

**Caracterização do comportamento crítico no
modelo de epidemia difusiva**

Daniel Ferreira de Souza Maia

Agosto 2008

Caracterização do comportamento crítico no modelo de epidemia difusiva

Daniel F. S. Maia

Orientador: Ronald Dickman

Tese de Doutorado apresentado à
Universidade Federal de Minas Gerais

Agosto de 2008

AGRADECIMENTOS

Não há palavras que possam expressar a minha gratidão ao meu orientador Ronald Dickman. Admiro sua coragem por aceitar um aluno mudando de projeto na metade do prazo, e trabalhando fora 8 horas por dia. Admiro ainda mais o seu empenho e constante motivação, que fizeram com que eu terminasse esse desafio com vitória.

Aos meus pais por terem me apoiado para progredir em meus estudos.

À Núbia por trazer me tanta alegria e força de vontade para transpor qualquer dificuldade.

À Brain Tecnologia, especialmente o Guilherme Castilho, por ter me cedido o tempo que eu precisava para finalizar o projeto.

RESUMO

Neste trabalho estudamos um processo estocástico longe do equilíbrio, conhecido como o processo de epidemia difusiva (PED). Neste processo, partículas de duas espécies (A e B) difundem em uma rede e sofrem as reações $A + B \rightarrow 2B$ e $B \rightarrow A$, tal que o número total de partículas é conservado. O estado livre de partículas B é absorvente. Variando os parâmetros de controle (a saber, a densidade total, e as taxas de reação e de difusão) o sistema sofre uma transição de fase entre uma fase ativa e a fase absorvente. Análises anteriores via grupo de renormalização prevêm três classes de universalidade distintas dependendo da relação entre as taxas de difusão para partículas A (D_A) e partículas B (D_B). A previsão classifica a transição de fase como contínua quando $D_A = D_B$ e $D_A < D_B$, mas a análise levou à conjectura de uma transição descontínua para $D_A > D_B$. Realizamos simulações Monte Carlo com um algoritmo fiel à definição do modelo como um processo markoviano, permitindo uma comparação quantitativa com estudos analíticos. Na base de extensivas simulações do estado quase-estacionário (QS) de sistemas unidimensionais com até 5000 sítios, determinamos os expoentes críticos para todas as três classes de universalidade. Não encontramos nenhuma evidência de uma transição descontínua para $D_A > D_B$. Estudos em $d = 2$ focados no caso $D_A > D_B$, também mostraram uma transição contínua. Não há portanto nenhum sinal de descontinuidade para a transição em qualquer regime, em sistemas uni ou bi-dimensionais. Para confirmar este resultado, criamos um algoritmo para a construção de um ciclo de histerese; novamente o resultado foi negativo. Outros estudos de decaimento inicial mostraram que o estado estacionário não depende da história ou das condições iniciais, constituindo outra evidência em favor da transição contínua. Todos estes métodos (simulações QS, histerese e decaimento inicial) foram também testados no modelo de criação por tripletos que sabidamente apresenta uma transição descontínua para altas taxas de difusão, e em todos os casos foi possível identificar a transição como descontínua. Finalmente, desenvolvemos uma expansão do parâmetro de ordem em potências do tempo. Elaboramos um algoritmo computacional que realiza a álgebra necessária para gerar os coeficientes dessa série, e assim calculamos os primeiros 12 termos da expansão para três valores diferentes da taxa de recuperação. Os resultados obtidos através desta previsão concordam muito bem com as simulações para tempos curtos, sendo que esta concordância se estende a tempos maiores na fase ativa.

ABSTRACT

In this work we study a far-from-equilibrium stochastic process known as the diffusive epidemic process. In this process, particles belonging to two species (A and B) hop on a lattice and undergo reactions $A + B \rightarrow 2B$ and $B \rightarrow A$, conserving the total number of particles. The B -free state is absorbing. Varying the control parameters (total density, and the rates of diffusion and reaction), the system suffers a phase transition between an active and an absorbing state. Previous studies, using renormalization group (RG) methods predict three distinct universality classes for this transition, depending on the relation between the diffusion rates D_A and D_B . The RG studies classify the transition as continuous for $D_A = D_B$ and $D_A < D_B$, but lead to a conjectured discontinuous transition for $D_A > D_B$. We perform Monte Carlo simulations using an algorithm that faithfully reflects the definition of the model as a Markov process, permitting detailed comparison with analytical results. On the basis of extensive simulations of the quasistationary (QS) state of one-dimensional systems of up to 5000 sites, we determine the critical exponents for all three universality classes. We do not find any evidence of a discontinuous phase transition for $D_A > D_B$. Studies in two dimensions, focused on the case $D_A > D_B$, also reveal a continuous transition. Thus we find no sign of a discontinuous transition in either one or two dimensions. To verify this result, we develop an algorithm for detecting a hysteresis loop; the result is once again negative, i.e., consistent with a continuous transition. Further studies of the evolution at short times show that the stationary state does not depend on history or on the initial condition, providing additional evidence for continuity of the transition. All of our simulation methods were tested on the triplet creation model, known to exhibit a discontinuous phase transition for high diffusion rates. In all cases we were able to identify a discontinuous transition in this model, showing that our simulation methods are reliable. Finally, we developed an expansion for the order parameter in powers of time. We devised a computational algorithm which performs the algebra required to generate the coefficients in the series, and in this manner derived the first twelve terms. Predictions derived from the series are in very good agreement with simulation for short times. Deep in the active phase, this agreement persists to long times.

CONTEÚDO

1. <i>Introdução</i>	13
2. <i>Transições de fase, escala e universalidade</i>	16
2.1 Introdução	16
2.2 Diagramas de fase de sistemas simples	18
2.3 A teoria clássica de Landau	20
2.4 Teoria de Escala	24
2.5 Transições de fase em sistemas fora do equilíbrio	27
2.6 Escala para tamanho finito	29
3. <i>O Grupo de Renormalização</i>	32
3.1 Introdução	32
3.2 O modelo Gaussiano	34
3.3 O modelo s^4 e a expansão ϵ	38
3.4 Construindo integrais funcionais para processos estocásticos	47
3.5 A ação efetiva do processo de epidemia difusiva	50
4. <i>O processo de Epidemia Difusiva em rede</i>	52
4.1 O modelo	52
4.2 Teoria de Campo Médio	53
4.3 Simulação Monte-Carlo	56
4.3.1 Simulando um estado quase-estacionário	57
4.4 Expansões em série	58
4.4.1 Introdução	58
4.4.2 Álgebra de operadores	59
4.4.3 Algoritmo Computacional	63
4.4.4 Aproximantes de Padé e transformações de variável	65
4.4.5 Cálculo Direto	66
5. <i>Resultados</i>	68
5.1 Teoria de campo médio	68
5.2 Simulações Monte-Carlo	72
5.2.1 Simulações quase-estacionárias em 2d	78
5.2.2 Simulações quase-estacionárias em uma transição de fase descontínua	80
5.2.3 Histerese	81

5.2.4	Dependência da condição inicial como indicador de transição descontínua	85
5.3	Expansões em séries de potência	86
6.	<i>Conclusões</i>	94
<i>Apêndice</i>		102
A.	<i>Algoritmo para expansão em série da equação mestra do PED</i> . . .	103

LISTA DE FIGURAS

2.1	Diagrama de fases em termos do campo aplicado versus a temperatura para um sistema ferromagnético uniaxial simples. A linha de coexistência é dada por $H = 0$ com $T < T_c$	18
2.2	Magnetização versus campo aplicado, para várias temperaturas. Note a descontinuidade em $H = 0$	19
2.3	Diagrama de fases de um fluido simples em termos da pressão versus a temperatura. As linhas cheias indicam transições de primeira ordem. O ponto triplo (P_t, T_t) indica coexistência das três fases. (P_c, T_c) é ponto crítico.	21
2.4	Isotermas de um fluido simples próximo ao ponto crítico. O patamar indica a coexistência de fases.	21
2.5	Dados reunidos por Guggenheim em 1945 para a curva de coexistência de oito fluidos. Note o ajuste com uma equação cúbica e também a coexistência de fases.	22
2.6	Parte singular do potencial termodinâmico de Landau para um ferromagneto uniaxial. Abaixo da temperatura crítica, o mínimo paramagnético se torna um máximo, aparecendo dois mínimos simétricos.	24
2.7	Dados reunidos por Ho e Lister em 1969 para o composto $CrBr_3$. Magnetização na escala t^β versus campo externo na escala $t^{\gamma+\beta}$	26
2.8	Aukrust <i>et al</i> [21] utilizam a teoria de escala de tamanho finito para encontrar o valor crítico do parâmetro $\mathbf{p}$ em sua simulação de reação autocatalítica em rede (C_V é a fração de sítios livres). No ponto crítico o gráfico deve ser uma reta cuja inclinação dá o valor do expoente crítico correspondente (no caso α).	30
2.9	Escala para tamanho finito no PC unidimensional em seu ponto crítico. De cima para baixo: τ_ρ, χ, ρ_s . As inclinações respectivas são 1.58, 0.497 e -0.252. Dados de Marro and Dickman (1999) [1].	31
3.1	Transição do modelo de Ising para o Gaussiano. (a) Spins tem valor +1 ou -1 em cada sítio. (b) as variáveis de spin têm pico nos valores de Ising (c) Em cada sítio a variável de spin segue uma distribuição Gaussiana em torno de zero. . . .	34

3.2	Alguns diagramas da expansão perturbativa do hamiltoniano s^4	42
3.3	Pontos fixos para o modelo s^4 . Destaca-se o caráter diferente para $d > 4$ e $d \lesssim 4$	45
4.1	Esquema de cálculo em árvore usado no algoritmo de avaliação de séries	64
5.1	Previsões de campo médio para a densidade crítica ρ_c versus a taxa de recuperação r_c . TCM de 1 sítio por linhas sólidas, de cima para baixo: $D_A = D_B = 0.2$; $D_A = 0.2, D_B = 1$; $D_A = 1, D_B = 1, D_A = D_B = 5$; função logística $\rho_c = r$. Linha pontilhada: TCM de 2 sítios para $D_A = 1, D_B = 1$	69
5.2	Taxa de recuperação crítica r_c versus taxa D_B de difusão das partículas B , para $D_A = 0.5$ e $\rho = 1$. Curva superior: TCM 1 sítio; curva inferior: TCM de dois sítios; pontos: simulação.	69
5.3	Distribuições de probabilidade marginal (1 sítio) variando com o número A ou B de partículas. Gráfico principal: TCM de 1 sítio, $\rho = 1, r \sim r_c = 0.688, D_A = 0.5$ e $D_B = 0.02$. Detalhe: resultados de simulações com $r=0.5$ e os mesmos valores de ρ, D_A e D_B , tamanho do sistema $L = 500$	71
5.4	Parâmetro de ordem ρ_B versus taxa de recuperação para $D_A = 0.5, D_B = 0.25$ e $\rho = 1$. Os pontos representam o limite para o tamanho infinito baseados nos nossos dados para tamanhos $L = 200-4000$	74
5.5	a) Parâmetro de ordem ρ_B versus tamanho do sistema L , para os mesmos parâmetros da figura 5.4. De cima para baixo: taxa de recuperação $r = 0.231, 0.232, 0.233, 0.234$. b) Tempo de vida médio τ versus tamanho do sistema L	75
5.6	Razão entre momentos m versus o tamanho do sistema (no ponto crítico). De cima para baixo: $D_A = 0.5, D_B = 0.25$; $D_A = D_B = 0.5$; $D_A = 0.25, D_B = 0.5$	75
5.7	Estudos de decaimento inicial para $D_A = 0.5, D_B = 0.25, \rho = 1$ e r variando de 0.237 a 0.232 (de cima para baixo). Após a relaxação inicial o sistema mostra um comportamento de lei de potência. O parâmetro crítico estimado é $r_c \sim 0.2325$. $\theta \cong 0.5$	76
5.8	Evolução temporal do PED no caso $D_A = 0.5, D_B = 0.25$	77
5.9	Evolução temporal do PED no caso $D_A = 0.25, D_B = 0.5$	77
5.10	Parâmetro de ordem ρ_B versus taxa de recuperação para $D_A = 4, D_B = 1$, e $\rho = 0.5$ no PED bidimensional. O ponto no eixo r a melhor estimativa para o ponto crítico $r_c = 0.3555(5)$. Detalhe: ρ_B versus $r_c - r$ em escala logarítmica. A inclinação da reta é 0.94.	78

-
- 5.11 a) Parâmetro de ordem reescalado $\rho_B^* = L^{\beta/\nu} \bar{\rho}_B$ versus tamanho linear do sistema L ; $\beta/\nu = 0.885(10)$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $\rho = 1$. De cima para baixo as taxas de recuperação são: $r = 0.735, 0.738, 0.739, 0.740, 0.745$. b) Tempo de vida QS reescalado $\tau^* = L^{-z} \tau$ versus tamanho do sistema. $z=1.9$ e os outros parâmetros são os mesmos de a). 79
- 5.12 Gráfico principal: histograma de ocupação para o MCT com $D = 0.95$ e $\lambda = 10.11$. Detalhe: histograma de ocupação de B 's para o PED com $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$, $r = 0.233$ 80
- 5.13 Ausência de histerese para o PED em 1d. Média sobre 125 ensaios em $L = 4000$ com $\rho = 1$, $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$ e $h = 10^{-5}$. Símbolos: + aumentando r ; o diminuindo r 82
- 5.14 Ausência de histerese para o PED em 2D. Ensaios em redes bidimensionais com $L = 320$, $\rho = 1$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $h = 10^{-5}$. Símbolos: + aumentando r ; o diminuindo r 82
- 5.15 Etapas de relaxação ao estado estacionário para o PED quando se muda o valor da taxa de recuperação. Parâmetros: $L = 2000$, $D_A = 0.5$ e $D_B = 0.25$, 200 ensaios. Em a) r passa de $0.25 \rightarrow 0.26$ e em b) $0.27 \rightarrow 0.26$. Quando a densidade inicial de atividade é baixa (0.05) o tempo de relaxação é muitas vezes maior. 84
- 5.16 Evolução da densidade de partículas em ensaios do MCT para $D = 0.98$, $\lambda_c = 9.6$ e $L = 10^4$ sítios. Densidade inicial (de cima para baixo): $\rho_i = 1, 0.083, 0.026$ 86
- 5.17 Evolução do modelo PED em 1 dimensão (200 ensaios) com $L = 2000$, $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$ e $r = 0.20$. A densidade inicial de B 's é, de cima para baixo: 0.9, 0.1, 0.05 e 0.01. 87
- 5.18 Evolução do modelo PED em 2 dimensões com $L = 500$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $r = 0.70(r_c = 0.739)$. A densidade inicial de B 's é, de cima para baixo: 0.9, 0.1, 0.05 e 0.01. 87
- 5.19 parskip=0pt 88
- 5.20 Comparação dos dados simulacionais (preto) com a previsão via expansão em série (vermelho) com 12 termos, para o caso $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 1.0$ 90
- 5.21 Comparação dos resultados simulacionais (preto) com as séries obtidas após a construção dos aproximantes de Padé $\langle 5, 4 \rangle$ (azul) e $\langle 4, 5 \rangle$ (vermelho) para a série transformada $w = -\ln \rho/t$. Parâmetros: $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 1.0$ 91
- 5.22 Comparação dos resultados simulacionais (preto) com as séries obtidas após a construção do aproximante de Padé $\langle 6, 5 \rangle$ (vermelho) sobre a variável $w = -\ln \rho/t$ transformada por $y = t/(b+t)$. Parâmetros: $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = r_c = 0.192$. 92

5.23	Comparação dos resultados da simulação (em preto) com a previsão obtida via aproximante de Padé $\langle 6, 6 \rangle$ (em vermelho) aplicado à serie transformada por $y = \frac{t}{b+t}$ ($b = 0.85$) no caso subcrítico $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 0.10$	92
6.1	Estudos com sistemas até 1000 sítios podem apresentar uma falsa idéia de escala, quando na verdade o comportamento para redes maiores é um pouco diferente.	95

LISTA DE TABELAS

3.1	Autovalores e autovetores da matrix $\mathbf{M}$ até $\mathcal{O}(\epsilon)$	46
5.1	Taxa de recuperação crítica r_c nas aproximações de 1 e 2 sítios, comparadas com a simulação.	70
5.2	Parâmetros críticos para o PED em uma dimensão	75
5.3	Parâmetros críticos para o PED em duas dimensões no caso $D_A > D_B$	80
5.4	Primeiros termos da expansão $\rho_B(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n$ para $D_A =$ $D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 1.0$	89
5.5	Primeiros termos da expansão $\rho_B(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n$ para $D_A =$ $D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = r_c = 0.192$	90
5.6	Primeiros termos da expansão $\rho_B(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n$ para $D_A =$ $D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 0.1$	91

1. INTRODUÇÃO

Transições de fases e fenômenos críticos ocorrem em uma enorme variedade de sistemas: fluidos, materiais magnéticos, ligas metálicas, cristais líquidos, semicondutores, etc, etc. Diversas grandezas termodinâmicas como calor específico e susceptibilidade magnética apresentam um comportamento peculiar na região próxima à transição de fase, com divergências assintóticas que foram caracterizadas por meio de uma coleção de parâmetros comuns. Logo se percebeu que o comportamento crítico de grandezas termodinâmicas análogas tinha um caráter universal, caracterizado pelo mesmo conjunto de expoentes críticos muito bem definidos, independentes da natureza física da transição. O conjunto de fenômenos que podem ser caracterizados pelos mesmos expoentes críticos formam uma *classe de universalidade*. Os requisitos para se formar uma classe de universalidade são mínimos, entre eles: a) a dimensionalidade do sistema, b) a dimensionalidade do parâmetro de ordem, c) simetria espacial (sob rotações, inversões), d) a simetria do próprio parâmetro de ordem (sob inversão, permutações, etc) e e) o alcance das interações.

A existência da universalidade nos permite fazer previsões a respeito do comportamento crítico de sistemas físicos ou químicos difíceis de serem modelados, através do estudo da criticalidade em sistemas de natureza completamente diferente, muito mais simples, porém com algumas propriedades básicas em comum.

O objetivo deste trabalho é caracterizar o diagrama de fase e determinar os expoentes críticos do processo de epidemia difusiva (PED) em redes unidimensionais e bidimensionais, que pode ser generalizado para uma grande categoria de fenômenos de difusão-reação envolvendo duas espécies de partículas. A caracterização das classes de universalidade presentes nesta importante categoria de processos ainda não está completa e daí a relevância deste estudo.

Este sistema é constituído de dois tipos de partículas, A e B , que difundem independentemente em uma rede, com taxas D_A e D_B respectivamente. Além disso as partículas sofrem reações locais $B \xrightarrow{\tau} A$ e $A+B \xrightarrow{\lambda} 2B$. Não há limite intrínseco para o número de partículas presentes em um determinado sítio e o número total de partículas $A+B$ é conservado. Na interpretação epidêmica A representa um organismo saudável e B um infectado, com as reações acima significando, respectivamente recuperação espontânea e trans-

missão da doença por contato direto. Outras interpretações possíveis são, por exemplo, A representar uma proteína propriamente enrolada e B uma não-enrolada ou anômala, etc.

O PED é um modelo estocástico de não-equilíbrio que exibe uma transição para o estado absorvente (ou vácuo)[1, 2, 3, 4]. Tais transições de fase ocorrem em muitos modelos de epidemia, dinâmica populacional e reações autocatalíticas, tendo atraído muita atenção para a mecânica estatística de não-equilíbrio no esforço de caracterizar as classes de universalidade associadas. O exemplo mais simples é o Processo de Contato (PC), ou sua versão em tempo discreto, a Percolação Dirigida (PD). No processo de contato, cada sítio da rede pode estar vazio(0) ou ocupado por uma partícula(X). Partículas morrem (na reação $X \rightarrow 0$) com taxa 1, independente do resto do sistema, e se reproduzem com taxa λ (reação $X + 0 \rightarrow 2X$). A partícula criada sobrevive se, e somente se, um dos seus sítios vizinhos estiver desocupado. No caso de haver muito vizinhos próximos livres, um deles é escolhido aleatoriamente. O PC é portanto o modelo mínimo de processos com nascimento e morte onde há competição por espaço. A configuração livre de partículas é um estado absorvente. É sabido que, para uma taxa de reprodução λ menor do um valor crítico λ_c , a densidade estacionária de partículas $\bar{\rho}$ é zero, mas (no limite para o sistema infinito) ela aumentará continuamente à medida que λ é aumentado além de λ_c . Portanto $\bar{\rho}$ serve como o parâmetro de ordem para esta transição de fase.

Relações de escala críticas no processo de contato e modelos análogos tem sido estudadas extensivamente, tanto teoricamente quanto numericamente. A conclusão central derivada destes estudos é que o comportamento crítico do tipo PD é genérico para modelos que apresentam uma transição de fase contínua para o estado absorvente, na ausência de simetrias adicionais ou quantidades conservadas. Ainda que exista mais de uma configuração possível de estado absorvente, caso estas configurações não apresentem nenhuma simetria entre si, o processo ainda pertencerá à classe de universalidade da percolação dirigida. [5, 6].

O PED oferece um cenário mais complicado, devido à conservação do número total de partículas. Um aspecto interessante do PED é que a transição para o estado absorvente pode pertencer à três classes de universalidade distintas, dependendo se $D_A = D_B$, $D_A < D_B$ ou $D_A > D_B$. O modelo foi inicialmente estudado por métodos do grupo de renormalização (GR) [7, 8, 9] via expansão ϵ em torno da dimensão crítica $d = 4$. A análise prevê uma transição contínua para os dois primeiros casos, mas quando $D_A > D_B$ o fluxo de renormalização flui para uma região onde a teoria não é bem definida; conjectura-se uma transição descontínua nesse caso. Em [8] foram apresentados alguns argumentos teóricos e simulacionais para classificar a transição como descontínua pelo menos em $d = 2$, mas como veremos mais adiante neste trabalho, essa afirmação é bastante controversa.

Já em $d = 1$, os estudos numéricos indicam uma transição de fase

contínua [10, 11] em todos os três regimes de difusão. Em [12], os expoentes críticos encontrados para $D_A = D_B$ são diferentes da previsão via GR que trazia, por exemplo, o expoente crítico de correlação $\nu_\perp = 2$ (veja também [13, 14]). Simulações subseqüentes reportadas em [11] aparentemente resolveram este ponto, mas sugeriram outras divergências com relação às previsões feitas via GR, pelo menos no caso unidimensional.

Devido ao desacordo entre teoria e simulação, e também pela disparidade nos estudos numéricos, há um interesse em avançar a análise sobre o PED, especialmente no caso unidimensional. Tanto a abordagem via GR quanto os estudos numéricos estão sujeitos à críticas; a primeira devido às inevitáveis aproximações usadas na determinação das relações de recorrência e os últimos devido à forte influência de tamanho finito e outros fatores que serão discutidos posteriormente.

Este trabalho aprofunda os estudos de baixa dimensionalidade, empregando para isso diferentes métodos: teoria de campo médio de 1 e 2 sítios, extensivas simulações de Monte-Carlo e expansão sistemática em série da equação mestra. O texto é organizado da seguinte forma.

O capítulo 2 traz a fundamentação teórica básica para a discussão de fenômenos críticos. São introduzidos os conceitos de transição de fase, relações de escala e classes de universalidade. O leitor familiarizado com o assunto deve ir direto ao capítulo 4. Revisões mais completas podem ser encontradas em [15, 17, 16, 1].

O capítulo 3 faz uma revisão do formalismo do grupo de renormalização aplicado ao estudo de fenômenos críticos, baseado no texto originalmente publicado por Wilson e Kogut. A intenção aqui não é detalhar a aplicação da ferramenta, mas apresentar as idéias por trás do método e, principalmente, ressaltar as aproximações necessárias, capacitando o leitor para um julgamento crítico posterior.

O capítulo 4 introduz o processo de epidemia difusiva (PED) em detalhes, calculando as taxas de transição e escrevendo a equação mestra para o processo. Detalha-se aqui os três métodos utilizados neste estudo, teoria de campo médio, simulação Monte-Carlo e expansão em série, assim como as particularidades das suas implementações.

O capítulo 5 traz todos os resultados obtidos através das três metodologias fechando o estudo dos casos 1d e 2d. Com exceção da análise via expansão em séries, que ainda está sendo trabalhada, todos os outros resultados estão resumidos em dois artigos publicados sob as referências [18] e [19].

O capítulo 6 conclui o trabalho, comentando os resultados obtidos e fazendo uma análise dos resultados anteriormente publicados.

2. TRANSIÇÕES DE FASE, ESCALA E UNIVERSALIDADE

2.1 Introdução

¹ Ao tomar um bloco grande de um material e dividi-lo em várias partes pequenas, mantendo as condições externas de temperatura e pressão constantes, espera-se que todas as propriedades intensivas tais como densidade, compressibilidade e magnetização sejam as mesmas em cada pequeno pedaço e mais, todas elas sejam iguais aos valores originais no grande bloco. Mas se continuarmos dividindo várias e várias vezes, eventualmente alguma coisa acontecerá porque sabemos que a matéria é constituída de átomos e moléculas cujas propriedades individuais são bastante diferentes da matéria final que eles constituem.

