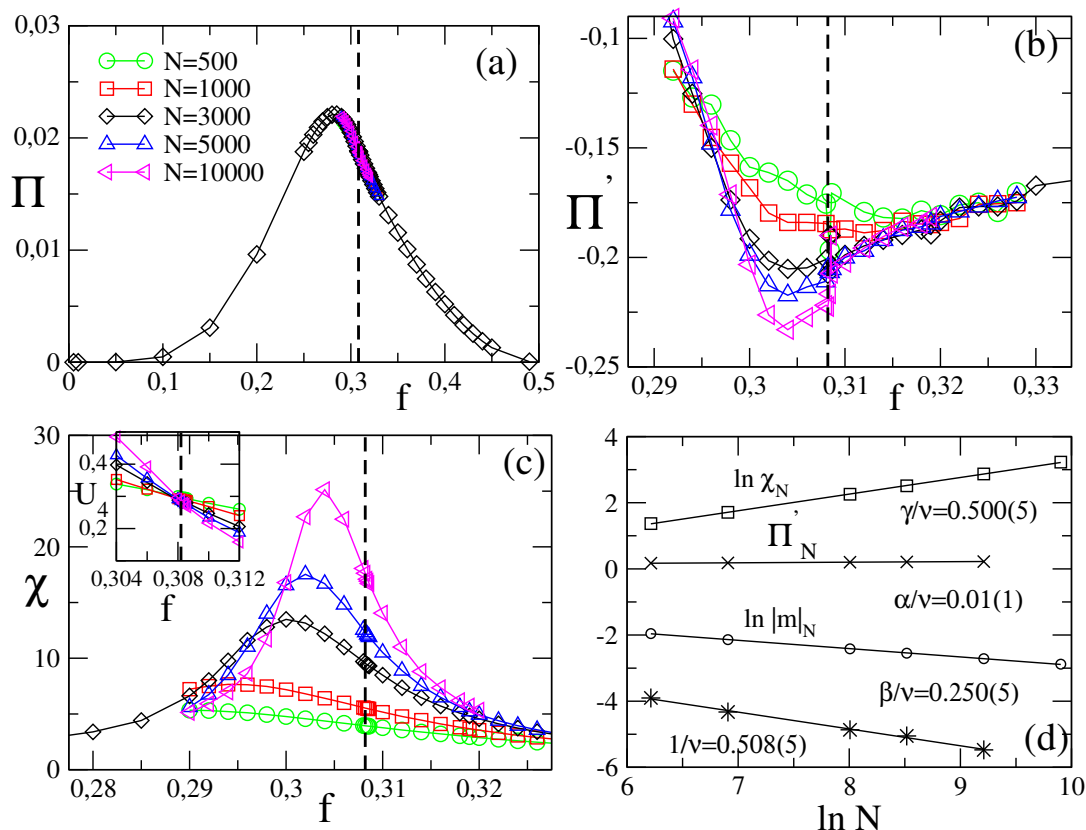


Figura 5.11: Transição contínua: rede regular aleatória (RR) com  $k = 12$  e  $\theta = 0$ : Painéis (a) – (c) mostram a produção de entropia  $\Pi$ , sua primeira derivada  $\Pi'$  e a variância do parâmetro de ordem  $\chi$  em função de  $f$  para diferentes tamanhos do sistema, respectivamente. "Inset": o cumulante reduzido de quarta ordem  $U_4$  contra  $f$ . Linhas tracejadas denotam o ponto crítico  $f_c$  obtido por meio do cruzamento entre as curvas do cumulante  $U_4$ . O painel (d) descreve o gráfico dos logaritmos de  $\chi_N$ ,  $|m|_N$  e  $(f_c - f_N)$ , além de  $\Pi'_N$  contra o logaritmo de  $N$  em  $f = f_c$ .

aumenta sem limites quando  $N \rightarrow \infty$  [painel (b)]. Para sistemas finitos, por outro lado, ela se torna limitada devido aos efeitos de tamanho finito. Conforme descrevemos anteriormente  $\Pi'_N$  calculada no ponto crítico aumenta com  $\ln N$ , consistente com uma divergência logarítmica na qual se associa ao expoente  $\alpha = 0$  [painel (d)]. A figura 5.11 estende esta análise para estruturas de redes aleatórias. Nesse caso, o comportamento crítico segue os expoentes  $\beta/\nu = 1/4$ ,  $\gamma/\nu = 1/2$  e  $1/\nu = 1/2$  [46], diferente dos valores  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$  e  $1/\nu = 2$  de campo médio e aqueles de redes regulares.

Em semelhança ao caso bidimensional,  $\Pi(f_c)$  é finito na criticalidade e sua primeira

derivada  $\Pi'_N(f_c)$  também aumenta com  $\ln N$ , novamente consistente com uma divergência logarítmica e portanto com o expoente  $\alpha = 0$ . Assim como na seção (4.1), nossas conclusões são reforçadas novamente considerando a relação de escala  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ . Tendo os valores de  $\beta$  e  $\gamma$ , nós reobtemos em ambos os casos  $\alpha = 0$ . Por fim, o caso de  $\bar{q} = 3$  é caracterizado em redes regulares pelos expoentes críticos  $\beta = 1/9$  e  $\gamma = 13/9$ . De acordo com a relação de escala, o expoente associado à produção de entropia deve ser  $\alpha = 1/3$ . Muito recentemente, o valor  $\alpha = 0,32(2)$  foi confirmado a partir de simulações numéricas em Ref. [48], de acordo com nossas previsões teóricas. Portanto, a presente análise não apenas coloca em bases mais firmes o comportamento da produção de entropia na criticalidade, mas também estende a relação de escala para transições de fase de não-equilíbrio.

## CAPÍTULO 6

---

### Conclusões

---

Apresentamos, com base em considerações gerais, uma descrição das características da produção de entropia para transições de fase contínuas e descontínuas (praticamente inexploradas). Nossos principais resultados demonstram que as transições de fase contínuas e descontínuas podem ser classificadas através de características específicas (bem definidas) da produção de entropia no domínio da teoria de campo médio e além dela.

Nossa abordagem inclui aspectos fundamentais que compreendem a influência da topologia da rede e propriedades de simetria. Na coexistência de fases, a produção de entropia apresenta uma descontinuidade em um único ponto (e bem definido) em redes regulares, enquanto um "loop" histerético aparece em redes complexas. O primeiro caso também é caracterizado pela existência de um ponto de cruzamento entre as curvas da produção de entropia para distintos tamanhos do sistema.

Por outro lado, apresentamos uma descrição geral da produção de entropia no contexto da teoria do campo médio para sistemas com simetria  $Z_2$ . Nosso trabalho é um passo relevante

na tentativa de unificar a descrição das transições de fase em sistemas fora do equilíbrio através de um importante indicador da irreversibilidade do sistema. Como um comentário final, seria interessante considerar o comportamento crítico da produção de entropia (e suas quantidades associadas) para sistemas que exibem outras simetrias e classes de universalidade, para verificar a confiabilidade das ideias de tamanho finito apresentadas aqui.

## APÊNDICE A

---

### Alguns resultados numéricos

---

Neste apêndice mostraremos, por meio de gráficos, alguns resultados obtidos tanto por métodos analíticos como por simulações numéricas.

#### A.1 Resultados de campo médio

A figura [A.3](#) contém as curvas analíticas da produção de entropia obtidas usando a aproximação de campo médio para um sistema com conectividade  $k = 12$  e diferentes valores de inercia. Observa-se a descontinuidade evitável no valor crítico, o que implica uma divergência na primeira derivada. Também podemos perceber que a teoria de campo médio prediz a biestabilidade para valores grandes de inercia.

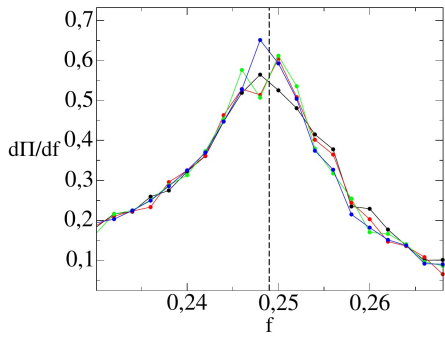
## A.2 Resultados numéricos

Nesta seção mostraremos alguns resultados obtidos de simulações em redes regulares e complexas para o modelo do votante majoritário. Em todos os casos consideramos o mesmo valor  $k = 20$  para a vizinhança.

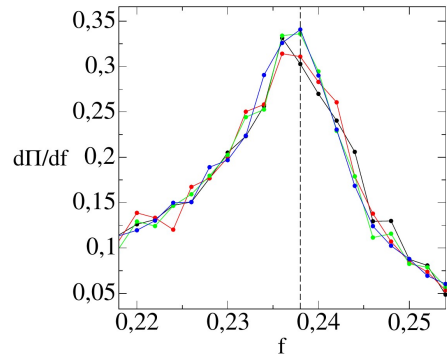
Primeiramente, na figura (A.1) podemos visualizar o comportamento da derivada  $\frac{d\Pi}{df}$  na rede regular como função do parâmetro de controle. Foram estudados sistemas com diferentes valores de inercia  $\theta$  e diferentes tamanhos  $N$ . O tamanho do sistema está dado por o número total  $N$  de sítios da rede. Os pontos pretos, vermelhos, verdes e azuis correspondem a sistemas de tamanho  $N = 4900$ ,  $N = 6400$ ,  $N = 8100$  e  $N = 10000$ , respectivamente. Observa-se como essa derivada diverge na criticalidade para todos os valores de inercia estudados.

Na figura A.2 se mostram os resultados de simulações na rede complexa usando o valor de inercia  $\theta = 0,1667$ . Os gráficos à direita representam a produção de entropia e à esquerda a derivada  $\frac{d\Pi}{df}$ , sempre em função de  $f$ . Para este valor de inercia, não se apresenta biestabilidade para nenhum dos sistemas estudados. O cor preto representa a trajetória de "ida" e o cor vermelho a trajetória de "volta".

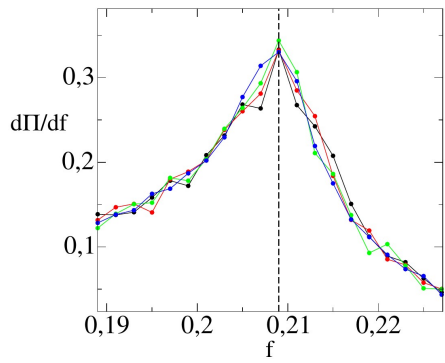
As figuras A.4, A.5 e A.6 mostram os resultados para a rede complexa. Observa-se, em ambas grandezas, a biestabilidade para valores maiores de inercia. As linhas tracejadas verticais pretas e vermelhas marcam o valor de  $f_c$ , calculados a partir do análise da parâmetro de ordem.



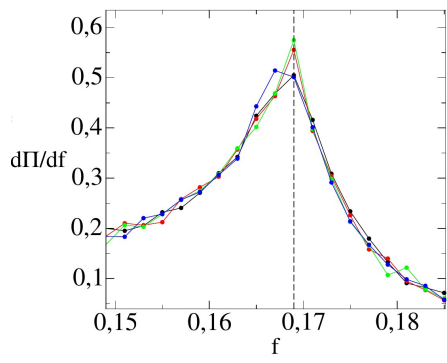
(a)  $\theta = 0,0500$



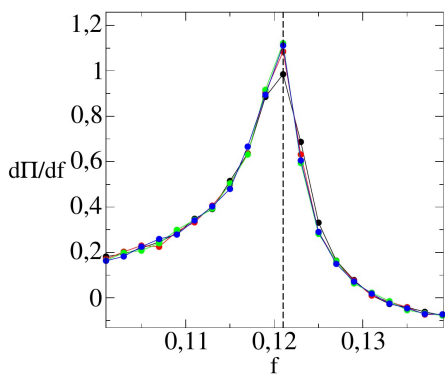
(b)  $\theta = 0,0910$



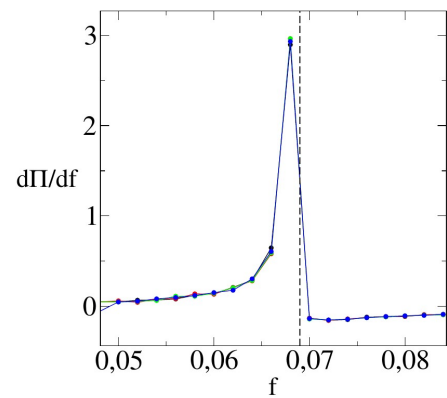
(c)  $\theta = 0,1667$



(d)  $\theta = 0,2310$



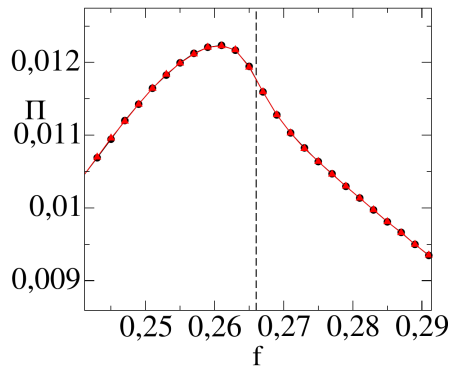
(e)  $\theta = 0,2850$



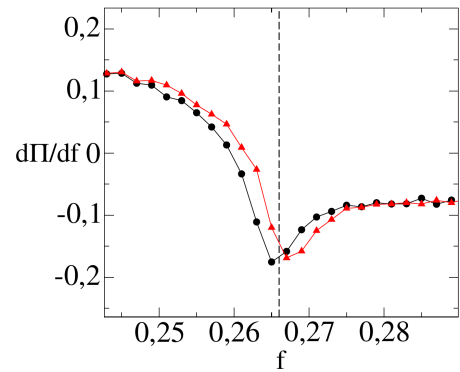
(f)  $\theta = 0,3334$

Figura A.1: Rede regular para sistemas com conectividade  $k = 20$ , diferentes tamanhos e valores de inercia.

