

Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física
Programa de Pós-graduação em Física

Comportamento crítico em um modelo de caminhantes
aleatórios em processos com conservação da paridade,
ramificação, aniquilação e múltipla ocupação

Fabiana Carvalho dos Anjos

Maceió
Julho/2016

Fabiana Carvalho dos Anjos

Comportamento crítico em um modelo de caminhantes
aleatórios em processos com conservação da paridade,
ramificação, aniquilação e múltipla ocupação

Dissertação de Mestrado apresentada ao Pro-
grama de Pós-Graduação em Física da Matéria
Condensada da Universidade Federal de Alagoas
como requisito para obtenção do grau de Mestre
em Física.

Orientador: Prof. Dr. Iram Marcelo Gléria

Coorientador: Prof. Dr. Carlos Argolo

Maceió

Julho/2016

**Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central**

Bibliotecária: Jansina Xisto de Barros Lima

A599c Anjos, Fabiana Carvalho dos.

Comportamento crítico em um modelo de caminantes aleatórios em processo com conservação da paridade, ramificação, aniquilação e múltipla ocupação / Fabiana Carvalho dos Anjos. - 2016.
74 f. : il., graf.

Orientador: Iram Marcelo Glória.

Coordenador: Carlos Aguiar.

Dissertação (Mestrado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física, Maceió, 2016.

Bibliografia: f. 70-74.

1. Transição de fase. 2. Ponto crítico. 3. Expoentes críticos. 4. Percolação direcionada. I. Título.

CDU: 536.76



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14, Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-670 Maceió - AL, Brasil
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1945

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

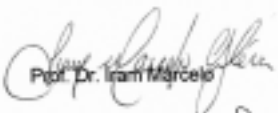
***“Comportamento Crítico em um Modelo com caminhantes
aleatórios em processos com conservação da paridade,
ramificação, aniquilação e múltipla ocupação.”***

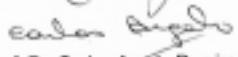
por

Fabiana Carvalho dos Anjos

A Banca Examinadora composta pelos professores Iram Marcelo Glória (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Carlos Argolo Pereira Alves (co-orientador), do Instituto Federal de Alagoas, André Luis Baggio, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva, do Campus Arapiraca da Universidade Federal de Alagoas consideram a candidata aprovada com grau “B”.

Maceió, 28 de julho de 2016


Prof. Dr. Iram Marcelo


Prof. Dr. Carlos Argolo Pereira Alves -


Prof. Dr. Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva


Prof. Dr. André Luis Baggio

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais (Luisa e Estevão) pelo amor incondicional e por me apoiar sempre na busca pelos meus objetivos. Aos meus queridos irmãos (Luciete, Berto e Cleonilson) mesmo que distantes sempre estão presentes me apoiando nesta jornada. Em especial minhas irmãs Adriana e Atyca pela amizade, amor e confiança depositada em mim. Aos demais membros da nossa família (Karla, Leonardo, Pedro e meus amados sobrinhos Guilherme e Mariana) pelo carinho.

Ao meu orientador e professor Dr. Iram Gléria pelos ensinamentos, paciência e pelas palavras de conforto nos momentos difíceis ao longo dessa jornada.

Ao meu coorientador o professor Dr. Carlos Argolo que teve uma contribuição decisiva na construção desse trabalho. Minha eterna gratidão pelos ensinamentos, pela paciência e pelo incentivo no desenvolvimento deste.

Aos queridos Pedro Barros e Gabriel Valentin (o Diabão) pelos ensinamentos, paciência e pelo companheirismo no desenvolvimento desse trabalho. Ao IFAL-Campus Maceió e aos demais alunos (Vinícios, Leonardo, Jardene, entre outros) pela acolhida, pelo carinho e respeito comigo.

Aos meus queridos amigos da graduação Givanildo e Nazareno que seguem comigo no mestrado, pela amizade e carinho. E minha querida amiga Thamásia pela amizade.

Ao querido Samuel pela acolhida nos primeiros dias aqui em Maceió.

Ao querido Job pelos ensinamentos e pela amizade.

Aos queridos Artur, Rafaela, Lívia, João Paulo, Elpídio, Eliane, Camila e Cristiano pelo carinho e pela companhia nas inúmeras noites de estudo.

Ao querido colega de sala e amigo Demytri pelo carinho, companheirismo e sugestões neste trabalho.

À Rafela, Tainã, Waléria e Elaine que me acolheram quando precisei.

Ao querido José Fábio pela ajuda na disciplina de quântica, pela amizade e pelas palavras de incentivo no desenvolvimento desse trabalho.

Aos queridos colegas da sala Bate Caverna, em especial Wesley e Rui pelo apoio e carinho comigo.

Aos professores do IF-UFAL, em especial ao professor Dr. Tiago Mariz pelas aulas de Quântica e ao coordenador da pós-graduação professor Dr. Marcelo Lyra.

Aos meus queridos amigos e amigas do interior do Piauí que mesmo distantes estão sempre mandando mensagens de apoio e incentivo.

A Deus, por ter colocado tantas pessoas especiais no meu caminho e me presentear com uma maravilhosa Família.

À CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Nesta dissertação abordamos um sistema que apresenta uma transição de fase de um estado ativo para um estado absorvente. O estudo envolve simulações numéricas em cadeias lineares e consideramos um modelo em que ocorre ramificação e aniquilação de caminhantes aleatórios. Admitimos que cada sítio da rede ser ocupado por mais de uma partícula, que difundem pela rede e se aniquilam imediatamente após o encontro. Cada partícula pode, em cada passo de tempo, gerar um determinado número n de filhotes, onde n é um número par. Investigamos as propriedades críticas do modelo usando simulações computacionais e a teoria de escala por tamanho finito. Analisamos a região de transição e após encontrado o ponto crítico calculamos o conjunto de expoentes críticos que é uma característica na vizinhança de transições de segunda ordem. O modelo apresenta conservação do número total de partículas modulo 2 e sua classe de universalidade difere da PD. A partir da análise dos resultados, encontramos o conjuntos de expoentes críticos, consistentes com a classe BARW - PC (branching and annihilating random walkers).

Palavras-chave: Transição de fase; Ponto crítico; Expoentes críticos; Percolação Direcionada (PD).

ABSTRACT

In this dissertation we address the problem of second order phase transitions with absorbing states. We analyze the critical behavior of a one dimensional model simulated on one dimensional chains. The sites on the linear chain can be multiple occupied by particles that annihilates each other with a finite probability. It also presents parity-conserving branching with an even number of offsprings. The number of particles are constant modulo 2. We determine the threshold of the phase transition between the statistically stationary active state and the absorbing state. From steady-state simulations and a finite-size scaling analysis, we calculate the order-parameter, order-parameter fluctuations, and spacial correlation length critical exponents. We also followed the short-time critical relaxation to determine some dynamical critical exponents. The hyperscaling relation is checked for both sets of stationary and dynamical critical exponents which we found to be consistent with the BARW-PC universality class.

Keywords: Phase transition; finite-size scaling; critical expoentes.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Diagrama de fases em termos da pressão contra a temperatura, de um fluido simples com única componente.	9
1.2	Curva de coexistência para fluidos distintos	10
1.3	Magnetização em função da temperatura	11
1.4	Transição de fase ferromagnética	14
2.1	Taxas de transição no processo de contato unidimensional, onde o quadrado preenchido denomina indivíduo infectado, o quadrado vazio denomina indivíduo saudável e λ o parâmetro de infecção.	19
2.2	Parâmetro de ordem versus parâmetro de infecção	20
3.1	Percolação Isotrópica	35
3.2	Percolação Direcionada	36
3.3	Densidade de predadores ρ no estado ativado versus c densidade de morte dos predadores para diferentes tamanhos de redes.	39
3.4	A relação do $U_L(c)$ em função da probabilidade de morte do predador para diferentes tamanhos de redes	40
3.5	Gráfico no log-log do parâmetro de ordem versus o tamanho linear L . A partir do melhor ajuste a uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\beta/\nu_\perp = 0.79(2)$ para uma rede quadrada	41
3.6	A derivada logarítima do parâmetro de ordem crítico versus L . A partir do melhor ajuste foi estimado o expoente crítico $\nu_\perp = 0.73(1)$. . .	41
3.7	Flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\rho$ contra c durante distinta estrutura linear dos tamanhos L	42
3.8	Gráfico log-log das flutuações parâmetro de ordem $\Delta\rho$ contra L no ponto crítico. A relação $\gamma'/\nu_\perp$ estimado a partir da inclinação da reta e foi obtido $\gamma'/\nu_\perp = 0.42(1)$	42

- 3.9 Colapso de dados da densidade do parâmetro de ordem calculado para diferentes tamanhos de redes L e usando $c_c = 0.18838(3)$, $\beta/\nu_\perp = 0.79(2)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$ 43
- 3.10 Colapso de dados da flutuação da densidade do parâmetro de ordem calculado para diferentes tamanhos de redes L e usando $c_c = 0.18838(3)$, $\gamma'/\nu_\perp = 0.42(1)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$ 43
- 4.1 Densidade de partículas no estado ativo versus σ para diferentes cadeias lineares L . Preto denota a menor cadeia ($L = 101$) e verde a maior ($L = 32001$). 52
- 4.2 O momento $m_L(\sigma)$ como uma função da probabilidade de ramificação σ para distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1). A invariância de escala no ponto crítico nos permitiu estimar com precisão a probabilidade de ramificação crítica $\sigma_c = 0,2427(1)$ 53
- 4.3 Gráfico no Log-log do parâmetros de ordem $\psi(L = 32001)$ versus $\sigma - \sigma_c$ acima do ponto crítico. O expoente crítico β é estimado a partir da inclinação da reta ajustada $\psi \approx (\sigma - \sigma_c)^\beta$ que fornece $\beta = 0.94(2)$ 54
- 4.4 Gráfico no Log-log do parâmetro de ordem versus o tamanho linear L para $\sigma_c = 0.2426$ (quadrados pretos), $\sigma_c = 0.2427$ (círculos vermelhos) e $\sigma_c = 0.2429$ (triângulos verdes). Para $\sigma_c = 0.2427$ e o melhor ajuste para uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\beta/\nu_\perp$ 54
- 4.5 A derivada logarítmica do parâmetro de ordem contra L no ponto crítico. A partir do melhor ajuste para uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\nu_\perp = 1.93(4)$ 55
- 4.6 Flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\psi(\sigma, L)$ versus σ para distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1). O cruzamento em $\sigma = 0.2427(1)$ sinaliza finitas flutuações críticas no parâmetro de ordem na transição. 55
- 4.7 Gráfico no log-log da flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\psi$ versus L no ponto crítico para $\sigma_c = 0.2426$ (quadrados pretos), $\sigma_c = 0.2427$ (círculos vermelhos) e $\sigma_c = 0.2429$ (triângulos verdes). Para $\sigma_c = 0.2427$ o expoente da relação $\gamma'/\nu_\perp$ é estimado a partir da inclinação da linha reta a partir do qual obtivemos $\gamma'/\nu_\perp = 0.005(4)$ 56

4.8	Colapso de dados da densidade-parâmetro de ordem calculado a partir de distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1), $\beta/\nu_{\perp} = 0.495$ e $\nu_{\perp} = 1.93$. O colapso de dados a partir de diferentes tamanhos corrobora a precisão dos parâmetros críticos estimados. O ramo inferior corresponde aos dados a partir da fase de absorção $\sigma < \sigma_c$ enquanto o ramo superior representa dados da fase ativa $\sigma > \sigma_c$	57
4.9	A evolução no tempo do parâmetro de ordem próximo ao ponto crítico: $\sigma_c = 0.2422$ (preto), $\sigma_c = 0.2427$ (vermelho) e $\sigma_c = 0.2430$ (verde). Usando $\sigma_c = 0.2427$, $L = 10^2$ e uma média de mais de 10^4 cópias, estimamos $\delta = \beta/\nu_{\perp}Z = 0.286(4)$ a partir da lei de potência apropriada.	58
4.10	Evolução do tempo do momento parâmetro de ordem perto do ponto crítico: $\sigma_c = 0.2422$ (preto), $\sigma_c = 0.2427$ (vermelho) e $\sigma_c = 0.2430$ (verde). Usando $\sigma_c = 0.2427$, $L = 10^5$ e uma média de mais de 10^4 cópias, estimamos $Z = 1.76(1)$	58
4.11	Cálculo independente para o expoente pelo uso da derivada logarítmica do parâmetro de ordem perto do ponto crítico $\sigma_c = 0.2427$. O ajuste da lei de potência fornece $\nu_{\parallel} = 3.27(2)$. Combinado com o valor previamente estimado de Z , isto leva a $\nu_{\perp} = 1.86(2)$	59
4.12	Evolução no tempo das flutuações de parâmetro de ordem na vizinhança do ponto de $\sigma_c = 0.2422, 0.2427$, e 0.2430 $L = 10^5$ e uma média de mais de 10^4 cópias. A partir do ajuste por uma lei de potência dos dados assintótico de σ_c , estimamos $\gamma'/Z\nu_{\perp} = 0.001(2)$	60
5.1	Gráfico do parâmetro de ordem versus parâmetro de controle	63
5.2	Gráfico do parâmetro de ordem versus o parâmetro de controle	64
5.3	Suscetibilidade em função da taxa de criação	64
5.4	Gráfico da densidade em função do tempo	65
5.5	Gráfico da densidade em função do tempo	66

Lista de Tabelas

4.1	Tabela de Expoentes críticos	48
4.2	Densidade crítica e expoentes estacionários	57
4.3	Densidade crítica e expoentes Dinâmicos	59
5.1	Tabela do Expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ para o caso da difusão $D = 0.0$	65
5.2	Tabela do Expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ para o caso da difusão $D = 0.8$	66

SUMÁRIO

1	Transição de Fase	7
1.1	Introdução	7
1.2	Transição de Fase Ferromagnética e o Modelo de Ising	10
1.3	Apresentação geral do trabalho	15
2	Sistemas fora do equilíbrio e Expoentes Críticos	16
2.1	Introdução	16
2.2	Aproximação de campo médio	18
2.2.1	Estado Quase-Estacionário	21
2.3	Expoentes Críticos	21
2.3.1	Os expoentes β , γ' e o expoente dinâmico Z	22
2.3.2	Colapso de dados e a relação de hiperescala	24
2.3.3	Efeito de Tamanho Finito (Finite-Size Scaling)	26
3	Sistemas de Partículas Interagentes	32
3.1	Introdução	32
3.2	Processo de Contato	32
3.3	Percolação Isotrópica	34
3.3.1	Percolação Direcionada	35
3.4	Predador-Presa	36
4	Modelo e Resultados	45
4.1	Introdução	45
4.2	Ramificação e Aniquilação de Caminhantes Aleatórios	46
4.3	Simulações Computacionais e Resultados	50

5	Conclusões e Perspectivas	61
5.1	Perspectivas para futuros trabalhos	61
5.1.1	Modelo de Criação por trincas	61
5.2	Conclusões	67
	Referências	70

Capítulo 1

Transição de Fase

1.1 Introdução

Estudos sobre transições de fase e fenômenos críticos estão presentes em inúmeros sistemas desde fluidos simples a mistura de fluidos, materiais magnéticos, ligas metálicas, cristais líquidos, entre outros. Um estudo pioneiro em transições de fase foi o proposto em 1869 por Andrews, um trabalho experimental para observar, através de medidas do comportamento crítico do dióxido de carbono, o espalhamento de luz nas proximidades do ponto crítico. Quatro anos mais tarde Van der Waals publicava sua tese de doutorado com a primeira teoria bem sucedida sobre os fenômenos críticos, trazendo uma equação de estado aproximada em que um único tipo de interação entre as moléculas de um fluido era capaz de definir diferentes fases termodinâmicas. A partir do início do século XX, a teoria da transição para o ferromagnetismo foi estudada por Pierre Curie e desenvolvida por Pierre Weiss, que apresentou uma teoria do ferromagnetismo que explicava o desaparecimento da magnetização no ponto crítico, conhecida por temperatura de Curie [1].

Tais teorias, desenvolvidas por Van der Waals, Pierre Curie e Pierre Weiss, são as chamadas teorias clássicas. Quando se trata de fenômenos críticos que ocorrem em sistemas longe do equilíbrio, grandezas termodinâmicas como: calor específico, compressibilidade e susceptibilidade magnética possuem comportamento singular na região crítica

caracterizada pelos chamados expoentes críticos. Depois se percebeu que algumas grandezas termodinâmicas possuem um caráter universal definido por valores idênticos de um mesmo expoente, estudos experimentais e teóricos mostraram a existência de classes de universalidade, com expoentes críticos distintos dos chamados expoentes clássicos.

Desta forma, no estudo de transição de fase em sistemas em equilíbrio e de não-equilíbrio, é necessário o entendimento do conceito de universalidade que infere a ideia de sistemas físicos distintos apresentarem um tipo de comportamento singular em uma transição de fase, e o comportamento crítico dessas transições podem ser associados a um conjunto finito de classes de universalidade, evidenciando a relevância das propriedades microscópicas necessária para definir estes expoentes, que possuem grande dependência referente ao alcance das interações, da lei de conservação, da dimensionalidade do sistema e do parâmetro de ordem.

Entre as classes de universalidade que se destacam na descrição de modelos que exibem transição de fase para estados absorventes (estes estados serão definidos nos próximos capítulos) estão percolação direcionada (directed percolation - DP) e a conservação da paridade (parity conserved - PC), sendo que a primeira é considerada como um paradigma para estes sistemas. Tal conceito pode ser visto na hipótese de Janssen e Grassberger, que define os modelos que exibem transições de fase contínua para um único estado absorvente pertencentes a classe de universalidade da percolação direcionada. Por outro lado, os modelos pertencentes a classe da conservação da paridade são representadas predominantemente por modelos do tipo Ramificação e Aniquilação de Caminhantes Aleatórios “branching and annihilating random walks” (BARWs) [2,3]. Tais conceitos serão estudados com mais detalhes nos capítulos 3 e 4.

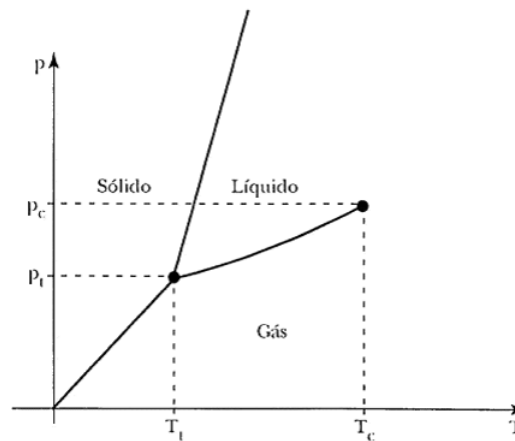
Alguns sistemas presentes na natureza são bem conhecidos por mudarem de fase à medida que ocorrem variações nos seus parâmetros externos. Essa mudança define a transição de fase que se caracteriza pela alteração do comportamento global das propriedades físicas do sistema. Os fenômenos críticos ocorrem nas proximidades do ponto crítico, e dizemos que este em geral é considerado como o final de uma curva finita que separa duas fases distintas de um sistema.

Por exemplo, ao examinar a linha de coexistência de uma substância pura observamos que em direção a altas pressões e altas temperaturas, a densidade do vapor cresce e a densidade do líquido decresce até chegar ao ponto em que as duas densidades se tornam

iguais, isto é, existem uma temperatura crítica T_c e pressão crítica P_c . É exatamente esse ponto que determina o término da linha de coexistência e corresponde ao estado em que as duas fases se tornam iguais, que é o que chamamos de ponto crítico.

Na figura 1.1 temos o diagrama de fase para um fluido simples em função da temperatura e da pressão, em que as linhas cheias mostram uma coexistência de fases. Notamos que a curva de coexistência entre as fases líquida e gasosa não se estendem indefinidamente e terminam de forma abrupta em um ponto crítico (coexistência das duas fases, T_c e P_c). O ponto triplo T_f, p_f é também mostrado e localiza um ponto onde temos a coexistência das três fases sólido, líquido e gás.