A escala de tamanho na qual as propriedades dos pedacinhos começam a diferir notavelmente daquelas do bloco original dá uma medida do que é chamado o *comprimento de correlação* do material. Ele representa a distância na qual as flutuações microscópicas ainda estão significativamente correlacionadas umas com as outras.

O comprimento de correlação é função de fatores externos como temperatura e pressão, e uma pequena mudança nesses fatores pode causar mudanças abruptas nas características macroscópicas de um sistema físico, como por exemplo a mudança de um estado da matéria para outro. Chamamos esse fenômeno de *transição de fase*.

Essa transição pode acontecer basicamente de duas maneiras. No primeiro cenário dois ou mais estados com propriedades físicas distintas coexistem no ponto que define a transição mas, imediatamente antes ou depois deste ponto, uma das fases desaparece por completo. Neste caso deve-se esperar um comportamento descontínuo em várias grandezas termodinâmicas ao passar de uma fase para outra. Tais transições são nomeadas *descontínuas* ou *de primeira ordem*. Exemplos bem conhecidos são o derretimento de um sólido ou a condensação de um gás para líquido. De fato, estas transições usualmente exibem histerese, por exemplo um líquido pode se tornar gás a uma temperatura T_c e ao ser resfriado novamente manter-se em estado gasoso até uma temperatura ligeiramente abaixo de T_c quando só então o sistema colapsa e se torna líquido novamente. O comprimento de correlação

¹ O texto deste capítulo foi baseado nas obras de Salinas [16] e Cardy [15]. O leitor familiarizado com o assunto deve ir direto ao capítulo 4. As figuras de 1 a 7 foram extraídas de [16].

de uma transição de fase descontínua é geralmente finito.

Durante uma transição *contínua* ou *de segunda ordem* a situação é bem diferente: a transformação se dá de maneira gradual. Existe um *ponto crítico* onde não se pode mais fazer distinção entre uma fase e outra. O comprimento de correlação se torna efetivamente infinito e, por conseqüência, as flutuações tornam-se correlacionadas sobre todas as escalas de distância, forçando o sistema como um todo a se comportar como uma fase única crítica. Não apenas o comprimento de correlação diverge de forma contínua a medida que o ponto crítico é aproximado mas a diferença entre as quantidades termodinâmicas das fases em competição, tais como densidade de energia e magnetização, tendem a zero suavemente. Exemplos simples, que serão melhor detalhados adiante, de transições de segunda ordem são a temperatura de Curie em um ferromagneto e o ponto crítico líquido-gás em um fluido.

O fato de existir um grande número de graus de liberdade fortemente correlacionados uns com os outros torna o estudo de transições de fase contínuas um problema intrinsecamente difícil. Apesar destes sistemas serem bastante complexos, eles exibem uma bela simplificação contida no fenômeno da universalidade. Muitas propriedades de um sistema próximo a uma transição de fase contínua mostram-se independentes dos detalhes e componentes microscópicos que o constituem. Ao invés disso, eles caem em uma das relativamente poucas *classes de universalidade*, cada qual definida apenas por características globais como simetrias intrínsecas do hamiltoniano, o número de dimensões espaciais do sistema, o alcance das interações e quantidades conservadas. Foi necessário constituir um método totalmente novo de abordar o problema para explicar o fenômeno, que é chamado de *grupo de renormalização* [20]. Esta teoria mostra que ao se realizar um cuidadoso processo de *course-graining*, escrevendo um novo hamiltoniano efetivo para o sistema para escalas de observação progressivamente maiores, vários termos vão se tornando irrelevantes. Se essa transformação de escala atinge uma relação de recorrência, ou seja o hamiltoniano escrito na escala anterior tem a mesma forma do novo hamiltoniano efetivo, então todos os modelos microscópicos que no fim chegam à essa mesma transformação pertencem à mesma classe de universalidade.

Tipicamente, próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação e outras grandezas termodinâmicas exibem um comportamento do tipo lei de potência (Δ^α) onde Δ é a distância do ponto crítico e α é um dos *expoentes críticos*, que dependem apenas da classe de universalidade na qual o problema se encaixa. Um dos desafios básicos é explicar porque tais expoentes universais ocorrem e prever os seus valores reais.

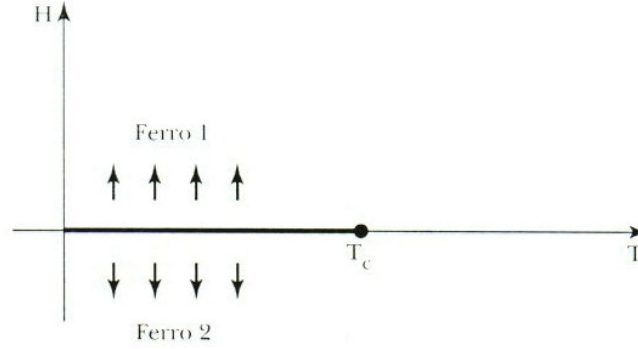


Fig. 2.1: Diagrama de fases em termos do campo aplicado versus a temperatura para um sistema ferromagnético uniaxial simples. A linha de coexistência é dada por $H = 0$ com $T < T_c$.

2.2 Diagramas de fase de sistemas simples

Ferromagnetos uniaxiais

Em um ferromagneto, existem dois parâmetros externos interessantes que podem ser variados: a temperatura T e o campo magnético aplicado H . O diagrama de fase deste sistema é simples (Figura 2.1). Todas as grandezas termodinâmicas são funções suaves analíticas de T e H exceto na linha $H = 0$ e $T \leq T_c$. Ao cruzar a linha $T < T_c$, $H = 0$, a magnetização é descontínua como esclarecido na figura 2.2. Esta descontinuidade é característica de uma transição de primeira ordem, com comprimento de correlação finito. No entanto, à medida que T se aproxima da temperatura de Curie T_c , vindo de baixo, a descontinuidade tende a zero e o comprimento de correlação começa a divergir. O ponto $H = 0, T = T_c$ é um exemplo de um ponto crítico, onde uma transição de primeira ordem torna-se contínua.

Quando $T < T_c$, os limites $H \rightarrow 0+$ e $H \rightarrow 0-$ dão diferentes valores $\pm M_0$ para a magnetização espontânea ou residual. Qual deles o sistema escolhe depende da história prévia (histerese). Este é um exemplo clássico de *quebra espontânea de simetria*. A magnetização M , que mede o quão ordenados estão os spins dentro do material, é denominada o *parâmetro de ordem* desta transição. Para temperaturas menores do que T_c , M tem um valor não nulo que depende da temperatura. Quando o ferromagneto atinge a temperatura de Curie T_c , os spins não conseguem mais se ordenar naturalmente e a magnetização residual é nula.

Como mencionado anteriormente, a maioria das quantidades de interesse exibem um comportamento de leis de potência quando suficientemente próximas ao ponto crítico. A fim de caracterizar os principais expoentes críticos definiremos duas medidas adimensionais da distância até o ponto crítico: a *temperatura reduzida* $t \equiv (T - T_c)/T_c$ e o campo magnético ex-

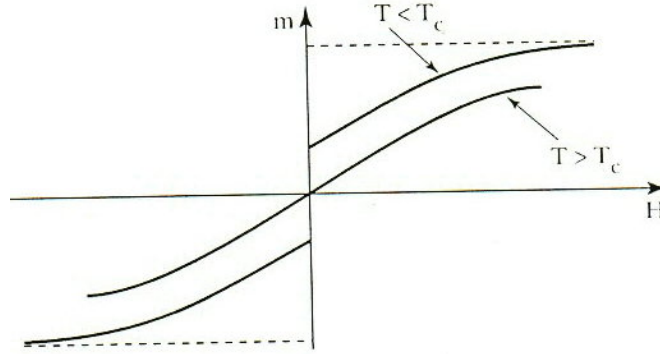


Fig. 2.2: Magnetização versus campo aplicado, para várias temperaturas. Note a descontinuidade em $H = 0$.

terno reduzido $h = H/k_B T$. Os expoentes são:

α O calor específico a campo zero $C \sim A|t|^{-\alpha}$

β A magnetização espontânea $\lim_{H \rightarrow 0^+} M \propto (-t)^\beta$

γ Susceptibilidade magnética a campo zero $\chi \equiv (\partial M / \partial H)|_{H=0} \propto |t|^{-\gamma}$

δ Em $T = T_c$ a magnetização varia com h de acordo com $M \propto |h|^{1/\delta}$

ν O comprimento de correlação ξ diverge quando $t \rightarrow 0$ de acordo com $\xi \propto |t|^{-\nu}$.

η Exatamente no ponto crítico, a função de correlação das flutuações locais não decai exponencialmente, mas de acordo com $G(r) \propto 1/r^{d-2+\eta}$.

z Este expoente está relacionado com as propriedades dinâmicas do sistema. Quando o ponto crítico se aproxima o tempo de relaxação do sistema diverge com $\tau \propto \xi^z$.

Os expoentes acima não são as quantidades mais fundamentais de uma perspectiva teórica mas são decorrentes de um conjunto menor de números obtidos através de *relações de escala*, que serão melhor descritas mais adiante.

Fluidos Simples

O diagrama de fases de um fluido simples, em termos da pressão e temperatura é exibido na figura 2.3. As linhas cheias indicam coexistência de fases, com densidades diferentes, mas com os mesmos valores dos campos termodinâmicos (P e T). A transição nestas linhas é descontínua ou de primeira ordem, exceto no fim da linha representado pelo ponto crítico, onde

as densidades das fases líquida e gasosa se igualam. Nas vizinhanças desse ponto, a diferença entre as densidades $\phi \equiv \rho_l - \rho_g$ segue a lei

$$\phi \sim Bt^\beta ,$$

onde o pré-fator B e a temperatura crítica T_c não têm qualquer caráter universal, mas o expoente β é aproximadamente $1/3$ para quaisquer fluidos (ou grandezas análogas em outros sistemas físicos tridimensionais). Também neste ponto, determinadas derivadas termodinâmicas como compressibilidade ou calor específico podem apresentar um comportamento singular ou anômalo, caracterizando um *estado crítico* da matéria. As curvas de isothermas ilustradas na figura 2.4 podem ser comparadas aos gráficos de magnetização em um ferromagneto (figura 2.2), vemos que $p - p_c$ é análogo ao campo aplicado H , e $\rho - \rho_c$ à magnetização M . Definindo então os expoentes críticos em analogia aos do ferromagneto temos:

- $C_V \propto |t|^{-\alpha}$ em $\rho = \rho_c$
- $\rho_L - \rho_G \propto (-t)^\beta$
- compressibilidade isotérmica $\kappa_T \propto |t|^{-\gamma}$
- $p - p_c \propto |\rho_L - \rho_G|^\delta$

Os expoentes ν e η são definidos da mesma forma que no ferromagneto com $G(r)$ agora representando a função de correlação entre as densidades.

Um dos aspectos mais incríveis da universalidade é que os expoentes críticos do fluido simples são exatamente os mesmos do ferromagneto uniaxial. A figura 2.5 mostra os dados reunidos por Guggenheim em 1945 para ρ/ρ_c (onde ρ_c é a densidade no ponto crítico) versus T/T_c ao longo da curva de coexistência de oito fluidos diferentes. Os dados podem ser razoavelmente bem ajustados com uma equação cúbica ($\beta = 3$).

2.3 A teoria clássica de Landau

Desde a proposta de van der Waals, vários outros autores apresentaram suas teorias para descrever os aspectos qualitativos de vários tipos de transição de fase, que ficaram conhecidas como teorias clássicas. As primeiras previsões de expoentes críticos vieram de teorias desta natureza e todas estas abordagens podem ser, de certa forma, englobadas por uma fenomenologia proposta por Landau em 1930.

A teoria de Landau baseia-se na introdução do conceito de parâmetro de ordem (ψ) e no estabelecimento de uma expansão da energia livre em termos dos invariantes dessa grandeza. Exige-se portanto que a energia livre seja uma função analítica nas vizinhanças da criticalidade. Em geral, temos que

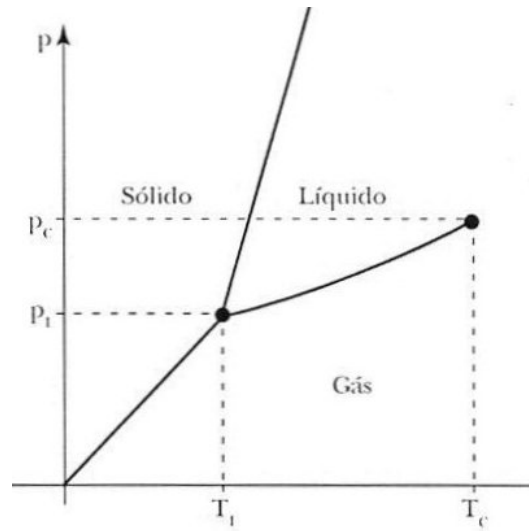


Fig. 2.3: Diagrama de fases de um fluido simples em termos da pressão versus a temperatura. As linhas cheias indicam transições de primeira ordem. O ponto triplo (P_t, T_t) indica coexistência das três fases. (P_c, T_c) é ponto crítico.

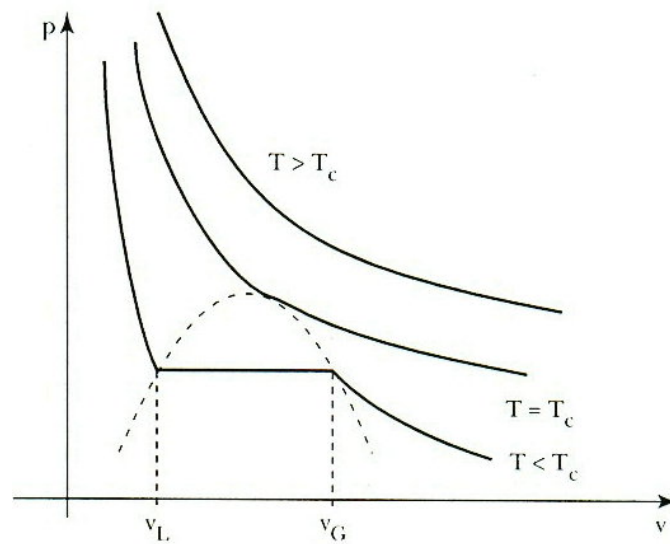


Fig. 2.4: Isotermas de um fluido simples próximo ao ponto crítico. O patamar indica a coexistência de fases.

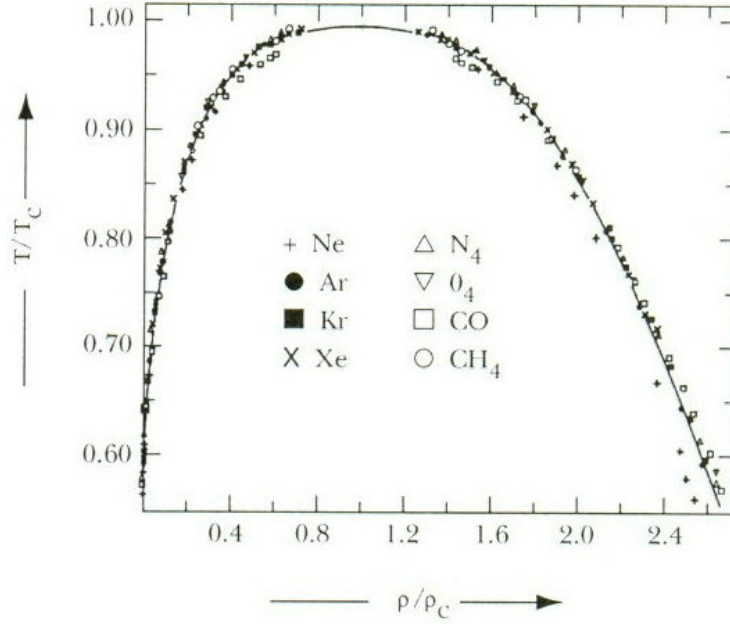


Fig. 2.5: Dados reunidos por Guggenheim em 1945 para a curva de coexistência de oito fluidos. Note o ajuste com uma equação cúbica e também a coexistência de fases.

$\psi = 0$ na fase mais simétrica (desordenada) e $\psi \neq 0$ na fase menos simétrica (ou ordenada).

Nos sistemas em equilíbrio termodinâmico, ou seja em contato com um reservatório termico, a energia livre de Helmholtz pode ser calculada como $F = -k_b T \ln Z$, onde $Z = \text{Tr}(e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_b T}})$ é a função partição canônica. Mesmo quando o hamiltoniano $\mathcal{H}$ é relativamente simples, computar Z é uma tarefa muito difícil, podendo ser impossível no caso de hamiltonianos mais realísticos. No entanto, devido à existência da universalidade dos fenômenos críticos, é possível considerar modelos simplificados que retêm apenas a física essencial do problema e suas simetrias.

Assumindo então um sistema simples cujos únicos campos externos são a temperatura e o campo magnético, e o parâmetro de ordem é um escalar, escrevemos a expansão da densidade de energia livre de Gibbs como:

$$g(T, H, \psi) = g_0(T, H) + g_1(T, H)\psi + g_2(T, H)\psi^2 + g_3(T, H)\psi^3 + g_4(T, H)\psi^4 + \dots \quad (2.1)$$

Para descrever um ponto crítico simples, basta que g_4 seja positivo, assegurando a existência de um mínimo em relação a ψ . Podemos então ignorar os termos de ordem superior. Se o parâmetro ψ é escalar, sempre é possível fazer uma translação para eliminar o termo cúbico da expansão, reescrevendo-a

na forma

$$g(T, H; \psi) = A_0(T, H) + A_1(T, H)\psi + A_2(T, H)\psi^2 + \psi^4 . \quad (2.2)$$

Para que o ponto crítico esteja associado a um mínimo estável de g , os coeficientes A_1 e A_2 devem se anular na criticalidade. As derivadas do potencial termodinâmico acima são

$$\frac{\partial g}{\partial \psi} = A_1 + 2A_2\psi + 4\psi^3 = 0 \quad (2.3)$$

e

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \psi^2} = 2A_2 + 12\psi^2 . \quad (2.4)$$

Para $A_1 = 0$, temos $\psi = 0$ ou $\psi = \pm\sqrt{-A_2/2}$. A solução $\psi = 0$ é estável para $A_2 > 0$, mas quando $\psi \neq 0$, temos $\partial^2 g / \partial \psi^2 = -4A_2$, ou seja, a solução $\psi \neq 0$ é estável para $A_2 < 0$.

No caso de um ferromagneto uniaxial, a simetria permite simplificar a expansão de modo que

$$g(T, H, m) = f_0(T) - Hm + A(T)m^2 + b m^4 + \dots \quad (2.5)$$

No ponto crítico $H = 0$ e $A(T) = 0$, e nas vizinhanças da criticalidade

$$A(T) = a(T - T_c) ,$$

com $a > 0$, $b > 0$ e $f_0(T) \approx f_0(T_c)$. Portanto, próximo à transição, a equação tem a seguinte forma

$$g(T, H, m) = f_0(T_c) - Hm + a(T - T_c)m^2 + bm^4 . \quad (2.6)$$

Quando o campo externo é nulo e as constantes a e b positivas, a parte singular do potencial termodinâmico $g_s = g - f_0$ tem a forma da figura 2.6.

Tomando a primeira derivada da equação 2.6 e igualando a zero, temos, no ponto crítico, três valores possíveis de magnetização residual

$$m = 0 \quad \text{ou} \quad m = -\left[\frac{a}{2b}(T - T_c)\right]^{1/2} \quad \text{ou} \quad m = \left[\frac{a}{2b}(T - T_c)\right]^{1/2} . \quad (2.7)$$

Daqui obtemos o valor clássico do expoente crítico $\beta = 1/2$. Da mesma forma pode-se obter que $\gamma = 1$ e $\delta = 3$. Também é fácil verificar que o calor específico a campo nulo apresenta a descontinuidade $\Delta c = a^2 T_c / 2b$ na temperatura crítica.

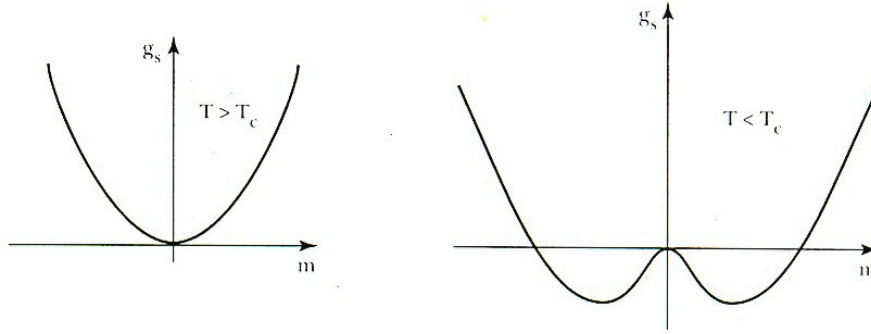


Fig. 2.6: Parte singular do potencial termodinâmico de Landau para um ferromagneto uniaxial. Abaixo da temperatura crítica, o mínimo paramagnético se torna um máximo, aparecendo dois mínimos simétricos.

2.4 Teoria de Escala

A ocorrência do comportamento de leis de potência para certas grandezas físicas é um sintoma das relações de escala presentes no problema. Nos casos mais elementares, elas são simplesmente o resultado de uma análise dimensional. Por exemplo, uma vez que assumimos que a aceleração gravitacional de um corpo a uma distância r de uma massa pontual segue a lei G/r^2 , então $F = ma \propto 1/r^2$. Assumindo uma órbita circular efetiva, podemos igualar $\frac{mG}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$ e como v tem dimensões de r/T , imediatamente obtém-se a lei de Kepler que diz que o período $T \propto r^{3/2}$ para qualquer planeta orbitando em torno do sol. No entanto, muitos sistemas físicos apresentam mais de um comprimento de escala. As quantidades podem então depender, de uma maneira arbitrária e complicada, das razões adimensionais entre estes comprimentos de escala. Nos casos onde existam uma ampla separação entre as escalas relevantes, o problema é extremamente simplificado.

Voltemos ao exemplo do ferromagneto uniaxial. Sua energia livre pode ser separada em uma parte regular, que é pouco interessante neste momento, e uma parte singular que contém todas as anomalias do problema. Por conveniência, escrevemos a parte singular desse potencial em termos das variáveis $t = (T - T_c)/T_c$ e H , que se anulam na criticalidade.

$$g(t, H) = g_0(t, H) + g_s(t, H) . \quad (2.8)$$

A hipótese de escala ou homogeneidade consiste em supor que g_s seja uma *função homogênea generalizada* das variáveis t e H .

$$g_s(t, H) = \lambda g_s(\lambda^a t, \lambda^b H) , \quad (2.9)$$

onde λ é um parâmetro arbitrário e a e b são dois expoentes bem definidos. A arbitrariedade de λ nos permite fazer a escolha $\lambda^a t = 1$, ou seja, $\lambda = t^{-1/a}$,

de forma a resultar em

$$g_s(t, H) = t^{-1/a} g_s \left(1, \frac{H}{t^{b/a}} \right) = t^{-1/a} F \left(\frac{H}{t^{b/a}} \right) . \quad (2.10)$$

Supondo que F seja uma função bem comportada, podemos fazer as derivações usuais da termodinâmica para exprimir os expoentes críticos em termos de a e b .

$$m = -\frac{\partial g_s}{\partial H} = -t^{-1/a-b/a} F' \left(\frac{H}{t^{b/a}} \right) . \quad (2.11)$$

Então, quando $H=0$, o expoente beta será:

$$\beta = -\frac{1}{a} - \frac{b}{a} . \quad (2.12)$$

Através da derivada da entropia a campo nulo, obtemos o calor específico

$$c(t, H=0) \approx -\frac{1}{aT_c} \left(\frac{1}{a} + 1 \right) t^{-1/a-2} F(0) \quad (2.13)$$

e por conseqüência o expoente α

$$\alpha = 2 + \frac{1}{a} . \quad (2.14)$$

A susceptibilidade magnética é obtida pela derivada da magnetização resultando em

$$\chi(t, H=0) = -t^{-1/a-2b/a} F''(0) \quad (2.15)$$

que fornece o expoente

$$\gamma = \frac{2b}{a} + \frac{1}{a} . \quad (2.16)$$

A partir das equações 2.12, 2.14 e 2.16 temos

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 , \quad (2.17)$$

pois apenas dois expoentes determinam todos os demais. Esta é uma *relação de escala* que já foi verificada tanto por dados experimentais quanto cálculos exatos e numéricos.