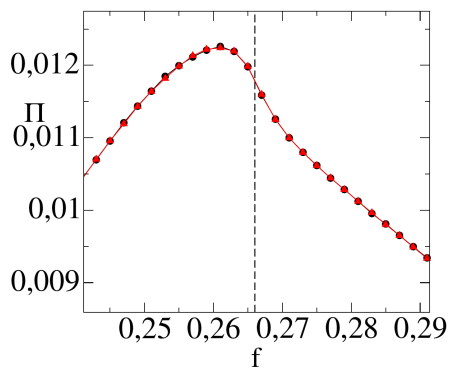




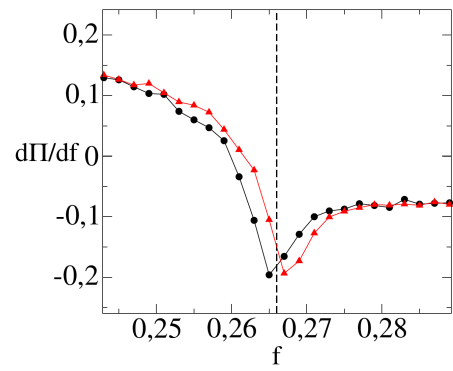
(a)  $N = 4900$



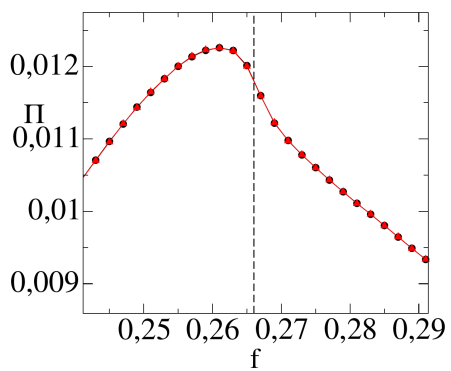
(b)  $N = 4900$



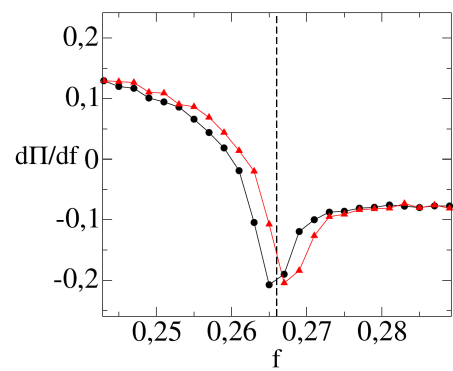
(c)  $N = 6400$



(d)  $N = 6400$



(e)  $N = 8100$



(f)  $N = 8100$

Figura A.2: Rede complexa com  $\theta = 0.1667$

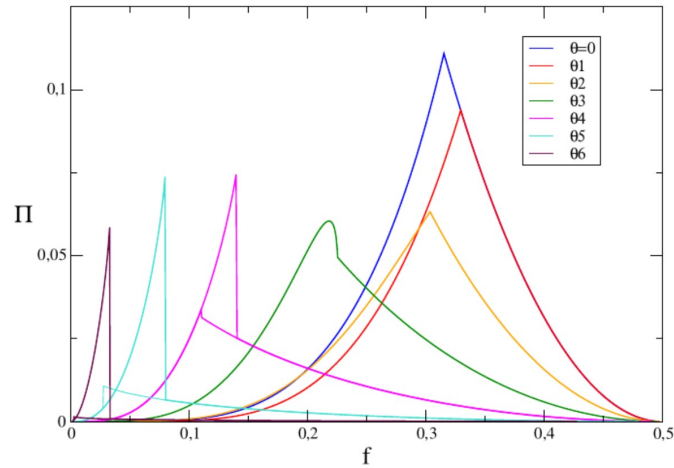


Figura A.3: Produção de entropia calculada analiticamente usando a aproximação de campo médio para sistemas com conectividade  $k = 12$  e diferentes valores de inercia.

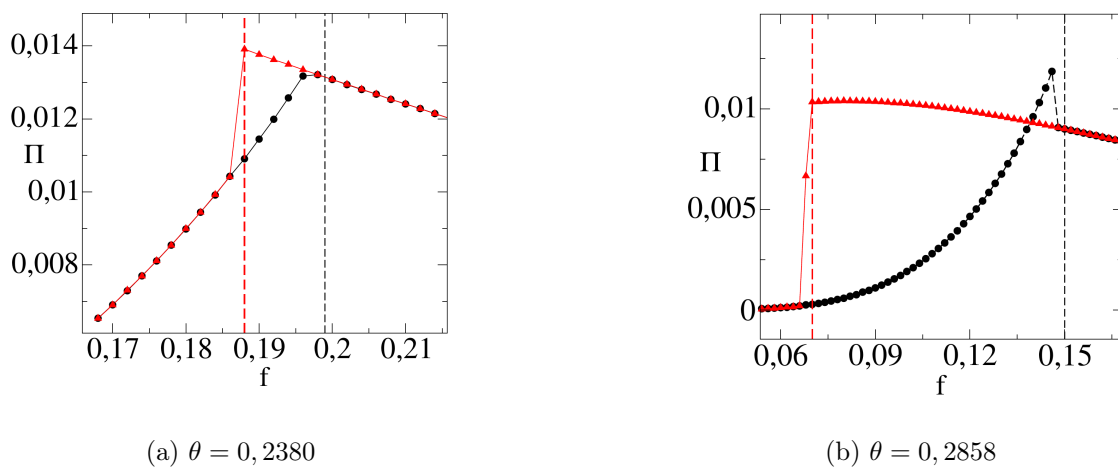
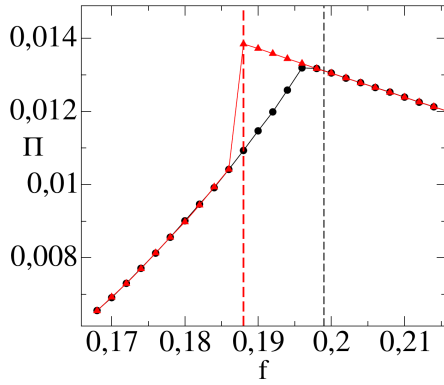
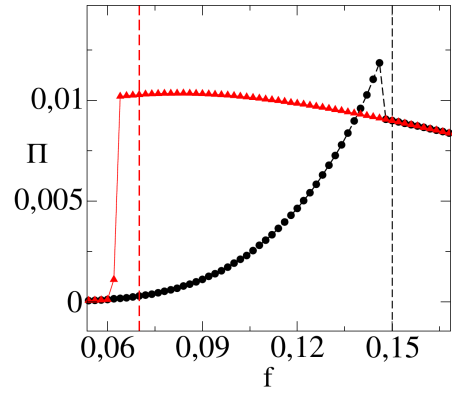


Figura A.4: Rede complexa de tamanho  $N = 4900$ .

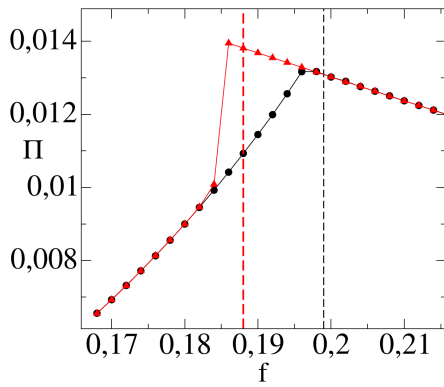


(a)  $\theta = 0,2380$

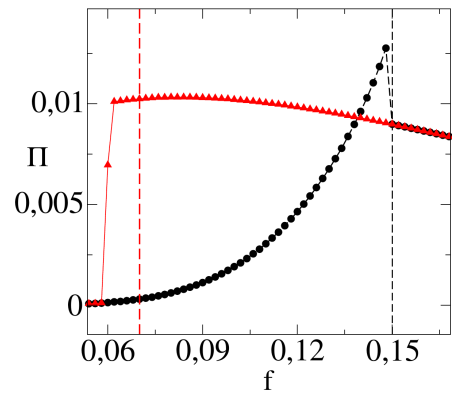


(b)  $\theta = 0,2858$

Figura A.5: Rede complexa de tamanho  $N = 6400$ .



(a)  $\theta = 0,2380$



(b)  $\theta = 0,2858$

Figura A.6: Rede complexa de tamanho  $N = 8100$ .

## APÊNDICE B

---

### Alguns cálculos analíticos

---

Como vimos anteriormente na seção 2.5, podemos obter uma expressão para a dependência temporal da magnetização  $\frac{dm}{dt} = -2\langle\sigma_i w_i(\sigma)\rangle$ . No caso do modelo do Votante Majoritário esta expressão fica:

$$\frac{dm}{dt} = -m + (1 - 2f) \left\langle S \left( \sum_{j=1}^k \sigma_j + \frac{k\theta\sigma_i}{1-\theta} \right) \right\rangle$$

onde  $\sigma_i$  representa o valor do spin local e o valor medio da função sinal esta dado por  $\langle S(X) \rangle = P(X_+) - P(X_-)$ , só que agora a probabilidade  $P(X_{\pm})$  não está dada pela Eq. (4.10). Isto porque consideramos a dependência do spin local  $\sigma_i$ , portanto, para alguns modelos onde existe esta dependência, devemos reescrever ela da seguinte forma

$$P(X_{\pm}) \approx \sum_{n=\lceil n_+ \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^{n+1} p_{\mp}^{k-n} + \sum_{n=\lceil n_- \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n+1}. \quad (\text{B.1})$$

Note-se que o primeiro termo de  $P(X_{\pm})$  considera as configurações associadas ao valor do spin local  $\sigma_i = \pm 1$ , por outro lado, o segundo termo considera as configurações associadas

ao valor contrario  $\sigma_i = \mp 1$ . Os limites inferiores  $n_{\pm}$  estão vinculados ao valor do spin local e dependem do modelo em questão. Para o caso do modelo do votante majoritário com inercia, podemos calcular estes limites reescrevendo o argumento da função sinal  $X = (1 - \theta) \sum_{j=1}^k \sigma_j/k + \theta\sigma_i$  de uma forma mais conveniente. O fator  $\frac{1-\theta}{k}$  é sempre positivo para qualquer um dos valores possíveis de  $k$  e  $\theta$ , portanto, este fator não influi no sinal do argumento  $X$ , de forma que podemos reescrever como

$$X = N_+ - N_- + \frac{k\theta\sigma_i}{1-\theta}, \quad (\text{B.2})$$

sendo  $N_+(N_-)$  a quantidade de vizinhos com valor  $+1(-1)$ . Levando e conta que o número total de vizinhos é  $k$ , podemos usar a expressão  $N_+ + N_- = k$  na Eq. (B.2) ficando

$$X = 2N_+ - k + \frac{k\theta\sigma_i}{1-\theta}. \quad (\text{B.3})$$

Em seguida, vamos calcular os valores de  $N_+$  para que o argumento  $X$  seja positivo, sendo que, o limite inferior  $n_+(n_-)$  será o menor destes valores quando o spin local é  $\sigma_i = +1(-1)$ .

$$2N_+ - k + \frac{k\theta\sigma_i}{1-\theta} > 0 \quad (\text{B.4})$$

de onde obtemos

$$N_+ > \frac{k}{2} \left( \frac{1 - \theta - \theta\sigma_i}{1 - \theta} \right) \quad (\text{B.5})$$

Finalmente, avaliando para  $\sigma_i = +1$  e  $\sigma_i = -1$ , obtemos

$$n_+ = \frac{k}{2} \left( \frac{1 - 2\theta}{1 - \theta} \right) \quad \text{e} \quad n_- = \frac{k}{2(1 - \theta)} \quad (\text{B.6})$$

respectivamente. A inercia é uma quantidade contínua, portanto, os valores de  $n_{\pm}$  também serão contínuos. Para corrigir isto na Eq. (B.1) temos utilizado a função teto, garantindo que o somatório inicie pelo menor valor inteiro maior ou igual que  $n_{\pm}$ . De forma análoga, podemos obter os mesmos resultados considerando os valores de  $N_-$  para que o argumento  $X$  seja negativo.