Figura 1.1: Diagrama de fases em termos da pressão contra a temperatura, de um fluido simples com única componente.

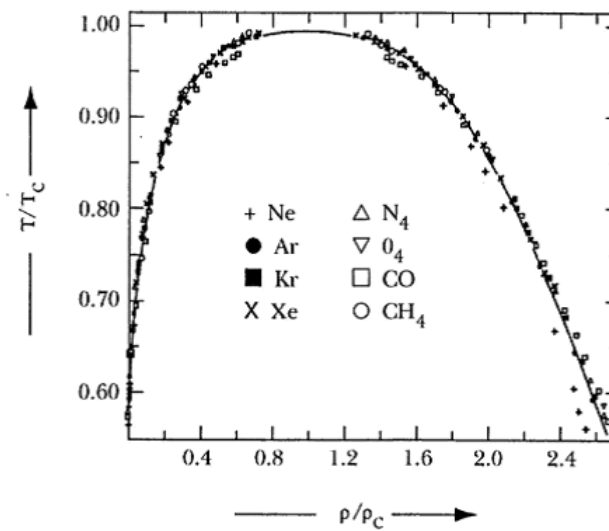


Fonte: Referência [1]

O Físico inglês Eward Guggenheim apresentou, em 1945, um gráfico de $\frac{T}{T_c}$ versus $\frac{P}{P_c}$ para mostrar a curva de coexistência de oito fluidos diferentes, conforme o gráfico da figura 1.2 onde mostra que a linha de coexistência de cada um dos oito fluidos se interceptam na região analisada, evidenciando que possuem o mesmo valor de expoentes de críticos [1].

A delimitação do diagrama de fases descreve a existência de cada fase com a variação dos parâmetros externos ou ainda por meio de uma função de estado (densidade, magnetização, energia interna, etc.). Para a função de estado com valores distintos nas diferentes fases e que se anula na fase mais desordenada, chamamos esta de parâmetro de ordem. Assim os sistemas ferromagnéticos possuem a magnetização como parâmetro de ordem e em uma transição líquido-gás o parâmetro de ordem será a diferença das

Figura 1.2: Curva de coexistência para fluidos distintos



Fonte: Referência [1]

densidades entre o líquido e o gás [4].

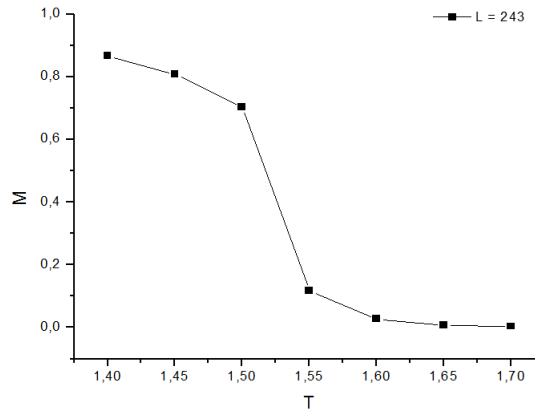
As transições de fase são classificadas de acordo com sua mudança de estado, podendo ser descontínua (de primeira ordem), que está relacionada com a descontinuidade da primeira derivada da energia livre com relação à temperatura, não havendo quebra de simetria. Um exemplo de transição descontínua é a líquido-vapor, que se encontram em equilíbrio ao longo da curva de vaporização e possuem a mesma simetria. As transições contínuas (de segunda ordem), são acompanhadas por uma contínua mudança de estado relacionada às derivadas superiores da energia livre em que há quebra espontânea de simetria. Um exemplo sendo algumas transições que ocorrem em cristais líquidos e materiais magnéticos [5].

1.2 Transição de Fase Ferromagnética e o Modelo de Ising

Um exemplo indispensável para explicar um fenômeno crítico é considerar um ímã com magnetização M , que decresce com o aumento da temperatura, até chegar o momento em que se torna nula em uma certa temperatura crítica. Este é um bom exemplo para

primeira aproximação na descrição de vários tipos de fenômenos, não só em magnetismo como na transição gás-líquido, em ferroeletricidade e outros.

Figura 1.3: **Magnetização em função da temperatura**



Fonte: Referência [47]

A figura 1.3 mostra o gráfico da magnetização versus a temperatura, que mostra claramente o que já foi mencionado, que o aumento da temperatura acarreta na diminuição da magnetização. Temos o modelo de Ising do ferromagnetismo que foi estudado com o objetivo de compreender como se comporta a magnetização espontânea e encontrar uma função desta em relação a temperatura. Tratando do comportamento de elementos individuais como os componentes de spin, foi proposto por Wilhelm Lenz em 1920 para estudar fenômenos magnéticos em materiais. Foi resolvido analiticamente em uma dimensão em 1925 por Ernst Ising, e se tornaria o modelo mais conhecido e citado da Mecânica Estatística. No entanto, os resultados do modelo de Ising não mostravam transição de fase para o caso unidimensional (transição de primeira ordem em $T = 0$) o que acarretou em um esquecimento temporário do modelo. Porém alguns anos mais tarde foi comprovado que havia um erro nos argumentos de Ising e mostrado que para o caso bidimensional existe uma transição de fase contínua [1,6].

Considere uma cadeia linear de sítios onde em cada um temos um átomo magnético. O estado do átomo é caracterizado pelo momento de dipolo magnético. O momento de dipolo pode ser encontrado em dois estados: no mesmo sentido do eixo “spin up” ($\sigma_i = +1$) ou no sentido oposto “spin down” ($\sigma_i = -1$). O termo $-J\sigma_i\sigma_j$ representa a energia de interação entre um par de sítios vizinhos $\langle i, j \rangle$ na rede:

$$\sigma_i = +1; \quad \sigma_j = +1 \quad -J(+1)(+1) = -J < 0, \quad (1.1)$$

$$\sigma_i = -1; \quad \sigma_j = -1 \quad - J(-1)(-1) = -J < 0, \quad (1.2)$$

nas equações 1.1 e 1.2 temos um ordenamento paralelo dos spins, favorecendo o ordenamento ferromagnético. Para o alinhamento antiparalelo, temos:

$$\sigma_i = +1; \quad \sigma_j = -1 \quad - J(+1)(-1) = J > 0, \quad (1.3)$$

$$\sigma_i = -1; \quad \sigma_j = +1 \quad - J(-1)(+1) = J > 0, \quad (1.4)$$

as variáveis de spins estão alinhadas antiparalelo favorecendo uma fase antiferromagnética. O operador hamiltoniano do sistema é dado por:

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.5)$$

Onde H representa o Hamiltoniano (a energia do sistema), J a constante de troca e h o campo externo. No modelo temos um sistema de momentos magnéticos arranjados em sítios de uma determinada rede regular, e os mesmos são descritos por σ_i , variável de spin associada ao sítio $i = 1, 2, 3, \dots, N$, que pode assumir apenas dois valores $\sigma_i = \pm 1$, com σ_i e σ_j correspondendo a variáveis de spins de sítios vizinhos [6].

Vamos considerar $\sigma(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ a configuração de todos os estados possíveis do sistema $\sigma = [-1, 1]^N$ sendo que $N = [1, \dots, N]^d$ (d é a dimensão do sistema). Por exemplo, em um modelo de Ising unidimensional linear na ausência do campo, a energia de uma configuração σ dada por $H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$ e com apenas duas variáveis de spins teremos as seguintes configurações possíveis:

$$\sigma_1 = [\uparrow, \uparrow] = [+1, +1]; \sigma_2 = [\uparrow, \downarrow] = [+1, -1]$$

$$\sigma_3 = [\downarrow, \uparrow] = [-1, +1]; \sigma_4 = [\downarrow, \downarrow] = [-1, -1]$$

E suas energias:

$$H(\sigma_1) = H(\sigma_4) = -J \quad (1.6)$$

$$H(\sigma_2) = H(\sigma_3) = +J \quad (1.7)$$

onde as configurações mostradas anteriormente (σ_1 , σ_4 e σ_2 , σ_3) representam estados degenerados, uma vez que compartilham da mesma energia.

A medida de probabilidade no espaço das configurações deve ser proporcional à energia. No equilíbrio termodinâmico com uma temperatura T , a probabilidade $P(\sigma)$ de encontrar o sistema na configuração σ é:

$$P(\sigma) = \frac{1}{\Omega} e^{-\beta H(\sigma)} \quad (1.8)$$

Sendo Ω a Função de Partição, que é a soma sobre todas as configurações de σ :

$$\Omega = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma)} \quad (1.9)$$

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (1.10)$$

Observamos o que acontece com o nosso sistema quando $\beta \rightarrow 0$ ou $\beta \rightarrow \infty$, ou seja, quando temos uma temperatura infinita ou temos uma temperatura igual a zero.

- Se o campo externo for nulo $h = 0$ implica dizer que $P(\sigma) = \frac{1}{2^{|N|}}$ onde N corresponde ao número de sítios, o denominador é o número total de configurações;
- Se β for igual a zero, ou seja, temos uma temperatura infinita e isso implica dizer que toda configuração tem a mesma probabilidade;

$$P(\sigma_i = 1) = \frac{1}{2} \quad (1.11)$$

$$P(\sigma_i = 1; \sigma_j = 1) = \frac{1}{4}; i \neq j \quad (1.12)$$

Em resumo, significa dizer que para $T \rightarrow \infty$ os spins se tornam variáveis independentes (não correlacionadas), isto é, conhecendo o estado de um spin qualquer não infere a ideia que é possível conhecer o estado dos demais (os spins se comportam de maneira independentes uns dos outros).

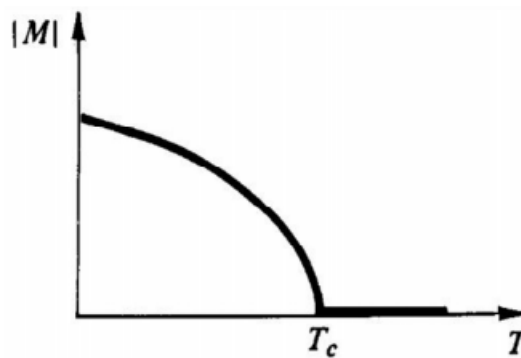
Por outro lado, no extremo $\beta \rightarrow \infty$ e $h = 0$ (temperatura $T = 0$) com isso diferenciamos muito a probabilidade de configurações com energias diferentes. Como dito anteriormente, para o campo externo igual a zero temos duas configurações de energia mínima, que é a configuração $+1$ e a configuração -1 .

Ou seja, se tomarmos uma configuração específica σ e fazer sua medida com $\beta \rightarrow \infty$ teremos a probabilidade $1/2$ para $\sigma = \pm 1$ e zero em todos os outros casos, teremos

a formação de condensado onde todos os spins estão na configuração $+1$ ou todos na configuração -1 . Isso é uma medida concentrada na configuração mínima para a energia $H(\sigma)$ do sistema.

No exemplo da transição de fase ferromagnética, temos que acima de uma certa temperatura, chamada de temperatura crítica T_c , este material possui seus momentos magnéticos completamente desordenados, isto é, possui magnetização nula ($M=0$), podemos ver isso na figura 1.4.

Figura 1.4: Transição de fase ferromagnética



Fonte: Referência [1]

Enquanto abaixo da temperatura crítica o material apresenta momentos magnéticos ordenados o que resulta em uma magnetização diferente de zero ($M \neq 0$), quando a temperatura vai se aproximando da temperatura crítica a partir de valores mais baixos a magnetização espontânea vai diminuindo e se anula em T_c . O fato de M crescer a partir de zero para $T < T_c$ é o que caracteriza uma transição contínua (de segunda ordem), no entanto, se M tivesse um salto na temperatura crítica a transição seria descontínua ou de primeira ordem, a temperatura funciona como um parâmetro de controle e esse valor do parâmetro que ocorre a transição (T_c) é o que chamamos de ponto crítico.

$$M = 0, \quad \text{se } T \geq T_c \quad (1.13)$$

$$M = a(T_c - T)^{-\beta} \quad \text{se } T < T_c \quad t = T_c - T \quad \text{ou} \quad t = \rho - \rho_c \quad (1.14)$$

Nas transições da fase descontínuas teremos a coexistências de duas fases distintas, a fase ordenada e a fase desordenada, na região da transição. Enquanto nas transições con-

tínuas teremos a fase ordenada se transformando de forma contínua na fase desordenada a medida que seu parâmetro de controle tende para seu valor crítico. Essa magnetização do ferromagneto discutida anteriormente é um exemplo de parâmetro de ordem, que neste caso possui a característica de ser nula acima da temperatura crítica e não nula abaixo dela.

1.3 Apresentação geral do trabalho

Os estudos sobre fenômenos críticos em sistemas fora do equilíbrio atraíram muito interesse nas últimas décadas. Estes possuem as mesmas características dos fenômenos críticos do equilíbrio, no entanto, ainda não existe uma teoria completa acerca das transições de fase longe do equilíbrio. A obtenção numérica de um conjunto de parâmetros, denominados expoentes críticos permite caracterizar a transição de fase do sistema a partir da identificação de sua classe de universalidade.

A dissertação está organizada em cinco capítulos. Nesse primeiro capítulo fazemos um breve texto falando sobre os primeiros estudos sobre transição de fase, em especial a Transição de Fase ferromagnética e o Modelo de Ising. No segundo capítulo falaremos sobre os processos estocásticos e markovianos, os expoentes críticos que foram calculados no decorrer do desenvolvimento do trabalho, teoria de campo médio e hipótese de escala por tamanho finito. No terceiro capítulo falaremos de sistemas de partículas interagentes por meio dos seguintes modelos: Processo de contato, Percolação direcionada que é a principal classe de universalidade dos modelos com estados absorventes, e o modelo Predador-Presa. No quarto capítulo descrevemos o modelo estudado nesta dissertação e mostramos os resultados encontrados. No quinto capítulo mostramos as conclusões e perspectivas sobre os resultados encontrados e a continuação da pesquisa. Mostraremos os resultados preliminares do modelo que estamos começando a analisar, o Modelo de criação de tripletos.

Capítulo 2

Sistemas fora do equilíbrio e Expoentes Críticos

2.1 Introdução

Em sistemas termodinâmicos condições externas eventualmente impostas podem levar a diferentes comportamentos macroscópicos, que são o que definimos como fases do sistema. Modificando as variáveis intensivas do sistema podemos observar uma transição de fase em um dado valor crítico destas variáveis.

Sistemas fora do equilíbrio possuem características distintas se comparados aos sistemas no equilíbrio, peculiaridades que trazem como resultado novas classes de universalidade, expoentes críticos e modelos. Dentro da abordagem markoviana uma importante classe são os sistemas irreversíveis com estados absorventes, que são configurações macroscópicas na qual uma transição para outras configurações não existem [6].

Para estudar a evolução dos sistemas ao longo do tempo é conveniente fazer uso dos processos estocásticos, onde incluímos variáveis ou um conjunto de variáveis que estão subordinadas a efeitos aleatórios e possuem uma dependência temporal.

Por exemplo, seja um processo estocástico a tempo discretizado em que a variável t representa os intervalos de tempo, a variável estocástica $x(t)$ assume valores inteiros e t os valores $0,1,2,3,\dots$. Assim, podemos definir um processo estocástico de uma variável $x(t)$

até um dado instante l pela distribuição conjunta de probabilidade [6]:

$$P_l(x(0), x(1), x(2), \dots, x(l)) \quad (2.1)$$

onde temos que a variável estocástica toma o valor de $x(0)$ no instante $t = 0$, o valor $x(1)$ no instante $t = 1$ e assim por diante até chegar a $x(l)$ no instante $t = l$. Para uma variável $x(t_{i+1})$ podemos escrever a probabilidade condicional:

$$P_r[x(t_{i+1})] = P_r[x(t_{i+1})|x(t_i), x(t_{i-1}), x(t_{i-2}), \dots, x(t_0)] \quad (2.2)$$

em que $x(t_{i+1})$ depende de todos os valores anteriores a ele.

Uma classe de processos importantes na física são os processos estocásticos Markovianos, onde a probabilidade de um estado assumir um valor em um dado instante depende apenas do seu valor no instante anterior. Sua probabilidade de transição de um estado para outro pode ser expressa pela relação:

$$P_r[x(t_{i+1})] = P_r[x(t_{i+1})|x(t_i)] \quad (2.3)$$

Assim, a probabilidade de ocorrer dois estados sucessivos é resultado do produto da probabilidades dos dois estados individualmente. Isso implica que a probabilidade de transição $x_2(t_2) \rightarrow x_3(t_3)$ não sofre influência pelo fato de ter ocorrido anteriormente uma transição de estados $x_1(t_1) \rightarrow x_2(t_2)$.

Para tal processo é conveniente inferir uma equação mestra que se trata de uma equação diferencial para descrever o fluxo de probabilidade do sistema ocupar diferentes estados. Consideramos que um sistema $G(y \rightarrow x)$ representa a taxa de densidade de probabilidade do sistema estar no estado x no instante t , e assim temos a variação no tempo da probabilidade do sistema se encontrar em x é dada pela relação:

$$\frac{dP(x, t)}{dt} = \sum_y [P(y, t)G(y \rightarrow x) - P(x, t)G(x \rightarrow y)] \quad (2.4)$$

que chamamos de equação mestra. A variação temporal da probabilidade de permanecer em um determinado estado é a diferença do que está “entrando” no estado (as configurações de x originadas de y) e do que está “saindo” do estado (as configurações de y originadas de x) do estado, $P(y, t)$ e $P(x, t)$ representam a densidade de probabilidade por tempo de

que o processo de Markov possa transitar entre dois estados. A equação mestra governa a evolução temporal de processos markovianos, mas nem todo processo de Markov converge para um estado estacionário.

Dizemos que um processo de Markov convergiu para um estado estacionário se satisfeito a relação $\frac{dP(x,t)}{dt} = 0$, para este caso faremos $P(x,t) = \omega(x)$ como sendo a distribuição estacionária do sistema.

$$\sum_y [\omega(y)G(y \rightarrow x) - \omega(x)G(x \rightarrow y)] = 0 \quad (2.5)$$

$$\omega(y)G(y \rightarrow x) = \omega(x)G(x \rightarrow y) \quad (2.6)$$

Quando temos um processo markoviano reversível, isto é, a condição imposta na equação 2.6 define que cada termo da equação 2.5 vai se anular. Esta relação é chamada de condição do balanço detalhado que é a situação onde devemos ter o mesmo número de transições do estado $y \rightarrow x$ e $x \rightarrow y$, os estados estacionários que são satisfeitos por essa condição são denominados de estados de equilíbrio. Também chamada de reversibilidade microscópica, pois como exposto anteriormente o par de estados x e y recebe e perde um fluxo de probabilidade de mesma intensidade. Isto é, a probabilidade do sistemas transitar entre os estados $x \rightleftharpoons y$ é a mesma por isso o nome reversibilidade.

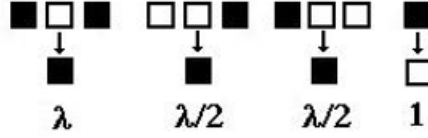
2.2 Aproximação de campo médio

Na mecânica estatística a teoria de campo médio trabalha com sistemas de muitos corpos interagentes em que as interações sentidas por um corpo devido aos outros corpos são representadas por um campo efetivo e todas as flutuações são desprezadas.

Considere o processo de contato simples (PC) em que o sítio i pode ser ocupado em um estado $\sigma_i = 1$ ou $\sigma_i = 0$ que denota o sítio vazio. Para o caso em que o sítio estar ocupado temos uma probabilidade que representamos por ρ e a probabilidade do sítio estar vazio será $1 - \rho$. O processo de contato pode ser estudado através da abordagem de campo médio, que nos leva a resultados aproximados e que nos permite compreender de forma geral o comportamento do PC na região crítica.

Um tipo de processo longe do equilíbrio são os processos com estados absorventes

Figura 2.1: Taxas de transição no processo de contato unidimensional, onde o quadrado preenchido denomina indivíduo infectado, o quadrado vazio denomina indivíduo saudável e λ o parâmetro de infecção.