Nesse contexto, podemos exprimir a magnetização na forma

$$m(t, H) = t^\beta Y \left(\frac{H}{t^\Delta} \right) , \quad (2.18)$$

onde Y deve ser uma função bem comportada e $\Delta = b/a = 2 - \alpha - \beta = \beta + \gamma$. Na seqüência temos

$$\frac{m}{t^\beta} = Y \left(\frac{H}{t^\Delta} \right) . \quad (2.19)$$

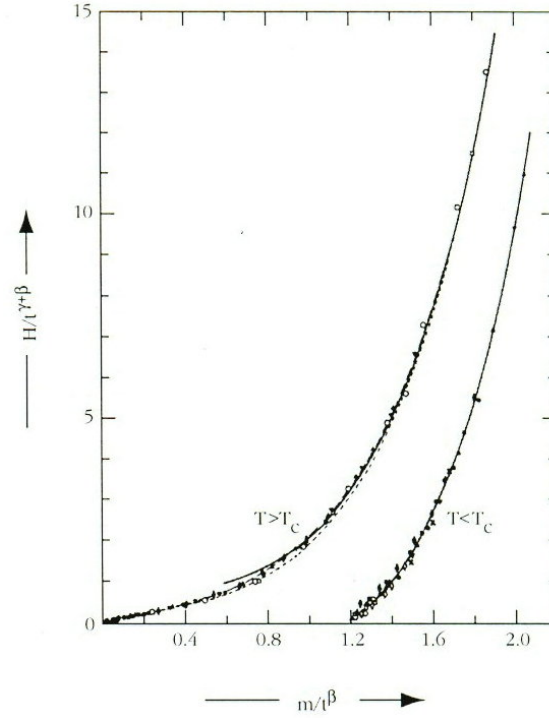


Fig. 2.7: Dados reunidos por Ho e Lister em 1969 para o composto $CrBr_3$. Magnetização na escala t^β versus campo externo na escala $t^{\gamma+\beta}$

O gráfico dos dados experimentais para m/t^β , isto é, para a magnetização numa escala definida por t^β , versus H/t^Δ , onde t^Δ é a escala associada ao campo externo H , deve corresponder à função universal $Y(x)$. A figura 2.7 reproduz uma análise feita em por Ho e Lister em 1969 para o ferromagneto $CrBr_3$, que exhibe claramente dois ramos distintos.

No ponto crítico, a função de correlação spin-spin para grandes distâncias também pode ser representada na forma de uma lei de potência do tipo

$$\Gamma(\vec{r}) \rightarrow B_d r^{-(d-2+\eta)}, \quad (2.20)$$

onde B_d é um coeficiente não universal e $\eta = 1/4$ para redes bidimensionais da classe Ising. Fora do ponto crítico,

$$\Gamma(\vec{r}) \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (2.21)$$

onde o comprimento de correlação ξ é dado por

$$\xi = \begin{cases} D_+ t^{-\nu} & ; \quad T \rightarrow T_c + \\ D_- (-t)^{-\nu} & ; \quad T \rightarrow T_c - \end{cases}. \quad (2.22)$$

Podemos também construir uma teoria de escala para as funções de correlação de pares,

$$\Gamma(r, t, H) = \lambda \Gamma(\lambda^a r, \lambda^b t, \lambda^c H) = t^{-1/b} F\left(\frac{r}{t^{a/b}}, \frac{H}{t^{c/b}}\right) \quad (2.23)$$

e reescolhendo de forma conveniente esses expoentes, temos a forma

$$\Gamma(r, t, H) = t^{\nu(d-2+\eta)} F\left(\frac{r}{t^{-\nu}}, \frac{H}{t^{\Delta}}\right). \quad (2.24)$$

Estes novos expoentes não são independentes sendo relacionados com os dois expoentes termodinâmicos via a relação de Fisher

$$\gamma = \nu(2 - \eta) , \quad (2.25)$$

e também pela relação de hiperescala

$$2 - \alpha = d\nu . \quad (2.26)$$

2.5 Transições de fase em sistemas fora do equilíbrio

Em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico não é mais possível escrever um hamiltoniano para o sistema, muito menos calcular uma função partição. Para maior parte dos problemas reais simplesmente não existe uma metodologia definida de estudo ou uma estratégia que funcione sempre. No entanto existe uma subclasse destes sistemas que apesar de não estarem no equilíbrio termodinâmico são simples o suficiente para terem a sua dinâmica microscópica descrita por uma equação passível de ser resolvida, ainda que numericamente. A dinâmica pode ser definida em termos de probabilidades e o sistema evolui em seu espaço de fase, mudando de uma configuração para outra. Dentro desta classe de sistemas existe um conjunto que fenômenos que após um certo tempo atingem um estado estacionário ou meta-estável, e é essa subclasse que nos interessa. As taxas de transição aqui tomam o lugar de variáveis intensivas como temperatura ou campo externo, e uma pequena alteração nestas taxas pode causar uma mudança drástica no sistema, que denominamos, em analogia à termodinâmica de equilíbrio, de transição de fase. Um novo leque de fenômenos se abre, possibilitando transições de fase em uma dimensão, sistemas com memória, estados estacionários e absorventes.

Para modelar a dinâmica microscópica de um destes sistemas é necessário escrever a sua equação mestra. O primeiro requisito é a distribuição inicial de probabilidades $P_n(t_0)$, que representa a probabilidade do sistema ocupar cada uma de suas possíveis configurações(ou estados). O próximo passo, e de longe o mais difícil, é determinar as taxas de transição de um estado para o

outro. Quando não é possível obtê-las a partir de primeiros princípios, deve-se empregar formas plausíveis e consistentes com o problema. Tal colocação não é entretanto desanimadora, uma vez que sabemos que para o estudo da criticalidade basta que conservemos a dimensionalidade, o alcance das interações e as simetrias inerentes ao sistema para atingirmos a classe de universalidade de interesse.

A equação mestra descreve um processo de Markov, ou seja, sem memória intrínseca, e pode ser sempre escrita na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P_n(t) = \sum_{n'} W_{n' \rightarrow n} P_{n'}(t) - \sum_{n'} W_{n \rightarrow n'} P_n(t), \quad (2.27)$$

com $\sum_n P_n(t) = 1$. É importante notar aqui que os valores de $W_{n \rightarrow n'}$ são taxas e não probabilidades, e portanto podem ser maiores do que 1 e, devido à arbitrariedade na escolha da unidade de tempo, é sempre possível fazer uma reescala de tempo para normalizar uma das taxas para 1.

Dizemos que um processo de Markov obedece a condição de balanço detalhado se

$$P'_n(t) W_{n' \rightarrow n} = P_n(t) W_{n \rightarrow n'}, \quad (2.28)$$

para todo par de estados n e n' . Uma diferença importante entre processos de equilíbrio e fora do equilíbrio é que os últimos *não* cumprem esta condição. Por conseguinte, a distribuição estacionária é geralmente desconhecida. A condição de balanceamento detalhado é equivalente à reversibilidade microscópica do processo e por isso sistemas fora do equilíbrio também são chamados de irreversíveis.

Definindo uma matriz de evolução como

$$\mathbb{W}_{n' \rightarrow n} = W_{n' \rightarrow n} - \delta_{nn'} \sum_{n''} W_{n \rightarrow n''}, \quad (2.29)$$

podemos reescrever a equação mestra em uma forma vetorial

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(t) = \mathbb{W} \mathbf{P}(t), \quad (2.30)$$

onde $\mathbf{P}(t)$ é um vetor contendo a probabilidade de encontrar o sistema em cada um dos seus estados no tempo t e cuja solução formal é

$$\mathbf{P}(t) = e^{\mathbb{W}t} \mathbf{P}(0). \quad (2.31)$$

Geralmente a dinâmica resultante inicia com um período de decaimento transiente até atingir um estado estacionário, cujas propriedades médias dependerão das taxas escolhidas.

O método comum para resolver equações deste tipo através dos autovalores e autovetores de $\mathbb{W}$ em geral não é bem sucedido ou nem mesmo se consegue aplicá-lo. Assim, uma vez que é raramente possível encontrar uma solução exata para a equação mestra, devemos buscar métodos alternativos tais como expansões em série, aproximação de campo médio e simulações. Estes métodos serão discutidos no capítulo 3.

2.6 Escala para tamanho finito

Como mencionado na seção anterior, ao abordar sistemas fora do equilíbrio, em algum momento será necessário empregar métodos numéricos ². Neste momento aparecerá um problema relativo ao tamanho finitos dos sistemas modelo. Na realidade o ponto crítico nunca pode ser diretamente investigado em simulações pois, exatamente nele, o comprimento de correlação torna-se infinito. Mesmo nas vizinhas do ponto crítico, o comprimento ξ é grande suficiente para fazer com que as propriedades intensivas do sistema sejam fortemente afetadas pelo tamanho. A solução é estudar a variação destas propriedades em sistemas de vários tamanhos e estimar os expoentes críticos através das *relações de escala de tamanho finito*. Apelamos aqui para a noção de que, próximo ao ponto crítico, a escala de comprimento relevante é $\xi \propto \Delta^{-\nu_\perp}$, onde $\Delta = \lambda - \lambda_c$ é a distância até o ponto crítico na escala do parâmetro de ordem. A dependência das propriedades intensivas com o tamanho L se dá na verdade através da razão L/ξ , que é proporcional a $\Delta L^{1/\nu_\perp}$.

Uma complicação adicional surge ao se aplicar a teoria de escala para tamanhos finitos a sistemas com transição para um estado absorvente. O tamanho finito impede que o sistema permaneça no que seria o seu estado estacionário, pois eventualmente ocorrerá uma flutuação que levará o sistema ao estado absorvente. Para aprender sobre o estado ativo a partir de simulações em sistemas finitos, estudamos o estado *quase-estacionário*, que descreve a média das propriedades de interesse baseada apenas nos ensaios sobreviventes até o tempo t , após um transiente inicial. Este tempo transiente é necessário para que o sistema dissipe a influência de sua configuração inicial e atinja o estado quase-estacionário, e depende tanto de L quanto de Δ . O conceito de estado quase-estacionário é de suma importância para este trabalho e será melhor detalhado nos capítulos seguintes.

Supondo que a densidade seja o parâmetro de ordem, para L grande e Δ pequeno, podemos escrever a densidade quase-estacionária da seguinte forma

$$\bar{\rho}(\Delta, L) \propto L^{-\beta/\nu_\perp} f\left(\Delta L^{1/\nu_\perp}\right). \quad (2.32)$$

O ponto crítico também pode ser encontrado examinando-se a dependência de $\bar{\rho}(\lambda, L)$ com L . Quando $\Delta = 0$ a relação 2.32 torna-se

$$\bar{\rho}(0, L) \propto L^{-\beta/\nu_\perp}. \quad (2.33)$$

Quando $\Delta < 0$ o regime é subcrítico e $\bar{\rho}$ cai com L^{-1} , enquanto para $\Delta > 0$, $\bar{\rho}$ tende a seu valor estacionário enquanto $L \rightarrow \infty$. A lei de potência da eq. 2.33 só pode ser obtida no ponto crítico e nesse sentido gráficos de $\ln \rho$ vs $\ln L$ são muito úteis na localização de λ_c (valor crítico do parâmetro

² Lembrando mais uma vez que apenas a subclasse de fenômenos especificada na seção anterior pode ser estudada desta forma.

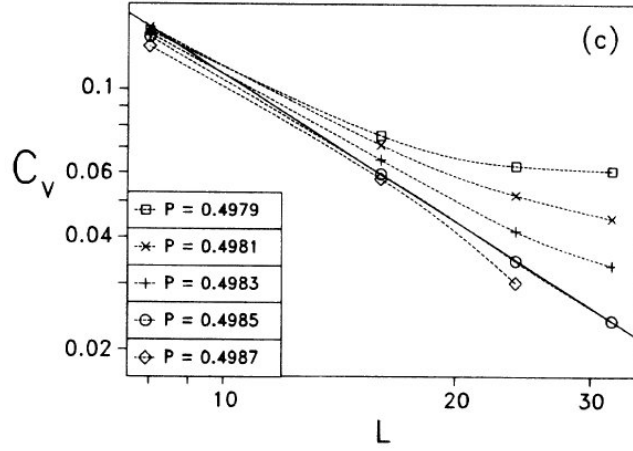


Fig. 2.8: Aukrust *et al* [21] utilizam a teoria de escala de tamanho finito para encontrar o valor crítico do parâmetro $\mathbf{p}$ em sua simulação de reação autocatalítica em rede (C_V é a fração de sítios livres). No ponto crítico o gráfico deve ser uma reta cuja inclinação dá o valor do expoente crítico correspondente (no caso α).

de controle). No ponto crítico eles serão apresentados como uma reta, e esta se curvará para cima ou para baixo a medida que nos afastamos da criticalidade em direção ao regime subcrítico ou supercrítico. A figura 2.8 mostra a aplicação desta metodologia na busca valor crítico da probabilidade de adsorção no modelo de reação auto-catalítica proposto por Aukrust *et al* [21].

Consideremos agora a distribuição de probabilidade $P(\rho, L)$ para a densidade em um sistema crítico. É razoável supor que para $\rho \simeq \bar{\rho}$, P depende de ρ apenas através da razão $\rho/\bar{\rho}$. Substituindo $\bar{\rho}$ de acordo com a relação 2.33, chegamos a seguinte forma para a probabilidade

$$P(\rho, L) \propto L^{\beta/\nu_{\perp}} \mathcal{P}(\rho L^{\beta/\nu_{\perp}}), \quad (2.34)$$

onde o pré-fator é necessário para a normalização.

Uma outra aplicação da teoria de escala de tamanho finito envolve o tempo médio de sobrevivência τ_s de um ensaio. Para $L \gg \xi$, mas suficientemente próximo ao ponto crítico, este tempo de decaimento também respeita uma lei de potência do tipo $\tau_s \propto |\Delta|^{-\nu_{\parallel}}$. Ao incorporar a dependência em L da maneira padrão, chegamos a

$$\tau_s(\Delta, L) \propto L^{\nu_{\perp}/\nu_{\parallel}} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (2.35)$$

Exatamente no ponto crítico $\tau_s \propto L^{\nu_{\perp}/\nu_{\parallel}}$, e é representado em um gráfico $\log \tau_s$ x $\log L$ por uma reta. A mesma metodologia usada no estudo da

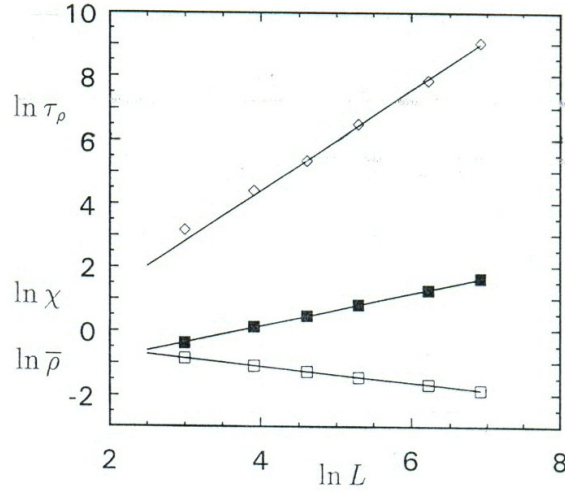


Fig. 2.9: Escala para tamanho finito no PC unidimensional em seu ponto crítico. De cima para baixo: τ_ρ, χ, ρ_s . As inclinações respectivas são 1.58, 0.497 e -0.252. Dados de Marro and Dickman (1999) [1].

densidade pode ser aplicada aqui para encontrar o valor do expoente crítico $\nu_\perp/\nu_\parallel$.

Por fim, o tempo transiente inicial que o sistema demora para atingir o seu estado quase-estacionário (nos ensaios que sobreviverem até lá) também apresenta uma relação de escala para tamanho finito

$$\rho_s(t) - \bar{\rho}(\Delta, L) \simeq C \exp(-t/\tau_\rho). \quad (2.36)$$

No ponto crítico, τ_ρ tem a mesma dependência em L de τ_s , mas ele é consideravelmente menor e portanto mais fácil de se determinar. A mesma analogia pode ser feita a outras grandezas de interesse para cada problema em particular.

3. O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

O método do Grupo de Renormalização não foi utilizado como ferramenta para os estudos realizados nesta tese. O leitor pode portanto saltar todo esse capítulo sem prejuízo para a compreensão do restante do trabalho. Apesar disso, nenhuma revisão sobre universalidade e fenômenos críticos estaria completa sem discursar sobre esta poderosa técnica. As próximas páginas dedicam-se a este propósito, porém sem a pretensão de ser uma base de referência completa. O leitor mais interessado no assunto deve recorrer à hoje vasta literatura a respeito ou aos próprios artigos originais de Wilson e Kogut, que são bastante detalhados [22, 23].

3.1 Introdução

As idéias do grupo de renormalização surgiram na década de 50, mas somente a partir de 1970 o método começou a ser aplicado a fenômenos críticos. Nessa abordagem as leis de escala aparecem naturalmente e a hipótese de universalidade de Kadanoff ganha um embasamento matemático forte.

Para ilustrar o conceito, podemos pensar em uma rede de spins com espaçamento L_0 . Se o comprimento de correlação ξ é muito maior do que L_0 , spins vizinhos estarão fortemente correlacionados e portanto podemos definir uma nova rede com spins efetivos $\sigma^{(1)}$ dados pela média sob blocos de tamanho $L_1 = 2L_0$. Como $\frac{\xi}{L_0}$ ainda é muito grande, podemos definir uma nova rede com spins efetivos $\sigma^{(2)}$ dados pela média dos $\sigma^{(1)}$ em um bloco de tamanho $L_2 = 2L_1 = 4L_0$. Essa transformação continua a ser aplicada sucessivamente até que a separação entre os spins efetivos seja da ordem do comprimento de correlação ξ . Nota-se que os graus de liberdade originais vão sendo divididos por 2^d , e as iterações continuam até que $2^n L_0$ seja da ordem de ξ .

Em cada passo é necessário também escrever a interação efetiva $\mathcal{H}_l$ para os graus de liberdade $\sigma^{(l)}$, como função de $\mathcal{H}_{l-1}$ e $\sigma^{(l-1)}$. Para isso assume-se que as interações $\mathcal{H}_l$ sejam *locais* na escala de separação entre seus próprios spins efetivos, o que obviamente implica que $\mathcal{H}_0$ seja local na escala original. A esperança é que a interação efetiva $\mathcal{H}_1$ tenha alcance da ordem $2L_0$, a interação efetiva $\mathcal{H}_2$ tenha alcance da ordem $4L_0$, etc. Essa afirmação implica em um efeito cascata no sistema como um todo. Flutuações atômicas (1-2Å) influenciam as flutuações de 2-4Å que por sua vez influenciam as flutuações

de 4-8Å, etc.

Uma consequência direta do efeito cascata é que todos os comprimentos de ondas estão envolvidos. Em outras palavras, não há uma escala característica. Os comportamentos das flutuações com comprimentos de onda intermediários tendem a ser idênticos exceto por uma mudança de escala, precisamente devido à inexistência de um comprimento de onda característico. O comportamento de escala falhará entretanto para comprimentos de onda próximos aos tamanhos atômicos e também no limite próximo ao comprimento de correlação ξ .

Outra consequência do efeito cascata é a ampliação ou atenuação de flutuações a medida que a cascata se desenvolve. Por exemplo, uma pequena mudança na temperatura não afetará significativamente as iterações na escala atômica, mas a medida que a cascata se desenvolve, flutuações de comprimentos de onda de 1Å aumentam para 2Å e depois para 4Å e depois para 8Å, etc. Dessa forma o efeito do aumento de temperatura é amplificado, levando a alterações macroscópicas para grandes comprimentos de onda. Exatamente no ponto crítico, uma pequena mudança de temperatura faz com que o comprimento de correlação mude de infinito para um valor ξ' finito, o que representa uma mudança macroscópica para os comprimentos de onda maiores que ξ' .

A atenuação também pode ocorrer, por exemplo, no caso de dois materiais magnéticos com estruturas atômicas diferentes. O efeito das diferentes estruturas sobre as iterações efetivas vai diminuindo até se tornar desprezível para grandes comprimentos de onda. Sob essa atenuação, jaz o fundamento da hipótese da *universalidade em fenômenos críticos*, que afirma que diferentes substâncias (sistemas físicos de modo geral) terão o mesmo comportamento crítico.

Dentro do limite de escala, deve existir uma transformação τ que converte $\mathcal{H}_0$ em $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_1$ em $\mathcal{H}_2$, e assim por diante, sempre mantendo a mesma forma e portanto conservando a função partição. Esta transformação é a mesma para cada passo e, se após várias iterações, o resultado voltar nele mesmo, como em

$$\tau\mathcal{H}^* = \mathcal{H}^* \quad (3.1)$$

então foi encontrado um ponto fixo.

Nada garante que a seqüência $\mathcal{H}_l$ se aproxima de um ponto fixo quando $l \rightarrow \infty$. Em princípio a seqüência pode exibir um comportamento ergódico ou turbulento, em tais casos não é possível progredir nos cálculos. Mesmo se a seqüência se aproximar de um ponto crítico, é improvável que $\mathcal{H}_n$, para grandes valores de n seja uma função suave dos parâmetros originais.

No caso onde o limite existe e a função pode ser bem determinada, a eq 3.1 pode ter mais de uma raiz, e a cada um associa-se um ponto fixo. Podemos dividir o conjunto de todos os possíveis parâmetros do hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ em subconjuntos ou domínios, e cada um deles após repetidas iterações

levará a um dos pontos fixos encontrados na solução da eq. 3.1. A universalidade se aplica separadamente a cada domínio, cada qual com seus próprios expoentes críticos.

Infelizmente essa recorrência não reduz o problema final para apenas um grau de liberdade. Não é difícil encontrar um exemplo onde é necessário considerar 60 ou mais variáveis para calcular $\mathcal{H}_l$ a partir de $\mathcal{H}_{l-1}$. Na prática a fórmula de recorrência só é encontrada em *circunstâncias especiais* (ex. $d = 4 - \epsilon$, com ϵ pequeno) ou *através de aproximações rudimentares* tal que apenas um grau de liberdade é considerado no cálculo de $\mathcal{H}_l$.

Nas próximas subseções trataremos os exemplos do modelo Gaussiano e modelo s^4 com o fim de ilustrar a aplicação do grupo de renormalização a fenômenos críticos.

3.2 O modelo Gaussiano

A aplicação mais trivial da técnica refere-se ao modelo gaussiano. Nesse caso o expoente crítico ν tem o mesmo valor previsto pela teoria de campo médio (1/2). O modelo Gaussiano pode ser obtido a partir de uma modificação do modelo de Ising. Inicialmente, escreve-se a função partição em termos de integrais, como abaixo.

$$\prod_m \int_{-\infty}^{\infty} ds_m 2\delta(s_m^2 - 1) \exp \left\{ K \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\delta} s_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}+\delta} \right\} \quad (3.2)$$

com $\mathbf{n}$ representando os sítios da rede e $\mathbf{n} + \delta$ os sítios primeiros vizinhos de $\mathbf{n}$. O próximo passo é uma aproximação extremamente simplificada da distribuição delta original para uma função suavizada como mostra a figura 3.1.

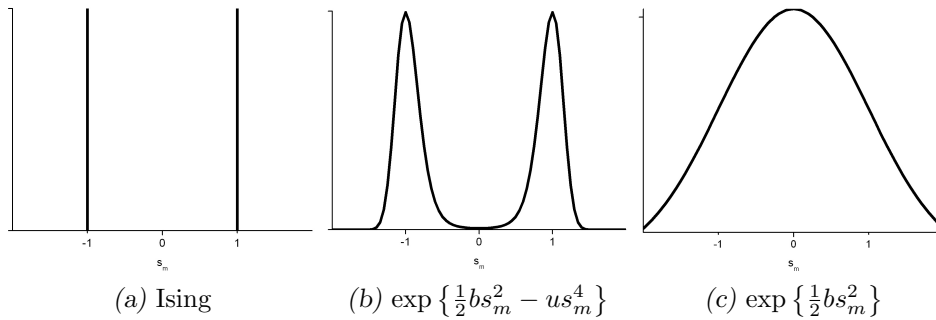


Fig. 3.1: Transição do modelo de Ising para o Gaussiano. (a) Spins tem valor +1 ou -1 em cada sítio. (b) as variáveis de spin têm pico nos valores de Ising (c) Em cada sítio a variável de spin segue uma distribuição Gaussiana em torno de zero.