Estudaremos agora sistemas no regime de grandes conectividades. Nestes casos, cada termo da Eq. (B.1) se aproxima a um termo gaussiano com média  $kp_{\pm}$  e variância  $\sigma^2 = kp_+p_-$ , portanto

$$\sum_{n=\lceil n_+ \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^{n+1} p_{\mp}^{k-n} \rightarrow p_{\pm} \int_{n_+}^k \frac{e^{-\left(\frac{\ell - kp_{\pm}}{\sqrt{2\sigma}}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}} d\ell$$

e

$$\sum_{n=\lceil n_- \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n+1} \rightarrow p_{\mp} \int_{n_-}^k \frac{e^{-\left(\frac{\ell-kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}} d\ell$$

Escreveremos agora essas integrais de uma forma equivalente fazendo a mudança de variáveis

$\zeta_{\pm} = \frac{\ell-kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}$ , ficando

$$p_{\pm} \int_{n_+}^k \frac{e^{-\left(\frac{\ell-kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}} d\ell = \frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_{\zeta_{\pm}^{n_+}}^{\zeta_{\pm}^k} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta \quad (\text{B.7})$$

$$p_{\mp} \int_{n_-}^k \frac{e^{-\left(\frac{\ell-kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}} d\ell = \frac{p_{\mp}}{\sqrt{\pi}} \int_{\zeta_{\pm}^{n_-}}^{\zeta_{\pm}^k} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta \quad (\text{B.8})$$

onde  $\zeta_{\pm}^{n_{\pm}} = \frac{n_{\pm}-kp_{\pm}}{\sqrt{2}\sigma}$  e  $\zeta_{\pm}^k = \frac{k(1-p_{\pm})}{\sqrt{2}\sigma}$ . Separando as integrais em dois termos ficam

$$\frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_{\zeta_{\pm}^{n_{\pm}}}^{\zeta_{\pm}^k} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta = \frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta_{\pm}^k} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta - \frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta_{\pm}^{n_{\pm}}} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta \quad (\text{B.9})$$

escritas desta forma, podemos perceber que essas integrais representam funções erro, definidas como  $\text{erf}(x) = 2 \int_0^x e^{-t^2} dt / \sqrt{\pi}$ , de forma que,

$$\frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta_{\pm}^k} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta - \frac{p_{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta_{\pm}^{n_{\pm}}} e^{-\zeta_{\pm}^2} d\zeta = \frac{p_{\pm}}{2} [\text{erf}(\zeta_{\pm}^k) - \text{erf}(\zeta_{\pm}^{n_{\pm}})] \quad (\text{B.10})$$

Agora podemos escrever a Eq. (B.1) por meio da função erro, ficando

$$\begin{aligned} P(X_{\pm}) &\approx \frac{p_{\pm}}{2} [\text{erf}(\zeta_{\pm}^k) - \text{erf}(\zeta_{\pm}^{n_{\pm}})] \\ &+ \frac{p_{\mp}}{2} [\text{erf}(\zeta_{\pm}^k) - \text{erf}(\zeta_{\pm}^{n_{\mp}})] \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

de onde, usando a expressão (4.9), obtemos

$$\begin{aligned} \langle S(X) \rangle &\approx \frac{p_+}{2} [\text{erf}(\zeta_+^k) - \text{erf}(\zeta_+^{n_+})] + \frac{p_-}{2} [\text{erf}(\zeta_+^k) - \text{erf}(\zeta_+^{n_-})] \\ &- \frac{p_-}{2} [\text{erf}(\zeta_-^k) - \text{erf}(\zeta_-^{n_+})] - \frac{p_+}{2} [\text{erf}(\zeta_-^k) - \text{erf}(\zeta_-^{n_-})] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

podemos simplificar ainda mais desenvolvendo os fatores  $n_+ - kp_{\pm}$ ,  $n_- - kp_{\pm}$  e  $\sqrt{2}\sigma = \sqrt{2kp_+p_-}$  fazendo uso de  $p_{\pm} = \frac{1 \pm m}{2}$ , ficando

$$n_+ - kp_{\pm} = \frac{k}{2} \left( \frac{1-2\theta}{1-\theta} \right) - k \left( \frac{1 \pm m}{2} \right) = \frac{k}{2} \left( -\frac{\theta}{1-\theta} \mp m \right) \quad (\text{B.13})$$

$$n_- - kp_{\pm} = \frac{k}{2} \left( \frac{1}{1-\theta} \right) - k \left( \frac{1 \pm m}{2} \right) = \frac{k}{2} \left( \frac{\theta}{1-\theta} \mp m \right) \quad (\text{B.14})$$

$$\sqrt{2kp_+p_-} = \sqrt{\frac{k(1+m)(1-m)}{2}} = \sqrt{\frac{k}{2}(1-m^2)} \quad (\text{B.15})$$

Agora podemos ver que

$$\zeta_-^{n_+} = -\zeta_+^{n_-} = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left( -\frac{\theta}{1-\theta} + m \right) \quad \text{e que} \quad \zeta_+^{n_+} = -\zeta_-^{n_-} = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left( -\frac{\theta}{1-\theta} - m \right)$$

portanto a Eq. (B.12) finalmente fica

$$\begin{aligned} \langle S(X) \rangle &\approx \frac{1+m}{4} [\text{erf}(\zeta_+^k) - \text{erf}(\zeta_-^k) + 2\text{erf}(\zeta_-^{n_-})] \\ &+ \frac{1-m}{4} [\text{erf}(\zeta_+^k) - \text{erf}(\zeta_-^k) - 2\text{erf}(\zeta_+^{n_-})] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Note-se que  $\zeta_{\pm}^k$  é diretamente proporcional a  $\sqrt{k}$ , portanto para valores suficientemente grandes de  $k$ , podemos assumir que  $\text{erf}(\zeta_{\pm}^k) \approx 1$ , de esta forma a expressão anterior fica

$$\begin{aligned} \langle S(X) \rangle &\approx \frac{1+m}{2} \text{erf}(\zeta_-^{n_-}) - \frac{1-m}{2} \text{erf}(\zeta_+^{n_-}) \\ &= \frac{1}{2} [\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) - \text{erf}(\zeta_+^{n_-})] + \frac{m}{2} [\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) + \text{erf}(\zeta_+^{n_-})] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Substituindo esta expressão na magnetização para caso estacionário  $m = (1-2f)\langle S(X) \rangle$ , obtemos a seguinte equação

$$m = \frac{1-2f}{2} \{ [\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) - \text{erf}(\zeta_+^{n_-})] + m [\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) + \text{erf}(\zeta_+^{n_-})] \}$$

Finalmente obtemos a magnetização

$$m = \frac{(1-2f)[\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) - \text{erf}(\zeta_+^{n_-})]}{2 - (1-2f)[\text{erf}(\zeta_-^{n_-}) + \text{erf}(\zeta_+^{n_-})]}$$

Correspondente com o resultado (5.12) onde

$$\zeta_-^{n_-} = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left[ \frac{\theta}{1-\theta} + m \right] = a \quad \text{e} \quad \zeta_+^{n_-} = \sqrt{\frac{k}{2-2m^2}} \left[ \frac{\theta}{1-\theta} - m \right] = b.$$

## APÊNDICE C

---

### Artigo publicado

---

Finalmente anexo o artigo publicado recentemente por nosso grupo de pesquisa na revista **Physical Review E**. Este artigo representa uma parte importante do meu trabalho em estes dois anos de mestrado. Por outro lado, o fato de ser publicado em uma revista de alto impacto proporciona maior visibilidade e aceitação dos nossos resultados.



## Entropy production as a tool for characterizing nonequilibrium phase transitions

C. E. Fernández Noa, Pedro E. Harunari, M. J. de Oliveira, and C. E. Fiore

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 05314-970 São Paulo, Brazil*



(Received 21 November 2018; published 3 July 2019)

Nonequilibrium phase transitions can be typified in a similar way to equilibrium systems, for instance, by the use of the order parameter. However, this characterization hides the irreversible character of the dynamics as well as its influence on the phase transition properties. Entropy production has been revealed to be an important concept for filling this gap since it vanishes identically for equilibrium systems and is positive for the nonequilibrium case. Based on distinct and general arguments, the characterization of phase transitions in terms of the entropy production is presented. Analysis for discontinuous and continuous phase transitions has been undertaken by taking regular and complex topologies within the framework of mean-field theory (MFT) and beyond the MFT. A general description of entropy production portraits for  $Z_2$  (“up-down”) symmetry systems under the MFT is presented. Our main result is that a given phase transition, whether continuous or discontinuous has a specific entropy production hallmark. Our predictions are exemplified by an icon system, perhaps the simplest nonequilibrium model presenting an order-disorder phase transition and spontaneous symmetry breaking: the majority vote model. Our work paves the way to a systematic description and classification of nonequilibrium phase transitions through a key indicator of system irreversibility.

DOI: [10.1103/PhysRevE.100.012104](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.012104)

### I. INTRODUCTION

Thermodynamics states that while certain quantities including the energy are ruled by a conservation law, the entropy is not conserved. In the general case of a system coupled with an environment, the time variation of entropy  $dS/dt$  has two contributions: the flux to the reservoir  $\Phi$  and the entropy production rate  $\Pi$  [1,2], that is,

$$\frac{dS}{dt} = \Pi(t) - \Phi(t). \quad (1)$$

Since in the steady state the time variation of  $S$  vanishes,  $dS/dt = 0$ ,  $\Pi = \Phi$  and all entropy produced must be delivered to the environment.

The entropy production has been the subject of considerable interest in physics [3–7], population dynamics [8], biological systems [9], experimental verification [10], and others. A microscopic definition of entropy production, in the realm of systems described by a master equation, is given by the Schnakenberg expression [11]:

$$\Pi(t) = \frac{k_B}{2} \sum_{ij} \{W_{ji}P_i(t) - W_{ij}P_j(t)\} \ln \frac{W_{ji}P_i(t)}{W_{ij}P_j(t)}, \quad (2)$$

where  $W_{ji}$  is the transition rate from the state  $i$  to state  $j$  with associated probability  $P_i(t)$  at the time  $t$ , and  $W_{ij}$  denotes the reverse transition rate. Equation (2) implies that  $\Pi(t)$  is always nonnegative because  $(x - y) \ln(x/y) \geq 0$ , vanishing when the detailed balance  $W_{ij}P_j - W_{ji}P_i = 0$  is fulfilled. Thus, it distinguishes equilibrium from nonequilibrium systems. Defining the nonequilibrium entropy by  $S(t) = -k_B \sum_i P_i(t) \ln P_i(t)$ , a microscopic relation for the flux  $\Phi(t)$

is obtained:

$$\Phi(t) = k_B \sum_{ij} W_{ij} \ln \frac{W_{ij}}{W_{ji}} P_j(t). \quad (3)$$

Equation (3) constitutes an alternative (and advantageous) formula for evaluating the steady entropy production, since it corresponds to an average that can be evaluated from the transition rates and it will be the subject of analysis in the present paper.

Despite the recent advances of stochastic thermodynamics, a fundamental question is whether entropy production can be utilized as a reliable tool for typifying nonequilibrium phase transitions. Different studies have been undertaken in this direction [4,7,8,12–18]. Some of them [4,7,8,18] indicate that continuous phase transitions can be identified by a divergence of the first derivative of  $\Pi$  whose associated exponent plays an analogous role to the specific heat. Other features, such as stochastic thermodynamics of many-particle systems at phase transitions to a synchronized regime have also been investigated [14,16,17]. Despite such a progress, a theoretical description of the entropy production at phase transition regimes, mainly in the context of discontinuous phase transition, has not been satisfactorily established yet.

In this paper we present a characterization of phase transitions in terms of the entropy production. Our study embraces the analysis of continuous and discontinuous phase transitions within the framework of mean-field theory (MFT) and beyond MFT. It is based on general considerations about the probability distribution related to the phase coexistence. The description of continuous phase transition takes into account the extension of finite-size scaling ideas and hyperscaling relations to nonequilibrium systems. A general description of entropy production for  $Z_2$  (“up-down”) symmetry systems in the realm of MFT is presented. Our main result is that a given

phase transition, whether continuous or discontinuous has a specific entropy production signature. As an example of our theoretical prescriptions, we shall consider the majority vote (MV) model with inertia [19–23]. It constitutes an ideal laboratory, since it presents continuous and discontinuous phase transition in both regular [19,23] and complex structures [20–22] displaying quite distinct features and universality classes. Thus, the existence of different entropy production hallmarks at phase transition regimes can be conveniently compared with those obtained from order parameter analysis.

This paper is organized as follows: In Sec. II we derive a general mean-field description for  $Z_2$  (“up-down”) symmetry systems. Sec. III presents a description of entropy production at phase transition regimes beyond the MFT. In Sec. IV, we exemplify our theoretical findings in the inertial MV model and Conclusions are performed in Sec. V.