Fonte: Referência [7]

em que a configuração na qual o sistema se encontra fora do equilíbrio pode ficar “aprisionado” em definitivo durante sua evolução, o estado absorvente pode ser atingido a partir de outros estados, mas é impossível atingir outro estado a partir do estado absorvente.

Na figura 2.1 temos a ilustração de um exemplo em uma dimensão. As partículas só podem ser infectadas por outra partícula, e o estado de vácuo é um estado absorvente. A sobrevivência por um longo prazo é dependente da taxa de criação, observamos que a extinção ocorre com probabilidade 1 e o ponto que marca a fronteira entre a existência e a extinção é delimitada por um ponto crítico.

Podemos escrever a equação do movimento para ρ da seguinte maneira, na aproximação de campo médio:

$$\frac{d\rho}{dt} = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2 \quad (2.7)$$

Esta é a chamada equação de Malthus-Verhulst onde ρ é a densidade de partículas. Os pontos de equilíbrio do sistema, onde $d\rho/dt = 0$, serão ρ^* tais que

$$\lambda\rho^{*2} - \rho^*(\lambda - 1) = 0, \quad (2.8)$$

$$\rho^*(\lambda\rho^* - \lambda + 1) = 0. \quad (2.9)$$

$$\rho^* = 0 \quad , \quad \rho^* = \frac{\lambda - 1}{\lambda} \quad (2.10)$$

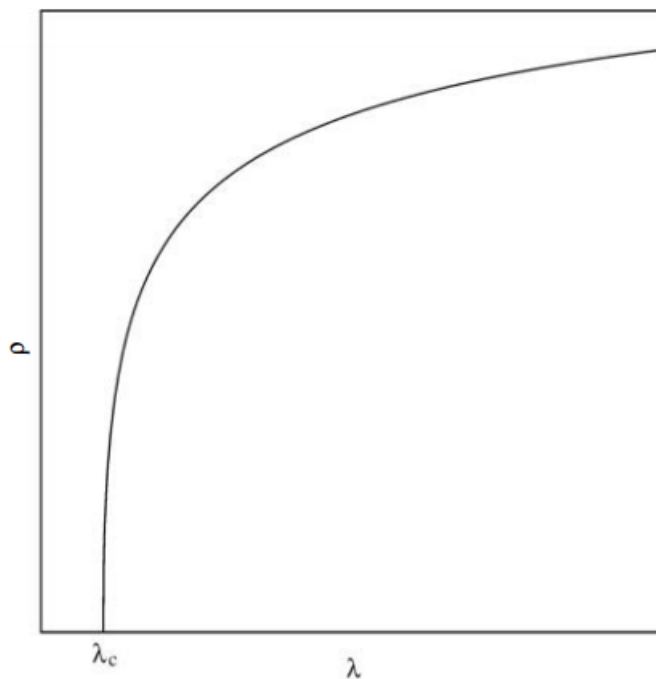
como ρ é densidade, desconsideramos $\rho^* = \frac{\lambda-1}{\lambda}$ se $\lambda < 1$. Tais pontos de equilíbrio serão estáveis se $\frac{df}{d\rho}|_{\rho=\rho^*} < 0$ onde f é o fluxo $f(\rho) = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2$

$$\frac{df}{d\rho} = \lambda - 1 - 2\lambda\rho \Rightarrow \frac{df}{d\rho}|_{\rho^*=0} = \lambda - 1; \quad \frac{df}{d\rho}|_{\rho^*=\frac{\lambda-1}{\lambda}} = 1 - \lambda \quad (2.11)$$

O ponto fixo interior $\lambda - 1/\lambda$ será estável quando $\frac{df}{d\rho}|_{\rho^*=\lambda-1/\lambda} < 0$. Isso ocorre se $\lambda > 1$. Igualmente, a origem $\rho^* = 0$ será um equilíbrio estável se $\frac{df}{d\rho}|_{\rho^*=0} < 0$, o que ocorre se $\lambda < 1$. Esta troca de estabilidade ocorre no ponto crítico $\lambda_c = 1$, chamada de ponto de bifurcação.

Na figura 2.2, é possível ver que no processo de contato a densidade finita de partículas, que é o parâmetro de ordem (ρ), cresce a partir do zero, quando λ cresce além do seu valor crítico λ_c . A curva deixa claro que o sistema próximo a λ_c tem uma transição de fase do estado absorvente $\rho^* = 0$ para o estado estacionário ativo $\rho^* = \lambda - 1/\lambda$ através de uma transição de fase contínua, isto é, ρ não cresce de forma abrupta. Assim, podemos dizer que o processo de contato é o análogo do modelo de Ising em transições de fase para estados absorventes, um ponto de partida para o estudo de problemas longe do equilíbrio.

Figura 2.2: **Parâmetro de ordem versus parâmetro de infecção**



Fonte: Referência [8]

Em sistemas infinitos temos então que a densidade evolui no tempo e estabiliza, estando no estado ativo com valor $\rho = \rho^* = \lambda - 1/\lambda \neq 0$ se $\lambda > 1$, sendo nulo no ponto crítico $\lambda_c = 1$ ou quando o sistema estiver no estado absorvente. Mas para sistemas de tamanho finito, sempre teremos a evolução para o estado absorvente $\rho = 0$ que é o único

estado estacionário. Antes de atingir o estado estacionário o sistema fica ativado por um longo tempo antes de atingir o estado absorvedor e é possível estudar certas propriedades estatísticas desse estado, conforme veremos na próxima seção.

2.2.1 Estado Quase-Estacionário

No estado quase-estacionário os sistemas finitos ficam estabilizados, no ponto em que a densidade possui um valor diferente de zero pouco antes do sistema atingir o estado estacionário. Assim, no limite em que $L \rightarrow \infty$ as propriedades quase-estacionárias se dirigem para propriedades estacionárias. É possível mostrar que próximo ao ponto crítico estas propriedades variam de acordo com uma lei de potência e temos que densidade estacionária se comporta da forma:

$$\rho = |\lambda - \lambda_c|^\beta \quad (2.12)$$

o expoente crítico β está associado ao parâmetro de ordem [5], uma transição de fase não se caracteriza por apenas um expoente crítico e sim por um conjunto de expoentes críticos, cada um associado a uma grandeza.

Os sistemas fora do equilíbrio possuem uma escala de comprimento caracterizada pela correlação temporal e a correlação espacial [9]. Os expoentes $\nu_{\parallel}$ e $\nu_{\perp}$ estão associados pelas realações:

$$\xi_{\perp} = |\lambda - \lambda_c|^{\nu_{\perp}}, \quad (2.13)$$

$$\xi_{\parallel} = |\lambda - \lambda_c|^{\nu_{\parallel}}. \quad (2.14)$$

Os expoentes β , $\nu_{\perp}$ e $\nu_{\parallel}$ são chamados expoentes críticos fundamentais e os demais que serão vistos a seguir estão relacionados com estes podendo ser relacionados através de relações de escala.

2.3 Expoentes Críticos

Na natureza temos inúmeros sistemas que apresentam transição de fase, e muitos destes apresentam transição fase de segunda ordem (transição contínua) onde calculamos

o ponto crítico e a partir disso definimos um conjunto de expoentes críticos e a qual classe de universalidade o modelo estudado pertence. Os sistemas fora do equilíbrio possuem um conjunto de expoentes que descrevem as propriedades do sistema na região crítica, importante salientar que além do regime estacionário temos os sistemas que evoluem no tempo e possuem expoentes que consideram a evolução dinâmica do sistema.

2.3.1 Os expoentes β , γ' e o expoente dinâmico Z

Em sistemas com um único estado absorvedor teremos a definição do parâmetro de ordem de acordo com a configuração inicial, em um processo de espalhamento o parâmetro de ordem é a densidade de sítios ativos $\sigma_i(t)$, dada pela seguinte expressão:

$$\rho_i(t) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_i \sigma_i(t) \quad (2.15)$$

Temos que a densidade é dada pela densidade média do número de sítios ativos no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. Para redes finitas a densidade é usualmente expressa como:

$$\rho_i(t) = \frac{1}{L} \langle \sum_i \sigma_i(t) \rangle \quad (2.16)$$

a operação $\langle \dots \rangle$ representa a média do número de sítios ativos [10]. Distinguimos os expoentes estáticos (relativos ao comportamento das grandezas no estado estacionário) daqueles denominados expoentes dinâmicos.

Para a determinação dos expoentes críticos estáticos consideramos a densidade de sítios ativos como:

$$\rho = \frac{\langle N(\rho, L) \rangle}{L^d} \quad (2.17)$$

ρ é definido como a densidade de partículas, L é o tamanho da rede, d é a dimensão do sistema e N é o número de partículas.

A densidade estacionária varia continuamente e se anula no ponto crítico. Na proximidade da transição o parâmetro de ordem varia com a lei de potência:

$$\rho \propto |\rho - \rho_c|^\beta \quad (2.18)$$

onde β é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem nas proximidades do ponto crítico. Em um gráfico log-log da densidade de partículas versus a distância do ponto crítico obtemos uma reta e sua inclinação corresponde ao valor do expoente. Também podemos analisar o expoente γ' associado a flutuação do parâmetro de ordem e que obedece a lei de potência:

$$\Delta \rho = [\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2] L^d \propto |\rho - \rho_c|^{-\gamma'} \quad (2.19)$$

onde $\Delta \rho$ é a flutuação do parâmetro de ordem que corresponde a diferença entre a média do quadrado e o quadrado da média do número de partículas multiplicado com o tamanho da rede elevado a dimensão do sistema.

Como mencionado na seção anterior, na emergência do ponto crítico o comprimento de correlação diverge e obedece o seguinte comportamento:

$$\xi_{\perp} \propto |\rho - \rho_c|^{-\nu_{\perp}} \quad (2.20)$$

$$\xi_{\parallel} \propto |\rho - \rho_c|^{-\nu_{\parallel}} \quad (2.21)$$

como dito anteriormente os sistemas fora do equilíbrio possuem os comprimentos de correlação com propriedades temporais e espaciais, que estão relacionados através do expoente dinâmico $Z = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}}$ cujo valor é determinado pela dimensão do sistema e a classe de universalidade a qual pertence.

Além da densidade de partículas no sistema, outras propriedades são extraídas do sistema como a probabilidade de sobrevivência $P(t)$, o número médio de partículas na rede $N(t)$ e o espalhamento das partículas $R^2(t)$. Essas grandezas são calculadas supondo que no instante inicial existe uma única partícula situada na origem $r = 0$ de um sistema de coordenadas [10]. Com isso existe um crescimento de um aglomerado de partículas e definimos o número médio de partículas:

$$N(t) = \sum_r \langle n_r \rangle \quad (2.22)$$

em que é a soma sobre todos os sítios ativos [6]. No ponto crítico o sistema segue as leis de potência:

$$P(t) \propto t^{-\delta} \quad (2.23)$$

$$R^2(t) \propto t^z \quad (2.24)$$

$P(t)$ é a probabilidade de, no instante t , o sistema não se encontrar no estado absorvente e $R^2(t)$ corresponde a soma dos quadrados da distância de cada partícula até a origem. Temos que $z = 2\nu_\perp/\nu_\parallel$, isto mostra que próximo ao ponto crítico possui uma relação entre os expoentes Z e z através da lei de escala [11].

2.3.2 Colapso de dados e a relação de hiperescala

Como falado anteriormente, para uma transição de segunda o conjunto de expoentes críticos serão calculados e para isso utilizaremos a técnica de colapso de dados e a relação de hiperescala para verificação do ponto crítico e dos expoentes críticos correspondentes. A partir do ponto crítico faremos uso das as relações que são válidas somente na respectiva região de transição, são elas:

$$\rho = aL^{-\varphi} \quad (2.25)$$

$$M = a\xi^{-\varphi} \quad (2.26)$$

no ponto crítico o comprimento de correlação é da ordem do tamanho do sistema $\xi \sim L$, estas relações mostram o comportamento da lei de potência para o parâmetro de ordem.

$$t^\beta = a(t^{-\nu_\perp})^{-\varphi}; \quad t = \rho - \rho_c \quad (2.27)$$

$$\beta = \nu_\perp \varphi \quad (2.28)$$

$$\varphi = \frac{\beta}{\nu_\perp} \quad (2.29)$$

Com o ponto crítico estimado e a partir des relações anteriores podemos fazer o gráfico do colapso de dados para distintos tamanhos de redes e calcular o valor do expoente $\beta/\nu_\perp$. De acordo com a equação 2.27 temos que $\rho L^\varphi = a$ uma vez que “a” é constante o primeiro termo da equação independe de L e no gráfico do colapso de dados está no eixo das ordenadas.

Seguindo este raciocínio temos que $\xi = a''|\rho - \rho_c|^{-\nu_\perp}$ sendo que no ponto crítico $\xi = L$, teremos que :

$$L = a''|\rho - \rho_c|^{-\nu_\perp}$$

$$(L)^{\frac{1}{\nu_\perp}} = (a''|\rho - \rho_c|^{-\nu_\perp})^{\frac{1}{\nu_\perp}}$$

$$L^{\frac{1}{\nu_\perp}} = (a'')^{\frac{1}{\nu_\perp}}|\rho - \rho_c|^{-1}$$

logo temos $|\rho - \rho_c|^1 L^{\frac{1}{\nu_\perp}} = (a'')^{\frac{1}{\nu_\perp}}$, independe de L e sendo colocado no eixo das abscissas. E assim obtemos o gráfico para o colapso de dados que mostra a curva para distintos tamanhos de redes, efeito importante nos estudos dos fenômenos críticos por corroborar com a precisão dos expoentes críticos. Com estas informações podemos mostrar como chegar na relação $\varphi = \frac{\beta}{\nu_\perp}$:

$$\rho = aL^{-\varphi}$$

$$a_1(\rho - \rho_c)^\beta = a_2L^{-\varphi} \Rightarrow \rho - \rho_c = t$$

$$a_1t^\beta = a_1[a_2(\rho - \rho_c)^{-\nu_\perp}]^{-\varphi}$$

$$a_1t^\beta = a_1[a_2t^{-\nu_\perp}]^{-\varphi}$$

$$a_1t^\beta = a_1[a_2t^{\varphi\nu_\perp}]$$

$$t^\beta \propto t^{\varphi\nu_\perp}$$

$$\beta = \varphi\nu_\perp$$

$$\varphi = \frac{\beta}{\nu_\perp}$$

Para a flutuação do parâmetro de ordem discutido na seção anterior, é possível ver que:

$$\Delta\rho \propto |\rho - \rho_c|^{-\gamma'} \propto V[\langle\rho^2\rangle - \langle\rho\rangle^2]$$

$$\xi = a''(\rho - \rho_c)^{-\nu_\perp} = L \Rightarrow L^{\frac{-1}{\nu_\perp}} = (\rho - \rho_c)a''$$

$$\Delta\rho \propto [L^{\frac{-1}{\nu_\perp}}]^{-\gamma'}$$

$$\Delta\rho \propto L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} \Rightarrow \Delta\rho = a^V L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}}$$

onde V corresponde ao volume.

A curva para o colapso de dados referente a flutuação do parâmetro de ordem, temos: $\Delta\rho/L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} = a^V$ para o eixo das ordenadas e $\xi = a''(\rho - \rho_c)^{-\nu_{\perp}} = L \Rightarrow L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}} = (a'')^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}(\rho - \rho_c)^{-1} \Rightarrow a''' = L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}(\rho - \rho_c)$ e fica no eixo das abscissas e com isso estimamos o expoente $\gamma'/\nu_{\perp}$.

Outra importante técnica no estudo do comportamento crítico é a relação de hiperescala que relaciona os expoentes críticos com a dimensão do sistema, como podemos ver a seguir:

$$\frac{2\beta}{\nu_{\perp}} + \frac{\gamma'}{\nu_{\perp}} = d \quad (2.30)$$

$$a^V L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} = L^d [\langle a L^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}} \rangle^2 - \langle (a L^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}})^2 \rangle]$$

$$a^V L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} = L^d (L^{\frac{-2\beta}{\nu_{\perp}}}) |a_1^2 - a_2^2|$$

$$L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} \propto L^d (L^{\frac{-2\beta}{\nu_{\perp}}})$$

$$L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} \propto (L^{d - \frac{2\beta}{\nu_{\perp}}})$$

$$\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}} = d - \frac{2\beta}{\nu_{\perp}}$$

$$\frac{2\beta}{\nu_{\perp}} + \frac{\gamma'}{\nu_{\perp}} = d$$

por outro lado, em dimensões mais elevadas que a dimensão crítica d_c , os fenômenos críticos são regidos por teorias de campo médio. Por conseguinte, nestas dimensões, todos os expoentes críticos assumem valores que independem da dimensão do sistema e a relação de hiperescala é violada [11,12].

2.3.3 Efeito de Tamanho Finito (Finite-Size Scaling)

Quando estudamos o sistema nas proximidades do ponto crítico o comprimento de correlação torna-se infinito e mesmo que seja estudado na vizinhança do ponto crítico o ξ é grande suficientemente que resulta na influência do tamanho junto as propriedades intensivas do sistemas, no caso de sistemas finitos ao se aproximar do ponto crítico o comprimento de correlação não diverge e se torna proporcional ao tamanho do sistema.

Para solucionar este problema é necessário estudar a variação das propriedades em sistemas de diferentes tamanhos e estimar os expoentes críticos. Esta consideração é o ponto de partida para a construção de uma teoria de escala para tamanhos finitos aplicados às transições de fase de segunda ordem em sistemas fora do equilíbrio, que possibilita encontrar o ponto crítico e fazer estimativas dos expoentes com base em dados do sistema com vários tamanhos [6].

Como trabalhamos com transição de fase, através de modelos com variáveis interagentes, usamos o método de Monte Carlo para estudar o comportamento crítico dos sistemas. Esta ferramenta consiste em um método estatístico, que faz uso de uma sequência de eventos aleatórios (constituindo uma cadeia de Markov) para a realização de simulações para obter resultados numéricos. Para esse estudo é necessário que tenhamos amostras gigantescas da ordem de grandeza do número de Avogadro, ou seja, redes infinitas $L \rightarrow \infty$ para que possamos observar uma transição de fase. No entanto, simulações numéricas produzidas em computadores são sempre feitas com amostras finitas, mas podemos ver o comportamento no limite termodinâmico a partir de simulações com diferentes tamanhos de redes.

Com a técnica chamada Efeito de Tamanho Finito (Finite-Size Scaling) faz-se simulações para distintos tamanhos de redes e para se obter a lei de potência que permite estudar o comportamento do sistema no limite termodinâmico [11]. Nos sistemas cuja a dimensão linear L seja finita não faz sentido falar de comprimento de correlação infinito, pois este é limitado pelo tamanho do sistema.

$$L \sim (\rho - \rho_c)^{-\nu_\perp}$$

$$L \sim 1/(\rho - \rho_c)^{\nu_\perp}$$

$$(\rho - \rho_c)^{\nu_\perp} \sim 1/L$$

$$\sqrt[\nu_\perp]{(\rho - \rho_c)} \sim \sqrt[\nu_\perp]{1/L}$$

$$(\rho - \rho_c) \sim 1/L^{1/\nu_\perp}$$

$$(\rho - \rho_c) \sim L^{-1/\nu_\perp}$$

Os efeitos de tamanho finito são importantes quando temos que o comprimento de correlação se comporta da seguinte maneira $\xi \sim L$ e quantidades físicas estão relaciona-

das com a extensão linear do sistema de acordo com L/ξ [12,,13]. Podemos expressar a densidade como:

$$\rho \propto L^{-\varphi} f(t, L) \quad (2.31)$$

$$\rho = L^{-\varphi} f\left(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}\right) \quad (2.32)$$

em que $t = \rho - \rho_c$ e f representa a função da razão entre o comprimento de correlação e o tamanho linear do sistema.