O modelo Gaussiano, embora longe de ser uma boa aproximação, é importante pois define alguns resultados a serem usados como premissa para

a resolução de modelos mais complicados. A inclusão do termo us^4 leva ao hamiltoniano de Ginzburg-Landau (fig.3.1c) que será descrito na subseção posterior. A função partição para o modelo Gaussiano agora tem a forma:

$$Z_G = \prod_m \int_{-\infty}^{\infty} ds_m \exp \left\{ -\frac{1}{2} b s_m^2 \right\} \exp \left\{ K \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{q}} s_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}+\mathbf{q}} \right\} \quad (3.3)$$

Como estamos interessados no comportamento crítico macroscópico do sistema, associado às flutuações de grandes comprimentos de ondas (ou vetores de onda q pequenos), será mais conveniente representar o hamiltoniano no espaço dos momentos. O primeiro passo é definir um campo de spins

$$s_{\mathbf{n}} = \int_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}} \sigma_{\mathbf{q}} \quad \text{e} \quad \sigma_{\mathbf{q}} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}} s(\mathbf{n}) \quad (-\pi < q_i < \pi, \quad i = 1, \dots, d). \quad (3.4)$$

Nota-se que a integração acima é feita sobre a primeira zona de Brillouin de um rede cúbica simples d -dimensional. A partir desse ponto é conveniente introduzir a notação simplificada abaixo.

$$\int_{\mathbf{q}} \equiv \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \dots \int_{-\pi}^{\pi} dq_d \quad (3.5)$$

Em seguida reescrevemos o Hamiltoniano original do modelo na representação dos momentos; a transformação está detalhada abaixo.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= K \sum_{\mathbf{n}} \sum_i s_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}+i} - \frac{1}{2} b \sum_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}}^2 = -\frac{1}{2} K \sum_{\mathbf{n}} \sum_i (s_{\mathbf{n}+i} - s_{\mathbf{n}})^2 - \left(\frac{1}{2}b - dK\right) \sum_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}}^2 \\ &= -\frac{1}{2} K \sum_{\mathbf{n}} \sum_i 2 \int_{\mathbf{q}} \int_{\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}') \cdot \mathbf{n}} \left[1 - e^{i\mathbf{q}' \cdot i} \right] \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}'} - \left(\frac{1}{2}b - dK\right) \sum_{\mathbf{n}} \int_{\mathbf{q}} \int_{\mathbf{q}'} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}'} \\ &= -K \sum_i \int_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} \left[1 - e^{-i\mathbf{q} \cdot i} \right] - \left(\frac{1}{2}b - dK\right) \int_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} \end{aligned}$$

Sendo $\sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}}$ uma função par em $\mathbf{q}$, podemos escrever

$$\int_{\mathbf{q}} (1 - e^{-i\mathbf{q} \cdot i}) \Rightarrow \int_{\mathbf{q}} \sum_i^d (1 - \cos q_i) \quad \text{e portanto}$$

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \left[K \sum_{j=1}^d (1 - \cos q_j) + \tilde{r} \right] \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} \quad \text{com} \quad \tilde{r} = b - 2dK$$

Como visto na seção 3 o operador da transformação $\tau \mathcal{H}_l = \mathcal{H}_{l+1}$ é exatamente o mesmo para toda a sequência. Então não é estritamente necessário iniciar o processo em $\mathcal{H}_0$. Se conhecemos a expressão para o Hamiltoniano em um limite com o índice l mais adiantado, podemos partir desse ponto e buscar a transformação que leve ao ponto fixo. Dado isso, faremos uma aproximação no hamiltoniano inicial para uma forma mais simples, válida para vetores de onda q pequenos. Uma vez que o objetivo é estudar o limite macroscópico isso não traz nenhuma perda. A simplificação é feita em três passos.

- i) $\sum_i (1 - \cos qi) \rightarrow |\mathbf{q}|^2 \equiv q^2$ com $|\mathbf{q}|$ pequeno
- ii) Muda-se o domínio de integração de $-\pi < q_i < \pi$ para $0 < |\mathbf{q}| < 1$, redefinindo $\int_{\mathbf{q}} \equiv \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{|\mathbf{q}| < 1} dq_i \dots dq_N$
- iii) Reescala-se os spins $\sigma'_{\mathbf{q}} = \sqrt{K} \sigma_{\mathbf{q}}$ e o parâmetro $r = \frac{\tilde{r}}{K}$

Feitas estas alterações, e deixando de escrever as linhas, a interação vira

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} (q^2 + r) \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} \quad (3.6)$$

A segunda mudança introduz uma complicação pois com $0 < |\mathbf{q}| < 1$ não é mais possível relacionar os $\sigma_{\mathbf{q}}$ de volta para as variáveis originais $s_{\mathbf{n}}$. Por consequência, somos forçados a definir a função partição como uma integral funcional sobre os $\sigma_{\mathbf{q}}$ ao invés das integrais simples sobre $\mathbf{q}$. A expressão para Z toma a forma abaixo.

$$Z = \left(\prod_{|\mathbf{q}| < 1} \int_{\sigma_{\mathbf{q}} : |\mathbf{q}| < 1} \right) \exp \left\{ - \sum_{|\mathbf{q}| < 1} \frac{1}{2} \sigma_{\mathbf{q}} \cdot \sigma_{-\mathbf{q}} (q^2 + r) \right\} \quad (3.7)$$

onde o símbolo entre parênteses $\int_{\sigma_{\mathbf{q}}}$ representa uma integral funcional sobre todos os $\sigma_{\mathbf{q}}$ com $0 < |\mathbf{q}| < 1$.

Se estivéssemos trabalhando no espaço das posições, o próximo passo seria realizar uma média sobre os spins efetivos $s_n^{(l)}$ para definir um novo sistema com spins efetivos $s_n^{(l+1)}$ em blocos com o dobro do tamanho anterior ($L_{(l+1)} = 2L_l$). No espaço dos momentos isso é equivalente a realizar a integral funcional sobre os $\sigma_{\mathbf{q}}$ com $|\mathbf{q}| > \frac{\pi}{2}$ ($> \frac{1}{2}$ na nossa aproximação). Isso equivale a dividir por 2 os graus de liberdade e multiplicar por 2^d a escala mínima de tamanho.

A equação 3.7 é então uma aproximação à integral gaussiana de argumento $\exp\{\sum_{q,q'} \sigma_q A_{qq'} \sigma_{q'}\}$. Porém, no presente contexto, todos os elementos de $\mathbf{A}$ são nulos exceto para $q' = -q$. Isso implica que $\sigma_{\mathbf{q}}$ e $\sigma_{\mathbf{q}'}$ são independentes para $\mathbf{q}' \neq -\mathbf{q}$ e o resultado da integração parcial em 3.7 é apenas uma constante a . A nova função partição será:

$$Z' = a \left(\prod_{|\mathbf{q}| < 1/2} \int_{\sigma_{\mathbf{q}} : |\mathbf{q}| < 1/2} \right) \exp \left\{ - \sum_{|\mathbf{q}| < 1/2} \frac{1}{2} \sigma_{\mathbf{q}} \cdot \sigma_{-\mathbf{q}} (q^2 + r) \right\}. \quad (3.8)$$

Para encontrarmos o ponto fixo precisamos que o novo hamiltoniano efetivo tenha exatamente a mesma forma do anterior. Com este fim, realizamos

duas mudanças de variável (ou de escala) para voltar à forma da interação original.

$$q' = 2q \quad d^d q = \frac{1}{2^d} d^d q' \quad \int_{|q| < 1/2} \rightarrow \frac{1}{2^d} \int_{|q'| < 1}$$

$$\text{e } \sigma_{\mathbf{q}} = \zeta \sigma'_{\mathbf{q}'} = \zeta \sigma'_{2\mathbf{q}}.$$

Agora a interação efetiva é

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2}(\zeta^2 2^{-d}) \int_{|\mathbf{q}'| < 1} \left(\frac{q'^2}{4} + r \right) \sigma'_{\mathbf{q}'} \sigma'_{-\mathbf{q}'}. \quad (3.9)$$

Escolhendo ζ tal que o coeficiente de $-\frac{1}{2}\mathbf{q}'^2$ torne-se 1, teremos $\zeta^2 2^{-d}/4 \Rightarrow \zeta = 2^{(1+d/2)}$. Com isso o hamiltoniano efetivo volta à forma original

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}'} (q'^2 + r') \sigma'_{\mathbf{q}'} \sigma'_{-\mathbf{q}'} \quad (3.10)$$

com $\mathbf{r}' = 4\mathbf{r}$. Esta é a relação de recorrência para o modelo Gaussiano, sem campo externo. Se tivéssemos incluído também o campo externo h , encontraríamos a relação de recorrência $h' = 2^{1+d/2}h$.

Toda a discussão até agora assume que os graus de liberdade originais são reduzidos por 2^d a cada passo na sequência. Na verdade, esse processo de "course-graining" pode ser feito dividindo-se por qualquer número ℓ . Podemos então generalizar as relações encontradas para:

$$\mathbf{r}' = \ell^2 \mathbf{r} \quad \mathbf{h}' = \ell^{1+d/2} \mathbf{h} \quad (3.11)$$

As equações acima mostram que há três pontos fixos para $h = 0$. O primeiro $r = +\infty$ corresponde a $T = \infty$, o segundo $r = -\infty$ corresponde a $T = 0$ e o terceiro $r = 0$ é o ponto fixo crítico que procuramos.

Como r é uma variável do tipo temperatura podemos escrever a forma de escala da parte singular da energia livre.

$$g(t, h) = \ell^{-d} g(t\ell^2, h\ell^{1+d/2}). \quad (3.12)$$

Daí pode-se obter, repetindo os passos da seção 2.4, os expoentes críticos

$$\alpha = 2 - \frac{d}{2} \quad \beta = \frac{d}{4} - \frac{1}{2} \quad \gamma = 1 \quad (3.13)$$

que se tornam idênticos aos expoentes clássicos de Landau para $d = 4$.

A função de correlação espacial tem a expressão abaixo.

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{x}) &= \frac{1}{Z} \int_{\sigma} s(\mathbf{x}) s(0) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} (q^2 + r) \right\} \\ &= \frac{1}{Z} \int_{\sigma} \int_{\mathbf{q}'} \int_{\mathbf{q}''} \sigma_{\mathbf{q}'} \sigma_{\mathbf{q}''} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} (q^2 + r) \right\} \end{aligned}$$

Após avaliar as integrais obtemos

$$\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2 + r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}. \quad (3.14)$$

O comprimento de correlação é avaliado da seguinte forma.

$$\xi^2 = \int x^2 \Gamma(\mathbf{x}) d^d x / \int \Gamma(\mathbf{x}) d^d x$$

Denominador:

$$\int \Gamma(\mathbf{x}) d^d x = \int d^d x \int_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}}{q^2 + r} = \int_{\mathbf{q}} \frac{\delta(\mathbf{q})}{q^2 + r} = \frac{1}{r}$$

Numerador:

$$\begin{aligned} \int \Gamma(\mathbf{x}) \mathbf{x}^2 d^d x &= \int d^d x \int_{\mathbf{q}} (-\nabla_q^2 \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}) \frac{1}{q^2 + r} = - \int \frac{1}{q^2 + r} - \nabla_q^2 \delta(\mathbf{q}) \\ &= -\nabla_q^2 \left(\frac{1}{q^2 + r} \right)_{q=0} = \nabla_q \cdot \frac{2\mathbf{q}}{(q^2 + r)} \Big|_{q=0} = \frac{2d}{r^2} \end{aligned}$$

$$\text{Então } \xi^2 = \frac{2d}{r}, \quad \xi \propto r^{-1/2}$$

Fica determinado então o expoente crítico $\nu = \frac{1}{2}$ para o modelo Gaussiano, independente da dimensão.

3.3 O modelo s^4 e a expansão ϵ

Vimos na seção anterior que o modelo de Ising pode ser aproximado por funções contínuas suaves (reveja a figura 3.1). O modelo Gaussiano não foi uma boa aproximação e foi discutido apenas com o intuito de introduzir as idéias da técnica e as ferramentas necessárias para cálculos mais complicados. O modelo s^4 aproxima-se muito melhor do problema inicial (Ising). Embora a solução não seja nada trivial, ela é bastante instrutiva e mostra como a teoria deve ser aplicada a problemas reais.

Ainda antes de prosseguir, recordemos a identidade para integrais gaussianas (eq. 3.15) que será muito útil adiante. Quando $\mathbf{A}(N \times N)$ é simétrica,

$$\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} ds_n \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{s} + \rho \cdot \mathbf{s} \right\} = C \exp \left\{ \frac{1}{2} \rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho \right\} \quad (3.15)$$

onde $C = \sqrt{(2\pi)^N / |\mathbf{A}|}$ e $\rho = (\rho_1, \dots, \rho_N)$ são parâmetros.

Agora, todas as integrais do tipo

$$I(m_1, \dots, m_k) = \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} ds_n s_{m_1} s_{m_2} \dots s_{m_k} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{s} \right\} \quad (3.16)$$

serão precisas na análise. Para resolvê-las utiliza-se o artifício

$$\begin{aligned} I(m_1, \dots, m_k) &= \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} ds_n \frac{\partial}{\partial \rho_{m_1}} \frac{\partial}{\partial \rho_{m_2}} \dots \frac{\partial}{\partial \rho_{m_k}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{s} + \rho \cdot \mathbf{s} \right\} \Big|_{\rho=0} \\ &= \frac{\partial}{\partial \rho_{m_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \rho_{m_k}} C \exp \left\{ \frac{1}{2} \rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho \right\} \Big|_{\rho_i=0 \ \forall i} . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Na expansão da exponencial aparecerão somente termos com um número par de ρ 's, portanto $I = 0$ para k ímpar. Mais do que isso, após a aplicação das derivadas apenas o termo proporcional a ρ^k dará um resultado não nulo quando $\rho_i \rightarrow 0$. Dessa forma:

$$I(m_1, \dots, m_k) = \frac{\partial}{\partial \rho_{m_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \rho_{m_k}} \left(\frac{1}{2} \rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho \right)^{k/2} \frac{1}{(k/2)!} \quad (3.18)$$

Para ilustrar o cálculo das derivadas, consideremos o caso $k = 2$. Utilizaremos, a partir de agora, a notação simplificada $I(m_1, \dots, m_k) = I(1, \dots, k)$ e $\partial_i \equiv \partial / \partial \rho_{m_i}$.

$$\begin{aligned} I(1, 2) &= \partial_1 \partial_2 C \frac{1}{2} \rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho \\ &= \frac{1}{2} C \partial_1 \left[\sum_j \rho_j \mathbf{A}_{j2}^{-1} + \sum_j \mathbf{A}_{2j}^{-1} \rho_j \right] \\ &= \frac{1}{2} C [\mathbf{A}_{12}^{-1} + \mathbf{A}_{21}^{-1}] = C \mathbf{A}_{12}^{-1} \end{aligned}$$

Antes de chegarmos à formula geral, analisemos também o caso $k=4$.

$$\begin{aligned} I(1, \dots, 4) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2} \right)^2 C \partial_1 \partial_2 \partial_3 \partial_4 [\rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho] [\rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho] \\ &= \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2} \right)^2 C \partial_1 \partial_2 \partial_3 \partial_4 [\rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho] \left[\sum_j \mathbf{A}_{4j}^{-1} \rho_j \right] \\ &= \frac{4}{2!} \left(\frac{1}{2} \right)^2 C \partial_1 \partial_2 \left\{ 2 \left[\sum_k \mathbf{A}_{3k}^{-1} \rho_k \right] \left[\sum_j \mathbf{A}_{4j}^{-1} \rho_j \right] + \mathbf{A}_{34}^{-1} \rho \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \rho \right\} \\ &= \frac{1}{2!} C \partial_1 \left\{ 2 \mathbf{A}_{23}^{-1} \sum_j \mathbf{A}_{4j}^{-1} \rho_j + 2 \mathbf{A}_{24}^{-1} \sum_k \mathbf{A}_{3k}^{-1} \rho_k + 2 \mathbf{A}_{34}^{-1} \sum_k \mathbf{A}_{2k}^{-1} \rho_k \right\} \\ &= C \left\{ \mathbf{A}_{12}^{-1} \mathbf{A}_{34}^{-1} + \mathbf{A}_{13}^{-1} \mathbf{A}_{24}^{-1} + \mathbf{A}_{14}^{-1} \mathbf{A}_{23}^{-1} \right\} \end{aligned}$$

Chamamos de *contração* de s_i e s_j o resultado obtido de $\widehat{s_i s_j} = A_{ij}^{-1}$. Como qualquer permutação dos $k/2$ pares dá o mesmo resultado e também qualquer troca $i \leftrightarrow j$ dentro de um mesmo par, cada termo aparecerá $2^{k/2} (k/2)!$ vezes, cancelando o fator $\left(\frac{1}{2}\right)^{k/2} \frac{1}{(k/2)!}$ da expansão da exponencial. As derivadas em ρ podem ser aplicadas em qualquer ordem, portanto

para um determinado $k = 2r$ existirão um total de $N_P = \frac{k!}{2^{k/2}(k/2)!}$ produtos de contrações únicas. A regra geral, conhecida como de Teorema de Wick, pode ser escrita como

$$I(m_1, \dots, m_{2r}) = C \otimes [\text{soma dos } N_P \text{ produtos de contrações}]. \quad (3.19)$$

Especificamente para este modelo os elementos de matriz $A_{m,n}$ na verdade dependem apenas da distância entre os sítios de forma que $A_{m,n} = A_{n-m} = A_{n'}$. A inversa é facilmente obtida usando a transformada de Fourier.

$$\begin{aligned} A(q) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dn' e^{-iqn'} A_{n'} \\ A_{n'}^{-1} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq e^{iqn'} A^{-1}(q) \\ A^{-1}(q) &= \frac{1}{A(q)} \quad \text{já que } \mathbf{A} \text{ é simétrica positiva} \end{aligned}$$

Agora possuímos o ferramental necessário para prosseguir em busca da relação de recorrência para a interação no modelo s^4 . Neste modelo o hamiltoniano agora inclui um pequeno termo quártico

$$\begin{aligned} -u \sum_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}}^4 &= -u \sum_{\mathbf{n}} \int_{\mathbf{q}_1} \int_{\mathbf{q}_2} \int_{\mathbf{q}_3} \int_{\mathbf{q}_4} e^{i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4) \cdot \mathbf{n}} \\ &= -u \int_{\mathbf{q}_1} \int_{\mathbf{q}_2} \int_{\mathbf{q}_3} \sigma_{\mathbf{q}_1} \sigma_{\mathbf{q}_2} \sigma_{\mathbf{q}_3} \sigma_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3} \end{aligned}$$

e a sua forma completa agora é

$$\mathcal{H}[\sigma] = \underbrace{-\frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} (q^2 + r) \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}}}_{\mathcal{H}_F} - \underbrace{u \int_{\mathbf{q}_1} \int_{\mathbf{q}_2} \int_{\mathbf{q}_3} \sigma_{\mathbf{q}_1} \sigma_{\mathbf{q}_2} \sigma_{\mathbf{q}_3} \sigma_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3}}_{\mathcal{H}_I} \quad (3.20)$$

Ao escrever a equação 3.20 já foi aplicada a aproximação de $\mathbf{q}$'s pequenos e o limite de integração reduzido para $0 < |\mathbf{q}| < 1$, assim como feito na seção anterior. O primeiro termo vem do modelo Gaussiano e será chamado de Hamiltoniano livre ($\mathcal{H}_F$) e o segundo termo é chamado de Hamiltoniano de interação ($\mathcal{H}_I$). A estratégia para obtenção do novo hamiltoniano efetivo será a mesma: eliminar as flutuações rápidas integrando os modos $\sigma_{\mathbf{q}}$ com vetor de onda entre $1/2 < |\mathbf{q}| < 1$, e então fazer reescalas dos spins e vetores de onda para manter a interação efetiva da forma original. Desta forma encontraremos as equações de ponto fixo (relações de recorrência)

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}'(\mathbf{r}, \mathbf{u}) \quad , \quad \mathbf{u}' = \mathbf{u}'(\mathbf{r}, \mathbf{u}) \quad .$$

A construção da solução começa com a decomposição abaixo.

$$\sigma_{\mathbf{q}} = \sigma_{0,\mathbf{q}} + \sigma_{1,\mathbf{q}} \quad \text{onde}$$

$$\sigma_{0,\mathbf{q}} = \begin{cases} \sigma_{\mathbf{q}} , & |\mathbf{q}| < \frac{1}{2} \\ 0 , & |\mathbf{q}| > \frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{e} \quad \sigma_{1,\mathbf{q}} = \begin{cases} \sigma_{\mathbf{q}} , & \frac{1}{2} < |\mathbf{q}| < 1 \\ 0 , & |\mathbf{q}| < \frac{1}{2} \end{cases}$$

A integral funcional da função partição Z pode ser escrita como

$$Z = \int \left\{ \int_{\sigma_{\mathbf{q}_0}} \int_{\sigma_{\mathbf{q}_1}} \exp(\mathcal{H}[\sigma_{0,\mathbf{q}} + \sigma_{1,\mathbf{q}}]) \right\}. \quad (3.21)$$

Agora realizamos a integração sobre os modos σ_1 para chegarmos ao novo hamiltoniano efetivo. Simplificando um pouco a notação escrevemos

$$Z = \int_{\sigma'} \exp\{\mathcal{H}'[\sigma']\} \quad \text{onde} \quad \exp\{\mathcal{H}'[\sigma']\} \equiv \int_{\sigma_1} \exp\{\mathcal{H}[\sigma_0 + \sigma_1]\} .$$

$$\text{e} \quad \int_{\sigma_1} \exp\{\mathcal{H}[\sigma_0 + \sigma_1]\} = \exp\{\mathcal{H}_F[\sigma_0]\} \underbrace{\int_{\sigma_1} \exp\{\mathcal{H}_F[\sigma_1] + \mathcal{H}_I[\sigma_1]\}}_{(\star)} \quad (3.22)$$

Seguindo a dedução feita para o modelo Gaussiano, é trivial escrever a parte livre $\mathcal{H}_F[\sigma_0]$ em termos das variáveis rescaladas $\mathbf{q}'$ e $\sigma'_{\mathbf{q}'}$.

$$\mathcal{H}_F[\sigma_0] = -\frac{1}{2} \int_{|q| < 1/2} (q^2 + r) \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} = -\frac{1}{2} \left(\zeta^2 2^{-d-2} \right) \int_{|q'| < 1} (q'^2 + 4r) \sigma_{\mathbf{q}'} \sigma_{-\mathbf{q}'} \quad (3.23)$$

Já para resolver a integral funcional $(\star)$ é preciso expandir $e^{\mathcal{H}_I}$ em potências de u e para tanto introduz-se a notação gráfica:

$$u \iiint_{(|q_1|, |q_2|, |q_3|) < 1} \sigma_{q_1} \sigma_{q_2} \sigma_{q_3} \sigma_{-q_1-q_2-q_3} = \mathbf{X}$$

onde cada linha (ou perna) de $\mathbf{X}$ representa um spin.

$$e^{\mathcal{H}_I} = 1 + \mathcal{H}_I + \frac{1}{2} \mathcal{H}_I^2 + \dots = 1 - \mathbf{X} + \frac{1}{2} (\mathbf{X}\mathbf{X}) + \dots$$

Após a expansão, a integral funcional $(\star)$ em 3.22 será dada por um somatório de termos do tipo

$$\sigma_{0,q_1} \dots \sigma_{0,q_m} \underbrace{\int_{\sigma_1} \sigma_{1,\mathbf{q}_1} \dots \sigma_{1,\mathbf{q}_k} \exp\{\mathcal{H}_F[\sigma_1]\}}_{\text{I}}, \quad (3.24)$$

sendo que os índices m e k crescem à medida que a ordem do pré-fator u aumenta.

As integrais funcionais gaussianas I têm solução dada pelo teorema de Wick: (equações 3.16 e 3.19):

$$I = Z_F \otimes \left\{ \text{Soma de todos produtos das contrações de } \sigma_{\mathbf{q}_1}, \dots, \sigma_{\mathbf{q}_k} \right\} \quad (3.25)$$

onde $Z_F = \int_{\sigma_1} \exp\{\mathcal{H}_F[\sigma_1]\}$ resulta numa constante que independe de σ' .

Cada termo da equação 3.24 ganhará uma representação gráfica (diagramas de Feynman). A cada vértice estão associadas 4 linhas, sendo que cada uma delas representa um spin. As pontas livres do diagrama representam uma variável do tipo σ_{0,q_i} enquanto pontas conectadas representam um par de variáveis σ_{1,q_j} e σ_{1,q_k} . Abaixo seguem alguns exemplos.

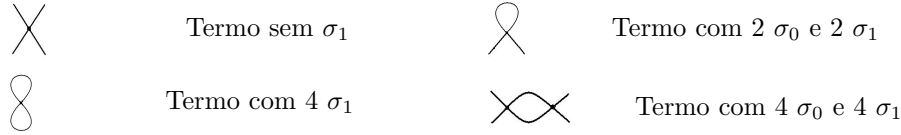


Fig. 3.2: Alguns diagramas da expansão perturbativa do hamiltoniano s^4

Diagramas topologicamente idênticos devem ser agrupados. Por exemplo, o segundo diagrama da figura 3.2 tem 4 spins (a, b, c, d) , sendo dois σ_0 e dois σ_1 . Existem $4 \cdot 3$ maneiras de se conectar as linhas, mas como $\sigma_{1,q_1}\sigma_{1,q_2} = \sigma_{1,q_2}\sigma_{1,q_1}$, teremos um total de $12/2 = 6$ possibilidades distintas.