## II. GENERAL MEAN-FIELD DESCRIPTION FOR $Z_2$ (“UP-DOWN”) SYMMETRY SYSTEMS

We are dealing with phase transitions in systems with up-down symmetry. Heuristically, a continuous phase transition in such class of models is described by the general logistic order-parameter equation:

$$\frac{d}{dt}m = a(q - q_c)m - bm^3, \quad (4)$$

where  $q$  denotes the control parameter and  $a$  and  $b$  are positive constants. It has two steady solutions:  $m^{(D)} = 0$  (disordered phase) and  $m^{(S)} = \pm\sqrt{a(q - q_c)/b}$  (ordered phase), stable for low and large values of  $q$ , respectively. The phase transition follows the mean-field exponent  $\beta_{mf} = 1/2$  and  $m$  vanishes as  $m \sim e^{a(q - q_c)t}$  for  $q < q_c$  when  $m \ll 1$ . Conversely, one requires the inclusion of an additional term  $+cm^5$  for reporting discontinuous phase transitions, leading to the following expression [23]:

$$\frac{d}{dt}m = a(q_b - q)m - bm^3 + cm^5, \quad (5)$$

where  $c > 0$  [23]. It exhibits three steady-state solutions  $m$ :  $m^{(D)} = 0$ ,  $m^{(S)}$  and  $m^{(U)}$ . At  $q = q_f = (b^2/4ac) - q_b$ ,  $m$  jumps from  $m_1 \equiv m^{(S)}(q_f)$  to  $m^{(D)} = 0$ . For  $q > q_f$ ,  $m$  behaves as  $m \sim e^{a(q_b - q)t}$  for  $m_0 \ll 1$  irrespective the initial condition  $m_0 > 0$ . The frontier  $q = q_b$  separates the exponential vanishing of  $m \sim e^{a(q_b - q)t}$  ( $q > q_b$ ) from the convergence to a well definite  $m_2 \equiv m^{(S)}(q)$  ( $q < q_b$ ) when  $m_0 \ll 1$ . For  $q_b < q < q_f$  (hysteretic branch),  $m$  behaves as follows:  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(D)}$  if  $m_0 < m^{(U)}$ ,  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(S)}$  if  $m_0 > m^{(U)}$  and only for  $m_0 = m^{(U)}$  one has  $m(t \rightarrow \infty) \rightarrow m^{(U)}$ . For this reason  $m^{(U)}$  is an unstable solution.

Since the above phenomenological relations hide the irreversible character which we are interested, we derive a general expression for the entropy production taking into account a generic dynamics with up-down symmetry. Each site  $i$  of an arbitrary lattice topology is attached to a spin variable  $\sigma_i$  that assumes the values  $\pm 1$ . The transition rate is given by the expression  $w(\sigma_i) = \frac{1}{2}[1 - q\sigma_i g(X)]$ , with  $q$  denoting the control parameter and  $g(X)$  expressing the generic dependence on a local neighborhood of  $k$  spins. Only two assumptions regarding  $g(X)$  are required. The first is that due

to the  $Z_2$  symmetry, it depends on the sign of the local spin neighborhood (odd function). Also, taking into account that  $w(\sigma_i)$  is constrained between 0 and 1, the product  $|qg(X)| \leq 1$  for all values of  $X$ . These assumptions allow us to rewrite  $g(X)$  as  $g(X) = |g(X)|S(X)$ , where  $S(X)$  denotes the sign function:  $\text{sign}(X) = 1(-1)$  and 0, according to  $X > 0(< 0)$  and  $X = 0$ , respectively, where  $|g(X)|$  gets restricted between 0 and  $|g(k)|$ .

From the master equation, one finds that the time evolution of order parameter  $m = \langle \sigma_i \rangle$  is given by

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_i \rangle = -2\langle \sigma_i w(\sigma_i) \rangle. \quad (6)$$

In the steady state,  $m = q\langle |g(X)|S(X) \rangle$ . For the evaluation of  $\Pi$ , one requires the calculation of  $w_i(\sigma) \ln[w_i(\sigma)/w_i(\sigma^j)]$  given by

$$\frac{1}{2}[\sigma_i S(X) - q|g(X)|S^2(X)] \ln \frac{1 - q|g(X)|}{1 + q|g(X)|}. \quad (7)$$

The reverse transition rate  $w_i(\sigma^j)$  was obtained by performing the transformation  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$  resulting in  $w_i(\sigma^j) = \frac{1}{2}[1 + q\sigma_i g(X)]$ . The one-site MFT consists of rewriting the joint probability  $P(\sigma_i, \dots, \sigma_k)$  as a product of one-site probabilities  $P(\sigma_i) \dots P(\sigma_k)$ , from which one derives closed relations for the correlations and then the relevant quantities can be obtained as function of the control parameters. Since the main marks of critical and discontinuous phase transitions are not expected to depend on the particularities of  $g(X)$ , it is reasonable, within the MFT, to replace the averages in terms of an effective  $\bar{g}$  given by

$$m = q\langle |g(X)|S(X) \rangle \rightarrow q\bar{g}\langle S(X) \rangle, \quad (8)$$

$$\frac{1}{2}\left\langle \sigma_i S(X) \ln \frac{1 - q|g(X)|}{1 + q|g(X)|} \right\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} \langle \sigma_i S(X) \rangle, \quad (9)$$

and

$$\frac{1}{2}\left\langle |g(X)|S^2(X) \ln \frac{1 - q|g(X)|}{1 + q|g(X)|} \right\rangle \rightarrow \frac{\bar{g}}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} \langle S^2(X) \rangle. \quad (10)$$

At this level of approximation the steady entropy production then reads

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - q\bar{g}}{1 + q\bar{g}} [m\langle S(X) \rangle - q\bar{g}\langle S^2(X) \rangle]. \quad (11)$$

Above averages are calculated by decomposing the mean sign function in two parts:

$$\langle S(X) \rangle = \langle S(X_+) \rangle - \langle S(X_-) \rangle, \quad (12)$$

and

$$\langle S^2(X) \rangle = \langle S(X_+) \rangle + \langle S(X_-) \rangle, \quad (13)$$

with each term being approximated by

$$\langle S(X_{\pm}) \rangle = \pm \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n}, \quad (14)$$

where  $\lceil \dots \rceil$  is the ceiling function and for  $S(X_+)S(X_-)$  the term  $C_n^k$  takes into account the number of possibilities of a neighborhood with  $n$  spins in the  $+1[-1]$  states with associated probabilities  $p_{\pm} = (1 \pm m)/2$ . Equations (12) and (13) become simpler in the regime of large connectivities. To see

this, we first note that each term of the binomial distribution approaches a Gaussian with mean  $kp_{\pm}$  and variance  $\sigma^2 = kp_+p_-$ , so that

$$\begin{aligned} \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k C_n^k p_{\pm}^n p_{\mp}^{k-n} &\rightarrow \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{k/2}^k e^{-\frac{(\ell-kp_{\pm})^2}{2\sigma^2}} d\ell \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \left\{ \operatorname{erf} \left[ \frac{k(1-p_{\pm})}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{erf} \left[ \frac{k(1/2-p_{\pm})}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (15)$$

where  $\operatorname{erf}(x) = 2 \int_0^x e^{-t^2} dt / \sqrt{\pi}$  denotes the error function. Since for large  $k$ ,  $\operatorname{erf}[k(1-p_{\pm})/\sqrt{2}\sigma] \rightarrow 1$  ( $\langle S^2(X) \rangle \rightarrow 1$ ), the expressions for  $m$  and  $\Pi$  read

$$m = q\bar{g} \left[ \operatorname{erf} \left( \sqrt{\frac{k}{2}} m \right) \right], \quad (16)$$

and

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{1-q\bar{g}}{1+q\bar{g}} \left[ \frac{m^2}{q\bar{g}} - q\bar{g} \right], \quad (17)$$

respectively. At the vicinity of the critical point  $m$  behaves as  $m \sim (q - q_c)^{1/2}$ . So that one reaches the following expressions for the entropy production:

$$\Pi \sim \frac{1}{2} \ln \frac{1+q\bar{g}}{1-q\bar{g}} \left[ \frac{q_c - q}{q\bar{g}} + q\bar{g} \right], \quad (18)$$

for  $q < q_c$ , and

$$\Pi = \frac{q\bar{g}}{2} \ln \frac{1+q\bar{g}}{1-q\bar{g}}, \quad (19)$$

for  $q > q_c$ . Hence, the entropy production is continuous at the critical point  $q_c$ , with  $\Pi_c = \frac{q_c\bar{g}}{2} \ln \frac{1+q_c\bar{g}}{1-q_c\bar{g}}$ . However, its first derivative  $\Pi' \equiv d\Pi/dq$  is discontinuous, jumping from

$$\Pi' = \frac{q_c\bar{g}^2}{1-q_c^2\bar{g}^2} + \frac{1-q_c\bar{g}^2}{2q_c\bar{g}} \ln \frac{1-q_c\bar{g}}{1+q_c\bar{g}}, \quad (20)$$

when  $q \rightarrow q_c^-$ , to

$$\Pi' = \frac{q_c\bar{g}^2}{1-q_c^2\bar{g}^2} - \frac{\bar{g}}{2} \ln \frac{1-q_c\bar{g}}{1+q_c\bar{g}}, \quad (21)$$

when  $q \rightarrow q_c^+$ , whose discontinuity of  $-\frac{\bar{g}}{2q_c\bar{g}} \ln \frac{1-q_c\bar{g}}{1+q_c\bar{g}}$  is associated with the critical exponent  $\alpha_{mf} = 0$ . Remarkably, having the classical exponents  $\beta_{mf}$  and  $\gamma_{mf}$  (evaluated from the order-parameter variance [24]), we see that the hyperscaling relation  $\alpha_{mf} + 2\beta_{mf} + \gamma_{mf} = 2$  is satisfied, reinforcing that the criticality is signed by the jump in the first derivative of  $\Pi$ , in close similarity to the specific heat discontinuity for equilibrium systems.

Above MFT entropy production also predicts correctly the signatures at discontinuous phase transitions. According to Eq. (5),  $m$  jumps from  $m_1 \equiv m^{(S)}(q_f)$  to 0 at  $q = q_f = (b^2/4ac) - q_b$  and thereby from Eq. (17) the entropy production will jump from

$$\frac{1}{2} \left( q_f\bar{g} - \frac{m_1^2}{q_f\bar{g}} \right) \ln \left[ \frac{1+q_f\bar{g}}{1-q_f\bar{g}} \right] \quad (22)$$

to

$$\frac{q_f\bar{g}}{2} \ln \left[ \frac{1+q_f\bar{g}}{1-q_f\bar{g}} \right]. \quad (23)$$

Conversely,  $m$  jumps from 0 to  $m_2 \equiv m^{(S)}(q_b)$  at  $q = q_b$ , and hence  $\Pi$  will jump from

$$\frac{q_b\bar{g}}{2} \ln \left[ \frac{1+q_b\bar{g}}{1-q_b\bar{g}} \right] \quad (24)$$

to

$$\frac{1}{2} \left( q_b\bar{g} - \frac{m_2^2}{q_b\bar{g}} \right) \ln \left[ \frac{1+q_b\bar{g}}{1-q_b\bar{g}} \right]. \quad (25)$$

The bistable behavior in the entropy production not only discerns continuous and discontinuous phase transitions but also it properly locates the hysteretic loop. In the Sec. IV, we show explicit results by taking an example of system with  $Z_2$  symmetry.

### III. BEYOND THE MEAN-FIELD THEORY

The analysis will be splitted in three parts: discontinuous transitions in regular lattices, complex networks, and continuous phase transitions.

#### A. Discontinuous phase transitions

##### 1. Regular lattices

Distinct works [21–23,25] have attested that discontinuous phase transitions yield stark differences in regular and complex networks. In the former case, it emerges through sudden changes of  $|m|$ , its variance  $\chi = N[\langle m^2 \rangle - |m|^2]$  and other quantities whose scaling behavior goes with the system volume  $N$  [see, e.g., Figs. 5(b)–5(d)] [22,23,25]. At the vicinity of an arbitrary discontinuous phase transition point  $q_0$ , in which the correlation length is finite, the probability distribution can be approximately written down as a sum of two independent Gaussians, from which one extracts a scaling behavior with the system volume [23,25–27]. More specifically, the probability distribution is given by  $P_N(m) = P_N^{(o)}(m) + P_N^{(d)}(m)$ , where  $P_N^{(o)}(m)$  is associated to the phase  $\alpha$  (with order-parameter  $m_{\alpha}$ ):

$$P_N^{(\alpha)}(m) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp\{N[\Delta q m - (m - m_{\alpha})^2/(2\chi_{\alpha})]\}}{[F_o'(\Delta q; N) + F_d'(\Delta q; N)]}. \quad (26)$$

Parameters  $\chi_{\alpha}$  and  $\Delta q \equiv q_N - q_0$  correspond to the distribution width and the “distance” to the coexistence point  $q_0$ , respectively. Although in principle the assumption of two independent Gaussians can not describe properly a “weak” discontinuous phase transition, in which an overlap between  $P_N^{(o)}(m)$  and  $P_N^{(d)}(m)$  is expected, its reliability has been verified in several examples of nonequilibrium phase transitions with distinct properties [25,26], even in some cases in which the overlap is observed.