Tomando a média da densidade de partículas (parâmetro de ordem), a média do quadrado da densidade de partículas e o quadrado da média, temos que:

$$\langle \rho \rangle = L^{-\varphi} f\left(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}\right) \quad (2.33)$$

$$\langle \rho^2 \rangle = L^{-2\varphi} g\left(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}\right) \quad (2.34)$$

$$\langle \rho \rangle^2 = L^{-2\varphi} h\left(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}\right) \quad (2.35)$$

Logo temos a razão entre $\langle \rho^2 \rangle$ e $\langle \rho \rangle^2$:

$$\frac{\langle \rho^2 \rangle}{\langle \rho \rangle^2} = j\left(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}\right) \quad (2.36)$$

para $\rho = \rho_c$ temos que $t = 0$ e $\frac{\langle \rho^2 \rangle}{\langle \rho \rangle^2} = j(0)$ (j representa a razão entre $g(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L})$ e $h(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L})$), logo isso implica dizer que no ponto crítico não diferenciamos os tamanhos das redes. Com essa técnica para sistemas de tamanho linear finito podemos expressar outros expoentes estáticos,

$$\xi \propto \Delta^{-\nu_{\perp}} \quad (2.37)$$

onde Δ que é a distância até o ponto crítico na escala do parâmetro de ordem. Podemos definir o parâmetro de ordem como uma função do tamanho do sistema L e da distância ao ponto crítico:

$$\rho \propto L^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}} f(\Delta L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}) \quad (2.38)$$

a razão L/ξ representada por $\Delta L^{1/\nu_{\perp}}$ e no ponto crítico

$$\rho \propto L^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}} \quad (2.39)$$

com esta relação calculamos o expoente $-\beta/\nu_{\perp}$ [11]. Temos outro importante expoente obtido a partir das flutuações do parâmetro de ordem, com o efeito de tamanho finito aplicado teremos que:

$$\Delta \rho \propto |\rho - \rho_c|^{-\gamma'} \quad (2.40)$$

$$\Delta \rho \propto L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} g(\Delta L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}) \quad (2.41)$$

no ponto crítico

$$\Delta \rho \propto L^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}} \quad (2.42)$$

os expoentes $-\beta/\nu_{\perp}$ e $\gamma'/\nu_{\perp}$ determinam a dependência do parâmetro de ordem e da suscetibilidade (flutuação do parâmetro de ordem) com o tamanho do sistema próximo ao ponto crítico.

Outro expoente calculado é o $\nu_{\perp}$ obtido através da derivada logarítmica do parâmetro de ordem em função do tamanho do sistema no ponto crítico, a partir da lei de escala $\frac{d \ln \rho(\rho_c, L)}{d \rho} \propto L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}$ estimamos o expoente.

$$\frac{d\rho}{d\rho} = \frac{d}{dt} [L^{-\varphi} f(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L})]$$

$$\frac{d\rho}{d\rho} = L^{-\varphi} f'(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}) \frac{(-\nu_{\perp})}{L} t^{-\nu_{\perp}-1}$$

$$\frac{d\rho}{d\rho} = L^{-\varphi} f'(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}) (-\nu_{\perp}) \frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L} \frac{t^{-1}}{L^{1/\nu_{\perp}}} L^{1/\nu_{\perp}}$$

$$\frac{d\rho}{d\rho} = L^{-\varphi} (\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}) (-\nu_{\perp}) f'(\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L}) (\frac{t^{-\nu_{\perp}}}{L})^{\frac{1}{\nu_{\perp}}} L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}$$

$$\frac{d\rho}{d\rho} \propto \frac{L^{\frac{1}{\nu_{\perp}} - \varphi}}{L^{-\varphi}} \propto L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}$$

$$\frac{d \ln \rho(\rho_c, L)}{d\rho} \propto L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}} \quad (2.43)$$

Para os casos em que o sistema evolui no tempo teremos expoentes dinâmicos diferentes dos expoentes estacionários citados anteriormente. Sendo τ o tempo de relaxação, temos que $\tau = L^Z$ e trocando τ por t teremos que $L = t^{\frac{1}{Z}}$, no ponto crítico é possível mostrar que a densidade estar relacionada com a lei de potência:

$$\rho = aL^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}} \quad (2.44)$$

$$\rho = a[t^{\frac{1}{Z}}]^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}}} \quad (2.45)$$

$$\rho = at^{\frac{-\beta}{\nu_{\perp}Z}} \quad (2.46)$$

Sendo essa a regra do decaimento do parâmetro de ordem. Temos o expoente crítico no regime dinâmico associado ao parâmetro ordem:

$$\rho \propto t^{\frac{-\beta}{Z\nu_{\perp}}} \quad (2.47)$$

Para a flutuação do parâmetro de ordem segue a equação $\Delta\rho = bL^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}}}$, e substituindo $L = t^{\frac{1}{Z}}$ temos:

$$\Delta\rho = bt^{\frac{\gamma'}{\nu_{\perp}Z}} \quad (2.48)$$

Sendo essa a regra de decaimento da flutuação do parâmetro de ordem, assim temos outro expoente crítico associado a essa flutuação:

$$\Delta\rho \propto t^{\frac{\gamma'}{Z\nu_{\perp}}} \quad (2.49)$$

Uma importante relação de escala é a regra de decaimento do cumulante que relaciona a dimensão do sistema,

$$U - 1 = t^{\frac{d}{Z}} \quad (2.50)$$

usada para estimar o expoente dinâmico Z , onde d é a dimensão do sistema.

Finalmente, temos o expoente $\nu_{\parallel}$ associado ao comprimento de correlação temporal e definido a partir da relação $\frac{d \ln \rho(\rho_c, t)}{d \rho}|_{\rho_c} = t^{1/\nu_{\parallel}}$, pois a partir da equação $\frac{d \ln \rho(\rho_c, L)}{d \rho} \propto L^{\frac{1}{\nu_{\perp}}}$ sendo que $t^{1/Z} = L$, temos:

$$\frac{d \ln \rho(\rho_c, L)}{d \rho} \propto [t^{1/Z}]^{\frac{1}{\nu_{\perp}}} \quad (2.51)$$

$$\frac{d \ln \rho(\rho_c, L)}{d \rho} \propto t^{1/\nu_{\parallel}} \quad (2.52)$$

Por meio das simulações computacionais usando a técnica da teoria de escala por tamanho finito é possível calcular com boas estimativas os expoentes críticos (estáticos e dinâmicos) para caracterizar o comportamento universal na vizinhança da transição de fase contínua.

Capítulo 3

Sistemas de Partículas Interagentes

3.1 Introdução

Neste capítulo será abordado modelos com estados absorventes, isto é, que são intrinsecamente irreversíveis. Na ausência de qualquer lei de conservação é esperado que as transições contínuas entre o estado ativado e o estado absorvente de um sistema de muitas partículas sejam pertencente a classe de universalidade PD.

3.2 Processo de Contato

Nos sistemas que possuem estados absorventes uma transição desse para qualquer outro estado é proibida e uma vez atingido esse estado o sistema não tem como escapar do mesmo. É importante salientar que todos os modelos que possuem uma transição contínua para o estado absorvente estão agrupados na mesma classe de universalidade, logo compartilham do mesmo comportamento crítico [6].

Como já vimos, o processo de contato (PC) foi proposto por T. E. Harris em 1974 com o objetivo de modelar o processo de espalhamento de uma epidemia. Nesse modelo, em cada sítio de uma rede temos um indivíduo que pode estar saudável ou doente, e a fase ativa da doença é determinada pela probabilidade de um indivíduo ser

infectado e a fase absorvente que é a probabilidade do indivíduo se recuperar da doença. Essa probabilidade é baseada na quantidade de vizinhos que estão infectados, juntamente com a taxa de infecção da epidemia. Esse é o modelo mais simples que apresenta uma transição de fase fora do equilíbrio, e consiste em um sistema interagente definido em uma rede d -dimensional onde podemos ter dois estados: ativos (ocupados) ou inativos (vazio). Considerando uma cadeia unidimensional em que cada sítio representado por i pode estar em um dos dois estados: saudável ($\sigma_i = A$) ou infectado ($\sigma_i = B$). O estado σ_i pode ser alterado de acordo com as seguintes regras [14]:

1. Os indivíduos saudáveis podem ser infectados ($A \rightarrow B$) de acordo com a taxa $n\lambda/2d$, onde n é o número de vizinhos infectados, d é a dimensão do sistema e λ é a taxa de infecção. Essa regra local é denominada criação autocatalítica, os sítios infectados surgem como sendo os reagentes com catalizadores (por exemplo, o oxigênio) na reação.
2. Os indivíduos infectados se tornam saudáveis ($B \rightarrow A$) a uma taxa unitária, independente de seus vizinhos serem saudáveis ou não. Podemos simplificar o processo a partir do esquema a seguir:

$$(B + A + A) \rightarrow (B + B + A)$$

$$(A + A + B) \rightarrow (A + B + A)$$

$$(B + A + B) \rightarrow (B + B + B)$$

$$(B) \rightarrow (A)$$

O processo de contato pode ser simulado computacionalmente a partir de regras locais markovianas. Seja uma rede de dimensão d e composta por N sítios que podem ser ocupados (ativos) ou vazios (inativos). A cada intervalo de tempo é escolhido de forma aleatória um sítio e temos duas probabilidades [6]:

- Se o sítio tiver ocupado, seja um δ distribuído uniformemente em $[0, 1]$ gerado aleatoriamente. Para $\delta \leq \alpha = 1/\lambda$ a partícula é aniquilada e o sítio torna-se vazio. Caso contrário, o sítio permanece ocupado.
- Caso o sítio σ_i esteja vazio, um do seus vizinhos é então escolhido ao acaso. Se o sítio vizinho estiver ocupado, criamos uma partícula nesse sítio e caso contrário o sítio permanece vazio.

- A cada passo de Monte Carlo calculamos o número total de partículas $\sigma = \sum_i \sigma_i$ e a partir disso determinamos a densidade média de partículas ρ e a flutuação do número de partículas:

$$\rho = \frac{1}{N} \langle \sigma \rangle \quad (3.1)$$

$$\chi = N[\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2] \quad (3.2)$$

A disseminação de uma epidemia vai então depender do parâmetro de infecção ou parâmetro de controle denominado λ . Para um indivíduo saudável ficar doente pelo menos um dos seus vizinhos deve estar infectado. No caso de todos indivíduos estarem saudáveis não há possibilidade de infecção e esse é o estado absorvente que indica o fim da epidemia.

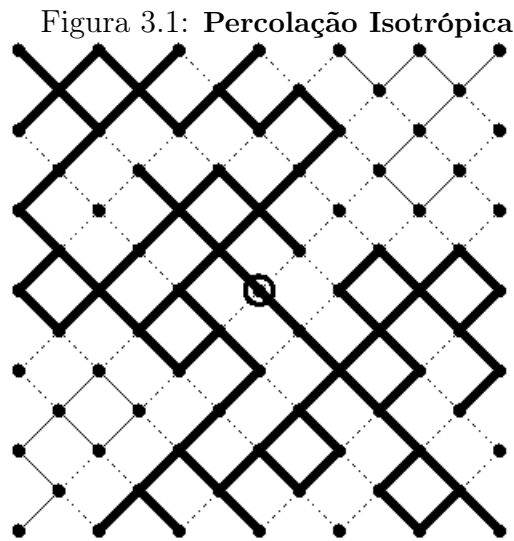
Quando o parâmetro λ de infecção é muito pequeno, teremos um longo período para observarmos a extinção da infecção. Entretanto, quando o parâmetro de infecção é grande a infecção se espalha indefinidamente. Para valores menores que um certo valor crítico λ_c o modelo possui estados estacionários que pode ser o vácuo ou a rede completamente preenchida por indivíduos saudáveis (estado absorvente) e para valores maiores que λ_c a rede fica ocupada por uma fração de doentes.

Se a dinâmica nos levar ao estado absorvente com apenas indivíduos saudáveis, este será um estado estacionário. O modelo apresenta transição de fase em qualquer dimensão d , em contraste com o modelo de Ising que não apresenta transição em uma dimensão.

3.3 Percolação Isotrópica

O conceito de percolação foi inicialmente utilizado na descrição do escoamento de um fluido em um meio poroso com canais aleatórios. Os sítios da rede sendo os poros e as ligações entre os sítios os canais. O líquido passa através dos poros sendo a ligação aberta com probabilidade p e a fechada com probabilidade $1 - p$.

A figura 3.1 ilustra o fato de observarmos que, a medida que aumentamos p , o



Fonte: Referência [15]

líquido percola no meio de forma arbitrária por longas distâncias para p pequeno o alcance será menor, e o material se torna impermeável. Ao considerarmos que o líquido escoar em qualquer direção teremos uma percolação isotrópica. Se restringirmos o escoamento de forma a existir uma direção preferencial teremos a percolação direcionada. Nesse caso o líquido escoar ao longo de uma certa direção preferencial, por exemplo quando temos a ação da gravidade [15]

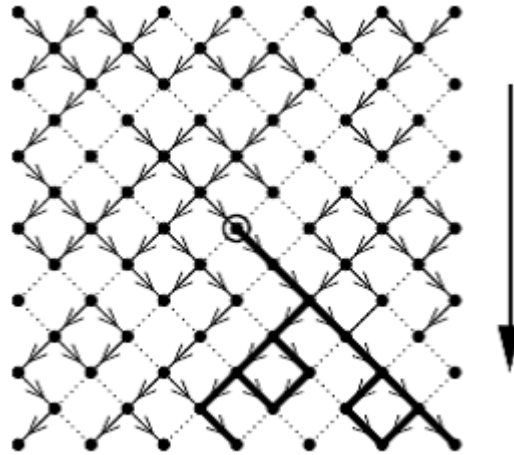
3.3.1 Percolação Direcionada

A percolação direcionada foi proposta por Broadbent e Hammersley [16], e analisada em vários modelos cuja a difusão está ligada com a transição de fase entre extinção e sobrevivência. A percolação é caracterizada como um processo de não-equilíbrio, sendo que a transição entre o estado ativo e o inativo acontece de forma contínua e se caracteriza por um comportamento universal.

Na figura 3.2 a percolação direcionada está representada por linhas sólidas para as ligações abertas sendo que as ligações fechadas estão caracterizadas por linhas fechadas. O sistema percola em uma direção preferencial representada pela seta à direita da figura.

Podemos simular a PD a partir de uma determinada configuração inicial da rede com sítios ativos, a direção preferencial sendo o tempo. Podemos utilizar o conceito de invariância de escala e identificar vários expoentes críticos, que permitem a classificação

Figura 3.2: Percolação Direcionada



Fonte: Referência [15]

em classes de universalidade. A classe da PD é fundamental no estudo de transições de fase de não equilíbrio, desempenhando um papel análogo ao da classe de universalidade de Ising para sistemas em equilíbrio [15].

3.4 Predador-Presa

O mecanismo mais básico no estudo de dinâmica de populações é a interação predador-presa. Tais interações são observadas frequentemente na natureza, e constitui o mecanismo básico para o controle populacional das espécies. O modelo mais simples admite que as presas se alimentam de plantas (cuja a fonte é inesgotável) e os predadores se alimentam das presas.

Nesse contexto o biofísico Alfred James Lotka (1880-1949) e o matemático Vito Volterra (1860-1940), de forma independente, propuseram um modelo, hoje conhecido como Lotka-Volterra, para explicar as interações entre populações de presas e predadores [17].

O modelo Lotka-Volterra considera as duas equações a seguir:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 ax - k_2 xy, \quad (3.3)$$

$$\frac{dy}{dt} = k_2xy - k_3y \quad (3.4)$$

x denota a população de presas e y a de predadores. As presas nascem com uma taxa k_1 sendo “ a ” a densidade de alimento disponível às mesmas. As presas são eliminadas pelos predadores com a taxa fixa k_2 , e os mesmos morrem de acordo com a taxa k_3 .

Note que o modelo descrito pelas equações 3.3 e 3.4 não leva em conta a capacidade de suporte do sistema. Isso pode ser visto na equação 3.3 na ausência de predadores ($k_2 = 0$), a população de presas cresce exponencialmente com a taxa k_1a . Note também que, na ausência de presas, os predadores morrem com uma taxa exponencial k_3 .

Esse modelo também pode ser utilizado para a descrição de uma epidemia, onde as presas será os indivíduos susceptíveis e os predadores como indivíduos infectados. Se estivermos modelando o sistema discretamente em uma rede, os sítios vazios será os indivíduos que foram recuperados.

Vamos considerar uma versão discreta em uma rede L^d , em que seus sítios podem estar vazios ($\sigma_i = O$) ou pode ser interpretado como um sítio contendo um alimento que permite a reprodução das presas. Os sítios podem estar ocupados por presas ($\sigma_i = x$) ou por predadores ($\sigma_i = y$). As transições entre estados obedecem regras probabilísticas que dependem do estado de cada sítio e de seus vizinhos [18]. Cada sítio da rede pode estar em um dos três estados e sofrerem as seguintes alterações:



significa que, se tivermos um sítio vazio e uma presa teremos ao final duas presas, de acordo com a taxa “ a ”.



A equação 3.6 indica que, se em um sítio tivermos um predador e uma presa, teremos em seguida dois predadores, de acordo com a taxa “ b ”.



O que indica a morte de um predador de acordo com a taxa “ c ”. Estas três equações

juntas descrevem o processo cíclico $x \rightarrow y \rightarrow O \rightarrow x$ e cuja evolução acontece seguindo as seguintes regras:

- Para ocorrer o nascimento de uma presa é necessário que um sítio escolhido esteja vazio e possua ao menos um sítio vizinho ocupado por uma presa. Uma presa nasce com probabilidade a/q multiplicado pelo número de presas na vizinhança, sendo q neste caso o número de coordenação da rede que em uma rede regular corresponde ao número de vizinhos do sítio.
- O nascimento de um predador e a morte de uma presa ocorre quando o sítio escolhido estiver ocupado por uma presa, desse modo um predador poderá ocupar esse sítio desde que pelo menos um dos vizinhos esteja ocupado por um predador. O predador então nasce com uma probabilidade b/q vezes o número de predadores na sua vizinhança.
- Para ocorrer a morte do predador temos que o sítio escolhido deve estar ocupado por um predador, independentemente de sua vizinhança. Os predadores morrem espontaneamente com probabilidade “ c ”.

Os três parâmetros a, b e c são usados para construir o diagrama de fases do modelo. Estão restritos no intervalo $[0,1]$ e consideramos $a + b + c = 1$. Note que o número de estados acessíveis e a competição entre as espécies é o que distingue esse modelo do processo de contato.

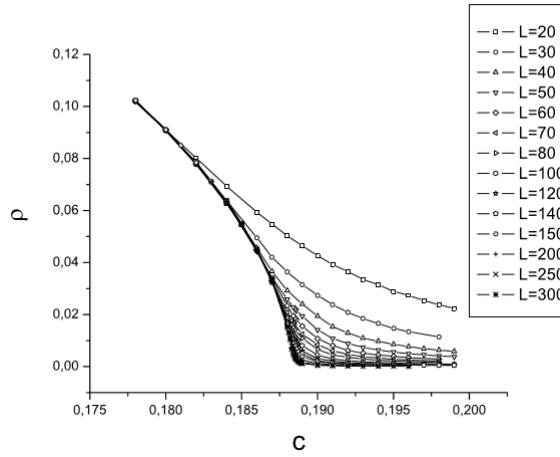
O modelo permite uma situação onde todas as presas morrem e consequentemente também os predadores, devido a falta de alimento ($x = y = 0$). Nesse caso a densidade ρ será nula. Também é possível outro estado em que todos os predadores morrem e a rede fica preenchida apenas com presas, em ambos os casos o sistema está em um estado absorvente. Os estados ativos são aqueles em que, após a evolução temporal e atingido o estado estacionário, a densidade de presas, predadores e sítios vazios são não nulas e constantes no tempo [15].

Essa interação entre predadores e presas foi estudado em [19] cujo modelo foi descrito como uma estrutura estocástica. Para estudar o comportamento crítico foi utilizado o procedimento de Monte Carlo em uma rede bidimensional. Com isso foi determinado o limiar de coexistências das espécies estudadas, que são as fronteiras da transição de fase

entre o estado ativo (em que ambas as espécies coexistem) e uma fase absorvente. A seguir mostraremos os resultados desta pesquisa.