Recordemos a contração básica $\widehat{\sigma_{1,\mathbf{q}}\sigma_{1,\mathbf{q}'}} = A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{-1}$, onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_F &= -\frac{1}{2} \iint \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{\mathbf{q}'} = -\frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} (q^2 + r) \\ \Rightarrow A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} &= \frac{1}{(2\pi)^d} (q^2 + r) \delta^d(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \quad , \quad A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{-1} = (2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \frac{1}{q^2 + r} \end{aligned}$$

De modo resumido, as regras para avaliação dos diagramas são as seguintes:

- i) Para vetores de onda nas linhas externas, $|\mathbf{q}| < 1/2$; para as linhas internas, $1/2 < |\mathbf{q}| < 1$.
- ii) Para cada linhas interna, com vetores de onda $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$, há um propagador $(2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \frac{1}{q^2 + r}$.
- iii) Cada vértice gera um fator $u (2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4)$
- iv) Cada linha externa gera um fator $\sigma_{0,q_i} = \zeta \sigma'_{2q_i} = \zeta \sigma'_{q'_i}$

v) Integrar $\int_{\mathbf{q}}$ de acordo com a regra ii).

Os diagramas sem linhas externas gerarão uma constante multiplicativa global que contribuirá apenas para a energia livre. Como estamos interessados em avaliar apenas a parte de interação, eles serão desprezados. Depois da reescala dos vetores de onda e dos spins, cada linha externa gera um fator $\zeta \sigma'_{2q_i} = \zeta \sigma'_{q'_i}$ que contribui para a reescala do novo hamiltoniano $\mathcal{H}'$.

As soluções individuais de cada um dos diagramas não serão detalhadas aqui. É possível mostrar que o hamiltoniano efetivo final será dado pela soma de todos os diagramas *conexos*. Por conexos entende-se que, no caso de múltiplos vértices, pelo menos uma linha de cada vértice deve estar conectada aos vizinhos.

Após as integrações e reescalas, deixando de escrever as linhas para a variável $\mathbf{q}' \rightarrow \mathbf{q}$, o novo hamiltoniano efetivo tem a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & -\frac{1}{2} \int_{|\mathbf{q}| < 1} u'_2(\mathbf{q}) \sigma'_{\mathbf{q}} \sigma'_{-\mathbf{q}} - \iiint_{|\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3| < 1} u'_4(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \sigma'_{\mathbf{q}_1} \sigma'_{\mathbf{q}_2} \sigma'_{\mathbf{q}_3} \sigma'_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3} \\ & = + \text{termos com 6 ou mais spins efetivos} \end{aligned} \quad (3.26)$$

onde tanto $\mathbf{u}'_2$ quanto $\mathbf{u}'_4$ são funções dos parâmetros originais u e r . (Como já vimos, $u'_2(\mathbf{q}) = q^2 + r' = q^2 + 4r$ no modelo Gaussiano.)

Obviamente, se quisermos que o hamiltoniano efetivo tome a mesma forma do original, somos obrigados a desprezar os termos com 6 ou mais spins. Fazendo isso, encontramos:

$$\begin{aligned} u'_2(\mathbf{q}) = \zeta^2 2^{-d} \left\{ \frac{1}{4} q^2 + r + 12u \int_{\mathbf{p}} \frac{1}{p^2 + r} - 96u^2 \iint_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_1} \frac{1}{p^2 + r} \frac{1}{p_1 + r} \frac{1}{|\frac{1}{2}\mathbf{q} - \mathbf{p} - \mathbf{p}_1|^2 + r} \right. \\ \left. - 144u^2 \iint_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_1} \frac{1}{(p^2 + r)^2} \frac{1}{p_1^2 + r} + \mathcal{O}(u^3) \right\} \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} u'_4(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) = \zeta^4 2^{-3d} \left\{ u - 12u^2 \left[\int_{\mathbf{p}} \frac{1}{p^2 + r} \frac{1}{|\frac{1}{2}\mathbf{q}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}|^2 + r} \right. \right. \\ \left. \left. + 2 \text{ permutações} \right] + \mathcal{O}(u^3) \right\} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Se os parâmetros iniciais u e r são pequenos, a expressão acima é uma boa aproximação já que o termo com 6 spins contribui apenas para ordem u^2 ou superior, e o termo com 8 spins já começa em ordem u^3 .

As integrais restantes em 3.27 e 3.28 podem ser resolvidas de forma aproximada.

$$\int_{0 < |\mathbf{p}| < 1} \frac{1}{p^2 + r} \cong \frac{c_s}{4} \frac{1}{1 + r} \quad \text{onde } c_s = \int_{1/2 < |\mathbf{p}| < 1} 1 \quad (3.29)$$

$$\int_{0 < |\mathbf{p}| < 1} \frac{1}{p^2 + r} \frac{1}{|\frac{1}{2}\mathbf{q}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}|^2 + r} \cong \frac{c_s}{4} \frac{1}{1 + r^2} . \quad (3.30)$$

Considerando inicialmente apenas os termos até ordem u

$$u'_2 = q^2 + r' \quad \text{se escolhemos } \zeta = 2^{1+d/2} \text{ como no modelo Gaussiano.}$$

Agora as relações de recorrência são

$$r' = 4r + 12c_s \frac{u}{1+r} + \mathcal{O}(u^2) \quad (3.31)$$

$$u' = 2^{4-d} \left[u - 9c_s \frac{u^2}{(1+r)^2} + \mathcal{O}(u^3) \right] . \quad (3.32)$$

Resolvendo as equações de ponto fixo temos:

- a) $r = u = 0$: O ponto fixo Gaussiano. Se $d > 4$, $u' < u$, então $u_\ell \rightarrow 0$ quando $\ell \rightarrow \infty$ e $r = 0$ é o único ponto fixo (além dos triviais).
- b) Se $d < 4$, $u = 0$ é *instável*. Procuramos um outro fixo sob a hipótese que r^* e u^* são pequenos ($\ll 1$). A relação para u implica

$$(2^{4-d} - 1)u^* = 9c_s \frac{u^{*2}}{(1+r)^2} \quad \text{ou} \quad u^* \cong \frac{2^{4-d} - 1}{9c_s} \quad (3.33)$$

e com isso

$$r^* \cong -4c_s u^* = -\frac{4}{9} (2^{4-d} - 1) \quad (3.34)$$

Em $d \lesssim 4$, u^* e r^* são realmente pequenos e por isso definimos o parâmetro pequeno

$$\epsilon = 4 - d \quad (3.35)$$

$$2^{4-d} = \exp\{\epsilon \ln 2\} \quad \Rightarrow \quad 2^{4-d} - 1 = \epsilon \ln 2 + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Até ordem ϵ temos:

$$r^* = -\frac{4}{9} \epsilon \ln 2 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad u^* = \frac{1}{9c_s} \epsilon \ln 2 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (3.36)$$

Quando $d > 4$ o parâmetro u (ou seja a interação de 4 spins) é não-relevante, porque $u \rightarrow 0$ sob repetidas relações de recorrência. No entanto, quando $d \lesssim 4$, o comportamento é regido por um outro ponto fixo com uma escala não-trivial. O fato de $u^* > 0$ e $r^* < 0$ está em concordância com a intuição física baseado na função de partição obtida para o hamiltoniano de Landau-Ginzburg $Z_{LG} (\propto \exp[\frac{1}{2}b s^2 - u s^4])$ com $b = r - 2dk$.

No caso gaussiano, havia apenas um parâmetro r que era associado a temperatura. Desta forma a correspondência entre r_c e T_c é unívoca. No caso do modelo s^4 surge uma complicação extra porque é possível estar

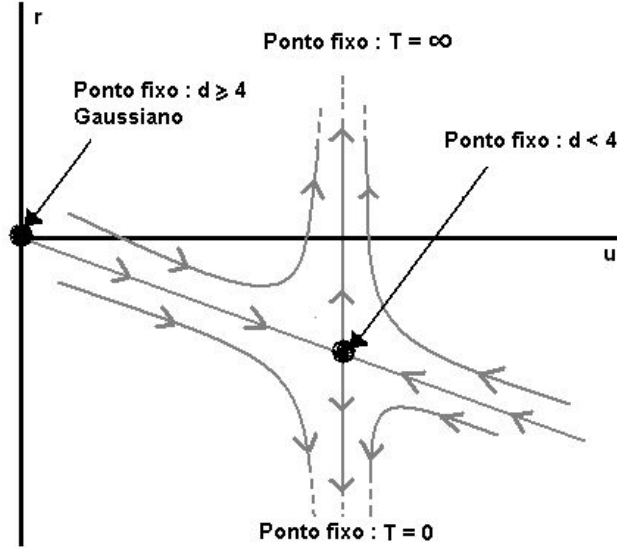


Fig. 3.3: Pontos fixos para o modelo s^4 . Destaca-se o caráter diferente para $d > 4$ e $d \lesssim 4$.

na temperatura crítica T_c sem que u_o e r_o sejam iguais aos seus valores de ponto fixo. A razão é que basta fixar um parâmetro T para estar na temperatura crítica enquanto é necessário ajustar tanto r_o quanto u_o para estar no ponto crítico. Se escrevemos $r_o(T)$ e $u_o(T)$, espera-se que, quando $\ell \rightarrow \infty$, $r_\ell(T_c) \rightarrow r^*$ e $u_\ell(T_c) \rightarrow u^*$. Também podemos dizer que, se ℓ é suficientemente grande, $r_\ell(T_c) \approx r^*$ e portanto $r_\ell(T)$ também estará próximo de r^* .

No domínio de validade da relação linear $r_\ell(T) = r_\ell(T_c) + (T - T_c) \left. \frac{dr_\ell}{dT} \right|_{T=T_c}$ podemos escrever

$$\begin{pmatrix} r_{\ell+1} - r^* \\ u_{\ell+1} - u^* \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} r_\ell - r^* \\ u_\ell - u^* \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} \delta'_r \\ \delta'_u \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta_r \\ \delta_u \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (3.37)$$

$$\text{com } \mathbf{M} = \begin{bmatrix} 4 - 12c_s \frac{u^*}{(1+r^*)^2} & 12c_s \frac{u^*}{1+r^*} \\ 2^\epsilon \frac{18cu^{*2}}{(1+r^*)^3} & 2^\epsilon \left[1 - \frac{18cu^*}{(1+r^*)^2} \right] \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

Desprezando os termos proporcionais a ϵ^2 , podemos calcular os autovetores e autovalores de $\mathbf{M}$. Como $\mathbf{M}$ não é simétrica, a diagonalização é um pouco mais complicada; o resultado está explícito abaixo (e na tabela).

$$M_{ij} = \lambda_1 w_i^{(1)} v_j^{(1)} + \lambda_2 w_i^{(2)} v_j^{(2)}$$

Tab. 3.1: Autovalores e autovetores da matrix $\mathbf{M}$ até $\mathcal{O}(\epsilon)$.

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= 4 - \frac{4}{3}\epsilon \ln 2 & \lambda_2 &= 1 - \epsilon \ln 2 \\
w_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & v_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 4c_s(1 + \frac{5}{9}\epsilon \ln 2) \end{pmatrix} \\
w_2 &= \begin{pmatrix} 4c_s(1 + \frac{5}{9}\epsilon \ln 2) \\ 1 \end{pmatrix} & v_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

onde $w^{(1)}$ e $v^{(1)}$ são os autovetores (com autovalor λ_1) correspondentes às matrizes M e M^T respectivamente.

Iterar a relação de recorrência 3.37 várias vezes, significa aplicar a operação $\mathbf{M}$ n vezes. A cada aplicação surge um fator λ que no fim estará elevado a potência n , como em $(\mathbf{M}_{ij}^n) = \sum_k \lambda_k^n w_{ik} v_{kj}$. Uma vez que $\lambda_1 \simeq 4$ e λ_2 é pouco menor do que 1, o resultado final será completamente dominado pelo maior autovalor.

Da análise geral proveniente da teoria de escala, sabemos que

$$G(t, h) = L G(L^a t, L^b h),$$

onde L é o parâmetro de reescala de tamanho; no atual exemplo esse número é 2. Fazendo a associação $\lambda_1 = L^a \equiv L^{1/\nu}$ podemos imediatamente calcular o primeiro expoente crítico:

$$\begin{aligned}
\nu &= \frac{\ln L}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln 2}{\ln[4(1 - \frac{1}{3}\epsilon \ln 2)]} \simeq \frac{\ln 2}{2 \ln 2 - \frac{\epsilon}{3} \ln 2} \quad \ln(1-x) \simeq -x \quad (3.39) \\
&= \frac{1}{2 - \frac{\epsilon}{3}} = \frac{1}{2} \frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{6}} \simeq \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon}{6}\right) = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12}
\end{aligned}$$

Utilizando as relações de escala deduzidas na seção 2.4 chega-se facilmente aos outros expoentes.

$$\beta = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{6} \quad \alpha = \frac{\epsilon}{6} \quad \gamma = 1 + \frac{\epsilon}{6} \quad (3.40)$$

No trabalho original de Wilson e Kogut, é feita ainda uma discussão sobre o impacto da eliminação dos termos com 6 ou mais spins durante a resolução. Em resumo, demonstra-se que os termos desprezados não contribuem linearmente em u e portanto os resultados encontrados até agora são de fato precisos até ordem ϵ , ou seja para $d = 4 - \epsilon$. A conclusão final é de o Grupo de Renormalização é uma técnica poderosa para o estudo de fenômenos críticos. No entanto, envolve muitas aproximações, algumas mais grosseiras do que outras. O leitor deve estar sempre atento ao limite de validade das soluções encontradas.

3.4 Construindo integrais funcionais para processos estocásticos

Todo o tratamento discutido sobre o grupo de renormalização até agora, parte da premissa que de é possível escrever um hamiltoniano para o processo. Quando tratamos de mecânica estatística de não-equilíbrio, isto não é possível. Devido à ausência de balanço detalhado não podemos ir diretamente ao estudo das propriedades estacionárias, é preciso enfrentar o problema dinâmico completo. No caso de sistemas estocásticos a equação mestra governa a evolução das distribuições de probabilidades.

Para estudar esta classe de problemas, foram desenvolvidos diversos métodos para mapear o operador de evolução em uma representação de integral de caminho. Este tratamento culmina em uma integral funcional, chamada *ação efetiva*, muito semelhante à estudada nas seções anteriores. Uma metodologia particularmente útil para processos envolvendo reações de criação e destruição foi desenvolvida por Peliti [24] e estendida por Dickman e Vidigal [25]. Nessa abordagem não é necessário escrever uma equação de Langevin ou postular autocorrelações de ruído, toda a análise é feita no espaço das funções geratrizes de probabilidade, em inglês PGF (*probability generating functions*). Faremos aqui uma rápida revisão das idéias necessárias, porém sem demonstrar todas as passagens, com o intuito de chegar à ação efetiva para o processo de epidemia difusiva. O leitor interessado no domínio da técnica deve recorrer aos artigos citados.

Consideremos a princípio, um processo markoviano de tempo contínuo e espaço discreto $n = 0, 1, 2, \dots$. Utilizando a representação de operadores para um espaço de Hilbert¹, escrevemos a equação mestra na forma

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} = L|\psi\rangle \quad \text{com} \quad |\psi\rangle = \sum_n p(n, t)|n\rangle. \quad (3.41)$$

cuja solução é dada por

$$|\psi\rangle(t) = e^{Lt}|\psi\rangle(0) \equiv \mathcal{U}_t|\psi\rangle(0) \quad (3.42)$$

Por conveniência o produto interno será definido como $\langle m|n\rangle = n!\delta_{m,n}$ e portanto a identidade é escrita como $\mathbf{1} = \sum_n \frac{1}{n!}|n\rangle\langle n|$.

A peça central na análise subsequente será a PGF, ou função geratriz de probabilidade

$$\Phi_t(z) \equiv \sum_n p_n(t)z^n \quad (3.43)$$

que a partir de agora será representada na notação de operadores como $|\phi\rangle$. Agora o produto interno entre dois estados $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$, após a aplicação de duas identidades matemáticas, pode ser escrito no espaço das PGFs como

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int \frac{dz dz'}{2\pi} \phi(z)\psi(iz')e^{-izz'} \quad (3.44)$$

¹ Lembramos aqui que os operadores são lineares e não bi-lineares então não se pode fazer uma analogia exata com a notação da mecânica quântica.

O operador de evolução também tem seu análogo no espaço das PGFs e é nesta representação que será desenvolvida a expressão para a integral de caminho. Para isso definimos para qualquer operador A no espaço de Hilbert, uma função chamada de *kernel*

$$A(z, \zeta) = \sum_{m,n} \frac{z^m \zeta^n}{m!n!} A_{m,n} \quad (3.45)$$

com $A_{m,n} = \langle m|A|n\rangle$. Outra definição importante é o kernel de um produto de operadores, A e B :

$$AB(z, \zeta) = \int \frac{d\eta d\eta'}{2\pi} A(z, \eta) B(i\eta', \zeta) e^{-i\eta\eta'} \quad (3.46)$$

Para processos de nascimento e morte é sempre possível escrever o operador de evolução em termos dos operadores criação e destruição.

$$a|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{e} \quad \pi|n\rangle = |n\rangle \quad (3.47)$$

com $[a, \pi] = \mathbf{1}$.² Mais do que isso, é possível escrevê-los em ordem normal, ou seja, com todos os operadores criação comutados para a esquerda dos operadores destruição.

$$A = \sum_{m,n} \mathcal{A}_{m,n} \pi^m a^n. \quad (3.48)$$

No espaço das PGFs, associa-se a este operador o *kernel normal*

$$\mathcal{A}(z, \zeta) = \mathcal{A}_{m,n} z^m \zeta^n. \quad (3.49)$$

A relação entre o kernel ordinário e o normal é dada por

$$A(z, \zeta) = e^{z\zeta} \mathcal{A}(z, \zeta). \quad (3.50)$$

Podemos agora, desenvolver a representação de integral de caminho para $U_t(z, \zeta)$. Para iniciar, relembremos a fórmula de Trotter, que nos permite escrever:

$$U_t = e^{tL} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{tL}{N}\right)^N. \quad (3.51)$$

Cada fator no produto tem um kernel normal correspondente

$$\left(1 + \frac{tL}{N}\right)(z, \zeta) = e^{z\zeta} \left(1 + \frac{t\mathcal{L}}{N}\right). \quad (3.52)$$

² Note que embora a notação é bastante semelhante a usada na mecânica quântica, existem diferenças fundamentais, por exemplo, os valores esperados são *lineares* e não *bilineares* em $|\psi\rangle$.

Aplicando a fórmula 3.46 várias vezes, chegamos a:

$$U_t(z, \zeta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left(\int \frac{d\eta_j d\eta'_j}{2\pi} e^{-i\eta_j \eta'_j} \right) \prod_{j=1}^{N-1} \left\{ e^{i\eta'_k \eta_{k-1}} \left[1 + \frac{t}{N} \mathcal{L}(i\eta'_k, \eta_{k-1}) \right] \right\}. \quad (3.53)$$

com as condições de contorno $\eta_o = z$ e $i\eta_N = \zeta$.

Usando $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{t}{N} \mathcal{L} \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left(\frac{t}{N} \mathcal{L} \right)$ e rearranjando os termos chega-se a:

$$U_t(z, \zeta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int \frac{d\eta_j d\eta'_j}{2\pi} \exp \left\{ \sum_{k=1}^{N-1} \left[-i\eta'_k (\eta_k - \eta_{k-1}) + \frac{t}{N} \mathcal{L}(i\eta'_k, \eta_{k-1}) \right] + \frac{t}{N} \mathcal{L}(z, \eta_{N-1}) + z \eta_{N-1} \right\}. \quad (3.54)$$

Finalmente, tomando $N \rightarrow \infty$ com $t' = (k/N)t$, $\eta_k \rightarrow \psi(t')$ e $\eta'_k \rightarrow \psi'(t')$, obtemos a expressão da integral de caminho para $U_t(z, \zeta)$:

$$U_t(z, \zeta) = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi' \exp \left\{ - \int_0^t dt' \left[i\psi'(t') \dot{\psi}(t') - \mathcal{L}(i\psi', \psi) \right] + z\psi(t) \right\} \quad (3.55)$$

onde o ponto significa uma derivada em t' . As integrais funcionais sobre $\psi(t')$ e $\psi'(t')$ são realizadas para $0 < t' < t$, com condições de contorno $\psi(0) = \zeta$ e $i\psi'(t) = z$; ψ e ψ' reais. O pré-fator global $(1/2\pi)$ foi deixado indefinido porque, junto com outros, será ajustado via renormalização. A função $\psi'(t')$ não tem nenhum significado físico óbvio, mas veremos que traz uma relação muito próxima com a variável aleatória $n(t)$ (população) em um processo com nascimentos e mortes.

O kernel $U_t(z, \zeta)$ tem dois usos principais. O primeiro é mapear as PGFs entre tempos diferentes:

$$\Phi_t(z) = \int \frac{d\zeta d\zeta'}{2\pi} e^{-i\zeta \zeta'} U_t(z, \zeta) \Psi_0(i\zeta'). \quad (3.56)$$

Se a distribuição inicial é Poissoniana, $\Psi_0(z) = e^{p(z-1)}$, então avaliar a integral acima é particularmente simples:

$$\Psi_t(z) = e^{-p} U_t(z, p). \quad (3.57)$$

O segundo uso, independente da interpretação da probabilidade, é o que mais nos interessa agora. Podemos tratar o argumento da exponencial em eq.3.55 como uma ação efetiva. No limite contínuo de um sistema com muitos graus de liberdade, a função $\psi(t)$ se torna um campo clássico $\psi(\mathbf{x}, t)$ (e de forma análoga para ψ'), levando-nos a uma teoria de campos para um processo de Markov, inicialmente descrito por taxas de transição para partículas em rede. Com estes campos em mãos, podemos aplicar a metodologia do grupo de renormalização para estudar o comportamento crítico.

3.5 A ação efetiva do processo de epidemia difusiva

O processo de epidemia difusiva pode ser mapeado em uma integral de caminho utilizando o formalismo descrito na seção 3.4. Desta forma chega-se a uma integral funcional cujo argumento é equivalente ao hamiltoniano efetivo, tornando possível o uso do método do grupo de normalização.

$$L = \sum_i L_i = \sum_i \sum_{p=1}^4 L_i^{(p)} \quad (3.58)$$

com

$$L_i^{(1)} = (B_i^\dagger - A_i^\dagger) B_i^\dagger B_i A_i \quad (3.59)$$

$$L_i^{(2)} = r(A_i^\dagger - B_i^\dagger) B_i \quad (3.60)$$

$$L_i^{(3)} = \frac{D_A}{2} (A_{i-1}^\dagger + A_{i+1}^\dagger - 2A_i^\dagger) A_i \quad (3.61)$$

$$L_i^{(4)} = \frac{D_B}{2} (B_{i-1}^\dagger + B_{i+1}^\dagger - 2B_i^\dagger) B_i. \quad (3.62)$$

As quatro componentes do operador de evolução estão associadas com infecção, recuperação e difusão das partículas A e B respectivamente. A_i e $A_i^\dagger$ são, respectivamente, os operadores aniquilação e criação de partículas A no sítio i (de forma análoga para B).

Nota-se que L já se encontra escrito em ordem normal, então fica fácil aplicar a equação 3.50 para escrever a representação no espaço das PGFs. Como agora temos duas espécies de partículas a equação 3.55, toma a forma:

$$U_t(z_a, \zeta_a, z_b, \zeta_b) = \int \mathcal{D}a \mathcal{D}a^* \mathcal{D}b \mathcal{D}b^* \exp \left\{ \sum_r \left[- \int_0^t dt' \left[ia^*(r, t') \dot{a}(r, t') + ib^*(r, t') \dot{b}(r, t') - \mathcal{L}(ia^*, ib^*, a, b) \right] + z_a(r) a(r, t) + z_b(r) b(r, t) \right] \right\} \quad (3.63)$$

onde $z_a(r) = ia^*(r, t)$, $\zeta_a(r) = a(r, 0)$ e analogamente para os B 's.