Despite the steady entropy production displaying a non-trivial dependence on the system features and on generic correlations of type  $\langle \sigma_i \rangle$ ,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ ,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} \rangle$  and so on, Eq. (3) depicts it as the ensemble average of a fluctuating quantity, enabling resorting to the central limit theorem ideas. The generality of order-parameter distribution for tackling the

phase coexistence [25] and Eq. (3) setting up  $\Phi$  as an ensemble average suggests the extension of a similar relationship for the steady entropy production. More concretely, we assume that  $P_N(\phi) = P_N^{(o)}(\phi) + P_N^{(d)}(\phi)$ , where  $P_N^{(\alpha)}(\phi)$  is given by

$$P_N^{(\alpha)}(\phi) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp\{N[\Delta q\phi - (\phi - \phi_\alpha)^2/(2\bar{\chi}_\alpha)]\}}{[F_o(\Delta q; N) + F_d(\Delta q; N)]},$$

where each Gaussian is centered at  $\phi_\alpha$  with  $\bar{\chi}_\alpha$  being the width of the  $\alpha$ -th peak. Given that  $P_N(\phi)$  is normalized, each term  $F_{o(d)}$  then reads  $F_{o(d)}(\Delta q; N) = \sqrt{\bar{\chi}_{o(d)}} \exp\{N\Delta q[\phi_{o(d)} + \bar{\chi}_{o(d)}\Delta q/2]\}$ . The steady entropy production  $\Pi = \Phi$  is straightforwardly calculated from  $P_N(\phi)$ ,  $\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} \phi P_N(\phi) d\phi$ , reading

$$\Pi = \sum_{\sigma=o,d} \frac{(\phi_\sigma + \bar{\chi}_\sigma \Delta q) F_\sigma(\Delta q; N)}{F_o(\Delta q; N) + F_d(\Delta q; N)}. \quad (27)$$

Close to the phase coexistence, in which  $\Delta q$  is expected to be small, the terms  $O(\Delta q)$  dominate over  $O(\Delta q)^2$  and Eq. (27) can be approximately rewritten as

$$\Pi = \frac{\sqrt{\bar{\chi}_o}\phi_o + \sqrt{\bar{\chi}_d}\phi_d e^{-N[(\phi_o - \phi_d)\Delta q]}}{\sqrt{\bar{\chi}_o} + \sqrt{\bar{\chi}_d} e^{-N[(\phi_o - \phi_d)\Delta q]}}. \quad (28)$$

Note that the Eq. (28) reproduces the jump from  $\phi_o(\phi_d)$  when  $\Delta q \rightarrow 0_{-(+)}$  and  $N \rightarrow \infty$  (a third reason for assuming  $P_N(\phi)$  as a sum of independent Gaussians). Remarkably, the curves for different values of  $N$  cross at the transition point  $\Delta q = 0$  with

$$\Pi^* = \frac{\sqrt{\bar{\chi}_o}\phi_o + \sqrt{\bar{\chi}_d}\phi_d}{\sqrt{\bar{\chi}_o} + \sqrt{\bar{\chi}_d}}. \quad (29)$$

The crossing point clearly discerns continuous and discontinuous phase transitions and can be used as an indicator of the phase coexistence, as shown in Figs. 5 and 8 and in Ref. [28] (Figs. 7 and 8) for a chemical reaction model.

## 2. Complex networks

Distinct works [21–23,29] have stated that in contrast to regular structures, the phase coexistence in complex networks is akin to the MFT (see, e.g., Fig. 1), whose behavior is generically characterized by the existence of a hysteretic loop and bistability. The order parameter will present a spinodal line in which along the hysteretic loop the system will converge to one of the possible steady states depending on the initial configuration. For locating the “forward transition” point  $q_f$ , the system is initially placed in an ordered configuration and the tuning parameter  $q$  is increased by an amount  $\delta$ , whose final state at  $q$  is used as the initial condition at  $q + \delta$  until the order-parameter discontinuity is viewed. Conversely, the “backward transition” point  $q_b$  is pinpointed by starting from the disordered phase and decreasing  $q$  (also by the increment  $\delta$ ) until the order-parameter jump takes place. Entropy production also captures these features, which can be viewed through a general argument for order-disorder phase transitions. The order-parameter behaves as  $\langle \sigma_i \rangle \sim N^{-1/2}$  in the disordered phase and then a  $n$ -th correlation will behave as  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_{i+n} \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+1} \rangle \dots \langle \sigma_{i+n} \rangle = N^{-n/2}$ . Hence in the thermodynamic limit, all correlations will vanish in the disordered phase and  $\Pi$  will depend solely on control parameters.

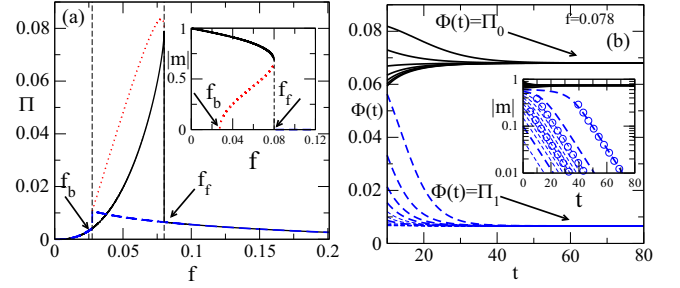


FIG. 1. Panel (a) depicts the bistable behavior of  $\Pi$  for  $\theta = 0.43$  and  $k = 12$ . Continuous (dashed) curves denote the stable solutions for  $m_0 > m^{(U)}$  ( $m_0 < m^{(U)}$ ). They coincide for  $f > f_f$  and  $f < f_b$  and are different for  $f_b < f < f_f$ . Dotted curves correspond to the unstable solutions for  $f_b < f < f_f$  with  $m = m^{(U)}(f)$  if  $m_0 = m^{(U)}(f)$ . Inset: The same but for the order-parameter. In panel (b) the time evolution of flux  $\Phi(t)$  for distinct initial configurations and  $f = 0.078$ . Inset: The time evolution of  $m$ , where circles correspond to the function  $m \sim e^{\alpha(f_b - f)t}$ , valid for  $m_0 \ll 1$ .

Contrariwise,  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_{i+n} \rangle$  presents a well defined (nonzero) value in the ordered phase and  $\Pi$  depends not only on the control parameters but also on correlations. So that, the jumps at  $q_f$  (from  $m_1 \equiv m(q_f) \neq 0$  to 0) and  $q_b$  (from 0 to  $m_2 \equiv m(q_b) \neq 0$ ), commonly viewed in terms of order-parameter, will also be present in the entropy production. The presence of bistability implies that  $\Phi(t)$  will converge to one of the two well defined values, since along the hysteretic branch the system behaves just like the disordered or the ordered phase, depending on the initial condition. Although the above argument is valid for a generic order-disorder phase transition, it is expected to describe phase transitions different from the order-disorder ones, provided the order-parameter and correlations also present a hysteretic behavior. Thereby, both cases reveal that the entropy production behavior also embraces phase coexistence traits commonly treated in terms of the order-parameter.

## B. Continuous phase transitions

Albeit characterized by the vanishing of the order-parameter  $|m|$  and algebraic divergences of other quantities at the criticality, the behavior of quantities become rounded due to finite size effects. According to the standard finite-size scaling (FSS), they behave as  $|m| = N^{-\beta/\nu} \tilde{f}(N^{1/\nu}|\epsilon|)$ ,  $\chi = N^{\gamma/\nu} \tilde{g}(N^{1/\nu}|\epsilon|)$  with  $\tilde{f}$  and  $\tilde{g}$  being scaling functions and  $\epsilon = (q - q_c)/f_c$ . Typically,  $q_c$  is located by choosing a quantity that intersects for distinct system sizes. For order-disorder phase transitions, the quantity  $U_4$  fulfills the above requirement, whose crossing value  $U_0^*$  depends on the lattice topology and the symmetry properties. Some papers [4,5] have described similar scaling relation for the entropy production. Close to the criticality  $\Pi$  and its first derivative  $\Pi' \equiv d\Pi/dq$  behave as  $\Pi - \Pi_c \sim (q_c - q)^{1-\alpha}$  and  $\Pi' \sim (q_c - q)^{-\alpha}$ , respectively. Above expression states that  $\Pi$  is continuous, but the derivative  $\Pi'$  diverges at  $q = q_c$ . Due to finite-size effects, it is reasonable to assume that  $\Pi'$  behaves as  $\Pi' = N^{\alpha/\nu} \tilde{h}(N^{1/\nu}|\epsilon|)$ , with  $\tilde{h}$  being an appropriate scaling function. From the exponents  $\beta$ ,  $\alpha$  and  $\gamma$ , we wish to check

whether the hyperscaling relation  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ , fulfilled in the MFT approach, is also satisfied beyond the MFT. Here we extend the entropy production analysis for continuous phase transitions in random complex topologies.

#### IV. APPLICATIONS: THE INERTIAL MAJORITY VOTE (MV) MODEL

##### A. Model and definitions

The previous predictions will be exemplified in one of the simplest nonequilibrium phase transition model with steady states, the majority vote (MV) model [19,20], defined as follows: Each site  $i$  of an arbitrary lattice can assume  $\bar{q}$  possible integer values ( $\sigma_i = 0, 1, \dots, \bar{q} - 1$ ). The dynamics is ruled by the fraction  $\bar{w}_X$  of neighboring nodes in each one of the  $\bar{q}$  states plus a local spin dependence  $\theta\delta(\sigma'_i, \sigma_i)$  (an inertial term),  $\bar{w}_{\sigma'_i} = (1 - \theta) \sum_{j=1}^k \delta(\sigma'_i, \sigma_j)/k + \theta\delta(\sigma'_i, \sigma_i)$ , with  $\sigma_j$  denoting the spin of each one of the  $k$  nearest neighbors of the site  $i$ . With probability  $1 - f$  ( $f$  being the misalignment parameter) the local spin  $\sigma_i$  changes to the majority neighborhood spin  $\sigma'_i$  and with complementary probability  $f$  the majority rule is not followed. For  $\bar{q} = 2$  and  $\theta = 0$ , the MV becomes equivalent to the Ising model in contact with two heat reservoirs, one being a source of heat, at infinite temperature, and the other a sink of heat, at zero temperature [19]. The contact with the first occurs with a given probability and with the second with the complementary probability. Recent studies [21–23] revealed that large inertia shifts the phase transition to a discontinuous one for all values of  $\bar{q}$ . An order-disorder phase transition arises by increasing  $f$ , whose classification depends on  $\theta$  and the lattice connectivity  $k$ . For low  $\bar{q}$  ( $\bar{q} < 4$ ) and  $\theta = 0$  (inertialess regime), it is always continuous [19–21], but the increase of  $\bar{q}$  modifies the symmetry properties ( $Z_2$  and  $C_{3v}$  for  $\bar{q} = 2$  and 3, respectively), leading to different sets of critical exponents. The phase transition becomes discontinuous for larger  $k$ 's when  $\theta$  goes up [21,23]. A given  $n$ th order parameter moment  $\langle m^n \rangle$  is calculated through the quantity  $\langle m^n \rangle = \langle |\sum_{i=1}^N e^{2\pi i \sigma_i / \bar{q}} / N|^n \rangle$ , with  $\langle \dots \rangle$  denoting the ensemble average. The  $n = 1$  is a reliable order-parameter since  $m > 0$  ( $= 0$ ) in the ordered (disordered) phases. The steady entropy production rate is calculated from Eq. (3) through the expression

$$\Pi = \frac{k_B}{N} \left\langle \sum_{j=1}^{\bar{q}-1} \sum_{i=1}^N w_i(\sigma) \ln \frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^j)} \right\rangle, \quad (30)$$

with  $w_i(\sigma)$  and  $w_i(\sigma^j)$  being the transition rate and its reverse, respectively. The latter is evaluated by taking transformation of  $\sigma_i$  to one of its  $\bar{q} - 1$  distinct values. For  $\bar{q} = 2$ , the transition rate above is more conveniently rewritten by taking the transformation  $\sigma_i \rightarrow 2\sigma_i - 1$ , so that  $w_i(\sigma)$  and  $m$  reads  $w_i(\sigma) = \frac{1}{2}[1 - (1 - 2f)\sigma_i S(X)]$  and  $m = \langle \sigma_i \rangle$ , respectively, where  $S(X)$  again denotes the sign function evaluated over the local neighborhood plus the inertia  $X = (1 - \theta) \sum_{j=1}^k \sigma_j / k + \theta\sigma_i$ . Thus, in such case  $X$  not only depends on the neighborhood, but also on the local spin  $\sigma_i$ . The steady-state expression for the absolute  $m$  reads

$$m = (1 - 2f)\langle S(X) \rangle. \quad (31)$$

To evaluate  $\Pi$  from Eq. (30) we take the ratio between  $w_i(\sigma)$  and its reverse  $w_i(\sigma^j)$  given by

$$\frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^j)} = \frac{1 - (1 - 2f)\sigma_i S\left[\sum_{j=1}^k \sigma_j + \frac{k\theta}{1-\theta}\sigma_i\right]}{1 + (1 - 2f)\sigma_i S\left[\sum_{j=1}^k \sigma_j - \frac{k\theta}{1-\theta}\sigma_i\right]}. \quad (32)$$

Inspection of the ratio above reveals that only local configurations with  $|\sum_{j=1}^k \sigma_j|$  greater than  $k\theta/(1 - \theta)$  will contribute for  $\Pi$ , since only in these cases the ratio is different from 1. Thereby, it can be rewritten as  $w_i(\sigma)/w_i(\sigma^j) = \sigma_i S'(X) \ln[f/(1 - f)]$ , with  $S'(X)$  being the sign function evaluated only over the subspace of local configurations in which the ratio is different from 1 (for  $\theta = 0$ , it reduces to the usual sign function). The expression for  $\Pi$  is then given by

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1 - f} [\langle \sigma_i S'(X) \rangle - (1 - 2f)\langle S'^2(X) \rangle], \quad (33)$$

in such a way that it depends on the averages  $\langle \sigma_i S'(X) \rangle$  and  $\langle S'^2(X) \rangle$ .