Na figura 3.3 temos o gráfico da relação entre a densidade de predadores ρ e c a probabilidade de morte espontânea dos predadores para diferentes tamanhos de redes (a menor rede simulada foi $L = 20$ e a maior foi $L = 300$). As curvas mostradas evidenciam que em uma rede quadrada com o aumento da taxa de morte dos predadores teremos uma transição de um estado com uma densidade diferente de zero para o estado absorvedor, como já era esperado os predadores morrendo a rede ficaria preenchida somente com presas ou com sítios vazios que caracterizam o estado absorvedor neste modelo.

Figura 3.3: **Densidade de predadores ρ no estado ativado versus c densidade de morte dos predadores para diferentes tamanhos de redes.**



Fonte: Referência [19]

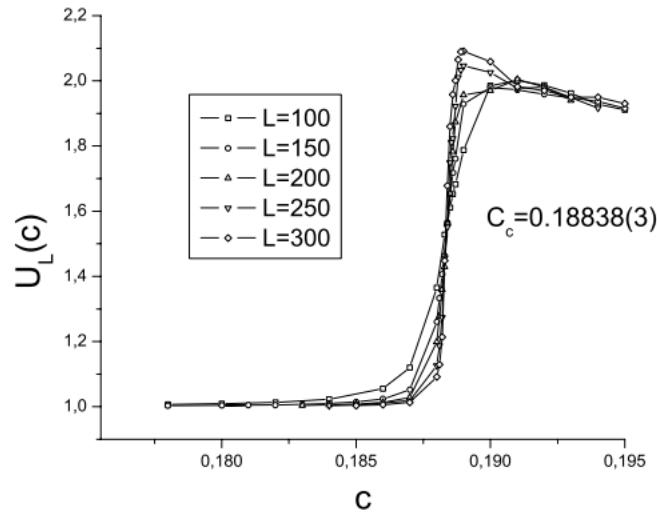
Para localizar com precisão o ponto de transição de fase, ou seja, a probabilidade crítica c_c , foi realizada a medida do cumulante que é definido como a relação entre o segundo momento e o quadrado do primeiro momento do número de partículas.

$$U_L(c) = \frac{\langle N_y^2 \rangle}{\langle N_y \rangle^2} \quad (3.8)$$

onde N_y denota o número de predadores, lembrando que no ponto crítico esta medida torna-se independente do tamanho do sistema.

Na Figura 3.4 temos o gráfico do cumulante $U_L(c)$ obtido a partir de simulações realizadas em redes de tamanhos distintos (a menor rede $L = 100$ e a maior $L = 300$), o que permitiu estimar a probabilidade crítica como $c_c = 0,18838(3)$. Com posse de valor crítico, foi encontrado que $U_L(c) \approx 1,5$, semelhante ao valor relatado em [20]. É

Figura 3.4: A relação do $U_L(c)$ em função da probabilidade de morte do predador para diferentes tamanhos de redes



Fonte: Referência [19]

importante notar que as curvas se comportam de forma suave característica que apontam para uma transição contínua e assim serem feitas as medidas que determinam o conjunto de expoentes críticos do modelo.

A partir do ponto crítico as relações de escala de tamanho finito foram utilizadas para se calcular os expoentes críticos que caracterizam uma transição de fase de não equilíbrio. Como já foi mencionado anteriormente, o parâmetro de ordem no regime estacionário obedece à lei de potência $\rho \propto L^{-\beta/\nu_\perp}$ e a derivada logarítmica $d \ln \rho / dc \propto L^{1/\nu_\perp}$.

Estas leis de escala foram utilizadas para obter seus respectivos expoentes que são apresentadas nas Figuras 3.5 e 3.6. Foi estimado $\beta/\nu_\perp = 0.79(2)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$.

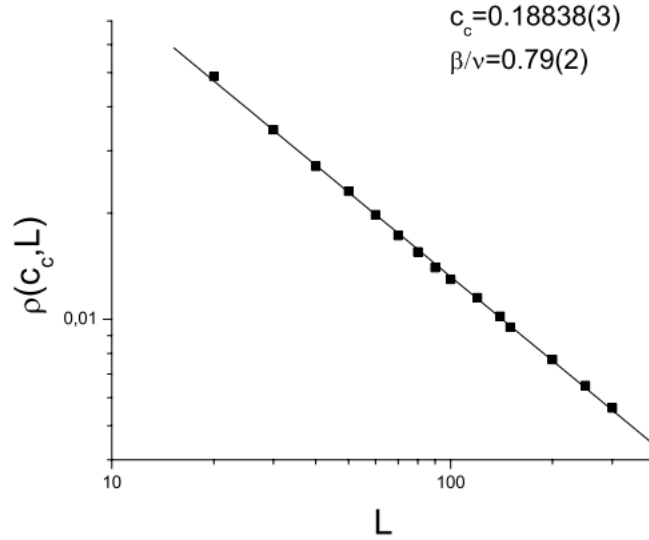
Na figura 3.7 temos o gráfico das curvas referentes a flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\rho$ versus c . $\Delta\rho$ é definida a partir de

$$\Delta\rho = [\langle N_y^2 \rangle - \langle N_y \rangle^2] N \quad (3.9)$$

Foram consideradas redes de $L = 50$ a $L = 300$. Na figura seguir 3.8 temos o gráfico da suscetibilidade versus o tamanho de rede no ponto crítico e a inclinação da reta no gráfico define o expoente $\gamma'/\nu_\perp$.

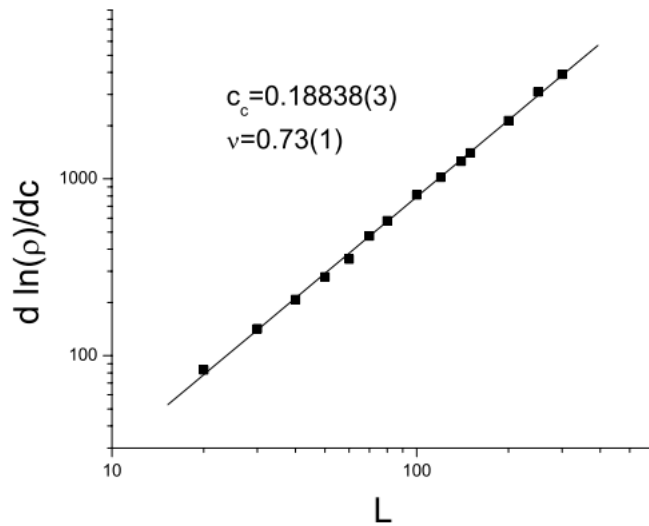
No gráfico apresentado na Figura 3.9, temos o colapso de dados da densidade do

Figura 3.5: Gráfico no log-log do parâmetro de ordem versus o tamanho linear L . A partir do melhor ajuste a uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\beta/\nu_{\perp} = 0.79(2)$ para uma rede quadrada



Fonte: Referência [19]

Figura 3.6: A derivada logarítima do parâmetro de ordem crítico versus L . A partir do melhor ajuste foi estimado o expoente crítico $\nu_{\perp} = 0.73(1)$

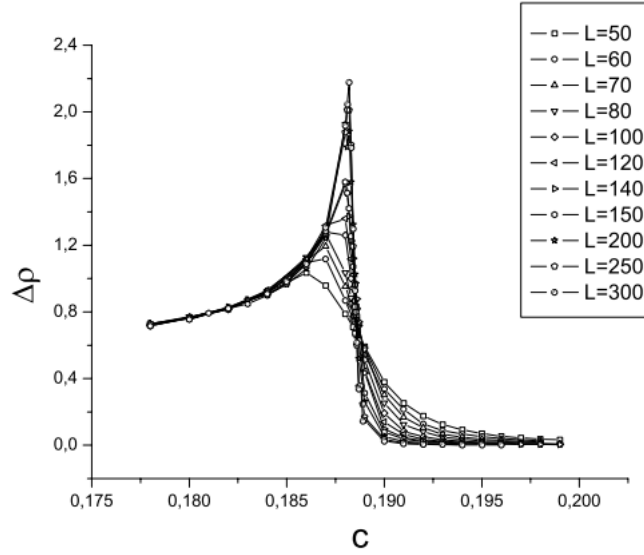


Fonte: Referência [19]

parâmetro de ordem calculada a partir de diferentes tamanhos de redes que já foram apresentados nos gráficos anteriores.

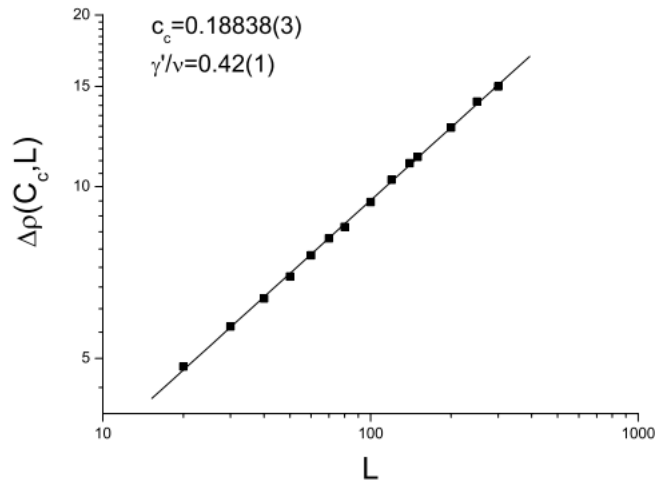
Também presente na Figura 3.10 o colapso dados da flutuação da densidade do parâmetro de ordem de diferentes tamanhos de rede. Estes são os resultados para a rede

Figura 3.7: Flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\rho$ contra c durante distinta estrutura linear dos tamanhos L .



Fonte: Referência [19]

Figura 3.8: Gráfico log-log das flutuações parâmetro de ordem $\Delta\rho$ contra L no ponto crítico. A relação $\gamma'/\nu_\perp$ estimado a partir da inclinação da reta e foi obtido $\gamma'/\nu_\perp = 0.42(1)$

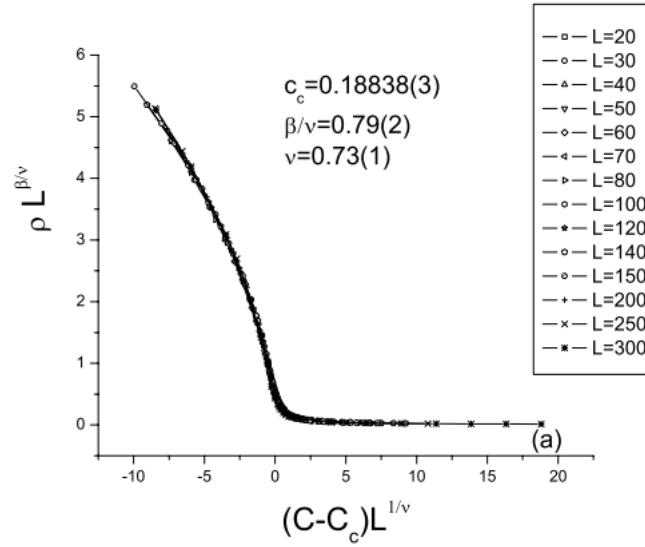


Fonte: Referência [19]

quadrada e usando $c_c = 0.18838(3)$, os expoentes $\gamma'/\nu_\perp = 0.42(1)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$ são estimadas considerando a densidade crítica. As curvas descritas pelo o colapso de dados evidenciam a precisão nos resultados obtidos para o conjunto de expoentes críticos.

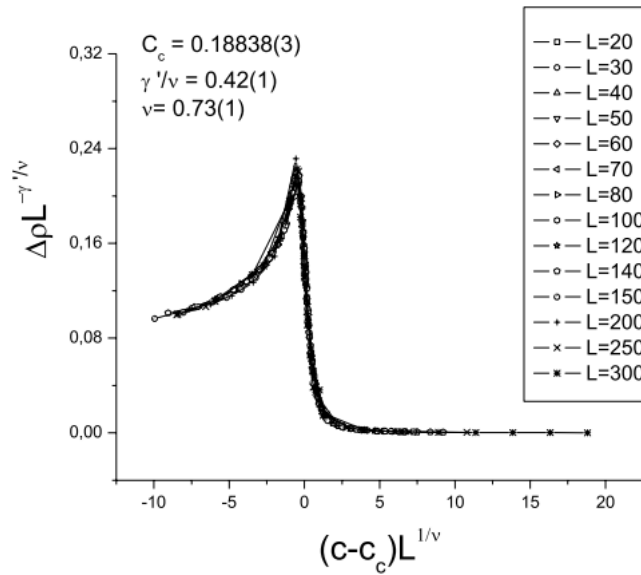
Usando $c_c = 0.18838(3)$, a relação do esponente crítico $\beta/\nu_\perp = 0.79(2)$ e o expoente crítico $\nu_\perp = 0.73(1)$ é estimado. Todos os gráficos mostrados trazem simulações feitas no

Figura 3.9: Colapso de dados da densidade do parâmetro de ordem calculado para diferentes tamanhos de redes L e usando $c_c = 0.18838(3)$, $\beta/\nu_\perp = 0.79(2)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$



Fonte: Referência [19]

Figura 3.10: Colapso de dados da flutuação da densidade do parâmetro de ordem calculado para diferentes tamanhos de redes L e usando $c_c = 0.18838(3)$, $\gamma'/\nu_\perp = 0.42(1)$ e $\nu_\perp = 0.73(1)$



Fonte: Referência9[19]

regime estacionário e ficou evidente que possui uma transição contínua, pois são apresentadas curvas suaves sem “picos” exagerados. Os resultados são consistentes com a classe da universalidade percolação dirigida.

É importante notar que o modelo possui dois estados absorventes, um quando temos toda a rede preenchida por presas e o outro quando todos os sítios estão vazios. E ainda o sistema pode possuir estados estacionários ativos onde possuem densidades de presas e predadores não nulas, nestes estado as presas e predadores estão nascendo e morrendo continuamente.

Capítulo 4

Modelo e Resultados

4.1 Introdução

Neste capítulo vamos apresentar um modelo de ramificação e aniquilação de caminhantes aleatórios para o caso de partículas com características bosônicas, isto é, onde é permitido a ocupação por várias partículas em um mesmo sítio da rede, cujos resultados foram publicados em [21].

O modelo de Caminhantes Aleatórios de Ramificação e Aniquilação consiste em partículas que difundem numa rede e aniquilam-se imediatamente após o encontro. Cada partícula pode gerar n filhotes e todo processo ocorre com taxas definidas. O modelo pertence a classe de universalidade de conservação da paridade, com caminhantes aleatórios que sofrem ramificação ou aniquilação. Aqui as criações de partículas ocorrem em um número par, sendo que o número de partículas é conservada, módulo 2. Em termos de equações de reação-difusão temos:

$$A \rightarrow (1 + n)A \quad (4.1)$$

$$2A \rightarrow \emptyset \quad (4.2)$$

Sendo $n = 2, 4, 6, 8, \dots$ o número de partículas criadas. Como pode ser observado o processo conserva o número de partículas modulo 2 (parte essencial do processo) começando com um número ímpar de partículas não se pode atingir um estado vazio, uma

vez que ao menos uma partícula permanecerá. Tal modelo difere da classe percolação direcionada porque tem uma simetria extra: a conservação de paridade adicional número total de partículas módulo 2.

Se as partículas que possuem características fermiônicas não são permitidas a ocupação de mais de uma partícula por sítio da rede. Sendo assim, como λ é a probabilidade de aniquilação, se $\lambda = 1$ e ocorrer a criação por pares ($A \rightarrow 3A$) não haverá transição quando os dois descendentes a cada processo de ramificação forem colocados simetricamente nos seus vizinhos e o sistema acaba no estado absorvente [22].

4.2 Ramificação e Aniquilação de Caminhantes Aleatórios

O modelo de ramificação e aniquilação de caminhantes aleatórios (BARW - do inglês Branching Annihilating Random Walks) introduzido por Bramson e Gray em 1985 é um processo de Markov com taxas de transição que são determinadas por um parâmetro. Dependendo da escolha do valor do parâmetro são possíveis dois tipos diferentes de comportamento a longo prazo, que chamamos de extinção e sobrevivência. Considere uma rede linear em que seus sítios encontram-se vazios ou ocupados por uma partícula escolha uma partícula aleatoriamente. Chame de p a probabilidade da partícula saltar para um de seus vizinhos mais próximos, tanto para a esquerda como para a direita. No caso em que o sítio já esteja ocupado, as partículas se aniquilam mutuamente. Com probabilidade $1 - p$, a partícula produz filhotes que são movidos para os sítios vizinhos mais próximos. Quando um descendente é criado em um sítio já ocupado, ambas as partículas se aniquilam gerando um sítio vazio. O sistema descrito consiste em um processo de difusão [23,24].

Na linguagem dos sistemas de reação-difusão o modelo descreve uma única espécie de partícula estocástica, sendo categorizado nas seguintes classes:

- Aniquilação Pura (Pure Annihilating-BARW-PA): onde ocorre a total aniquilação no encontro de duas partículas e não ocorre ramificação ($A + A \rightarrow \emptyset$). Neste caso, a partícula salta para seu vizinho com probabilidade p . Como os sítios estão ocupados as partículas se aniquilam mutuamente e os sítios se tornam ambos vazios.

- Percolação Direcionada-BARW (Directed Percolation-BARW-DR) ocorre com um processo de ramificação, onde temos $A \rightarrow (n + 1)A$ com o número de filhotes n ímpar e uma taxa de ramificação σ . Este modelo pertence à classe de universalidade Percolação Direcionada.
- Conservação da paridade (Conservation of Parity-BARW-PC) este processo ocorre predominantemente por caminhadas aleatórias de ramificação-aniquilação com número par de criações de partícula.

Sistemas onde ocorrem as transições de fase de estado ativo para estado absorvente representam um dos casos mais simples no qual observamos o verdadeiro comportamento de não equilíbrio. Assim, nesse contexto intensificou-se os estudos sobre ramificação e aniquilação de caminhantes aleatórios, sistemas compostos por partículas de uma única espécie A , que se difundem numa rede d -dimensional e que pode sofrer tanto processos de aniquilação quanto de ramificação [25,26].

Em [27] foi feito o estudo do processo de reação-difusão através da teoria de campo, onde foi usado a estrutura da aniquilação pura e utilizado para execução de expansões em torno de $\sigma = 0$, ou seja, não existe ramificação. O sistema de reações $A + A \rightarrow \emptyset$ e $A \rightarrow 2A$ pertence a classe de universalidade percolação direcionada, encontraram evidências que em todas as dimensões existe transição de fase e o valor das taxa de aniquilação para estas transições. No estudo realizado referente a classe de conservação da paridade foi encontrado o ponto crítico associado com a transição de um estado absorvente para o estado ativado abaixo de uma dimensão crítica e que ocorre a uma valor diferente de zero para a taxa de ramificação $\sigma \neq 0$.

Em [25] simulações foram feitas em uma rede linear, com aniquilação completa e ramificação simétrica com um número de filhotes $n = 4$, com isso teremos uma transição absorvente. Com essas condições as simulações mostraram um conjunto de expoentes críticos que diferem do conjunto de expoentes críticos que pertencem a classe de universalidade Percolação Direcionada. Para o caso em que o número de filhotes é o mesmo número de partículas conservada módulo 2, o estado absorvente só pode ser alcançado quando iniciar com um número par de partículas, e como dito anteriormente se $n = 4$ o modelo possui expoentes distintos da classe de PD, de acordo com [28]. Na tabela a seguir temos os valores dos expoentes críticos pertencentes a classe da PD e os expoentes encontrados em [28].

Tabela 4.1: **Tabela de Expoentes críticos**

	β	θ	δ	$\nu_{\parallel}\nu_{\perp}$
[26]	0.922(5)	0.000(1)	0.285(2)	1.750(5)
PD	0.276486(8)	0.3136861(8)	0.159464(6)	1.580745(10)

Referência: Adaptada da referência [27].