Os operadores de difusão em A.4 e A.5 podem ser reescritos utilizando a definição do laplaciano discreto $\Delta\phi_r = \sum_e \phi_{r+e} - \phi_r$, onde $\sum_e$ representa a soma sobre os vizinhos mais próximos de $\mathbf{r}$. Tomando o limite contínuo $a(r, t') \rightarrow a(x, t')$ e absorvendo i na notação $ia^* \rightarrow a^*$ chega-se a ação efetiva do PED:

$$U_t(z_a, \zeta_a, z_b, \zeta_b) = \int \mathcal{D}a \mathcal{D}a^* \mathcal{D}b \mathcal{D}b^* \exp \left\{ - \int dx^d - \int_0^t dt' \left[a^*(\partial_{t'} - D_a \nabla^2) a + b^*(\partial_{t'} - D_b \nabla^2) b + \lambda(b^* - a^*) b^* b a - r(b^* - a^*) b \right] + z_a(x) a(x, t) + z_b(x) b(x, t) \right\} \quad (3.64)$$

Esta ação é o ponto de partida para a análise via grupo de renormalização feita em [26]. Assim como no exemplo do modelo s^4 , as relações de recorrência são encontradas após a expansão diagramática da exponencial. Foram considerados os diagramas com apenas um loop e até 3 vértices. A dimensão crítica do problema é 4, e os resultados são válidos para $\epsilon = 4 - d$ pequeno.

A análise mostra a existência de três classes de universalidade e, quando $D_A = D_B$ ou $D_A < D_B$, os expoentes $z = 2$ e $\nu = 2$ são assim definidos para todas as ordens em ϵ . No caso $D_A > D_B$ o fluxo de renormalização flui para uma região onde a teoria é mal definida; especula-se a existência de uma transição descontínua.

4. O PROCESSO DE EPIDEMIA DIFUSIVA EM REDE

O objetivo deste capítulo é detalhar o sistema modelo que será estudado no restante deste trabalho assim como as metodologias a serem aplicadas. Estudos prévios mostram a existência de três classes de universalidade distintas, dependendo da relação entre as taxas de difusão D_A e D_B (veja capítulo 1). Há todavia uma discordância com relação à natureza da transição quando $D_A > D_B$ e também quanto ao valor dos expoentes críticos nos outros dois regimes, onde a transição é indiscutivelmente contínua. O foco deste trabalho está nos sistemas de baixa dimensionalidade (1d e 2d), justamente onde a análise via grupo de renormalização é mais dúbia. Os resultados encontrados através de cada uma das abordagens são apresentados no capítulo 5

4.1 O modelo

O PED é definido em uma rede de L^d sítios. A configuração é especificada pelo conjunto de variáveis a_j e b_j , que denotam o número de partículas A e B presentes em cada sítio j . Não há restrição intrínseca ao número de partículas por sítio. O modelo é um processo de Markov com tempo contínuo, caracterizado por quatro tipos de transição:

- Deslocamento de partículas A para um sítio primeiro vizinho escolhido aleatoriamente, com taxa D_A .
- Deslocamento de partículas B para um sítio primeiro vizinho escolhido aleatoriamente, com taxa D_B .
- Transformação de partículas B para partículas A , com taxa r .
- Transformação de partículas A para partículas B , na presença de uma partícula B no mesmo sítio, à taxa de λ vezes o número de pares A - B .

Isto significa que um determinado sítio j perde (via difusão) uma partícula A com taxa $D_A a_j$ (de maneira similar para partículas B), e sedia as reações $B \rightarrow A$, com taxa rb_j , e $A + B \rightarrow 2B$ com taxa $\lambda a_j b_j$.

Nota-se que todas as transições conservam o número total de partículas $N = \sum_j (a_j + b_j)$. Devido a este importante ponto introduz-se correlações de longo alcance que fazem com que o modelo pertença a uma classe de universalidade diferente da percolação dirigida (DP).

O processo envolve uma quantidade razoavelmente grande de parâmetros: D_A, D_B, r, λ e a densidade de partículas $\rho = N/L^d$. Já que uma das taxas pode ser normalizada através de uma escolha adequada da escala de tempo, fixaremos $\lambda = 1$ daqui em diante. Isto ainda nos deixa quatro parâmetros. Nas análises subseqüentes, fixaremos as constantes de difusão e estudaremos o comportamento do sistema no plano r - ρ , ou fixaremos D_A e ρ deixando D_B e r como parâmetros de controle.

A interpretação mais comum é a epidêmica, que dá nome ao modelo. Nesta, A representa um organismo saudável e B um infectado, com as reações citadas significando, respectivamente recuperação espontânea e transmissão da doença por contato direto. Outras interpretações possíveis são, por exemplo, A representar um proteína propriamente enrolada e B uma não-enrolada ou anômala, etc.

4.2 Teoria de Campo Médio

Iniciaremos aqui o estudo da dinâmica do modelo através da Teoria de Campo Médio (TCM) [1]. Como é usual nas abordagens de campo médio em aglomerados, assumiremos a homogeneidade espacial (segue da simetria de uma rede em forma de anel) para em seguida buscar a solução estacionária das equações que governam a dinâmica da distribuição de probabilidades. Em [8], usando uma representação contínua do processo, os limites para a aproximação de campo médio são tomados na ordem rigorosamente correta, primeiro $t \rightarrow \infty$ e em seguida homogeneidade espacial. As duas abordagens levam a conclusões qualitativamente similares, e.x. uma transição de fase contínua. Aqui, utilizando a formulação para espaço discreto, seremos capazes de fazer previsões para a distribuição de probabilidades.

Ao inserir os valores das taxas de transição (definidas na seção 4.1) na fórmula da equação mestra definida em 2.30, a evolução da probabilidade de ocupação de um sítio qualquer i será dada por:

$$\begin{aligned}
\frac{dP(a,b)}{dt} = & D_A[(a+1)P(a+1,b) - aP(a,b)] \\
& + D_A \sum_{a',b'} a' [P(a-1,b;a',b') - P(a,b;a',b')] \\
& + D_B[(b+1)P(a,b+1) - bP(a,b)] \\
& + D_B \sum_{a',b'} b' [P(a,b-1;a',b') - P(a,b;a',b')] \\
& + r[(b+1)P(a-1,b+1) - bP(a,b)] \\
& + (b-1)(a+1)P(a+1,b-1) - abP(a,b) \quad (4.1)
\end{aligned}$$

onde $P(a,b;a',b')$ é a distribuição de probabilidade conjunta para uma par de sítios primeiros vizinhos. A simetria de inversão já está implícita na

equação 4.1 (cada sítio tem 2 primeiros vizinhos, dividindo a difusão em um evento com taxa $D_A/2$ de deslocamento para a esquerda mais $D_A/2$ de deslocamento para direita).

A equação 4.1 é a primeira em uma hierarquia de equações para a distribuição de probabilidades para $1, 2, \dots, n, \dots$ sítios, pois a evolução de um sítio (ex. i) depende da distribuição de probabilidades nos seus primeiros vizinhos ($i-1$ e $i+1$) que por sua vez depende também dos próximos vizinhos ($i-2 \dots i+2$) e assim por diante.

A TCM de um sítio trunca esta hierarquia na ordem mais baixa, via fatorização $P(a, b; a', b') = P(a, b) P(a', b')$, levando a

$$\begin{aligned} \frac{dP(a, b)}{dt} = & D_A[(a+1)P(a+1, b) - aP(a, b)] \\ & + D_A \rho_A [P(a-1, b) - P(a, b)] \\ & + D_B[(b+1)P(a, b+1) - bP(a, b)] \\ & + D_B \rho_B [P(a, b-1) - P(a, b)] \\ & + r[(b+1)P(a-1, b+1) - bP(a, b)] \\ & + (b-1)(a+1)P(a+1, b-1) - abP(a, b), \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde $\rho_a = \sum_{a,b} aP(a, b)$ é a densidade de partículas A na rede e de forma similar para ρ_B . Uma equação para ρ_A pode ser encontrada multiplicando 4.2 por a em ambos os lados e somando sobre todos os valores de a e b , levando a

$$\dot{\rho}_A = r\rho_B - \langle ab \rangle, \quad (4.3)$$

onde $\langle ab \rangle = \sum_{a,b} abP(a, b)$ (e portanto $\langle a \rangle = \rho_A$). Note que o momento cruzado $\langle ab \rangle$ é geralmente diferente do simples produto das densidades de A e B . Se ainda assim fizermos $\langle ab \rangle = \rho_A \rho_B$, obtemos uma 'aproximação de ordem zero' dada por

$$\dot{\rho}_A = r\rho_B - \rho_A \rho_B. \quad (4.4)$$

Com o vínculo $\rho_A + \rho_B = \rho = \text{constante}$ encontramos

$$\dot{\rho}_B = (\rho - r)\rho_B - \rho_B^2, \quad (4.5)$$

mostrando que no nível mais baixo de aproximação o parâmetro de ordem ρ_B satisfaz a equação de Malthus-Verhulst com taxa de reprodução $\rho - r$ (também conhecida como função logística). Neste ponto uma transição de fase contínua ocorre em $\rho = r$, independente das taxas de difusão, e a densidade estacionária de partículas B segue a relação linear $\bar{\rho}_B = \rho - r$ (o expoente $\beta = 1$ é característico da TCM).

Um resultado um tanto melhor é obtido integrando (numericamente) o conjunto completo de equações da TCM de um sítio, eq. 4.2 (partindo de uma distribuição inicial poissoniana). Na análise numérica, somos forçados

a restringir o número máximo de partículas por sítio, definindo os valores de corte a_c e b_c . Se estes valores forem altos o suficiente, o erro incorrido é mínimo uma vez que a distribuição de probabilidades cai exponencialmente para valores altos de a e b , podendo atingir valores inferiores à precisão numérica de 32 bits. Alguns cuidados devem ser tomados na implementação do algoritmo. Naturalmente, as transições $a_c \rightarrow a_c + 1$ devem ser proibidas. Além disso, uma transição da forma $a \rightarrow a - 1$ devido a uma partícula pular para fora do sítio de interesse, deve ter a sua taxa multiplicada por $1 - P(a_c)$, onde $P(a) = \sum_b P(a, b)$ é distribuição marginal de probabilidades para as partículas A em um sítio qualquer. Restrições similares são aplicadas às transições envolvendo partículas B. Esta análise já alcança resultados bem mais interessantes, não previstos pela equação 4.5.

Para obter uma descrição ainda mais rica, estendemos a aproximação para dois sítios. Haverão (em geral) 16 transições para um determinado estado e outras 16 saindo dele. Usando a simetria $P(a, b; a', b') = P(a', b'; a, b)$ e fatorando a probabilidade de três sítios de forma que $P(a, b; a', b'; a'', b'') = P(a, b; a', b')P(a', b'; a'', b'')/P(a', b')$, a equação que governa a probabilidade conjunta de dois sítios pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\frac{dP(a, b; a', b')}{dt} = & \frac{D_A}{2}(a+1) [P(a+1, b; a', b') + P(a+1, b; a'-1, b')] \\
& + \frac{D_A}{2}(a'+1) [P(a, b; a'+1, b') + P(a-1, b; a'+1, b')] \\
& + \frac{D_B}{2}(b+1) [P(a, b+1; a', b') + (P(a, b+1, a', b'-1))] \\
& + \frac{D_B}{2}(b'+1) [P(a, b; a', b'+1) + P(a, b-1, a', b'+1)] \\
& + \frac{D_A}{2} [\Phi_A(a-1, b)P(a-1, b; a', b')] \\
& + \frac{D_A}{2} [\Phi_A(a'-1, b')P(a, b; a'-1, b')] \\
& + \frac{D_B}{2} [\Phi_B(a, b-1)P(a, b-1; a', b')] \\
& + \frac{D_B}{2} [\Phi_B(a', b'-1)P(a, b; a', b'-1)] \\
& + r[(b+1)P(a-1, b+1, a', b')] \\
& + r[(b'+1)P(a, b; a'-1, b'+1)] \\
& + (a+1)(b+1) P(a+1, b-1; a', b') \\
& + (a'+1)(b'+1) P(a, b; a'+1, b'-1) \\
& - \left\{ D_A(a+a') + \frac{D_A}{2} [\Phi_A(a, b) + \Phi_A(a', b')] \right. \\
& \quad + D_B(b+b') + \frac{D_B}{2} [\Phi_B(a, b) + \Phi_B(a', b')] \\
& \quad \left. + r(b+b') + ab + a'b' \right\} P(a, b; a', b')
\end{aligned} \tag{4.6}$$

onde

$$\Phi_A(a, b) = \frac{\sum_{a'} \sum_{b'} a' P(a, b; a', b')}{P(a, b)} \quad (4.7)$$

é a densidade condicional de partículas A em um sítio, dado que um dos seus vizinhos próximos tem ocupação (a, b) (analogamente para Φ_B). As equações acima são integradas numericamente via método Runge-Kutta de 4ª ordem usando um valor de corte igual a 10 para as variáveis a, b, a', b' . As mesmas correções citadas para a TCM de um sítio são aplicadas aqui. Verificou-se que para densidades $\rho \leq 2$ o erro inserido é desprezível.

Os resultados obtidos aplicando-se a teoria de campo médio ao modelo de epidemia difusiva serão mostrados no capítulo seguinte.

4.3 Simulação Monte-Carlo

As simulações Monte Carlo são realizadas utilizando um algoritmo escrito para reproduzir fielmente as taxas de transição que definem o processo. Modelos mais simples e computacionalmente eficientes envolvendo os quatro tipos de reação (difusão de A e B , recuperação (R) e infecção(I)) são possíveis mas não correspondem exatamente às mesmas taxas de transição. Nosso método de simulação permite uma comparação quantitativa com as previsões teóricas, incluindo expansões sistemáticas da equação mestra.

A simulação consiste em uma seqüência de eventos, sendo que cada um envolve a escolha do tipo de transição e do sítio na qual irá ocorrer. A escolha do tipo de evento depende da taxa total de transição de cada um dos quatro processos e é dada por:

- Deslocamento de partículas A : taxa total de transição $W_A = N_A D_A$, onde $N_A = \sum_j a_j$ é o número total de partículas A .
- Deslocamento de partículas B : taxa total de transição $W_B = N_B D_B$.
- Transformação de partículas B para A : taxa total de transição $W_R = r N_B$.
- Transformação de partículas A para B : taxa total de transição $W_I = \sum_j a_j b_j$.

Se definirmos $W_T = W_A + W_B + W_R + W_I$ como a taxa total de transição para todos os processos somados, então a probabilidade do próximo evento ser do tipo m ($= A, B, R$ or I) é $P_m = W_m / W_T$, enquanto o tempo médio até que ocorra o próximo evento é $\Delta t = 1 / W_T$ (e portanto soma-se esse valor ao tempo total a cada evento). O próximo evento é escolhido aleatoriamente dentro deste conjunto de probabilidades.

Uma vez que o tipo de evento é determinado, deve-se escolher o sítio onde ele ocorrerá. Para este propósito, várias listas são mantidas. Por exemplo, se

o evento escolhido for o deslocamento de uma partícula A , nós selecionamos um sítio aleatório dentro de uma lista com todos os sítios contendo $a_j > 0$ (chamada de lista-A). No entanto, nem todos os sítios da lista-A têm a mesma chance de sediar o evento, pois possuem um número diferente de partículas. Para isso mantemos sempre o registro a_{max} com o maior número de partículas A presentes em um único sítio. Quando um sítio j é sorteado da lista-A, ele é aceito com probabilidade $p_{ace} = a_j/a_{max}$. No caso de rejeição, um novo sorteio é feito (ex. sítio k), comparando-se a_k com a_{max} . O processo é repetido até que um sítio seja aceito, garantindo desta forma que todas as partículas A tenham exatamente a mesma chance de deslocamento. O sítio que receberá a partícula deslocada também é escolhido aleatoriamente entre os vizinhos próximos.

O mesmo procedimento é adotado para os outros três processos, sendo necessário a manutenção de uma lista-B e de uma lista-AB (a última contendo todos os sítios com o produto $a_j b_j > 0$). Os procedimentos de rejeição explicados acima, embora necessários para manter a fidelidade com a equação mestra original, são computacionalmente caros. Por esta razão o presente estudo foi restringido a uma densidade relativamente baixa ($\rho = 1$) para que os valores a_{max} , b_{max} e $(ab)_{max}$ não fossem muito grandes.

Poderíamos também ter adotado listas das posições de todas as *partículas* A e B , ao invés de manter uma lista dos *sítios* contendo A s e B s, mas a reação $A \rightarrow B$ requer uma lista-AB (a taxa é proporcional ao produto ab em um mesmo sítio) e por isso adotamos um procedimento uniforme para os quatro eventos. Para altas taxas de difusão, adotar um algoritmo misto, utilizando listas de partículas para todos os processos exceto a reação $A-B$, aumentaria a eficiência.

Estudos de decaimento inicial, histerese, e a estimativa dos tempos de relaxação são feitos com esta rotina. Para o cálculo preciso dos expoentes críticos, empregou-se uma outra versão, chamada quase-estacionária, cuja metodologia é descrita abaixo.

4.3.1 Simulando um estado quase-estacionário

Como mencionado no capítulo 1, em sistemas infinitos o processo deve atingir um estado estacionário estável, após um período de relaxação. Entretanto, em sistemas de tamanho finito, cedo ou tarde o processo sofrerá uma flutuação que o levará ao estado absorvente. Em simulações convencionais, as propriedades de interesse do estado ‘estacionário’ são na verdade obtidas através de médias feitas sobre vários ensaios de simulações que sobreviveram tempo o suficiente para o sistema relaxar até a quase-estabilidade.

Rigorosamente, estudamos portanto o estado *quase-estacionário*, ou seja, condicionado à sobrevivência. Para tanto empregamos um método muito útil para o estudo de sistemas com um estado absorvente, também chamado de método quase-estacionário (QS) [27]. O método envolve manter,

e atualizar gradativamente, uma lista de configurações visitadas durante a evolução, após a sua relaxação. Quando uma flutuação gerar uma transição que levaria o sistema ao estado absorvente, ele é, ao invés disso, colocado em uma das configurações salvas escolhidas aleatoriamente na lista. De resto, a evolução do processo é idêntica a uma simulação convencional, seguindo as regras detalhadas na seção 4.3. (O conjunto de configurações salvas é atualizado a cada intervalo de tempo, substituindo-se uma das configurações salvas pela atual, com uma pequena probabilidade p_{rep})

A eficácia do método acima foi comprovada em [28] onde resultados precisamente iguais foram obtidos via simulações QS e tradicionais para o Processo de Contato em rede unidimensional e no grafo completo. O sistema também se mostrou bastante preciso quando comparamos os resultados obtidos por simulações convencionais e QS para o modelo da Pilha de Areia [29]. A vantagem do método está no fato de que a realização do processo pode rodar por um tempo indefinidamente longo, enquanto em simulações convencionais um grande número de ensaios devem ser realizados para se obter uma amostragem decente do estado quase-estacionário. Como na simulação QS o tempo de relaxação só precisa ser esperado uma vez, ela é uma ordem de grandeza mais rápida na região crítica. A aplicação do método QS para transições descontínuas será discutida na seção 5.2.2 abaixo. Para maiores detalhes sobre o método veja [27].

4.4 Expansões em série

4.4.1 Introdução

A análise de séries tem se mostrado um método eficiente no estudo de fenômenos críticos, tanto em equilíbrio quanto fora do equilíbrio termodinâmico [30, 31, 32, 33]. As expansões em série funcionam melhor em sistemas de baixa dimensionalidade (porque mais termos podem ser calculados); exatamente o limite onde o tratamento via grupo de renormalização com expansão em torno de uma dimensão crítica d_c é pouco confiável. O processo de epidemia difusiva é um destes casos onde os resultados via grupo de renormalização podem não ser válidos em $d = 1$.

Resultados de simulação sugerem um comportamento crítico diferente, mas há um certo conflito nos valores dos expoentes críticos publicados, provavelmente relacionados a fortes efeitos de tamanho finito. As expansões em série tratam implicitamente o limite para tamanho infinito e portanto fornecem uma importante informação complementar. Em vista destas observações é desejável obter a expansão em série de potências de tempo para a densidade de partículas ativas no PED.

4.4.2 Álgebra de operadores

Como visto anteriormente, a dinâmica do processo pode ser descrita pela equação mestra 2.30, cuja solução formal é 2.31. Na notação de operadores as equações tomam a forma:

$$\frac{d|\Psi\rangle}{dt} = L|\Psi\rangle, \quad (4.8)$$

com

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{a_i, b_i\}} p(\{a_i, b_i\}, t) |\{n_i\}\rangle, \quad (4.9)$$

onde $\{a_i, b_i\}$ representa uma determinada configuração do sistema com a_i partículas A e b_i partículas B no sítio i , um outro conjunto no sítio j e assim por diante. O somatório na equação acima é sobre todas as configurações possíveis, e p representa a probabilidade daquele estado específico no tempo t .

O operador de evolução L consiste de uma soma de termos idênticos L_i , cada qual associado a um sítio:

$$L = \sum_i L_i = \sum_i \sum_{p=1}^4 L_i^{(p)}. \quad (4.10)$$

As quatro componentes do operador de evolução estão associadas com infecção, recuperação e difusão das partículas A e B respectivamente:

$$L_i^{(1)} = (B_i^\dagger - A_i^\dagger) B_i^\dagger B_i A_i \quad (4.11)$$

$$L_i^{(2)} = r(A_i^\dagger - B_i^\dagger) B_i \quad (4.12)$$

$$L_i^{(3)} = \frac{D_A}{2} (A_{i-1}^\dagger + A_{i+1}^\dagger - 2A_i^\dagger) A_i \quad (4.13)$$

$$L_i^{(4)} = \frac{D_B}{2} (B_{i-1}^\dagger + B_{i+1}^\dagger - 2B_i^\dagger) B_i. \quad (4.14)$$

Aqui A_i e $A_i^\dagger$ são, respectivamente, os operadores aniquilação e criação de partículas A no sítio i (de forma análoga para B), definidos via

$$A_i |a_i\rangle = a_i |a_i - 1\rangle \quad (4.15)$$

e

$$A_i^\dagger |a_i\rangle = |a_i + 1\rangle. \quad (4.16)$$

Os comutadores não nulos são:

$$[A_i, A_i^\dagger] = [B_i, B_i^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (4.17)$$

Vale notar que cada componente $L^{(i)}$ do operador evolução conserva a probabilidade. A componente de recuperação(2), por exemplo, tem um

termo positivo que adiciona probabilidade ao estado $|a+1, b-1\rangle$ enquanto subtrai a mesma quantidade do estado $|a, b\rangle$.

A solução formal da equação mestra é $|\Psi(t)\rangle = e^{tL}|\Psi(0)\rangle$. A densidade de partículas B na origem segue

$$\rho(0, t) = \langle |B_0 e^{tL} |\Psi(0)\rangle, \quad (4.18)$$

onde

$$\langle | \equiv \sum_{\{a_i, b_i\}} \langle \{a_i, b_i\} | \quad (4.19)$$

é a projeção sobre todos os estados possíveis; a normalização garantindo $\langle |\Psi\rangle = 1$.

Uma distribuição inicial de probabilidades pode ser escolhida com uma certa arbitrariedade e, por ser simples, escolheremos a distribuição espacial uniforme, doravante denotada como $|P\rangle$, dada pelo produto de Poisson com a densidade de partículas B igual ρ e nenhuma partícula A . Portanto, a distribuição inicial de probabilidades para o número de partículas B no sítio i é $p(b_i) = e^{-\rho} \rho^{b_i} / b_i!$, independente em cada sítio. A conservação de partículas intrínseca no modelo garante que $\rho_A + \rho_B = \rho$ para todo tempo $t \geq 0$. Uma vez que a distribuição espacial inicial é homogênea, a simetria do sistema nos permite determinar o parâmetro de ordem ρ_B pela densidade de partículas B em qualquer sítio, por exemplo a origem.

As equações 4.20-4.23 trazem algumas identidades básicas.

$$B_j |P\rangle = \rho |P\rangle \quad (4.20)$$

$$A_j |P\rangle = 0 \quad (4.21)$$

$$\langle |A_j^\dagger = \langle |B_j^\dagger = \langle | \quad (4.22)$$

$$\langle |L_j^{(p)} = 0. \quad (4.23)$$

A primeira relação é consequência da distribuição de Poisson. A terceira afirma que os operadores de criação conservam a normalização de qualquer estado, enquanto a última mostra que cada componente $L_j^{(p)}$ do operador de evolução conserva a probabilidade. As componentes $L_j^{(1)}$ e $L_j^{(2)}$ envolvem apenas operadores no sítio j e portanto comutam com quaisquer operadores criação ou aniquilação associados a outro sítio.

Os termos de difusão $L_j^{(3)}$ e $L_j^{(4)}$ envolvem operadores no sítio j e seus primeiros vizinhos de modo que

$$[L_i^{(3)}, A_j] = [L_i^{(4)}, A_j] = 0 \quad \text{para } |i-j| > 1, \quad (4.24)$$

e de forma similar para $A_j^\dagger$, B_j e $B_j^\dagger$.