##### B. MFT results

The (general) results from Sec. II can be straightforwardly applied for the inertialess regime simply by replacing  $q$  and  $g(X)$  for  $1 - 2f$  and  $S(X)$ , respectively. Although the main aspects of phase transitions are expected not depending on  $\theta$ , in such case it is more convenient to use Eq. (33), due to the dependence on the local spin. The MFT expression for  $m$  reads

$$m = (1 - 2f) \left[ \langle S[X_+] \rangle \left( \frac{1 + m}{2} \right) - \langle S[X_-] \rangle \left( \frac{1 - m}{2} \right) \right]. \quad (34)$$

As in Sec. II, for large  $k$  the  $\langle S[X_{\pm}] \rangle$  can be calculated from Eq. (14), but the lower limits  $n_{\pm}$  depend on  $\theta$  and are given by

$$n_+ = \frac{k(1 - 2\theta)}{2(1 - \theta)} \quad \text{and} \quad n_- = \frac{k}{2(1 - \theta)}.$$

Note that both  $n_{\pm}$  reduce to  $k/2$  when  $\theta = 0$ . By performing similar calculations that those from Sec. II, Eq. (34) in the regime of large connectivities becomes

$$m = \frac{(1 - 2f)[\text{erf}(a) - \text{erf}(b)]}{2 - (1 - 2f)[\text{erf}(a) + \text{erf}(b)]}, \quad (35)$$

where  $\text{erf}(x)$  denotes the error function, with  $a$  and  $b$  given by

$$a = \sqrt{\frac{k}{2}} \left[ \frac{\theta}{1 - \theta} + m \right] \quad \text{and} \quad b = \sqrt{\frac{k}{2}} \left[ \frac{\theta}{1 - \theta} - m \right]. \quad (36)$$

As performed previously, the one-site MFT for  $\Pi$  is obtained by replacing  $\langle \sigma_i S'(X) \rangle$  for  $\langle \sigma_i \rangle \langle S'(X) \rangle$ , so that

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1 - f} [m \langle S'(X) \rangle - (1 - 2f)\langle S'^2(X) \rangle]. \quad (37)$$

Figure 1 summarizes the main results for the former case for  $k = 12$  and distinct inertia values. As predicted in Sec. II, the order parameter jumps at  $f_f$  and  $f_b$  and the discontinuities are also presented in the entropy production. Along the hysteretic branch,  $\Phi(t)$  converges to two well defined values

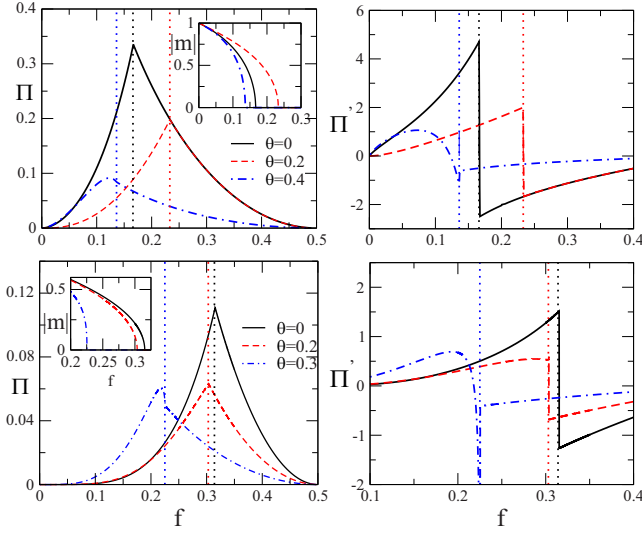


FIG. 2. Left and right panels: Steady entropy production  $\Pi$  and its derivative  $\Pi'$  versus  $f$  for low  $\theta$ ,  $k = 4$  (top) and  $k = 12$  (bottom), respectively. Inset: the corresponding order parameter versus  $f$ . Dotted lines denote the associated critical points.

which are  $\Pi_1 \equiv \Pi(f, \theta)$  and  $\Pi_0 \equiv \Pi(m^{(S)}, f, \theta)$  in the region  $f_b < f < f_f$ . The time evolution of  $m$  follows theoretical prediction  $m \sim e^{a(f_b - f)^b}$  for  $m_0 \ll 1$  (see inset symbols).

Figure 2 exemplifies the main results for continuous phase transitions. In all cases, the entropy production increases until a maximum at  $f = f^*$  and then decreases for  $f > f^*$ . For the inertialess case or even the low  $\theta$ ,  $f^* = f_c$ . This can be understood by resorting the findings from Sec. II [for  $q = 1 - 2f$  and  $g(X) = S(X)$ ] in which in the regime of large  $k$ ,  $m$  and  $\Pi$  are given by

$$m = (1 - 2f)\text{erf}\left(m\sqrt{\frac{k}{2}}\right), \quad (38)$$

and

$$\Pi = \frac{1}{2} \ln \frac{f}{1-f} \left[ \frac{m^2}{1-2f} - (1-2f) \right], \quad (39)$$

respectively. At the vicinity of the critical point, where  $m$  is expected to be small, the right side of Eq. (38) can be expanded in Taylor series, allowing us to rewrite  $m$  solely in terms of  $f$  and  $k$ :

$$m \sim \sqrt{\frac{12}{k}}(f_c - f)^{1/2}, \quad (40)$$

where  $\beta_{mf} = 1/2$  is the critical exponent and

$$f_c = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \right\}, \quad (41)$$

is the critical point. From Eq. (40),  $\Pi$  behaves as  $\Pi \approx \frac{1-2f}{2} \ln \frac{1-f}{f} \left[ 1 - \frac{12}{k} \frac{f_c - f}{(1-2f)^2} \right]$  and  $\Pi = \frac{1-2f}{2} \ln \frac{1-f}{f}$  for  $f \rightarrow f_c^-$  and  $f > f_c$ , respectively, and hence  $\Pi$  is continuous at the criticality. Despite this, its first derivative  $\Pi'$  jumps from  $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \ln \frac{1+\sqrt{\frac{\pi}{2k}}}{1-\sqrt{\frac{\pi}{2k}}}$  to  $\frac{12}{\pi} \ln \frac{1+\sqrt{\frac{\pi}{2k}}}{1-\sqrt{\frac{\pi}{2k}}}$ , hence consistent with the

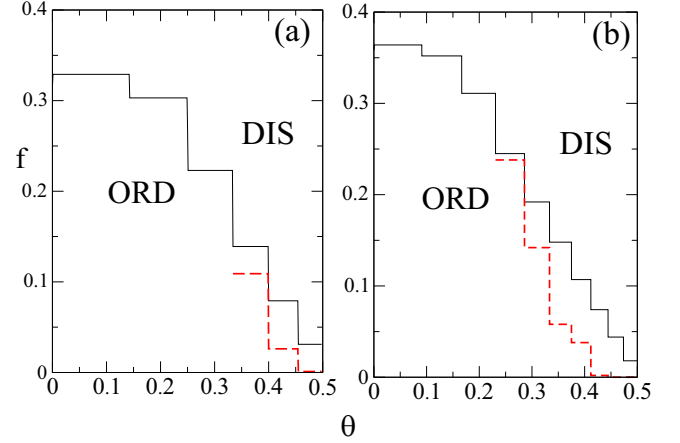


FIG. 3. Panels (a) and (b) show the mean-field phase diagrams for  $k = 12$  and  $k = 20$  through analysis of entropy production. ORD (DIS) denote the ordered (disordered) phases, whereas continuous and dashed lines, correspond to the values of  $f_f$  and  $f_b$ , respectively. They coincide for continuous transitions, but are different for discontinuous ones.

exponent  $\alpha_{mf} = 0$ . By increasing  $\theta$  (see, e.g.,  $\theta = 0.4$  and  $0.3$  for  $k = 4$  and  $k = 12$ , respectively), the maximum of  $\Pi$  does not coincide with the jump of  $\Pi'$  nor the order-parameter vanishing. Thereby the present results (together with the general description in Sec. II) unifies the description in the MFT context, in which the criticality is not necessarily marked by a peak in the entropy production but related to a peculiar behavior of its first derivative.

Last, in Fig. 3 we plot the phase diagrams for  $k = 12$  and  $k = 20$  evaluated through the distinct entropy production signatures. We see that both phase transition location and its classification are in full agreement with those obtained from order-parameter analysis (see, e.g., Fig. 1 in Ref. [21]).

A final comment concerns that the limit  $k \rightarrow \infty$  corresponds to the complete graph regime. In this case, the expression for  $m$  and  $\Pi$  become

$$m = \frac{(1-2f)[S(\frac{\theta}{1-\theta} + m) - S(\frac{\theta}{1-\theta} - m)]}{2 - (1-2f)[S(\frac{\theta}{1-\theta} + m) + S(\frac{\theta}{1-\theta} - m)]}, \quad (42)$$

and

$$\Pi = \ln \frac{f}{1-f} \{m - (1-2f)Y_p\}, \quad (43)$$

respectively, where  $Y_p = \{(1+m)S[m + \theta/(1-\theta)] - (1-m)S[m - \theta/(1-\theta)]\}/2$ . By combining the above relation with Eq. (42), it follows that  $\Pi = 0$  and thus there is no entropy production in the complete graph case. The reversible character of the inertialess MV in the complete graph has already been presented in Ref. [30] and our analysis not only confirms it but also extends for the inertial regime.

### C. Beyond the MFT: Numerical results in regular and complex structures

Numerical simulations will be performed for distinct lattices structures and neighborhoods. All studied structures are quenched, i.e., they do not change during the simulation

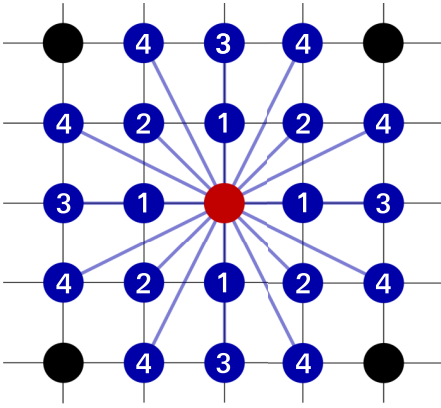


FIG. 4. Local configuration for a bidimensional lattice with central site (red) and its first (1), second (2), third (3), and fourth (4) next neighbors.

of the model. For a given network topology with  $N$ ,  $f$ , and  $\theta$  held fixed, a site  $i$  is randomly chosen, and its spin value  $\sigma_i$  is updated ( $\sigma_i \rightarrow \sigma'_i$ ) according to  $\bar{w}_{\sigma'_i} = (1 - \theta) \sum_{j=1}^k \delta(\sigma'_i, \sigma_j)/k + \theta \delta(\sigma'_i, \sigma_i)$ , with  $\sigma_j$  denoting the spin of each one of the  $k$  nearest neighbors of the site  $i$ . With probability  $1 - f$ ,  $\sigma_i$  changes to the majority neighborhood spin  $\sigma'_i$  and with complementary probability  $f$  the majority rule is not followed. A Monte Carlo (MC) step corresponds to  $N$  updating spin trials. After repeating the above dynamics a sufficient number of MC steps (in order of  $10^6$  MC steps), the system attains a nonequilibrium steady state.

Random regular networks have been generated through a configuration model scheme [31] described as follows: For a system with  $N$  nodes and connectivity  $k$ , we first start with a set of  $Nk$  points, distributed in  $N$  groups, in which each one contains exactly  $k$  points. Next, one chooses a random pairing of the points between groups and then creates a network linking the nodes  $i$  and  $j$  if there is a pair containing points in the  $i$ th and  $j$ th sets until  $Nk/2$  pairs (links) are obtained. If the resulting network configuration present a loop or duplicate links, then the above process is restarted.