No modelo estudado em [29] cada sítio poderia ter uma partícula ou nenhuma. Quando a partícula difunde de forma aleatória para os sítios vizinhos mais próximos, se o mesmo estiver ocupado as partículas são aniquiladas. Na ramificação ocorre a criação de duas novas partículas que são distribuídas ao redor do sítio. Foi feito o estudo com um número par de filhotes e usando aproximação de campo médio em redes unidimensionais a transição de fase foi encontrada em $\nu_{\perp} = 1.85(3)$ e $\beta = 0.96(2)$ o que mostra expoentes pertencentes a classe de universalidade Conservação da Paridade.

Em [30] foi estudado o comportamento crítico do processo de ramificação de aniquilação de caminhantes aleatórios com a mesma forma de ordem e desordem espacial. Ficou evidenciado que a desordem fraca não altera o comportamento de escala das quantidades estudadas. No entanto, para desordem forte os expoentes críticos são modificados ao longo da desordem da classe CP.

Simulações foram realizadas com ramificação assimétrica onde o número de filhotes $n = 2$ e aniquilação completa por pares. Seus expoentes foram consistentes com os expoentes encontrados em simulações feitas com ramificação simétrica e com número de filhotes $n = 4$ [31,32]. Este processo de ramificação simétrica com o número de filhotes $n = 2$ foi usada para demonstrar uma transição com uma taxa de ramificação finita quando é considerada uma aniquilação incompleta e os expoentes encontrados foram consistentes com a classe de universalidade CP [33].

Nesta dissertação estudamos o caso com um processo de criação com $n = 2$ filhotes e através de um processo de ramificação finita. As transições de fase contínua de um estado absorvente para um estado ativo visto em modelos de uma única componente pertence a classe de universalidade CP.

A aniquilação finita de partículas fermiônicas ocorre no processo de difusão para um local onde já é habitado por outra partícula, mas a realização deste processo é submetido a uma probabilidade k e caso essa probabilidade não seja superada, a partícula que foi

escolhida para difundir permanece no seu sítio de origem. Consequentemente a difusão depende da densidade local de partículas [33]. A forma como é tratada a difusão é de suma importância em algumas transições da fase em um estado de absorção [33]. Usaremos uma estratégia para permitir uma aniquilação finita, em vez de alterar a taxa de difusão local vamos considerar um modelo de estrutura estocástica para Caminhantes Aleatórios de Ramificação e Aniquilação de partículas bosônicas onde fica possível a ocupação múltipla dos sítios [34-37].

Realizamos simulações estacionárias e dinâmicas que apontam um conjunto de quantidades críticas que possuem características consistentes com um comportamento crítico universal pertencente a uma transição de um estado absorvente. E esta transição pertence a classe de universalidade Conservação da Paridade, que conserva a paridade das partículas localmente. Demonstraremos que ambos os conjuntos de expoentes críticos estacionários e dinâmicos são consistentes com a validade da relação hyperescala.

Admitindo a construção de uma teoria de campo médio para um sistema com um número q de coordenações, escolhendo um sítio e considerando seus vizinhos como sítios de campo médio. Quando é admitido que o número de partículas nos locais de campo médio é igual à do local escolhido, teremos a equação diferencial a seguir [38]:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{1}{q+1}[(1-\psi)\{\psi p + n\psi(1-p)\} - \psi\{\psi p + n\psi(1-p) + p\}] \quad (4.3)$$

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{1}{q+1}\psi\{(1-p)n - 2\psi(n+p-np)\} \quad (4.4)$$

Temos que:

$1 - \psi$ é a probabilidade do sítio escolhido ser vazio;

$1 - p$ é a probabilidade de ramificar;

p é a probabilidade de saltar a outro sítio;

n é o número de filhotes;

ψ é a concentração de partículas;

1 é a probabilidade de aniquilar;

q é o número de coordenações;

Para o processo em que o sítio será esvaziado temos os seguintes casos:

- Quando a partícula visita um sítio já habitado por outra partícula ocorre o processo de aniquilação deixando um sítio vazio;
- Quando a partícula mãe cria filhotes e estes saltam para sítios onde já são ocupados por outras partículas ocorre a aniquilação deixando o sítio vazio
- Quando a partícula mãe cria filhotes e em seguida difunde para um sítio onde já existe outra partícula deixando o sítio vazio;
- Quando a partícula salta para o sítio vizinho, esvaziando o sítio que ocupava anteriormente;

Para o processo em que o sítio será preenchido temos o seguinte:

- Quando a partícula mãe cria o filhote e o mesmo difunde para um sítio vizinho que estava vazio preenchendo o mesmo ou quando a partícula mãe cria os filhotes e difunde para ocupar o sítio vizinho que está vazio;

Em resumo, no termo “Ramificação e Aniquilação de Caminhantes Aleatórios ” é facilmente identificado que as partículas saltam (ramificam) e estas ações ocorrem de forma independente das demais partículas, exceto quando duas partículas tentam ocupar o mesmo sítio da rede.

4.3 Simulações Computacionais e Resultados

Aqui trabalhamos com transições de um estado ativado para um estado absorvente, um modelo em uma dimensão com caminhantes aleatórios de ramificação e aniquilação cujo número de filhotes é par.

Conforme dito anteriormente, a Conservação da Paridade (Branching and Annihilating Random Walkers-Conserved Parity-BARW-PC) compreende transições de fase que ocorrem nos processos de reação-difusão da seguinte forma:

$$A \rightarrow^{\sigma} (n+1)A; \text{ número de filhotes } n \text{ e taxa de ramificação } \sigma \quad (4.5)$$

$$A + A \rightarrow^{\lambda} \emptyset; \text{ aniquilando com taxa } \lambda \quad (4.6)$$

O trabalho foi realizado usando simulação computacional com o método de Monte Carlo. Encontramos a região do ponto crítico e calculamos o conjunto de expoentes críticos. Simulamos em uma rede linear de tamanho L com condições de contorno periódicas (isso significa que o último sítio da esquerda é vizinho do primeiro sítio da direita e o último sítio da direita é vizinho do primeiro sítio da esquerda), para o caso de partículas bosônicas em que é permitido a ocupação múltipla dos locais.

A dinâmica do modelo envolve os processos de ramificação, difusão e aniquilação sendo que ocorrem de forma independente a cada varredura da rede. Inicialmente começamos com cada sítio da cadeia preenchido com uma partícula.

A ramificação, que é o processo onde a partícula mãe vai gerar seus filhotes, considere que cada partícula gera $n = 2$ filhotes com uma probabilidade σ , sendo que os dois filhotes de cada cada partícula que fez a ramificação são colocados na mesma posição original. Após ramificar, todas as partículas vão difundir a um dos seus vizinhos com igual probabilidade de ir para o sítio da direita ou para o sítio da esquerda. Lembrando que as partículas que ocupam o mesmo sítio serão aniquiladas por pares com uma probabilidade λ .

Nas seguintes simulações numéricas, a taxa de ramificação σ é tomada como parâmetro de controle da transição de fase do estado absorvente, e a aniquilação λ é fixada, temos que a fase ativa é caracterizada pela sobrevivência de uma densidade finita de partículas. Como as simulações são realizadas em redes finitas as flutuações aleatórias podem conduzir o sistema para o estado absorvente, para evitar esse problema deve ser realizado médias no regime quase-estacionário [39-41].

Quando trabalhamos com modelos com conservação da paridade, para evitar que flutuações aleatórias aconteçam trabalhamos com o número de partículas ímpar, isto significa que o estado absorvente nunca será realmente alcançado. Logo, a transição será observada entre um estado com uma densidade finita de partículas e um estado com uma densidade de partículas da ordem de $1/L$ que representa o estado absorvente.

Temos que o conjunto de expoentes críticos estático e dinâmico caracterizam o comportamento crítico do sistema estudado, estes são obtidos através do efeito tamanho finito e tempo finito de análise de escala. Calculamos o ponto crítico e com isso foi possível determinar o conjunto de expoentes críticos estáticos e dinâmicos.

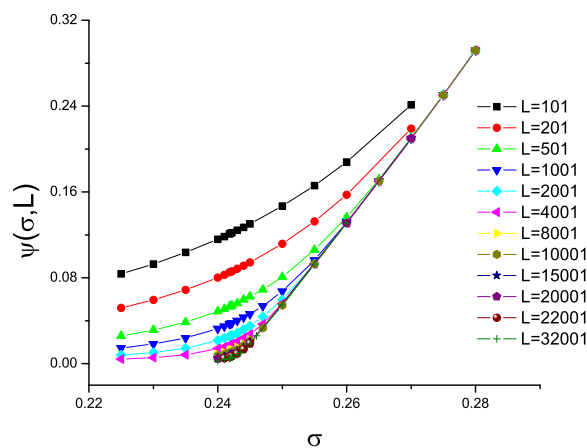
A princípio as simulações foram realizadas no estado estacionário, com o objetivo

de encontrar o ponto crítico e dessa forma determinar os expoentes críticos. Para isso simulamos redes finitas unidimensionais de tamanhos $L = 101, 201, 501, 1001, 2001, 4001, 8001, 10001, 15001, 20001, 22001$ e 32001 sítios. Cada varrimento na rede é considerada uma unidade de tempo ou um passo de Monte Carlo (MCS). O sistema evolui no tempo e atinge o estado estacionário estatisticamente. Medimos o parâmetro de ordem, a densidade de partículas A :

$$\Psi(\sigma, L) = \frac{\langle N_A(\sigma, L) \rangle}{L} \quad (4.7)$$

onde $\langle N_A(\sigma, L) \rangle$ é o número médio de partículas no regime estacionário. Os resultados mostrados a seguir foram feitos com a aniquilação representada por $\lambda = 0.5$.

Figura 4.1: Densidade de partículas no estado ativo versus σ para diferentes cadeias lineares L . Preto denota a menor cadeia ($L = 101$) e verde a maior ($L = 32001$).



Fonte: Referência: [21]

No gráfico da figura 4.1 mostramos a densidade de partículas $\psi(\sigma, L)$ como uma função da probabilidade de ramificação σ , tal como obtido a partir de simulações em redes lineares de tamanhos distintos L .

Quando estamos trabalhando com simulações no estado estacionários é necessário que as medidas sejam feitas descartando os primeiros passos L^2 , isto é, são realizadas após o tempo de relaxamento adequado, mesmo que nas imediações do ponto crítico. Geralmente as médias variam de acordo com o tamanho da rede: de $2 \times 10^5 L$ configurações para a menor estrutura ($L = 101$) até $10L$ para o maior.

Para localizar o ponto crítico, calculamos a flutuação relativa do parâmetro de

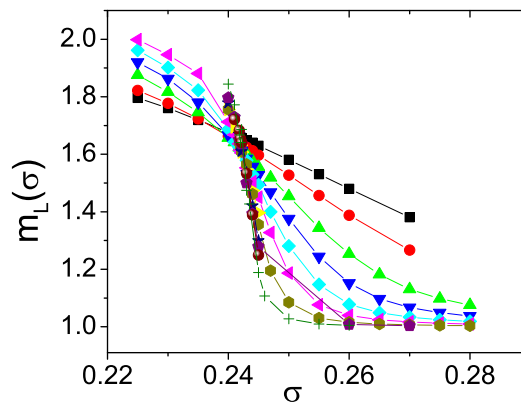
ordem para diferentes tamanhos de rede. Esta quantidade deve ser invariante por escala no ponto crítico, exceto por pequenas correções de escala que podem estar presentes. Logo, devemos observar que no gráfico do cumulante as redes com diferentes estruturas se cruzam em um único ponto, que é o ponto crítico [41].

Em nossas simulações foram usados valores para a ramificação no intervalo de $0.225 < \sigma < 0.285$ com o passo de 0.005 próximo ao ponto crítico. Como já mencionamos, para localizar com precisão a probabilidade crítica de ramificação σ_c calculamos a relação entre o segundo momento e o quadrado do primeiro momento do número de partículas:

$$m_L = \frac{\langle N_A^2 \rangle}{\langle N_A \rangle^2} \quad (4.8)$$

No gráfico da figura 4.2, mostramos $m_L(\sigma)$ obtidos a partir de simulações realizadas em tamanhos de rede distintos, o que nos permitiu estimar a probabilidade crítica como $\sigma_c = 0.2427(1)$.

Figura 4.2: O momento $m_L(\sigma)$ como uma função da probabilidade de ramificação σ para distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1). A invariância de escala no ponto crítico nos permitiu estimar com precisão a probabilidade de ramificação crítica $\sigma_c = 0,2427(1)$.

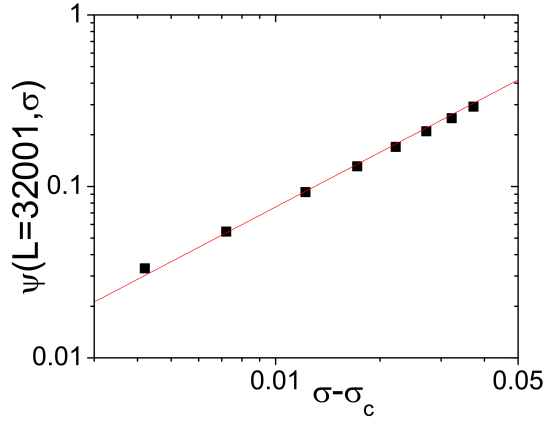


Fonte: Referência:[21]

Localizado o ponto crítico onde ocorre a transição σ_c , relações de escala de tamanho finito foram usadas para calcular os expoentes críticos. No limite termodinâmico, próximo ao ponto crítico o parâmetro de ordem obedece a lei de potência $\psi(\sigma > \sigma_c) \propto (\sigma - \sigma_c)^\beta$. Consideramos a maior rede simulada e assim estimamos $\beta = 0.94(2)$ (ver a figura 4.3).

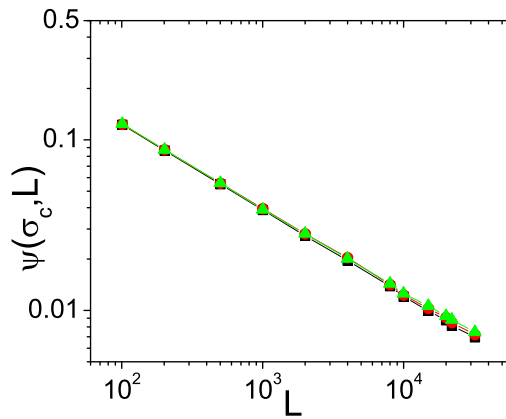
Mas como o processo usado no gráfico da figura 4.3 é impreciso preferimos ainda,

Figura 4.3: Gráfico no Log-log do parâmetros de ordem $\psi(L = 32001)$ versus $\sigma - \sigma_c$ acima do ponto crítico. O expoente crítico β é estimado a partir da inclinação da reta ajustada $\psi \approx (\sigma - \sigma_c)^\beta$ que fornece $\beta = 0.94(2)$.



Fonte: Referência:[21]

Figura 4.4: Gráfico no Log-log do parâmetro de ordem versus o tamanho linear L para $\sigma_c = 0.2426$ (quadrados pretos), $\sigma_c = 0.2427$ (círculos vermelhos) e $\sigma_c = 0.2429$ (triângulos verdes). Para $\sigma_c = 0.2427$ e o melhor ajuste para uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\beta/\nu_\perp$.

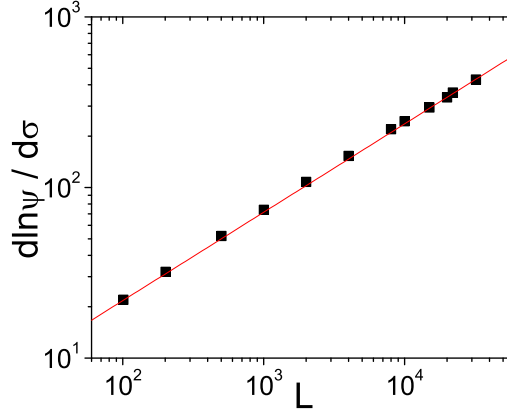


Fonte: Referência: [21]

explorar as relações de escala de tamanho finito do parâmetro de ordem crítico $\psi(\sigma_c, L) \propto L^{-\beta/\nu_\perp}$ e a derivada logarítmica $\frac{d \ln \psi(\sigma_c, L)}{d \sigma} \propto L^{1/\nu_\perp}$. Temos estas leis de escala representadas nas figuras 4.4 e 4.5, a partir da qual estimamos $\beta/\nu_\perp = 0.495(1)$ e $\nu_\perp = 1.93(4)$.

Na figura 4.6 calculamos a flutuação do parâmetro de ordem contra σ para vários

Figura 4.5: A derivada logarítmica do parâmetro de ordem contra L no ponto crítico. A partir do melhor ajuste para uma lei de potência, estimamos o expoente crítico $\nu_{\perp} = 1.93(4)$.

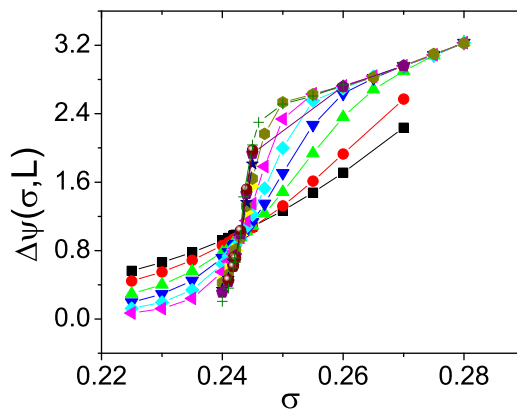


Fonte: Referência: [21]

tamanhos de rede. Definida pela equação a seguir:

$$\Delta\psi(\sigma, L) = [\langle N_A^2 \rangle - \langle N_A \rangle^2] L \quad (4.9)$$

Figura 4.6: Flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\psi(\sigma, L)$ versus σ para distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1). O cruzamento em $\sigma = 0.2427(1)$ sinaliza finitas flutuações críticas no parâmetro de ordem na transição.



Fonte: Referência: [21]

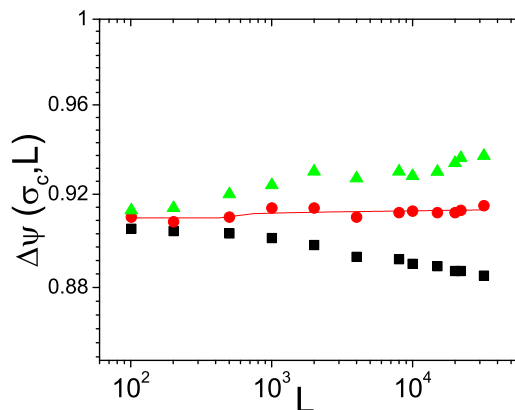
Um fator importante é que a medida que aumentamos o tamanho do sistema, ocorre uma diminuição no efeito de tamanho finito e levando a um tempo menor para que o sistema relaxe. Além da influência do tamanho da rede, essa outra variável que

influi diretamente no aumento do tempo computacional é o que chamamos de tempo de relaxação, que ameniza qualquer outra influência sobre o sistema, pois os resultados só começam a serem guardados após o sistema atingir o equilíbrio. Logo teremos que as flutuações nas médias são menores com o aumento do sistema.

Para as flutuações do parâmetro de ordem em que temos as duas regiões distintas, temos que: abaixo do ponto crítico, as flutuações do parâmetro de ordem diminuem com o tamanho do sistema, desaparecendo no limite termodinâmico como já é esperado para uma fase de absorção. E o contrário acontece acima do ponto crítico, onde as flutuações crescem com o tamanho do sistema. Ainda no gráfico mostrado na figura 4.6 notamos que temos curvas bem suaves o que evidencia uma transição de fase contínua de segunda ordem.

Por outro lado, usamos os dados para as flutuações do parâmetro de ordem nas imediações do ponto crítico e são mostrados no gráfico da figura 4.7 para obter expoentes críticos da relação $\gamma'/\nu_\perp$ a partir de $\Delta\psi(\sigma_c, L) \propto L^{\gamma'/\nu_\perp}$ no ponto crítico. A independência aproximada do tamanho das flutuações do parâmetro no ponto crítico é consistente com $\gamma'/\nu_\perp = 0.0$ [24].