Registramos abaixo, para referência futura, os comutadores básicos.

$$[A_i, L_i^{(1)}] = -B_i^\dagger B_i A_i \quad (4.25)$$

$$[A_i^\dagger, L_i^{(1)}] = -(B_i^\dagger - A_i) B_i^\dagger B_i \quad (4.26)$$

$$[B_i, L_i^{(1)}] = (2B_i^\dagger - A_i^\dagger) B_i A_i \quad (4.27)$$

$$[B_i^\dagger, L_i^{(1)}] = -(B_i^\dagger - A_i^\dagger) B_i^\dagger A_i \quad (4.28)$$

$$[A_i, L_i^{(2)}] = r B_i \quad (4.29)$$

$$[A_i^\dagger, L_i^{(2)}] = 0 \quad (4.30)$$

$$[B_i, L_i^{(2)}] = -r B_i \quad (4.31)$$

$$[B_i^\dagger, L_i^{(2)}] = r(B_i^\dagger - A_i^\dagger) \quad (4.32)$$

Os comutadores não nulos envolvendo operadores de difusão são:

$$[A_i, L_i^{(3)}] = -D_A A_i \quad (4.33)$$

$$[A_{i\pm 1}, L_i^{(3)}] = \frac{D_A}{2} A_i \quad (4.34)$$

$$[A_j^\dagger, L_i^{(3)}] = \frac{D_A}{2} \delta_{ij} (A_{i-1}^\dagger + A_{i+1}^\dagger - 2A_i^\dagger) \quad (4.35)$$

Voltemos agora à eq. 4.18. Ao expandirmos ρ_B (e portanto e^{tL}) em potências de tempo, o coeficiente do termo $t^n/n!$ é

$$c_n = \sum_{\mathcal{S}} \langle |B_0 L_{s_1} L_{s_2} \dots L_{s_n} | P \rangle, \quad (4.36)$$

onde a soma corre sobre uma seqüência de sítios $\mathcal{S}$ com $s_0 \equiv 0, s_1, s_2, \dots, s_n$. Se, por exemplo, tivéssemos $s_1 = 2$ o operador $L_2^{(p)}$ (com p qualquer) poderia comutar para esquerda de B_0 gerando um termo nulo, de acordo com a equação 4.23. Seguindo essa idéia restringimos a somatório de modo que $|s_1| \leq 1$, e $s_{j+1} \in \{s_{j_{\min}} - 1, \dots, s_{j_{\max}} + 1\}$, para $j \geq 1$, onde $s_{j_{\min}} = \min\{s_0, \dots, s_j\}$, e $s_{j_{\max}}$ é o valor máximo deste conjunto. Se essa condição fosse violada, seria possível mover um dos L_j para a esquerda de todos os outros operadores, gerando um resultado nulo. Além disso o termo mais à direita obrigatoriamente será $L_{s_n}^{(2)}$, já que todos as outras partes de L dão zero quando aplicados à distribuição inicial $|P\rangle$. As escolhas para o primeiro termo (mais à esquerda) também estão limitadas a: $L_0^{(p)}$ com $p \neq 3$, e $L_{\pm 1}^{(4)}$ (todos os outros casos comutam com B_0). Levando em conta estas restrições,

a equação 4.36 pode ser reescrita como

$$c_n = \sum_S \sum_{p_2=1}^4 \cdots \sum_{p_{n-1}=1}^4 \langle |B_0[L_0^{(1)} + L_0^{(2)} + L_0^{(4)} + 2L_1^{(4)}]L_{s_2}^{(p_2)} \dots L_{s_{n-1}}^{(p_{n-1}-1)}L_{s_n}^{(2)}|P \rangle. \quad (4.37)$$

onde já foi aplicada uma operação de simetria (rotação ou translação) ao escrever $L_{-1}^{(4)} + L_1^{(4)} = 2L_1^{(4)}$.

Se escrevermos os L_j em *ordem normal*, ou seja, com todos os operadores criação à esquerda de todos os operadores aniquilação, então os primeiros poder ser substituídos por $\mathbf{1}$, de acordo com a equação 4.22. Portanto,

$$\langle |B_0 L_j = \langle |[B_0, L_j] + \underbrace{L_j B_0}_0 = \langle |[B_0, L_j]_R, \quad (4.38)$$

onde o subscrito R denota um *comutador reduzido*, ou seja, escrito em ordem normal com todos os operadores criação substituídos pela identidade. Evidentemente $[B_0, L_j]_R$ envolve apenas operadores aniquilação. As expressões não triviais que seguem são:

$$[B_0, L_0^{(1)}]_R = B_0 A_0, \quad (4.39)$$

$$[B_0, L_0^{(2)}]_R = -r B_0, \quad (4.40)$$

$$[B_0, L_0^{(3)}]_R = -D_B B_0 \quad (4.41)$$

e

$$[B_0, L_0^{(4)}]_R = \frac{D_B}{2} B_0. \quad (4.42)$$

A simplicidade das equações acima sugerem um próximo passo. A partir da equação 4.18 temos

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_B}{dt} &= \langle |B_0 L e^{Lt} | P \rangle \\ &= \langle |B_0 [L_0^{(1)} + L_0^{(2)} + L_0^{(4)}] e^{Lt} | P \rangle \\ &= \langle |[B_0 A_0 - r B_0] e^{Lt} | P \rangle \end{aligned} \quad (4.43)$$

de modo que o parâmetro de ordem satisfaz

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -r\rho_B + f_1(t) \quad (4.44)$$

com

$$f_1(t) = \langle |B_0 A_0 e^{Lt} | P \rangle. \quad (4.45)$$

Para prosseguir escrevemos os comutadores reduzidos não nulos envolvendo o operador $B_0 A_0$:

$$[B_0 A_0, L_0^{(1)}]_R = -B_0 A_0 - B_0 (B_0 - A_0) A_0, \quad (4.46)$$

$$[B_0 A_0, L_0^{(2)}]_R = r B_0 (B_0 - A_0), \quad (4.47)$$

$$[B_0 A_0, L_0^{(3)}]_R = -D_A B_0 A_0, \quad (4.48)$$

$$[B_0 A_0, L_0^{(4)}]_R = -D_B B_0 A_0, \quad (4.49)$$

$$[B_0 A_0, L_1^{(3)}]_R = \frac{D_A}{2} B_0 A_1, \quad (4.50)$$

$$[B_0 A_0, L_1^{(4)}]_R = \frac{D_B}{2} B_1 A_0. \quad (4.51)$$

Estes operadores (e as operações de simetria) são suficientes para escrevermos:

$$\frac{df_1}{dt} = -(1 + r + D_A + D_B) f_1 + f_{21} + f_{22} + f_{23} + f_{24}, \quad (4.52)$$

onde

$$f_{21} = r \langle |B_0^2 e^{Lt}| P \rangle \quad (4.53)$$

$$f_{22} = -\langle |B_0^2 A_0 e^{Lt}| P \rangle \quad (4.54)$$

$$f_{23} = \langle |B_0 A_0^2 e^{Lt}| P \rangle \quad (4.55)$$

$$f_{24} = (D_A + D_B) \langle |B_0 A_1 e^{Lt}| P \rangle. \quad (4.56)$$

Em princípio, podemos continuar nesse caminho, escrevendo equações para f_{21} , etc., mas a cada geração posterior o número de termos cresce muito rapidamente. Ao invés disso, a partir desse ponto, desenvolveu-se um algoritmo para determinar o valor exato destas funções como uma série de potências em t até uma ordem limite t^n . Fazendo a substituição reversa na equação 4.52 chega-se a uma série para f_1 de ordem $n + 1$, que por sua vez, ao ser substituída em 4.18 gera uma série para $\rho_B(t)$ de ordem $n + 2$.

4.4.3 Algoritmo Computacional

Cada uma das equações 4.53 a 4.56 continuará a ser expandida computacionalmente via álgebra de operadores. Para isso necessitaremos de um determinado conjunto de comutadores reduzidos. Lembrando que

$$[B_o^n, B_0^\dagger] = n B_o^{n-1}, \quad (4.57)$$

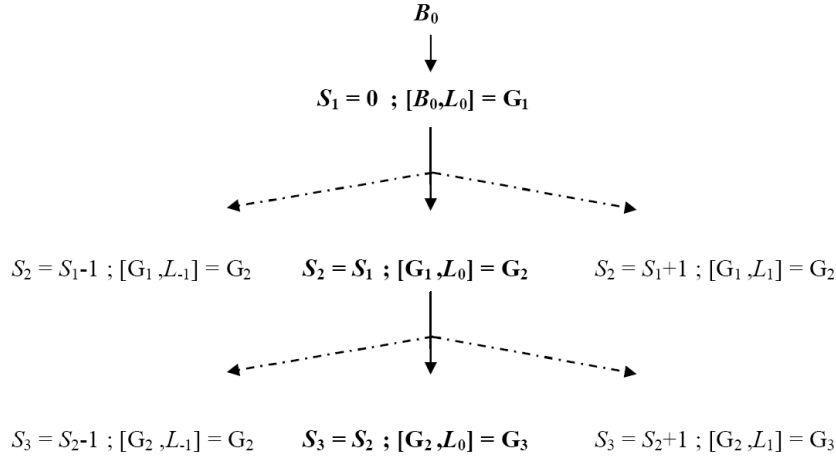


Fig. 4.1: Esquema de cálculo em árvore usado no algoritmo de avaliação de séries

é possível mostrar que

$$[B_0^n A_0^m, L_0^{(1)}]_R = nB_0^n A_0^{m+1} + n(n-1)B_0^{n-1} A_0^{m+1} - mB_0^{n+1} A_0^m - mnB_0^n A_0^m, \quad (4.58)$$

$$[B_0^n A_0^m, L_0^{(2)}]_R = mrB_0^{n+1} A_0^{m-1} - nrB_0^n A_0^m, \quad (4.59)$$

$$[B_0^k A_{-1}^\ell A_0^m A_1^n, L_0^{(3)}]_R = \frac{D_A}{2} (\ell A_{-1}^{\ell-1} A_0^{m+1} A_1^n + n A_{-1}^\ell A_0^{m+1} A_1^{n-1} - 2m A_{-1}^\ell A_0^m A_1^n) B_0^k, \quad (4.60)$$

$$[A_0^k B_{-1}^\ell B_0^m B_1^n, L_0^{(4)}]_R = \frac{D_B}{2} (\ell B_{-1}^{\ell-1} B_0^{m+1} B_1^n + n B_{-1}^\ell B_0^{m+1} B_1^{n-1} - 2m B_{-1}^\ell B_0^m B_1^n) A_0^k. \quad (4.61)$$

Partindo da equação 4.37 e das restrições nela implícitas, iniciamos um procedimento que se propaga em árvore (veja figura 4.1). Se $s_1 = 0$, então s_2 poderá ser -1, 0 ou 1; s_3 varia de $s_2 - 1$ a $s_2 + 1$ e assim por diante. Cada escolha única de $s_1, s_2, \dots, s_n$ gera um conjunto de termos que contribuem para o coeficiente c_n da expansão. Já que a distribuição inicial é Poissoniana, cada um destes termos terá valor nulo se restar nele algum operador A_i com potência diferente de zero, caso contrário será proporcional a ρ^{sb} , onde sb é a soma dos expoentes de todos os operadores B_i .

Se na próxima escolha de comutadores, todos os valores de s_i (para $i = 1$ até n) forem idênticos exceto na última ordem n , precisamos apenas voltar uma geração na árvore e selecionar um novo valor para s_n , aproveitando no cálculo os termos produzidos até a geração $n - 1$. Ao esgotar todas as possibilidades s_n (dada a escolha anterior de s_{n-1}), um novo conjunto de comutadores é calculado para uma nova escolha de s_{n-1} . De posse desse resultado descemos novamente à geração n calculando todas as contribuições

possíveis. Obviamente, ao determinar o coeficiente c_n , ficam automaticamente calculados os valores de $c_1, c_2, \dots, c_{n-1}$.

A estrutura de cálculo em árvore pode ser facilmente implantado em Fortran95 fazendo uso de subrotinas recursivas. Os recursos de vetorização dos novos compiladores tornam os cálculos vetoriais até 4 vezes mais rápidos em processadores com extensão SSE3 (ex: todos os Pentium D, Core Duo e Xeon mais modernos), quando comparados ao código escrito em fortran77. O algoritmo atual foi escrito para tirar o proveito destas extensões (melhorando em 3x o desempenho), mais ainda encontra-se em versão 'single-thread' (não preparado para clusters).

O esquema descrito acima é eficiente mas tem um alto custo em memória visto que cada termo gera em média 8 termos para a geração futura. Com $n=8$, um computador com 2Gb de RAM já teria dificuldades em concluir o processo. Para contornar esse problema, adiciona-se um procedimento de concatenação de termos após cada operação de comutação. Termos com o mesmo conjunto de operadores têm seus coeficientes somados. Devido às relações de simetria, termos idênticos por translação ou rotação (ou uma combinação de ambas) também são concatenáveis. O custo computacional da concatenação é muito alto (principalmente quando n é grande), mas além de reduzir a memória necessária torna mais simples a conferência dos resultados. O algoritmo completo encontra-se no anexo A

4.4.4 Aproximantes de Padé e transformações de variável

Como no fim estaremos truncando uma série infinita, podem aparecer problemas de convergência (ou até séries divergentes). Mesmo nesses casos, muitas vezes é possível se obter resultados úteis ao se aproximar o polinômio resultante por uma função racional, através da técnica conhecida como aproximantes de Padé [34].

Dada uma função f e dois inteiros $m \geq 0$ e $n \geq 0$, o aproximante de Padé de ordem (m, n) é a função racional

$$R(x) = \frac{p_0 + p_1x + p_2x^2 + \dots + p_mx^m}{1 + q_1x + q_2x^2 + \dots + q_nx^n} \quad (4.62)$$

que concorda com $f(x)$ até a ordem mais alta possível e que portanto garante que

$$\begin{aligned} f(0) &= R(0) \\ f'(0) &= R'(0) \\ f''(0) &= R''(0) \\ &\vdots \\ f^{(m+n)}(0) &= R^{(m+n)}(0) \end{aligned} \quad (4.63)$$

De forma equivalente, se $R(x)$ for expandida em série de Taylor em torno de 0, os primeiros $m + n + 1$ termos cancelarão os primeiros $m + n + 1$ termos. Para um dado valor de x os aproximantes de Padé são calculados resolvendo-se um sistema de equações lineares.

Embora extremamente poderosa, esta técnica sozinha ainda não é capaz de trazer bons resultados quando aplicada diretamente sobre uma série divergente. Neste caso, realiza-se uma transformação de variáveis sobre a série original e em seguida constroem-se os aproximantes de Padé.

No caso do PED, a série original será transformada para

$$y = \frac{t}{b+t}. \quad (4.64)$$

Essa transformação mapeia o intervalo $t = [0, \infty)$ em um intervalo finito. Ela pode ser expandida em um série de potências de t e em seguida invertida, permitindo-nos expressar o tempo t como potências y , de acordo com

$$t = \frac{by}{1-y} = \sum_{m=1}^{\infty} by^m \quad (4.65)$$

Então, se $\rho(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n$,

$$\begin{aligned} \rho(y) &= \rho(t(y)) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left[\frac{by}{1-y} \right]^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left[\sum_{m=1}^{\infty} by^m \right]^n \\ &= a_0 + a_1 by + (a_1 b + a_2 b^2) y^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.66)$$

Sobre esse resultado serão construídos os aproximantes de Padé para chegar à melhor previsão possível com o número limitado de termos.

4.4.5 Cálculo Direto

É possível calcular os primeiros termos da série diretamente, sem recorrer ao desmembramento de funções f_1 , etc. Iniciemos na equação 4.37 na qual pode ser feita a seguinte simplificação. A contribuição $L_0^{(4)} + 2L_1^{(4)}$ no fator imediatamente à direita de B_0 pode ser removida já que

$$[B_0, L_0^{(4)}] + 2[B_0, L_1^{(4)}] = D_B(B_1 - B_0) \quad (4.67)$$

e

$$\langle |(B_1 - B_0)|\Psi \rangle = 0 \quad (4.68)$$

para qualquer estado $|\Psi\rangle$ invariante por translação.

Os primeiros termos da expansão são $c_0 = \langle |B_0|P \rangle = \rho$ e (usando a observação acima)

$$c_1 = \langle |B_0 L_0^{(2)}|P \rangle = -r\rho \quad (4.69)$$

Agora, usando as equações 4.39 e 4.40, podemos escrever a eq. 4.37 para $n > 2$ como:

$$c_n = \sum_S \sum_{p_2=1}^4 \cdots \sum_{p_{n-1}=1}^4 \langle |B_0(A_0 - r)L_{s_2}^{(p_2)} \dots L_{s_{n-1}}^{(p_{n-1})}L_{s_n}^{(2)}|P \rangle, \quad (4.70)$$

Os operadores de difusão no fator imediatamente à direita de $B_0(A_0 - r)$ podem novamente ser eliminados, pelo mesmo argumento usado acima, resultando em

$$c_n = \sum_S \sum_{p_3=1}^4 \sum_{p_{n-1}=1}^4 \langle |B_0(A_0 - r) [L_0^{(1)} + L_0^{(2)}] L_{s_3}^{(p_3)} \dots L_{s_{n-1}}^{(p_{n-1})}L_{s_n}^{(2)}|P \rangle \quad (4.71)$$

onde $\sum_S$ é agora sobre sítios $s_3, \dots, s_n$. Usando os comutadores reduzidos previamente dados, chegamos a

$$c_n = \sum_S \sum_{p_3=1}^4 \sum_{p_{n-1}=1}^4 \langle | [r^2 B_0 + r B_0^2 - (1 + 2r) B_0 A_0 - B_0^2 A_0 + B_0 A_0^2] \times L_{s_3}^{(p_3)} \dots L_{s_{n-1}}^{(p_{n-1})}L_{s_n}^{(2)}|P \rangle. \quad (4.72)$$

Isso resulta em $c_2 = r\rho(r + \rho)$, e

$$\begin{aligned} c_3 &= \langle | [r^2 B_0 + r B_0^2 - (1 + 2r) B_0 A_0 - B_0^2 A_0 + B_0 A_0^2] L_0^{(2)}|P \rangle \\ &= -r\rho [(1 + r)^2 + \rho(2r + \rho)] \end{aligned} \quad (4.73)$$

Note que as taxas de difusão não entram na expressão para c_n com $n \leq 3$. Este cálculo direto serviu como uma forma de comprovar a acuidade do nosso algoritmo computacional pelo menos até ordem $n = 3$. Por exemplo, quando $\rho = r = 1$ a expansão é

$$\rho_B(t) = 1 - t + t^2 - \frac{7}{6}t^3 + \mathcal{O}(t^4) \quad (4.74)$$

Na expressão para c_n com $n \geq 4$, surgem termos começando com $B_0^2[L_0^{(4)} + 2L_1^{(4)}]$. Note que

$$[B_0^2, L_0^{(4)}] + 2[B_0^2, L_1^{(4)}] = 2D_B(B_0 B_1 - B_0^2). \quad (4.75)$$

Uma vez que $\langle |(B_0 B_1 - B_0^2)|\Psi \rangle \neq 0$ para estados que possuem correlação entre o número de partículas B em sítios adjacentes, este termo não pode em geral ser excluído. Portanto, na equação 4.72 com $n > 4$ pode-se excluir os operadores de difusão imediatamente à direita de $r^2 B_0$ e $-(1 + 2r) B_0 A_0$, mas não nos outros casos. (Claro que os operadores de difusão para as partículas A podem ser excluídos imediatamente à direita de B_0^2).

5. RESULTADOS

5.1 Teoria de campo médio

Como vimos na seção 4.2, a equação mestra para o processo de epidemia difusiva (eq.4.1), em sua aproximação mais rudimentar, nos leva à equação de Malthus-Verhulst ou função logística (eq. 4.5). Neste caso mais simples a transição de fase é contínua e a difusão das partículas não afeta em absoluto o resultado.

A TCM de 1 sítio (eq. 4.2) já apresenta resultados bem mais ricos, que dependem das taxas de difusão. Dois fatores causam esta dependência. Primeiro, nas vizinhanças da transição de fase, os termos de reação fazem com que a distribuição marginal para o número de partículas B desvie significativamente da distribuição inicial de Poisson, enquanto altas taxas de difusão retornam a distribuição para uma forma mais poissoniana. Segundo, as reações tornam as variáveis a e b anti-correlacionadas, ou seja $cov(a, b) = \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle < 0$, enquanto a difusão rápida tende a eliminar a correlação.

A figura 5.1 mostra a linha crítica $\rho_c(r)$ de acordo com a previsão da TCM de um sítio, para várias combinações de D_A e D_B . À medida que as taxas de difusão crescem o valor de ρ_c se aproxima do resultado $\rho_c = r$ previsto na aproximação de ordem zero. Para taxas finitas de difusão ρ_c será sempre maior do que r , devido novamente à anti-correlação entre a e b . Da mesma forma, a aproximação de dois sítios prevê um valor maior de ρ_c do que a teoria de um sítio com todos os parâmetros idênticos.

Comparamos as previsões obtidas pela teoria de campo médio com os resultados da simulação nos três casos representativos ($D_A > D_B$; $D_A = D_B$; $D_A < D_B$), todos para densidade $\rho = 1$. Os resultados estão apresentados na tabela 5.1 e na figura 5.2.

Embora as previsões da teoria de campo médio superestimem o valor real de r_c nos 3 casos principais, há uma melhora significativa da aproximação de um sítio para a de dois sítios. De forma interessante, quando $D_A \gg D_B$ os resultados da TCM de 2 sítios e da simulação são muito próximos; para o caso $D_B = 0.05$ e $D_A = 0.5$, sempre com $\rho = 1$, as duas abordagens também prevêem $r_c = 0.475$ e $r_c = 460$ respectivamente.

Em princípio, quanto mais alta a ordem da aproximação melhor será o resultado. O custo computacional, no entanto, pode inviabilizar o cálculo; o número de equações a serem integradas na aproximação de n sítios é

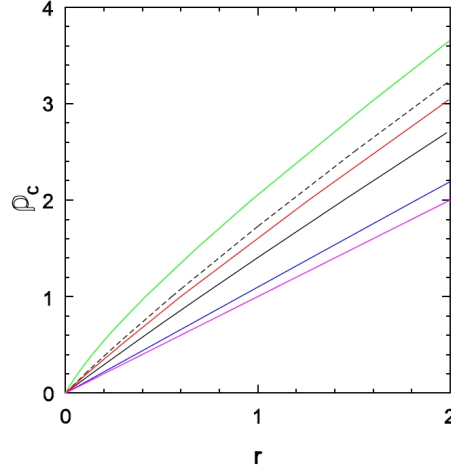


Fig. 5.1: Previsões de campo médio para a densidade crítica ρ_c versus a taxa de recuperação r_c . TCM de 1 sítio por linhas sólidas, de cima para baixo: $D_A = D_B = 0.2$; $D_A = 0.2, D_B = 1$; $D_A = 1, D_B = 1, D_A = D_B = 5$; função logística $\rho_c = r$. Linha pontilhada: TCM de 2 sítios para $D_A = 1, D_B = 1$.

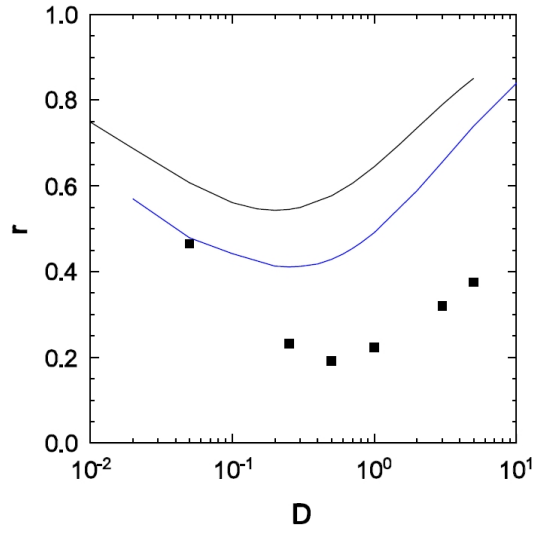


Fig. 5.2: Taxa de recuperação crítica r_c versus taxa D_B de difusão das partículas B , para $D_A = 0.5$ e $\rho = 1$. Curva superior: TCM 1 sítio; curva inferior: TCM de dois sítios; pontos: simulação.

Tab. 5.1: Taxa de recuperação crítica r_c nas aproximações de 1 e 2 sítios, comparadas com a simulação.

D_A	D_B	$r_c(1\text{-sítio})$	$r_c(2\text{-sítios})$	$r_c(\text{sim})$
0.5	0.25	0.5420	0.411	0.2325(10)
0.5	0.5	0.5771	0.429	0.1921(5)
0.25	0.5	0.5144	0.368	0.1585(3)

$[(a_c + 1)(b_c + 1)]$.