The increase of connectivity  $k$  in bidimensional topologies is accomplished by extending the range of interaction neighborhood. For example,  $k = 4, 8, 12$ , and  $20$  includes interaction between the first, first and second, first to third and first to fourth next neighbors, respectively, as sketched in Fig. 4.

### 1. Discontinuous phase transitions

Figure 5 exemplifies such predictions for the MV in bidimensional lattices with  $k = 20$  and  $\theta = 0.375$ . The entropy production curves follow the theoretical predictions [continuous lines in Figs. 5(a) and 5(b)] from Eqs. (28) and (29), whose intersection among curves [Figs. 5(a) and 5(b)] occurs at  $f_0 = 0.05084(5)$ , in excellent agreement with estimates obtained from standard techniques [25],  $0.0509(1)$  (maximum of  $\chi$ ),  $0.0510(1)$  (minimum of  $U_4 = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2$ ), and  $0.0509(1)$  [equal area order-parameter distribution  $P_N(m)$ ]; see, e.g., Fig. 5(d). Collapse of all data by taking the transformation  $y = (f - f_0)N$  (inset) reinforces the reliability of

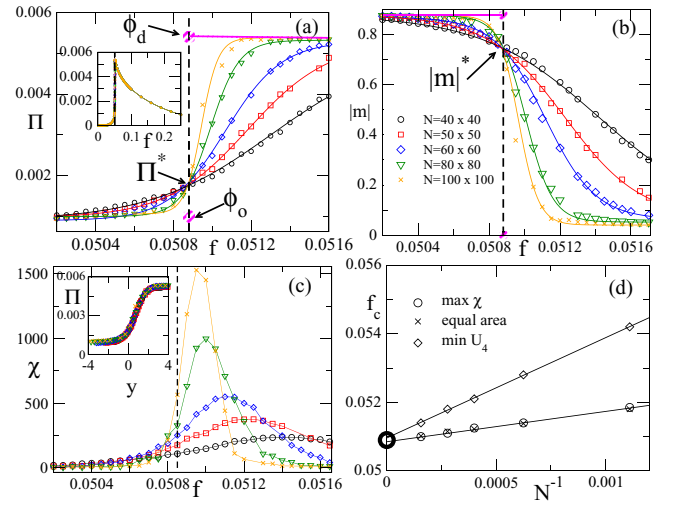


FIG. 5. Bidimensional lattice with  $k = 20$  and  $\theta = 0.375$ . Panels (a–c) show the steady  $\Pi$ , the order parameter  $|m|$  and the variance  $\chi$  versus  $f$ , respectively, for distinct system sizes at the vicinity of phase coexistence. Dashed lines: Crossing point among entropy production curves. Continuous lines in (a) and (b) correspond to the theoretical description, Eq. (28). Top and bottom insets:  $\Pi$  for larger sets of  $f$  and collapse of data by taking the relation  $y = (f - f_0)N$ , respectively. In (d), the plot of the maximum of  $\chi$ , minimum of  $U_4$  and equal area order-parameter probability distribution versus  $N^{-1}$ .

Eq. (28) for describing  $\Pi$  at the phase coexistence region. Out of the scaling regime ( $f > f_0$  for large  $N$ ),  $\Pi$  depends solely on the control parameters ( $f$  and  $\theta$  for the MV), as can be seen in the upper inset of Fig. 5. The crossing in both order parameter and entropy production not only discerns the behavior from regular and complex topologies (see, e.g., Fig. 6)

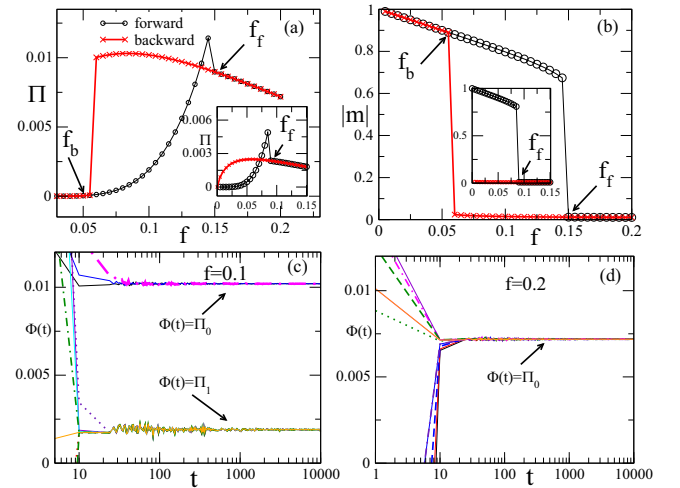


FIG. 6. Panels (a) and (b) show the steady  $\Pi$  and  $|m|$  versus  $f$  for  $k = 20$ ,  $\theta = 0.3$  for the random-regular (RR) case with  $N = 10^4$ . Black and red curves correspond to the forward and backward “trajectories,” respectively. Inset: the same but for  $\theta = 0.375$ . In panels (c) and (d), the time evolution of  $\Phi(t)$  for distinct initial conditions  $m_0$  for  $f_b < f = 0.10 < f_f$  and  $f = 0.20 > f_f$ , respectively. For larger inertia values (inset), the bistability extends over  $0 \leq f \leq f_f$ , also viewed from the behavior of steady  $\Pi$ .

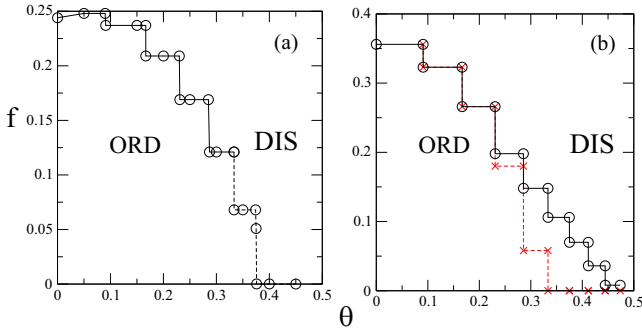


FIG. 7. Panels (a) and (b) show the phase diagrams for  $k = 20$  for regular and RR structures, respectively, through analysis of entropy production. ORD (DIS) denote the ordered (disordered) phases and continuous (dashed) lines correspond to continuous (discontinuous) phase transitions. In panel (b), circles ( $\times$ ) correspond to the increase (decrease) of  $f$  starting from an ordered (disordered) phase.

but also discontinuous and continuous phase transitions (see, e.g., Fig. 11).

Conversely, Fig. 6 depicts the main results for the MV in a random-regular (RR) topology, for  $k = 20$ ,  $\theta = 0.3$  and  $N = 10^4$ . In such case, the entropy production reveals typical signatures from aforementioned complex networks: the existence of a hysteretic loop [Fig. 6(a)] located at the interval  $f_b = 0.055 < f < f_f = 0.15$ , in full equivalence with the order-parameter branch [Fig. 6(b)] [21,23].

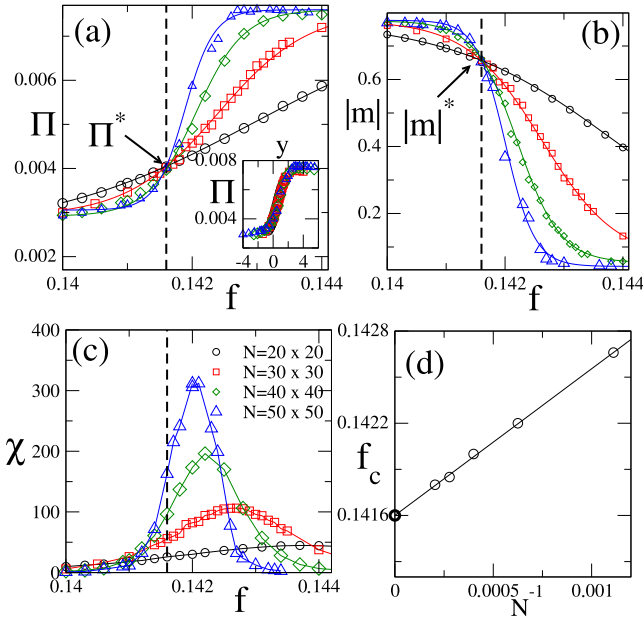


FIG. 8. Regular lattice for  $k = 20$  and  $\theta = 0.32$ : Panels (a)–(c) depict the steady  $\Pi$ , the order parameter  $|m|$ , and the variance  $\chi$  versus  $f$ , respectively, for distinct system sizes at the vicinity of phase coexistence. Dashed lines: Crossing point among entropy production curves. Continuous lines in (a) and (b) are the theoretical description presented in Eq. (28). Inset: collapse of data by taking the relation  $y = (f - f_0)N$ . In panel (d), the plot of the maximum of  $\chi$  versus  $N^{-1}$ .

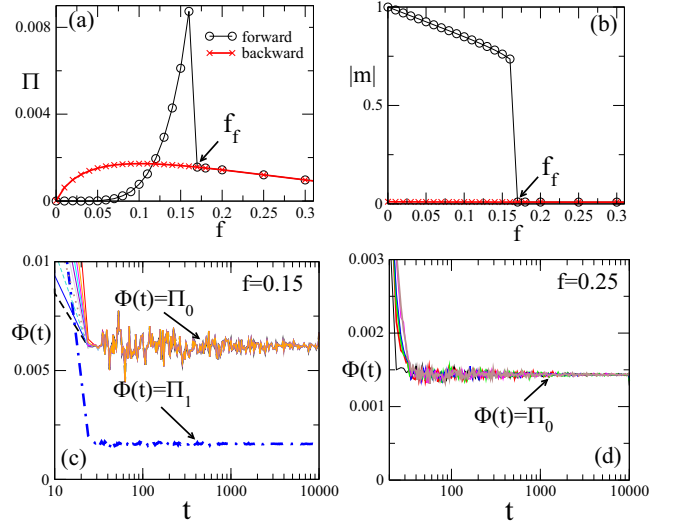


FIG. 9. For the RR structure, panels (a) and (b) show the steady  $\Pi$  and  $|m|$  versus  $f$  for  $k = 20$  and  $\theta = 0.35$ . In panels (c) and (d), the time evolution of  $\Phi(t)$  for distinct initial conditions for  $f = 0.15$  (bistable loop) and  $f = 0.25$  (disordered phase), respectively.

The phase diagrams, calculated from the entropy production analysis, are shown in Fig. 7 for both regular and complex networks.

Figures 8 and 9 depict the main results for the bidimensional and random-regular structures for  $\bar{q} = 3$ , in which the  $C_{3v}$  symmetry leads to an entirely different critical behavior from the  $\bar{q} = 2$  case. However, the phase coexistence portraits are analogous to the previous ones, including the existence of bistability (complex networks), crossing among curves at

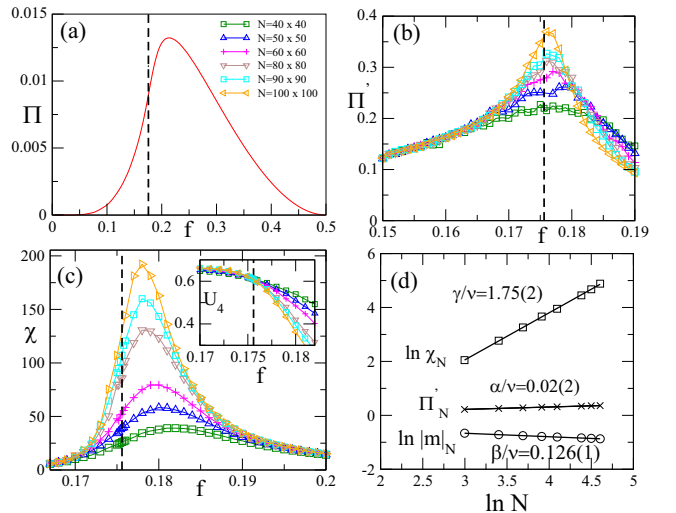


FIG. 10. Regular lattice for interactions between the first to the third next neighbors ( $k = 12$ ) and  $\theta = 0.2$ : Panels (a)–(c) depict the entropy production  $\Pi$ , its derivative  $\Pi'$  and the variance  $\chi$  versus  $f$ , respectively for distinct system sizes. Inset: the same but for fourth-order reduced cumulant  $U_4$ . Dashed lines denote the critical point  $f_c$  evaluated through the crossing among  $U_4$  curves. In panel (d), the  $\ln \chi_N$ ,  $\ln |m|_N$  and  $\ln \Pi'_N$  versus  $\ln N$  at  $f = f_c$ .