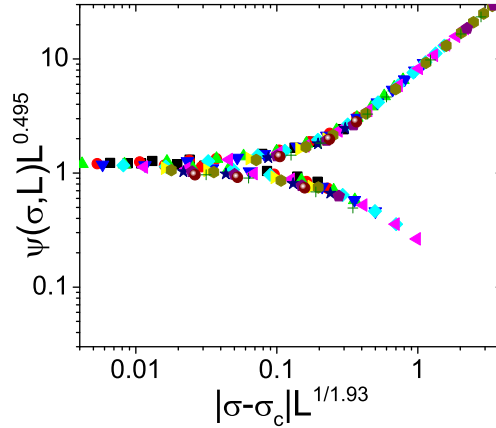
Figura 4.7: Gráfico no log-log da flutuação do parâmetro de ordem $\Delta\psi$ versus L no ponto crítico para $\sigma_c = 0.2426$ (quadrados pretos), $\sigma_c = 0.2427$ (círculos vermelhos) e $\sigma_c = 0.2429$ (triângulos verdes). Para $\sigma_c = 0.2427$ o expoente da relação $\gamma'/\nu_\perp$ é estimado a partir da inclinação da linha reta a partir do qual obtivemos $\gamma'/\nu_\perp = 0.005(4)$.



Fonte: Referência: [21]

No gráfico mostrado na figura 4.8 mostra o colapso de dados para distintos tamanhos de rede em uma única curva o que mostra a precisão no conjunto de expoentes

Figura 4.8: Colapso de dados da densidade-parâmetro de ordem calculado a partir de distintos tamanhos L (o mesmo que na figura 4.1), $\beta/\nu_\perp = 0.495$ e $\nu_\perp = 1.93$. O colapso de dados a partir de diferentes tamanhos corrobora a precisão dos parâmetros críticos estimados. O ramo inferior corresponde aos dados a partir da fase de absorção $\sigma < \sigma_c$ enquanto o ramo superior representa dados da fase ativa $\sigma > \sigma_c$.



Fonte: Referência: [21]

críticos estimados.

Tabela 4.2: Densidade crítica e expoentes estacionários

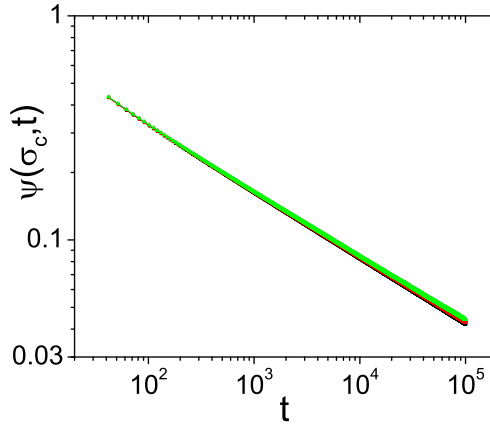
λ	σ_c	β	$\beta/\nu_\perp$	$\nu_\perp$	$\gamma'/\nu_\perp$	$(2\beta + \gamma')/\nu_\perp$
0.5	0.2427(1)	0.94(2)	0.495(1)	1.93(4)	0.005(4)	0.995(6)
[24]		0.92(3)	0.500(5)	1.84(6)	0.00(3)	1.00(4)

Para efeito de comparação, mostramos expoentes para o BARW com $n = 4$ descendentes simétricas e aniquilação completa de partículas fermiônicas [25]. A última coluna representa a relação hyperescala $(2\beta + \gamma')/\nu_\perp = d = 1$, o qual é satisfeito dentro das barras de erro.

Na tabela 4.2 são apresentados os valores dos expoentes críticos σ_c , β , $\beta/\nu_\perp$, $\nu_\perp$ e $\gamma'/\nu_\perp$. São mostrados o conjunto de expoentes calculados que são comparados com os expoentes mostrados em [25]. Os valores para a relação hiperscala em $1D$ são apresentadas na última coluna para comparação [24]. O valor estimado é consistente com $2\beta/\nu_\perp + \gamma'/\nu_\perp = d$ para $d = 1$.

Como falado anteriormente, também realizamos simulações para o caso dinâmico, as simulações foram feitas a partir da configuração inicial com uma partícula habitando cada sítio da rede. A evolução do parâmetro de ordem, a sua relação de momento e flutuações foram utilizados para estimar alguns expoentes críticos dinâmicos. A seguir, consideramos o processo de relaxamento em cadeias com $L = 10^5$ locais e as quantidades

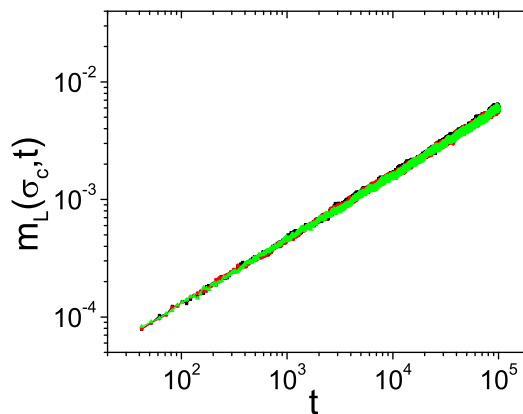
Figura 4.9: A evolução no tempo do parâmetro de ordem próximo ao ponto crítico: $\sigma_c = 0.2422$ (preto), $\sigma_c = 0.2427$ (vermelho) e $\sigma_c = 0.2430$ (verde). Usando $\sigma_c = 0.2427$, $L = 10^2$ e uma média de mais de 10^4 cópias, estimamos $\delta = \beta/\nu_\perp Z = 0.286(4)$ a partir da lei de potência apropriada.



Fonte: Referência: [21]

médias a partir de 10^4 execuções distintas. A densidade do parâmetro de ordem relaxa com a lei de escala dinâmica $\psi(\sigma_c, t) \propto t^{-\beta/Z\nu_\perp}$, onde $Z = \nu_\parallel/\nu_\perp$. No gráfico mostrado na figura 4.9 nós mostramos essa evolução no tempo. A hipótese de escala dinâmica também prevê que a relação do momento $m_l(\sigma_c, t) \propto t^{d/Z}$ mostrado no gráfico da figura 4.10.

Figura 4.10: Evolução do tempo do momento parâmetro de ordem perto do ponto crítico: $\sigma_c = 0.2422$ (preto), $\sigma_c = 0.2427$ (vermelho) e $\sigma_c = 0.2430$ (verde). Usando $\sigma_c = 0.2427$, $L = 10^5$ e uma média de mais de 10^4 cópias, estimamos $Z = 1.76(1)$.



Referência:[21]

Na figura 4.11 estimamos o expoente $\nu_\parallel$ definido por $\xi_\parallel \propto (\sigma - \sigma_c)^{-\nu_\parallel}$ usando $\frac{d \ln \psi(\sigma, t)}{d \sigma} \Big|_{\sigma_c} \propto t^{1/\nu_\parallel}$ próximo ao ponto crítico de transição de fase. Este cálculo independente

do expoente $\nu_{\parallel}$ mostrando mais evidências do comportamento crítico incomum do sistema.

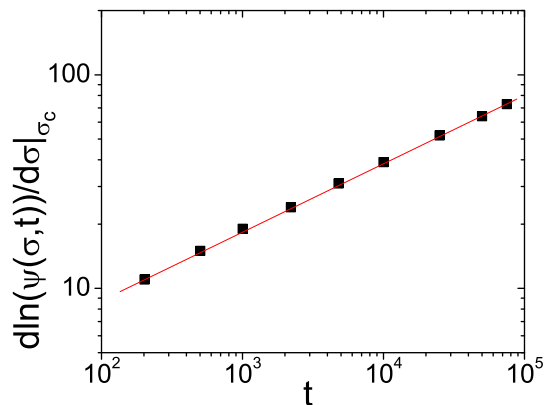
Tabela 4.3: **Densidade crítica e expoentes Dinâmicos**

λ	σ_c	$\beta/Z\nu_{\perp}$	Z	$\gamma'/Z\nu_{\perp}$	$\nu_{\parallel}$	$\nu_{\perp}$	$(2\beta + \gamma')/\nu_{\perp}$
0.5	0.2427(1)	0.286(4)	1.76(1)	0.001(2)	3.27(2)	1.86(2)	1.01(3)
[25]		0.285(2))	1.750(5)		3.25(10)	1.86(6)	

Para efeito de comparação, mostramos expoentes para o BARW com $n = 4$ descendentes simétricas e aniquilação completa de partículas fermiônicas [25]. A última coluna representa a relação de hiperscala $(2\beta + \gamma')/\nu_{\perp} = d = 1$, o qual é satisfeito dentro das barras de erro.

O melhor ajuste para a lei de potência a partir dos dados numéricos fornece $\nu_{\parallel} = 3,27(2)$. Este valor, em conjunto com o correspondente valor de Z foram usadas para calcular os valores de $\nu_{\perp}$ forma independente.

Figura 4.11: **Cálculo independente para o expoente pelo uso da derivada logarítmica do parâmetro de ordem perto do ponto crítico $\sigma_c = 0.2427$. O ajuste da lei de potência fornece $\nu_{\parallel} = 3.27(2)$. Combinado com o valor previamente estimado de Z , isto leva a $\nu_{\perp} = 1.86(2)$**



Fonte: Referência: [21]

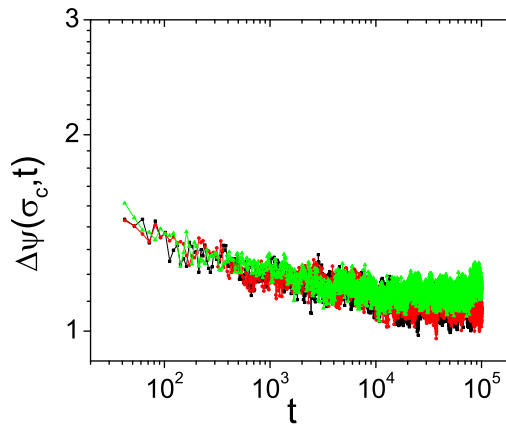
Finalmente, o tempo de evolução das flutuações de parâmetro de ordem é mostrado na Figura 4.12. Predições de escala dinâmica $\Delta\psi(\sigma_c, t) = t^{\gamma'/Z\nu_{\perp}}$. As estimativas dos expoentes críticos dinâmicos são relatados na tabela 2. Eles também satisfazem a relação de hiperscala [43].

Neste capítulo, foi apresentado nosso modelo de ramificação e aniquilação de caminhantes aleatórios, no qual estudamos seu comportamento crítico no processo em que partículas bosônicas difundem em uma cadeia linear.

Nosso sistema apresenta uma transição de fase de um estado absorvente, que possui uma probabilidade de ramificação σ e que de acordo com esta cada partícula gera $n = 2$ filhotes distribuídos no local de origem.

Após simulações encontramos uma transição contínua de segunda ordem e assim calculamos o ponto crítico e o conjunto de expoentes críticos que regem esta transição de fase de não-equilíbrio.

Figura 4.12: **Evolução no tempo das flutuações de parâmetro de ordem na vizinhança do ponto de $\sigma_c = 0.2422, 0.2427$, e 0.2430 $L = 10^5$ e uma média de mais de 10^4 cópias. A partir do ajuste por uma lei de potência dos dados assintótico de σ_c , estimamos $\gamma'/Z\nu_\perp = 0.001(2)$.**



Fonte: Referência: [21]

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

5.1 Perspectivas para futuros trabalhos

Aqui apresentamos resultados preliminares de um problema que estamos estudando e pesquisas que serão desenvolvidas posteriormente, que versa projetos futuros, tal que uma tese de doutorado.

5.1.1 Modelo de Criação por trincas

A partir do processo de contato é possível fazer generalizações que consistem no fato da autocatálise só ocorrer quando tiver um determinado número de partículas definido, para os modelos de criação por pares e trincas em que a criação ocorre com um certo número de partículas, o primeiro necessita de número mínimo de dois, de criação por trincas de três e assim por diante [44].

Normalmente os modelos apresentam transições fase de segunda ordem. Se considerarmos uma população de partículas que residem em locais de uma estrutura (com, no máximo, uma partícula por local), que evolui através de aniquilação espontânea $X \rightarrow 0$, criação autocatalítica $nX \rightarrow (n+1)X, n \geq 1$ e o pulo para o vizinho mais proximo, sendo que para o caso mais simples, ou seja, com $n = 1$ teremos o processo de contato [45].

Considerando uma população de partículas que residem em uma rede (que acontece com no máximo uma partícula por sítio), no modelo de tripleto-criação temos que cada sítio representado por σ_i pode estar vazio $\sigma_i = 0$ ou ocupado com uma partícula $\sigma_i = 1$.

Para este modelo temos algumas definições que estão descritas a seguir, sendo que estas regras (criação, aniquilação e pulo/difusão) ocorrem no sistema de forma aleatória [44]:

- Criação: Um sítio i é escolhido de forma aleatória. Para o caso $\sigma_{i+1} = \sigma = \sigma_{i-1} = 1$, ou seja, o sítio escolhido e os seus vizinhos (da direita e da esquerda) estão ocupados com um partícula cada uma formando uma trinca, neste caso uma nova partícula é colocada de forma aleatória para $i + 2$ ou $i - 2$ caso este sítio esteja vazio e caso contrário não ocorre a criação. Ocorre com probabilidade denominada

$$\frac{(1 - D)\lambda}{(1 + \lambda)} \quad (5.1)$$

o λ representa a taxa de criação.

- Aniquilação: Quando o sítio escolhido (aleatoriamente) já é habitado por uma partícula $\sigma_1 = 1$, ocorre a aniquilação desta. Este processo corre com probabilidade:

$$\frac{(1 - D)}{(1 + \lambda)} \quad (5.2)$$

- Pulo/Difusão: O sítio i é escolhido aleatoriamente, logo σ_1 e σ_{i+1} são trocados (a partícula pula para o sítio vizinho da direita). Ocorre com probabilidade que denominada de D .

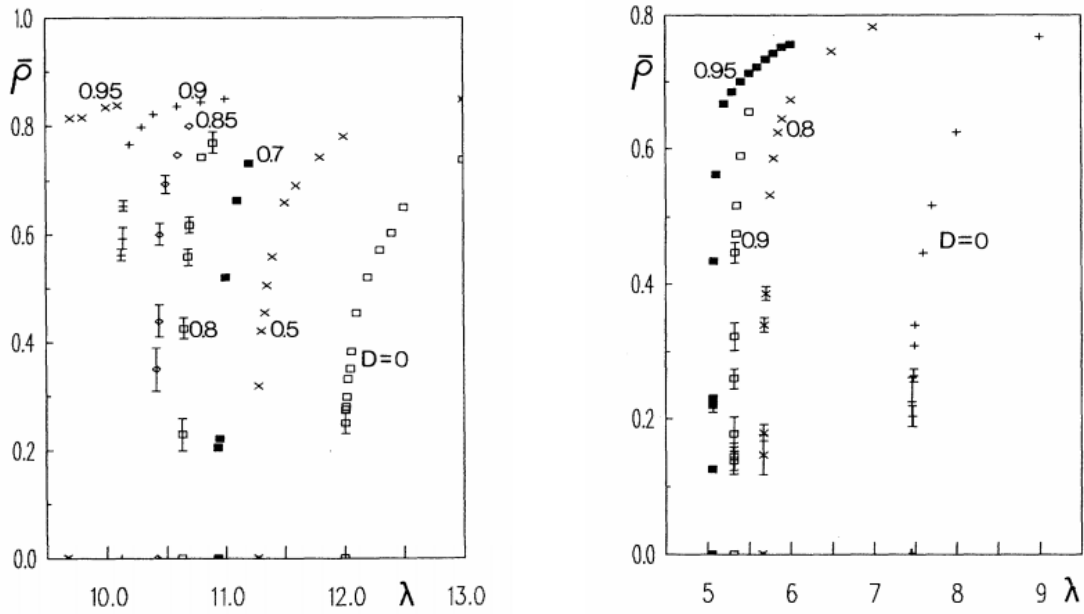
Para este modelo de tripletos temos a equação de campo médio:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -a\rho(x, t) - b\rho(x, t)^2 + D \nabla^2 \rho(x, t) \quad (5.3)$$

onde $\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t}$ é a densidade de partículas em função tempo e D representa a difusão. Quando temos uma transição de primeira ordem o termo da equação ρ^2 é o fator dominante na equação, simulações em [46] mostraram que a transição é na verdade contínua em uma e duas dimensões espaciais, e descontínua quando $d = 4$. Assim, $d = 4$ marca a dimensão crítica, abaixo do qual as previsões de campo médio são qualitativamente incorrecta. Para $d < 4$ as partículas são fortemente agrupadas de modo a que a taxa de produção é proporcional a ρ e não ρ^2 .

No gráfico da figura 5.1 – (a) temos simulações do modelo de tripleto para diferentes difusões, as curvas indicam que o modelo apresenta uma transição de fase contínua de

Figura 5.1: Gráfico do parâmetro de ordem versus parâmetro de controle



(a) Densidade de partículas em função da taxa de criação para o modelo de trincas

(b) Densidade de partículas em função da taxa de criação para o modelo de pares

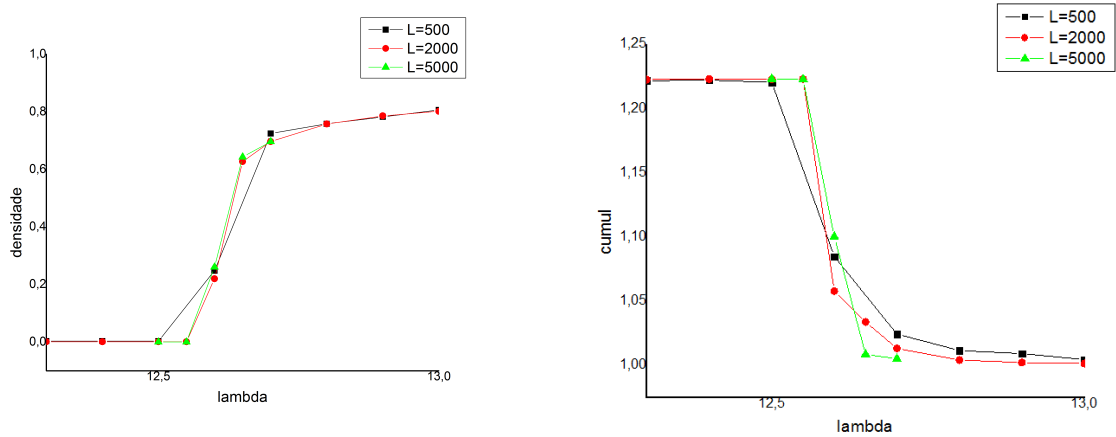
Fonte: Referência [44]

segunda ordem para difusões baixas e se $D > 0.85$ temos uma transição descontínua de primeira ordem. Em [44] também foi estudado o modelo de criação de pares para diferentes difusões, como mostrado no gráfico da figura 5.1 – (b) onde notamos que para alta difusão ou baixa difusão (por exemplo $D = 0.95$ ou $D = 0.0$) teremos uma transição fase contínua.

Motivados com os estudos realizados em [44] procuramos estudar o modelo de criação por trincas com o objetivo de compreender a transição de fase para diferentes difusões. Inicialmente simulamos redes de diferentes tamanhos ($L = 500$, $L = 2000$, $L = 5000$) todas com a mesma taxa de difusão $D = 0.8$. Em seguida, fizemos o gráfico da densidade em função da taxa de criação (ver figura 5.2 – (a)) que mostra curvas suaves características de uma transição contínua e consistentes com resultados encontrados em [44] que indicam uma transição de segunda ordem para esta difusão.

Na figura 5.2 – (b) observamos o gráfico do cumulante em função da taxa de criação para os diferentes tamanhos de rede (mesmos da figura 5.2 – (a)) todas com a mesma taxa de difusão $D = 0.8$ e notamos que neste o cumulante exibe também curvas suaves (sem picos exagerados) que caracteriza uma transição de fase contínua.