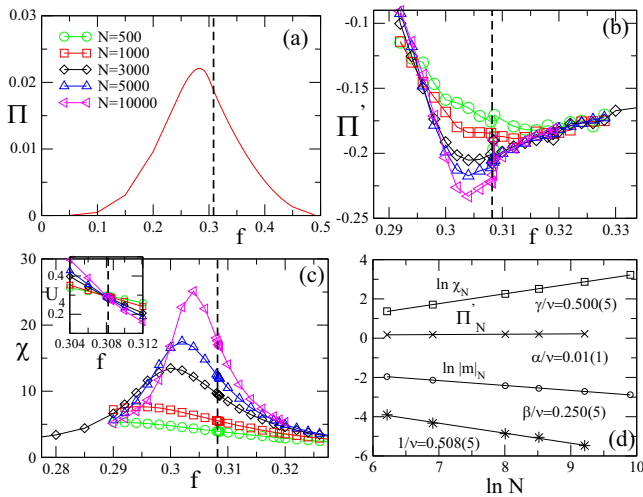


FIG. 11. Random regular (RR) network with  $k = 12$  and  $\theta = 0$ : Panels (a)–(c) show the steady entropy production  $\Pi$ , its derivative  $\Pi'$  and  $\chi$  versus  $f$  for distinct system sizes respectively. Inset: the reduced cumulant  $U_4$  vs.  $f$ . Dashed lines denote the critical point  $f_c$  evaluated through the crossing among  $U_4$  curves. Panel (d) depicts the plot of  $\ln \chi_N$ ,  $\ln |m|_N$ ,  $\Pi'_N$  and  $\ln(f_c - f_N)$  versus  $\ln N$  at  $f = f_c$ .

the transition point [ $f_0 = 0.14160(5)$ ] and scaling with the system volume (regular structures), thereby reinforcing the robustness of our findings at discontinuous phase transitions.

## 2. Continuous phase transitions

Previous results show that irrespectively the value of  $\theta$  [23], the phase transition remains continuous in regular structures when  $k < 20$  whose critical exponents are consistent with the values  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = 7/4$ , and  $1/\nu = 1$  [19]. Figure 10 illustrates continuous phase transition traits in terms of the entropy production. Although  $\Pi$  is finite in the critical point [Fig. 10(a)],  $\Pi'$  increases without limits as  $N \rightarrow \infty$  [Fig. 10(b)]. For finite systems,  $\Pi'_N$  evaluated at  $f = f_c$  increases with  $\ln N$ , consistent to a logarithmic divergence in which one associates the exponent  $\alpha = 0$  [Fig. 10(d)].

Figure 11 extends the analysis for RR structures. In that case, the critical behavior follows the exponents  $\beta/\nu = 1/4$ ,  $\gamma/\nu = 1/2$  and  $1/\nu = 1/2$  [32], rather different from  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$  and  $1/\nu = 2$  (MFT) and those from regular lattices

(Fig. 10). In similarity to the bidimensional case,  $\Pi(f_c)$  is finite and  $\Pi'_N(f_c)$  increases with  $\ln N$ , which is also consistent to a logarithmic divergence and with the exponent  $\alpha = 0$ . As in Sec. II, such conclusions are reinforced by appealing to the hyperscaling relation  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ . Having the values of  $\beta$  and  $\gamma$ , we reobtain in both cases  $\alpha = 0$ . Last, the  $\bar{q} = 3$  case is characterized in regular lattices by the critical exponents  $\beta = 1/9$  and  $\gamma = 13/9$ . According to the hyperscaling relation, the exponent associated with the entropy production should read  $\alpha = 1/3$ . Very recently, the value  $\alpha = 0.32(2)$  has been confirmed from numerical simulations in Ref. [33], in full accordance with our theoretical predictions. The present analysis not only puts on firmer basis the behavior of entropy production at the criticality but also extends the hyperscaling relation for nonequilibrium phase transitions.

## V. CONCLUSIONS

Based on general considerations, the description of entropy production at continuous and discontinuous (practically unexplored) phase transitions was presented. Our main findings are that continuous and discontinuous phase transitions can be classified through specific (well defined) entropy production traits in the realm of MFT and beyond MFT. Our approach embraces fundamental aspects comprising the influence of the lattice topology and symmetry properties. At the phase coexistence, the entropy production presents a discontinuity in a single (and well defined) point in regular lattices, whereas a hysteretic loop is portrayed in complex networks. The former case is also characterized by the existence of a crossing point among entropy production curves for distinct system sizes. A general description of entropy production in the framework of mean-field theory for systems with  $Z_2$  symmetry was presented. Our work is a relevant step in trying to unify the description of nonequilibrium phase transitions through a key indicator of system irreversibility. As a final comment, it would be interesting to consider the critical behavior of entropy production (and its allied quantities) for systems displaying other symmetries and universality classes, to verify the reliability of finite size ideas presented here.

## ACKNOWLEDGMENT

C.E.F. and P.E.H. acknowledge the financial support from FAPESP under Grants No. 2018/02405-1 and No. 2017/24567-0, respectively.

[1] I. Prigogine, *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1961).  
 [2] S. R. de Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics* (North-Holland, Amsterdam, 1962).  
 [3] U. Seifert, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 126001 (2012).  
 [4] L. Crochik and T. Tomé, *Phys. Rev. E* **72**, 057103 (2005).  
 [5] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 020601 (2012).  
 [6] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **91**, 042140 (2015).  
 [7] Y. Zhang and A. C. Barato, *J. Stat. Mech.* (2016) 113207.

[8] B. Andrae, J. Cremer, T. Reichenbach, and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 218102 (2010).  
 [9] D. Mandal, K. Klymko, and M. R. DeWeese, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 258001 (2017).  
 [10] M. Brunelli, L. Fusco, W. Wiczorek, J. Hoelscher-Obermaier, G. Landi, F. L. Semiao, A. Ferraro, N. Kiesel, T. Donner, G. De Chiara, and M. Paternostro, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 160604 (2018).  
 [11] J. Schnakenberg, *Rev. Mod. Phys.* **48**, 571 (1976).  
 [12] P. Gaspard, *J. Chem. Phys.* **120**, 8898 (2004).  
 [13] H. Ge and H. Qian, *J. R. Soc. Int.* **8**, 107 (2011).

- [14] A. Imparato, *New J. Phys.* **17**, 125004 (2015).
- [15] P. S. Shim, H. M. Chun, and J. D. Noh, *Phys. Rev E* **93**, 012113 (2016).
- [16] T. Herpich, J. Thingna, and M. Esposito, *Phys. Rev. X* **8**, 031056 (2018).
- [17] T. Herpich and M. Esposito, *Phys. Rev. E* **99**, 022135 (2019).
- [18] A. C. Barato and H. Hinrichsen, *J. Phys. A* **45**, 115005 (2012).
- [19] M. J. de Oliveira, *J. Stat. Phys.* **66**, 273 (1992).
- [20] H. Chen, C. Shen, G. He, H. Zhang and Z. Hou, *Phys Rev. E* **91**, 022816 (2015).
- [21] H. Chen, C. Shen, H. Zhang, G. Li, Z. Hou, and J. Kurths, *Phys Rev. E* **95**, 042304 (2017).
- [22] P. E. Harunari, M. M. de Oliveira, and C. E. Fiore, *Phys Rev. E* **96**, 042305 (2017).
- [23] J. M. Encinas, P. E. Harunari, M. M. de Oliveira, and C. E. Fiore, *Sci. Rep.* **8**, 9338 (2018).
- [24] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility* (Springer, Cham, 2015).
- [25] M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz, and C. E. Fiore, *Phys. Rev. E* **97**, 060101(R) (2018).
- [26] M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz, and C. E. Fiore, *Phys. Rev. E* **92**, 062126 (2015).
- [27] M. S. S. Challa, D. P. Landau, and K. Binder, *Phys. Rev. B* **34**, 1841 (1986).
- [28] M. Pineda and M. Stamatakis, *Entropy* **20**, 811 (2018).
- [29] See e.g. J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, A. Arenas, and Y. Moreno, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 128701 (2011).
- [30] A. Fronczak and P. Fronczak, *Phys. Rev. E* **96**, 012304 (2017).
- [31] B. Bollobás, *Eur. J. Combinator.* **1**, 311 (1980).
- [32] L. F. C. Pereira and F. G. Brady Moreira, *Phys. Rev. E* **71**, 016123 (2005).
- [33] O. A. Barbosa Bohórquez *et al.*, *J. Phys. A: Math. Theor.* (2019), doi: [10.1088/1751-8121/ab2640](https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab2640).

---

## Bibliografia

---

- [1] T. Andrews, Phil. Trans. R. Soc., 159-575 (1869).
- [2] J. D. Van der Waals, "Over de continuïteit van den gas-envloeistoestand, Thesis", Leiden, (1873).
- [3] J. C. Maxwell, Nature 10, 477 (1874).
- [4] P. Curie, Ann. Chim. Phys. 5, 289 (1895).
- [5] P. Weiss, J. Phys. Radium (Paris) 6, 667 (1907).
- [6] W. Heisenberg, Z. Phys. 49, 619 (1928).
- [7] E. Ising, Z. Phys. 31, 253 (1925).
- [8] W. Lenz, Z. Phys. 21, 613 (1920).
- [9] L. D. Landau, Phys. Zurn. Sowjetunion 11, 545 (1937).
- [10] B. Widom, J. Chem. Phys. 43, 3898 (1965).
- [11] Leo Kadanoff. Physics Physique Fizika 2, 263, (1966).

- [12] K. G. Wilson, *Physical Review B*, 4 (9), 3174, (1971).
- [13] U. Seifert, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 126001 (2012).
- [14] L. Crochik and T. Tomé, *Phys. Rev. E* **72**, 057103 (2005).
- [15] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 020601 (2012).
- [16] T. Tomé and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **91**, 042140 (2015).
- [17] Y. Zhang and A. C. Barato, *J. Stat. Mech.* **2016**, 113207 (2016).
- [18] B. Andrae, J. Cremer, T. Reichenbach and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 218102 (2010).
- [19] D. Mandal, K. Klymko and M. R. DeWeese, *Phys. Rev. Lett* **119**, 258001 (2017).
- [20] M. Brunelli, L. Fusco, W. Wieczorek, J. Hoelscher-Obermaier, G. T. Landi, F. L. Semião, A. Ferraro, N. Kiesel, T. Donner, G. De Chiara and M. Paternostro, *Phys. Rev. Lett* **121**, 16064 (2018).
- [21] S. Carnot, *Reflexions sur la puissance motrice du feu* Bachelier, París, (1824).
- [22] R. Clausius, «Über die Wärmeleitung gasförmiger Körper», *Annalen der Physik*, 125:353–400, (1865).
- [23] L. Boltzmann, *Sitzungsberichte der kaiserlichen Akademie der Wissenschaften zu Wien (em alemão) (II 76): 428*. Reimpressão em: *Wissenschaftliche Abhandlungen von Ludwig Boltzmann. II. Viena: [s.n.] p. 164–223, (1877)*.
- [24] J. Schnakenberg, *Rev. Mod. Phys.* **48**, 571 (1976).
- [25] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility* (Springer, Cham, 2015).
- [26] I. Prigogine, *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1961).
- [27] S. R. de Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics* (North-Holland, Amsterdam, 1962).

- [28] G. Jaeger, «The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution». *Archive for History of Exact Sciences*. 53 (1): 51–81, (1998).
- [29] M. J. de Oliveira, *Termodinâmica* (Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [30] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* 13, 253 (1945).
- [31] Sílvio R. A. Salinas *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, 1999).
- [32] A. C. Barato and H. Hinrichsen, *J. Phys. A* **45**, 115005 (2012).
- [33] J. M. Encinas, P. E. Harunari, M. M. de Oliveira and C. E. Fiore, *Sci. Rep.* **8**, 9338 (2018).
- [34] C. Castellano and R. Pastor-Satorras, *J. Stat. Mech.*, 5001 (2006).
- [35] P. E. Harunari, M. M. de Oliveira, and C. E. Fiore, *Phys Rev. E* **96**, 042305 (2017).
- [36] M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz and C. E. Fiore, *Phys. Rev. E* **97**, 060101(R) (2018).
- [37] H. Chen, C. Shen, H. Zhang, G. Li, Z. Hou and J. Kurths, *Phys Rev. E* **95**, 042304 (2017).
- [38] M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz, and C. E. Fiore, *Phys. Rev. E* **92**, 062126 (2015).
- [39] M. S. S. Challa, D. P. Landau, and K. Binder, *Phys. Rev. B* **34**, 1841 (1986).
- [40] M. Pineda and M. Stamatakis, *Entropy* **20**, 811 (2018).
- [41] See e.g. J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, A. Arenas and Y. Moreno, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 128701 (2011).
- [42] M. J. de Oliveira, *J. Stat. Phys.* **66**, 273 (1992).
- [43] H. Chen, C. Shen, G. He, H. Zhang and Z. Hou, *Phys. Rev. E* **91**, 022816 (2015).
- [44] A. Fronczak and P. Fronczak, *Phys. Rev. E* **96**, 012304 (2017).
- [45] B. Bollobás, *Europ. J. Combinatorics*, **1**, 311 (1980).

- [46] L. F. Pereira and F. G. B. Moreira, Phys. Rev. E **71**, 016123 (2005).
- [47] J. M. Encinas, H. Chen, M. M. De Oliveira, C. E. Fiore, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, v. 516, p. 563-570, (2018).
- [48] O. A. Barbosa Bohórquez et al., J. Phys. A: Math. Theor. (2019)