Figura 5.2: Gráfico do parâmetro de ordem versus o parâmetro de controle

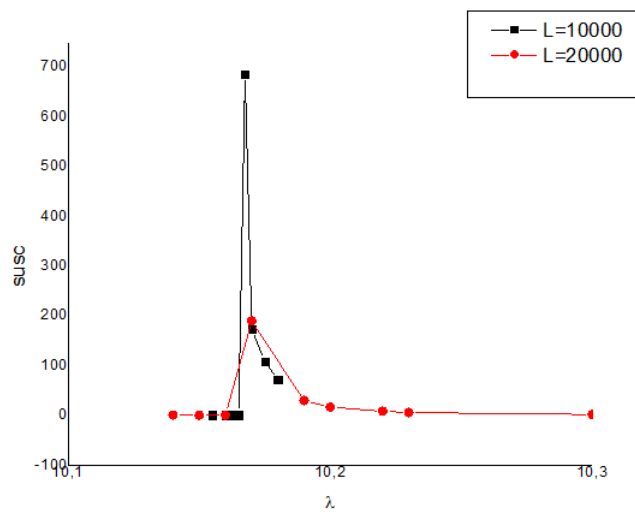


(a) Gráfico da densidade em função da taxa de criação para o modelo de triplete.

(b) Gráfico do cumulante em função da taxa de criação.

Fonte: Referência [47]

Figura 5.3: Suscetibilidade em função da taxa de criação

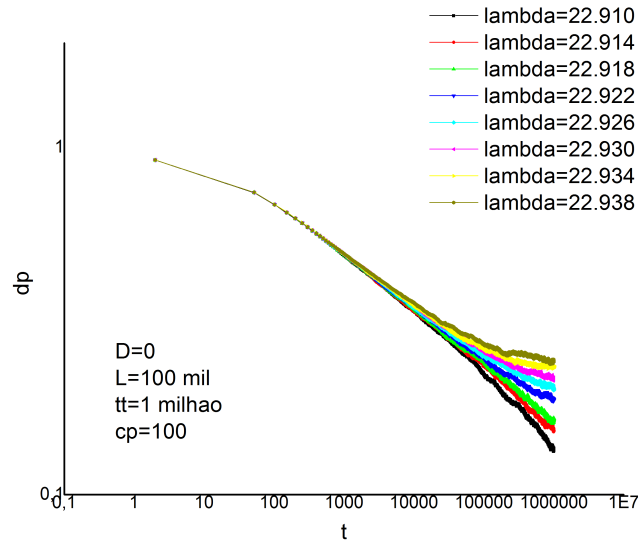


Fonte: Referência [47]

Para o caso de uma transição de segunda ordem, um gráfico como o da figura 5.3 apresentaria uma diferença em relação aos tamanhos das redes, mas não um comportamento abrupto como aparentemente vemos nesse gráfico. As simulações mostradas do gráfico foram feitas no modelo de triplete em uma dimensão para redes de 10.000 e 20.000 com alta difusão $D = 0,95$ no regime estacionário. Uma das principais perspectivas para futuros trabalhos será investigar uma possível transição de primeira ordem evidenciada pelo “pico” exagerado, que ocorre devido a densidade ao quadrado médio ser muito maior

que a média ao quadrado.

Figura 5.4: Gráfico da densidade em função do tempo



Fonte: Referência [47]

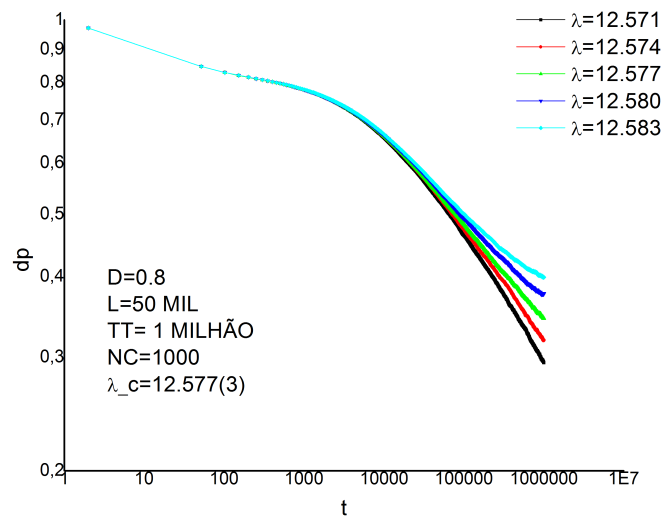
Tabela 5.1: Tabela do Expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ para o caso da difusão $D = 0.0$

λ	22.914	22.918	22.922
$\beta/\nu_{\perp}Z$	0.17768	0.16447	0.12706
r	0.99721	0.99802	0.99191
sd	0.00578	0.00451	0.00708

Com o objetivo de estimar o ponto crítico realizamos simulações para a difusão $D = 0,0$ em uma rede unidimensional de $L = 10^5$ sítios. No regime dinâmico, com o gráfico mostrado na figura 5.4 onde temos a densidade em função do tempo visualmente estimamos a região crítica entre $\lambda = 22,914$ e $\lambda = 22,922$ e nessa região calculamos o valor aproximado do expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ cujos os valores encontram-se na tabela 5.1. É importante observar que a média entre os valores encontrados para o expoente $\beta/\nu_{\perp}Z = 0,156$, isto é, bem próximo do valor pertencente a classe de PD e corroborando os resultados encontrados em [44].

Para estudar a difusão $D = 0,8$ a princípio realizamos simulações para uma rede de 50000 sítios fizemos uma estimativa da região crítica a partir do gráfico da figura 5.5 e com isso calculamos o expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ na região entre $\lambda = 12.571$ e $\lambda = 12.58$ cujos

Figura 5.5: Gráfico da densidade em função do tempo



Fonte: Referência [47]

Tabela 5.2: Tabela do Expoente $\beta/\nu_{\perp}Z$ para o caso da difusão $D = 0.8$

λ	12.571	12.574	12.577	12.58
$\beta/\nu_{\perp}Z$	0.17768	0.16447	0.12706	0.121
r	0.99721	0.99802	0.99191	0.99605
sd	0.00578	0.00451	0.00708	0.00472

valores dos expoentes estão na tabela 5.2 que mostra este próximo do expoente pertencente a PD.

No entanto, estes resultados são preliminares uma vez que são simulações em redes curtas, com pouca média e um número pequeno de passos e que a princípio mostram uma concordância com os resultados apresentados em [44] mostrando que a difusão muda a natureza da transição e consequentemente a classe de universalidade.

Com a continuação desta pesquisa será possível encontrar com precisão a natureza da transição de fase através de simulações no regime estacionário e dinâmico estimando o conjunto de expoentes críticos para diferentes difusões. Os dados mostrados anteriormente são apenas os primeiros passos da pesquisa.

5.2 Conclusões

Nesta Dissertação de Mestrado estudamos as transições de fases em sistemas fora do equilíbrio. Um campo atraente para pesquisas uma vez que possui uma grande variedade de fenômenos que ainda não possuem uma teoria unificada. Nossas discussões foram feitas com base em conceitos como parâmetro de ordem, expoentes críticos, classes de universalidade, entre outros.

Muitas das regras que regem os sistemas fora do equilíbrio podem ser estudadas através de uma probabilidade de ocorrência ou não de um evento. Isto pode ser feito através de simulações numéricas, onde se destaca a simulação de Monte Carlo, que foi utilizada na realização da presente pesquisa, e que se baseia no uso de números aleatórios e estatísticas para a resolução de problemas.

Discorreremos a respeito da transição de fase de segunda ordem, onde são calculados os expoentes críticos e consequentemente definida qual classe de universalidade pertence o modelo estudado. Outra classe de transição de fase são as transições de primeira ordem, cuja principal característica é o salto abrupto do parâmetro de ordem ao passar de uma fase para outra.

Para enriquecer a discussão falamos sobre alguns modelos fora do equilíbrio como o processo de contato que foi introduzido por Harris em 1974, para estudar a propagação de epidemias. Neste modelo cada sítio pode estar infectado (sítio ocupado) ou saudável (sítio vazio). Este modelo pertence a classe de universalidade da Percolação Direcionada. Para falar sobre a dinâmica de populações discutimos sobre o modelo Predador-Presa e suas principais regras para estudar os mecanismos de competição biológica (no caso entre a presa e o predador).

Apresentamos o modelo e resultados preliminares de pesquisas que pretendemos prosseguir, como o modelo de criação de partículas por trincas (modelo de tripletos), que é a interação entre partículas de uma mesma espécie e sua criação ocorre a um alinhamento de um determinado número de partículas.

Focamos nosso trabalho em um estudo sobre sistemas que possuem transição de fase de um estado ativado para um estado absorvente. Em particular, estudamos o modelo de Ramificação e Aniquilação de Caminhantes Aleatórios introduzido por Bramson Gray em 1985, e investigamos o comportamento crítico do modelo que descreve o processo de

ramificação e aniquilação conservando a paridade de caminantes aleatórios.

A motivação para o desenvolvimento dessa pesquisa foi encontrar um conjunto de expoentes que governam o comportamento do sistema nas vizinhanças do ponto crítico.

Dessa forma, simulamos o modelo com o auxílio do método de Monte Carlo em redes lineares finitas com número ímpar de sítios, que podem ser ocupados por múltiplas partículas e que possuem uma probabilidade finita de aniquilação. Consideramos que a difusão ocorre com uma probabilidade ρ e a ramificação ocorre com probabilidade $1 - \rho$, sendo que a criação de filhotes sempre ocorre em número par.

Como as simulações foram desenvolvidas em redes de tamanhos finitos, temos que estudar o comportamento $L \rightarrow \infty$, a partir da análise de tamanho finito, onde diferentes tamanhos de redes podemos ter o limite termodinâmico. Assim, as simulações foram feitas nos regimes estacionário e dinâmico para se determinar o ponto crítico e calcular os referentes expoentes.

Iniciamos com simulações no estado estacionário para se determinar a região de transição, para isso fizemos primeiramente o gráfico da densidade de partículas em função da probabilidade de ramificação (com redes variando de $L = 101$ a $L = 32001$ e a probabilidade de ramificação variando de $0.225 < \sigma < 0.285$) e com isso obtivemos uma curva bem comportada mostrando que a medida que σ diminui temos a transição do estado ativado para o estado absorvente. Investigando a invariância de escala a partir do gráfico do cumulante em função da probabilidade de ramificação foi possível estimar com exatidão a probabilidade de ramificação crítica $\sigma_c = 0.2427(1)$.

Com o ponto crítico estimado usamos as relações de escala para determinar os expoentes críticos. O primeiro expoente encontrado foi $\beta = 0.94(2)$, a partir da inclinação da reta no gráfico do parâmetro de ordem versus os pontos acima do σ_c . Para obter maior precisão na determinação deste expoente exploramos a relação de escala $\psi(\sigma_c, L) \propto L^{-\beta/\nu_\perp}$ e a derivada logarítmica $\frac{d \ln \psi(\sigma_c, L)}{d \sigma} \propto L^{1/\nu_\perp}$ que resultou em $\beta/\nu_\perp = 0.495(1)$ e $\nu_\perp = 1.93(4)$. Com o gráfico da flutuação do parâmetro de ordem versus σ em comparação com estrutura linear de diferentes tamanhos L nos permitiu encontrar $\sigma_c = 0.2427$ e com a inclinação da reta do gráfico $\Delta\psi$ versus L encontramos $\gamma'/\nu_\perp = 0.005(4)$.

Realizamos também simulações dinâmicas de relaxamento, fazendo o gráfico da evolução no tempo do parâmetro de ordem na região do ponto crítico estimamos $\beta/\nu_\perp Z = 0.286(4)$, para encontrar o expoente dinâmico Z plotamos o gráfico do cumulante em fun-

ção do tempo e encontramos $Z = 1.76(1)$, usando a derivada logarítmica do parâmetro de ordem em função do tempo estimamos o expoente $\nu_{\parallel} = 3.27(2)$ e por fim com o gráfico da flutuação do parâmetro de ordem em função do tempo encontramos o expoente $\gamma'/\nu_{\perp}Z = 0.001(2)$. Encerramos o trabalho verificando a validade da relação de hipercala para ambos os conjuntos de expoentes críticos (estacionários e dinâmicos).

Referências Bibliográficas

- [1] S.R. Salinas, Introdução à Física Estatística. Editora: Edusp, (2005).
- [2] J. C. Mansur Filho and R. Dickman, “Conserved directed percolation: exact quasistationary distribution of small systems and Monte Carlo simulations” Journal of Statistical Mechanics: J Theory and Experiment. P05029 (2011)
- [3] H. K. Janssen, “On the Nonequilibrium Phase Transition in Reaction-Diffusion Systems with an Absorbing Stationary State ” Phys. Rev. B: Cond. Mat 42, 151-154 (1981).
- [4] OLIVEIRA, J. O. Termodinâmica. Editora: Livraria da Física, (2008).
- [5] REICHL, L. E. A modern course in statistical physics. 2Ed. [S.l.]: John Wiley e Sons, (1997).
- [6] TOMÉ, Tânia; DE OLIVEIRA, Mário José. Dinâmica estocástica e irreversibilidade. Edusp, 2001.
- [7] For further details see: J. Marro and R. Dickman, Nonequilibrium Phase Transitions and Critical Phenomena (Cambridge University Press, Cambridge).
- [8] DICKMAN, Adriana G. AND DICKMAN, Ronald AND BARBOSA, Fabrício Almeida, “Phase transitions without thermodynamics” Revista Brasileira de Ensino de Física v.28, p. 23-33 (2006).
- [9] WRESZINSKI, Walter F. Termodinâmica Vol. 50. Edusp, 2003.
- [10] ÓDOR, Géza. Universality classes in nonequilibrium lattice systems. Reviews of modern physics, v. 76, n. 3, p. 663, 2004.

- [11] HONG, Hyunsuk et al. Finite-size scaling, dynamic fluctuations, and hyperscaling relation in the Kuramoto model. *Physical Review E*, v. 92, n. 2, p. 022122, 2015.
- [12] STANLEY, H. Eugene. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, v. 71, n. 2, p. S358, 1999.
- [13] LANDAU, David P.; BINDER, Kurt. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge university press, 2014.
- [14] Marro, J. and Dickman, R. “Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models” (Cambridge: Cambridge University Press) (1999)
- [15] HINRICHSSEN, Haye. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. *Advances in physics*, v. 49, n. 7, p. 815-958, 2000.
- [16] BROADBENT, Simon R.; HAMMERSLEY, John M. Percolation processes. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Cambridge University Press, 1957. p. 629-641.
- [17] LOTKA, Alfred J. *Elements of mathematical biology*. 1956.
- [18] ARASHIRO, Everaldo; TOMÉ, Tânia. The threshold of coexistence and critical behaviour of a predator-prey cellular automaton. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 40, n. 5, p. 887, 2007.
- [19] ARGOLO, C. OTAVIANO, H. GLÉRIA, I. ARASHIRO, E. and TOMÉ, T. Critical Behavior and Threshold of Coexistence of a predator-prey stochastic model in 2d lattice. *Int. J. Bifurcation Chaos* 20, 309-314 (2010).
- [20] DICKMAN, Ronald; DA SILVA, Jafferson Kamphorst Leal. Moment ratios for absorbing-state phase transitions. *Physical Review E*, v. 58, n. 4, p. 4266, 1998.
- [21] ARGOLO, C; BARROS, P. H; GLÉRIA, I; ANJOS, F. C. and LYRA, M. L. Critical behavior of the absorbing transition of branching and annihilating bosonic random walkers. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2015, n. 8, p. P08006, 2015.
- [22] TAKAYASU, H.; INUI, N. Reaction limited catalytic reaction in one dimension. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 25, n. 9, p. L585, 1992.

- [23] BRAMSON, Maury; GRAY, Lawrence. The survival of branching annihilating random walk. v. 68, n. 4, p. 447-460, 1985.
- [24] CARDY, John; TÄUBER, Uwe C. Theory of branching and annihilating random walks. Physical review letters, v. 77, n. 23, p. 4780, 1996.
- [25] JENSEN, Iwan. Critical exponents for branching annihilating random walks with an even number of offspring. Physical Review E, v. 50, n. 5, p. 3623, 1994.
- [26] M. Henkel, H. Hinrichsen, S. Lubeck, 2009, NonEquilibrium Phase Transitions: Volume 1: Absorbing Phase Transitions, Springer.
- [27] BENITEZ, Federico; WSCHEBOR, Nicolás. Branching-rate expansion around annihilating random walks. Physical Review E, v. 86, n. 1, p. 010104, 2012.
- [28] JENSEN, Iwan. Low-density series expansions for directed percolation: I. A new efficient algorithm with applications to the square lattice. Journal of Physics A: Mathematical and General, v. 32, n. 28, p. 5233, 1999.
- [29] ÓDOR, Géza; SZOLNOKI, Attila. Cluster mean-field study of the parity-conserving phase transition. Physical Review E, v. 71, n. 6, p. 066128, 2005.
- [30] ÓDOR, Géza; MENYHÁRD, Nóra. Critical behavior of an even-offspringed branching and annihilating random-walk cellular automaton with spatial disorder. Physical Review E, v. 73, n. 3, p. 036130, 2006.
- [31] KWON, Sungchul; PARK, Hyunggyu. Reentrant phase diagram of branching annihilating random walks with one and two offspring. Physical Review E, v. 52, n. 6, p. 5955, 1995.
- [32] VERNON, Daniel; HOWARD, Martin. Branching and annihilating Lévy flights. Physical Review E, v. 63, n. 4, p. 041116, 2001.
- [33] ZHONG, Dexin; BEN-AVRAHAM, Daniel. Universality class of two-offspring branching annihilating random walks. Physics Letters A, v. 209, n. 5, p. 333-337, 1995.
- [34] VAN WIJLAND, F. OERDING, K. HILHORST, H. J. Wilson renormalization of a reaction-diffusion process. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, v. 251, n. 1, p. 179-201, 1998.

- [35] STEPHEN, Michael J.; STINCHCOMBE, Robin B. Persistence in Reaction-Diffusion Problems: I. Bosons. *Journal of statistical physics*, v. 95, n. 1-2, p. 171-180, 1999.
- [36] PARK, Su-Chan. Monte Carlo simulations of bosonic reaction-diffusion systems. *Physical Review E*, v. 72, n. 3, p. 036111, 2005.
- [37] BARONCHELLI, Andrea; CATANZARO, Michele; PASTOR-SATORRAS, Romualdo. Bosonic reaction-diffusion processes on scale-free networks. *Physical Review E*, v. 78, n. 1, p. 016111, 2008.
- [38] TAKAYASU, H.; TRETYAKOV, A. Yu. Extinction, survival, and dynamical phase transition of branching annihilating random walk. *Physical review letters*, v. 68, n. 20, p. 3060, 1992.
- [39] DICKMAN, Ronald; VIDIGAL, Ronaldo. Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 35, n. 5, p. 1147, 2002.
- [40] DE OLIVEIRA, Marcelo Martins; DICKMAN, Ronald. How to simulate the quasistationary state. *Physical Review E*, v. 71, n. 1, p. 016129, 2005.
- [41] DICKMAN, Ronald; DA SILVA, Jafferson Kamphorst Leal. Moment ratios for absorbing-state phase transitions. *Physical Review E*, v. 58, n. 4, p. 4266, 1998.
- [42] AUKRUST, T.; BROWNE, D. A.; WEBMAN, I. Critical behavior of an autocatalytic reaction model. *Physical Review A*, v. 41, n. 10, p. 5294, 1990.
- [43] GRASSBERGER, Peter; DE LA TORRE, A. Reggeon field theory (Schlögl's first model) on a lattice: Monte Carlo calculations of critical behaviour. *Annals of Physics*, v. 122, n. 2, p. 373-396, 1979.
- [44] DICKMAN, Ronald; TOMÉ, Tania. First-order phase transition in a one-dimensional nonequilibrium model. *Physical Review A*, v. 44, n. 8, p. 4833, 1991.
- [45] Harris, T. E. Contact Interactions on a Lattice. *Ann. Probab.* 2 (1974), no. 6, 969–988.
- [46] GRASSBERGER, Peter. On phase transitions in Schlögl's second model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 47, n. 4, p. 365-374, 1982.

- [47] Simulações não publicadas.