Um aspecto importante do modelo é a anti-correlação entre as variáveis a e b (quantidade de partículas A e B em um mesmo sítio). Para fazer uma análise quantitativa estudamos

$$\mathcal{Q}_A \equiv \frac{\langle ab \rangle}{\rho_B} - \rho_A = \frac{\text{cov}(a, b)}{\rho_B}. \quad (5.1)$$

No ponto crítico ($\rho_B \rightarrow 0$), $\mathcal{Q}_A$ é o excesso de densidade de partículas A em um sítio que contém uma partícula B . Na aproximação de 1 sítio encontramos $\mathcal{Q}_A = -0.583, -0.298$ e -0.089 , para $D_A = D_B = 0.2, 1$ e 5 , respectivamente, em seus pontos críticos. Isto indica que as espécies são anti-correlacionadas e que a magnitude dessa correlação diminui à medida que a taxa de difusão cresce, como esperado. Este efeito é ainda maior na aproximação de dois sítios, onde, por exemplo, no ponto crítico para $D_A = D_B = 1$ $\mathcal{Q}_A = -0.447$. (Todos os resultados para $\rho = 1$). Valores similares são encontrados nas simulações. Na TCM de dois sítios vemos que a anti-correlação ab se estende inclusive para os sítios primeiros vizinhos de forma que $\langle a_j b_{j+1} \rangle / \rho_B - \rho_A = -0.444$ para os mesmos parâmetros escolhidos acima. Por outro lado as variáveis b_j e b_{j+1} mostram uma forte correlação positiva.

Uma vez que a difusão das partículas B é essencial para a sobrevivência do processo, seria intuitivo pensar que à medida que a taxa D_B é reduzida, a densidade crítica deveria aumentar (ao se fixar r), ou a taxa de recuperação crítica r_c diminuir (ao se fixar a densidade). Entretanto, a teoria de campo médio (em 1 ou 2 sítios) prevê diferente. Como mostrado na figura 5.2 a taxa de recuperação crítica exibe um mínimo em um valor pequeno D_B^* da taxa de difusão para B , mas para valores ainda menores começa a crescer novamente. Para $D_B > D^*$ o valor da taxa de recuperação crítica cresce sistematicamente até saturar no valor da função logística $r_c = \rho$. A figura 5.2 também mostra que r_c segue o mesmo comportamento qualitativo nas simulações, embora os valores numéricos são em geral menores.

A razão para o aumento de r_c para valores pequenos de D_B para está, na possibilidade de acúmulo de várias partículas em um mesmo sítio e na obrigatoriedade da conservação do número total de partículas. Quando $D_A \gg D_B$, podemos, ao invés de pensar nas partículas B , considerar os sítios ativos de um processo evoluindo sobre um fundo difusivo de partículas A . Suponha

por exemplo que, devido a uma flutuação, ocorra um acúmulo de partículas B em um sítio. Como elas não tem muita mobilidade, esse acúmulo terá um tempo de vida longo, desde que haja partículas A suficientes para manter a reação ativa. Devido ao rápido deslocamento das partículas A elas eventualmente atingirão o sítio ativo. Nele, a probabilidade de contaminação é muito maior do que a de qualquer outro evento, e a recém-chegada partícula A acabará se transformando em B . Esta amplificação contínua gera domínios compactos com alta densidade de partículas. Dependendo do valor relativo da taxa r em relação a D_B o aglomerado pode crescer também para os lados, ocupando sítios vizinhos (justificando a forte correlação positiva $\langle b_j b_{j+1} \rangle$ vista na TCM). Devido à flutuação, o processo de espalhamento torna-se supercrítico dentro do domínio.

A evolução temporal deste processo de aglomeração depende da dinâmica das paredes entre os domínios de alta e baixa densidade local. Embora isso não tenha sido estudado de forma sistemática, podemos conjecturar que os aglomerados de alta densidade tendem a crescer até que a densidade local de A 's nas suas vizinhanças caia abaixo de um valor limite. Este valor limite depende não só da densidade total ρ que é fixa, mas também do tamanho total de todos os aglomerados ativos (que consomem as partículas A do sistema!). Justifica-se daí a correlação de longo alcance presente no modelo.

Tal processo de amplificação poderia levar a uma transição descontínua, pelo menos para $d > 2$, mas em uma ou duas dimensões não foi suficiente. Já foi observado em [2] que o tamanho do domínio ativo sobrevivente cresce quase linearmente com $\rho - \rho_c$ (ou inversamente com $r - r_c$).

A teoria de campo médio de 1 sítio, surpreendentemente, já mostra que, quando $D_B < D^*$ a distribuição marginal de probabilidades $P(b)$, embora

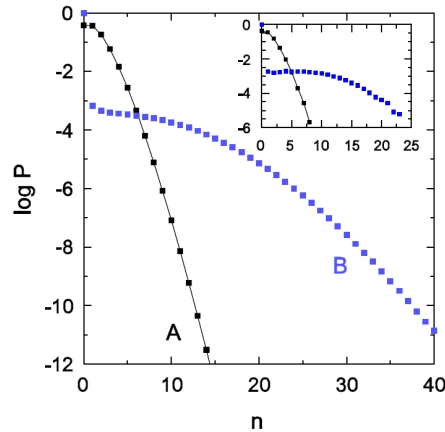


Fig. 5.3: Distribuições de probabilidade marginal (1 sítio) variando com o número A ou B de partículas. Gráfico principal: TCM de 1 sítio, $\rho = 1, r \sim r_c = 0.688, D_A = 0.5$ e $D_B = 0.02$. Detalhe: resultados de simulações com $r=0.5$ e os mesmos valores de ρ, D_A e D_B , tamanho do sistema $L = 500$.

pequena para valores de $b \geq 1$, decai muito lentamente ao aumentar b .

As distribuições $P(a)$ e $P(b)$ são comparadas na figura 5.3 (para o caso $\rho = 1, r \sim r_c = 0.668, D_A = 0.5, D_B = 0.02$). Embora (globalmente) quase todas as partículas são da espécie A , $P(b)$ decai muito lentamente para grandes ocupações ao passo que $P(a)$ segue aproximadamente uma distribuição de Poisson. Também vemos na figura 5.3 (detalhe) que distribuições similares são observadas nas simulações, no regime $D_B \ll D_A$. Isso sugere que os aglomerados devem formar ilhas, com sítios ocupados por um número variável de partículas B . Se a ocupação dentro das ilhas cair do centro para as beiradas, podemos imaginar que as interfaces entre regiões ativas e inativas são razoavelmente suaves e as simulações mostram que de fato não há 'grandes paredes'.

É interessante considerar por um momento o caso $D_A \rightarrow \infty$, com todas as outras taxas igual a unidade. Neste limite, entre cada evento do tipo contaminação, recuperação ou difusão de B s haverão tantos eventos de difusão de A s que estas sempre alcançarão uma distribuição uniforme na rede. A probabilidade de haver exatamente a_j partículas no sítio j segue uma distribuição de Poisson com parâmetro $\rho_A = \rho - \rho_B$. As taxas de infecção, recuperação e difusão de B s serão independentes das suas posições, de forma que o processo é caracterizado pelo número total N_B de partículas B . Agora N_B é um processo markoviano com taxas de transição $W(N_B \rightarrow N_B - 1) = rN_B$ e $W(N_B \rightarrow N_B + 1) = N_B\rho(1 - \rho_B/\rho)$, que é processo de contato em um grafo completo de $N = \rho L^d$ sítios com taxa de criação ρ e taxa de aniquilação r . Deste último, sabe-se que o processo sofre uma transição de fase contínua para o estado absorvente em $\rho = r$, cujos expoentes são previstos pela teoria de campo médio. Portanto, para o PED, mesmo se a transição fosse descontínua para o caso $D_A > D_B$, ela deveria se tornar contínua à medida que $D_A \rightarrow \infty$.

Finalmente destacamos que as aproximações de campo médio com 1 e 2 sítios prevêem uma transição de fase contínua independente da relação entre D_A e D_B [18]. (Note que estas aproximações são bastante sensíveis às taxas de difusão). Embora não seja incomum que estas aproximações prevejam uma transição descontínua quando de fato ela é contínua (como no caso do segundo modelo de Schlögl [?]), não há exemplos conhecidos em que tanto a aproximação de um sítio quanto a de dois sítios errem ao prever uma transição *contínua*.

5.2 Simulações Monte-Carlo

Foram realizadas várias simulações do PED em anéis com $L = 200, 500, 1000, 2000$ e 4000 sítios, empregando o método QS. O número M de configurações salvas variou de 1000, para $L = 200$, até 100 para $L = 4000$. A probabilidade reposição de uma configuração de estado variou de 10^{-4} a 10^{-5} , sendo menor para os sistemas maiores. Duas escalas de tempo são

relevantes na escolha destes parâmetros. A primeira é o tempo médio de residência de uma configuração na lista, $\tau_L = M/p_{rep}$. A segunda é o tempo médio de vida entre duas tentativas de transição para o estado absorvente, τ . Nossos estudos mostraram que os resultados serão independentes da escolha de p_{rep} desde que $\tau/\tau_L < 1$. Isto parece estar associado à necessidade de se preservar configurações visitadas antes da última tentativa de transição para o estado absorvente. Claro que é possível tomar τ_L arbitrariamente grande reduzindo-se p_{rep} , mas isso prolongaria a memória do estado inicial e conseqüentemente o tempo de relaxação necessário.

Inicialmente metade das partículas são do tipo A e metade são do tipo B. Elas são distribuídas aleatoriamente e independentemente sobre os sítios, de forma que a distribuição a e b em um dado sítio é essencialmente Poissoniana com média $1/2$. Cada realização (ensaio) roda por um tempo máximo de até 8×10^8 unidades de tempo. Vale notar que $\Delta t = 1/W_T$ (ver sec. 4.3) é da ordem de $1/N_A N_B$, portanto são necessários milhares de passos Monte Carlo para completar uma única unidade de tempo. Os resultados apresentados aqui representam médias sobre 4-8 realizações completas independentes para cada conjunto de valores D_A, D_B, r . ($\rho = 1$ e $\lambda = 1$ sempre), constituindo portanto um imenso esforço computacional. As médias são tomadas sempre no regime QS, após o transiente inicial, cuja duração cresce com o tamanho da rede. O algoritmo nos permite acumular histogramas do tempo em que o sistema teve exatamente $1, 2, \dots, n$ partículas B . Estes histogramas são utilizados para avaliar a densidade média de partículas B , $\bar{\rho}_B$, e a razão dos momentos [35]

$$m = \frac{\langle b^2 \rangle}{\langle b \rangle^2}. \quad (5.2)$$

A taxa de recuperação crítica r_c (ρ, D_A, D_B) foi determinada utilizando-se as relações de escala para tamanho finito. Próximo ao ponto crítico, a densidade estacionária de partículas B deve seguir $\rho_B \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ e o tempo médio de sobrevivência (entre tentativas de transição para o estado absorvente) obedece $\tau \sim L^z$. Para investigar as características nos três regimes do processo ($D_A = D_B$, $D_A > D_B$ e $D_A < D_B$), três casos são estudados com maior detalhe: $D_A = D_B = 0.5$; $D_A = 0.5, D_B = 0.5$ e $D_A = 0.25, D_B = 0.5$ (resultados resumidos na tabela 5.2).

Consideremos inicialmente o caso $D_A = 0.5, D_B = 0.25$. Como já foi sugerido que a transição de fase seria descontínua para $D_A > D_B$, é interessante estudar o comportamento do parâmetro de ordem ρ_B como função da taxa de recuperação r . Na figura 5.4 nós plotamos as estimativas do parâmetro de ordem no limite $L \rightarrow \infty$, baseado nos nossos dados para tamanhos $L = 500-4000$. (A extrapolação só pode ser feita com confiança até $r = 0.22$ com os dados que temos em mãos.) Aparentemente o parâmetro de ordem decai *continuamente* a zero quando $r \rightarrow r_c = 0.232$. Baseados apenas nesses dados não podemos excluir a possibilidade uma transição descontínua bem fraca, mas uma transição contínua parece uma interpretação mais na-

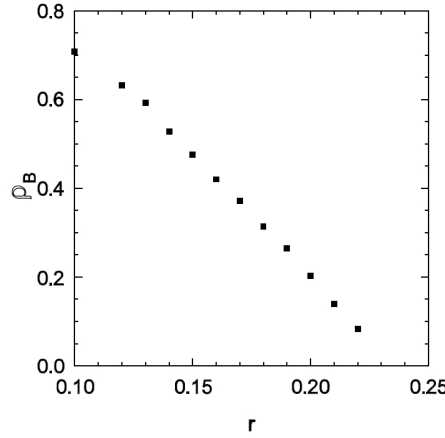


Fig. 5.4: Parâmetro de ordem ρ_B versus taxa de recuperação para $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$ e $\rho = 1$. Os pontos representam o limite para o tamanho infinito baseados nos nossos dados para tamanhos $L = 200-4000$.

tural. A evidência de uma transição contínua é reforçada pela observação do comportamento de escala como discutiremos a seguir.

Dados para o parâmetro de ordem quase-estacionário ρ_B versus o tamanho do sistema L são exibidos em escalas logarítmicas na figura 5.5a. Os dados para $r = 0.231$ curvam para cima, enquanto para $r = 0.234$ curvam para baixo. Isso nos leva a uma estimativa $r_c = 0.2325(10)$. Devido à pequena dispersão nesses valores vemos uma boa evidência de um comportamento do tipo lei de potência, característico da relação de escala esperada em um ponto crítico. Da mesma forma, os dados para o tempo de vida médio QS (veja figura 5.5b) mostram uma escala de lei de potência para $r \simeq r_c$ e uma curvatura significativa fora deste ponto.

Repetindo os procedimentos acima para os outros dois casos, chegamos às razões para os expoentes críticos $\beta/\nu_\perp$ e $z = \nu_\parallel/\nu_\perp$. na tabela 5.2. Para obter uma estimativa direta de $\nu_\perp$, nós estudamos o parâmetro de ordem na vizinhança do ponto crítico r_c para vários tamanhos de rede. Isso nos permite determinar o expoente de correlação $\nu_\perp$, usando a relação de escala para tamanho finito

$$\rho_b(\Delta, L) \propto L^{-\beta/\nu_\perp} \mathcal{F}(\Delta L^{1/\nu_\perp}) \quad (5.3)$$

onde $\Delta = r - r_c$ e $\mathcal{F}$ é uma função de escala. Isto implica que

$$\left| \frac{\partial \ln \rho_B}{\partial r} \right|_{r_c} \propto L^{1/\nu_\perp} \quad (5.4)$$

Dickman e Leal da Silva [35] mostraram que a razão entre momentos m é também bastante útil na caracterização do comportamento crítico. Nossos

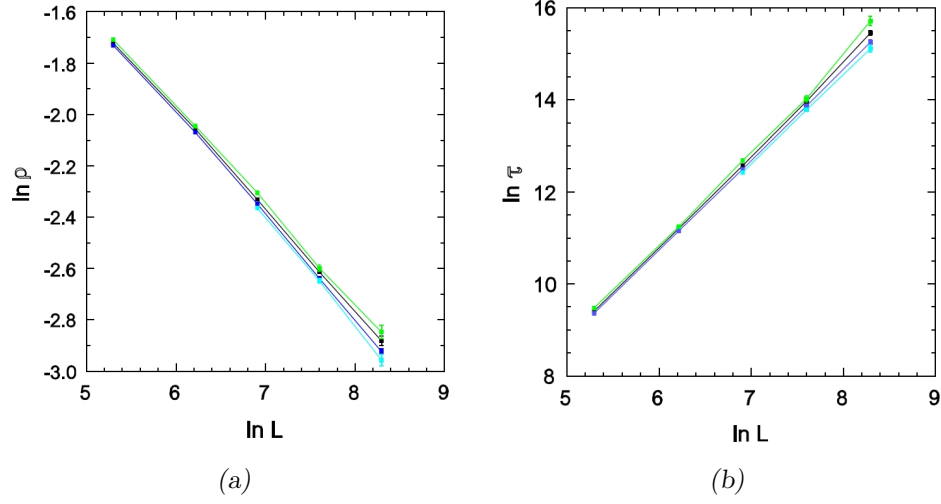


Fig. 5.5: a) Parâmetro de ordem ρ_B versus tamanho do sistema L , para os mesmos parâmetros da figura 5.4. De cima para baixo: taxa de recuperação $r = 0.231, 0.232, 0.233, 0.234$. b) Tempo de vida médio τ versus tamanho do sistema L .

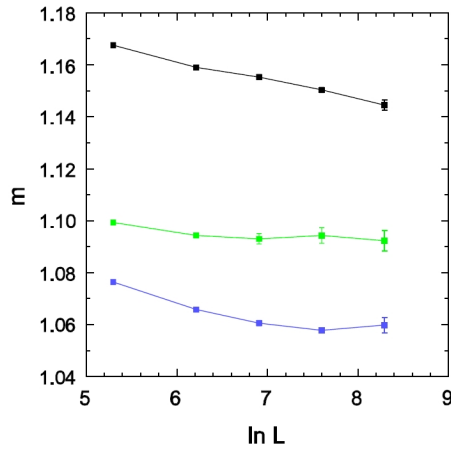


Fig. 5.6: Razão entre momentos m versus o tamanho do sistema (no ponto crítico). De cima para baixo: $D_A = 0.5, D_B = 0.25$; $D_A = D_B = 0.5$; $D_A = 0.25, D_B = 0.5$.

Tab. 5.2: Parâmetros críticos para o PED em uma dimensão

D_A	D_B	$\beta/\nu_\perp$	z	$\nu_\perp$	m
0.5	0.25	0.404(10)	2.01(4)	2.3(3)	< 1.15
0.5	0.5	0.192(4)	2.02(4)	2.0(2)	1.093(10)
0.25	0.5	0.113(8)	1.6(2)	1.77(3)	1.06(1)

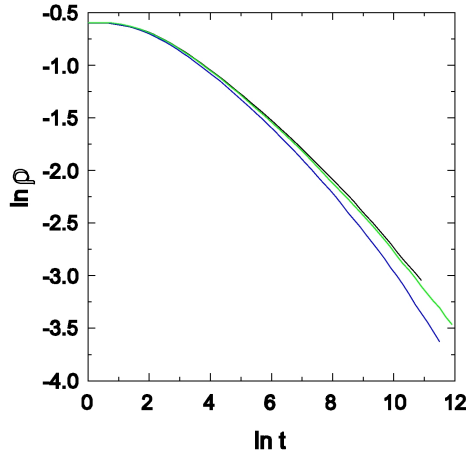


Fig. 5.7: Estudos de decaimento inicial para $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$, $\rho = 1$ e r variando de 0.237 a 0.232 (de cima para baixo). Após a relaxação inicial o sistema mostra um comportamento de lei de potência. O parâmetro crítico estimado é $r_c \sim 0.2325$. $\theta \cong 0.5$

resultados, exibidos na figura 5.6, permitem estimar seu valor para o limite $L \rightarrow \infty$ exceto no caso $D_A = 0.5, D_B = 0.25$.

Como uma forma de checar nosso procedimento para a determinação de r_c , nós também fizemos estudos de decaimento inicial [36, 37]. Nestes estudos a evolução do parâmetro de ordem é acompanhada durante um longo tempo, utilizando a mesma condição inicial dos estudos QS. Devido ao grande tamanho do sistema usado aqui, o processo não entra no estado absorvente durante a escala de tempo da simulação. Nesta etapa as simulações envolveram 10^6 sítios durante um tempo máximo de 10^7 . O comportamento crítico esperado para o decaimento é $\rho_B \sim t^{-\theta}$. Em um gráfico semi-log no tempo, o comportamento de lei de potência prevê uma reta apenas no ponto crítico (cuja inclinação é θ), portanto identificando desvios de curvatura (positiva e negativa) conseguimos restringir r_c ao intervalo $[0.231, 0.239]$. Esse resultado, apresentado na 5.7, é consistente porém menos preciso do que o obtido pelo método QS. Análise dos dados para $t \geq 5 \times 10^5$ fornece $\theta \simeq 0.5$.

Gráficos da evolução espaço-temporal do processo nos permitem visualizar melhor o comportamento distinto das classes $D_A > D_B$ e $D_A < D_B$. As figuras 5.8 e 5.9 trazem a evolução de uma rede com densidade total 1 e 4000 sítios. As linhas negras representam a densidade local de partículas B (média sob um bloco de 50 sítios) e as linhas claras são o análogo para as partículas A . A figura 5.8 é uma seqüência típica para os perfis de densidade para $D_A = 0.5$ e $D_B = 0.25$, com $r = 0.22$. O intervalo do eixo vertical é de $\Delta t = 50000$ unidades de tempo, com o tempo crescendo para baixo. Destaca-se a evolução bastante lenta das regiões com $\rho_B > 0$, que são na verdade muito esparsas. A redução de ρ_A nestas regiões é também evidente.

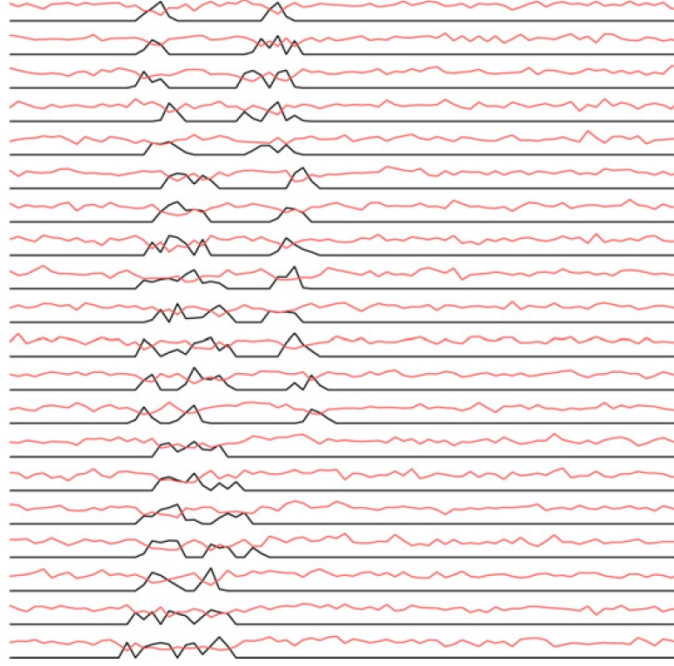


Fig. 5.8: Evolução temporal do PED no caso $D_A = 0.5, D_B = 0.25$.

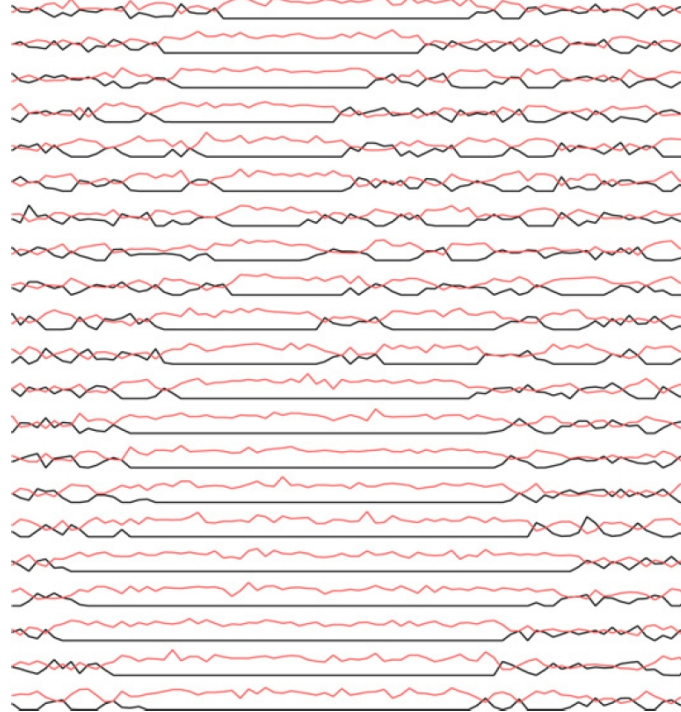


Fig. 5.9: Evolução temporal do PED no caso $D_A = 0.25, D_B = 0.5$.

A figura 5.9 é uma representação similar para o caso $D_A = 0.25$ e $D_B = 0.5$, com $r=0.16$ e $\Delta t = 10000$. Aqui a densidade B é mais uniformemente distribuída e a evolução se dá de maneira bem mais rápida. Encerramos essa seção com a observação de que o PED é caracterizado por flutuações bastante incomuns, de grande amplitude e com um tempo de vida longo. Além disso, a conservação de partículas introduz uma correlação de longo alcance. Em modelos como o processo de contato, um tamanho $L = 1000$ já é suficiente para se obter resultados de alta precisão, mas no caso do PED a convergência é muito mais lenta (ex. fig. 5.6) e os efeitos de tamanho finito muito mais pronunciados (por isso usamos $L = 4000$).

5.2.1 Simulações quase-estacionárias em 2d

Todos os estudos realizados em 1d não mostraram qualquer sinal de descontinuidade para as 3 classes de universalidade presentes no PED. Será que a transição descontínua prevista em [8] para o caso $D_A > D_B$ aconteceria somente para $d \geq 2$? Para responder a essa pergunta realizamos também simulações QS bidimensionais, todas com $D_A = 4$ e $D_B = 1$, objetivando caracterizar a natureza desta transição em 2d (não tanto determinar com precisão os expoentes críticos).

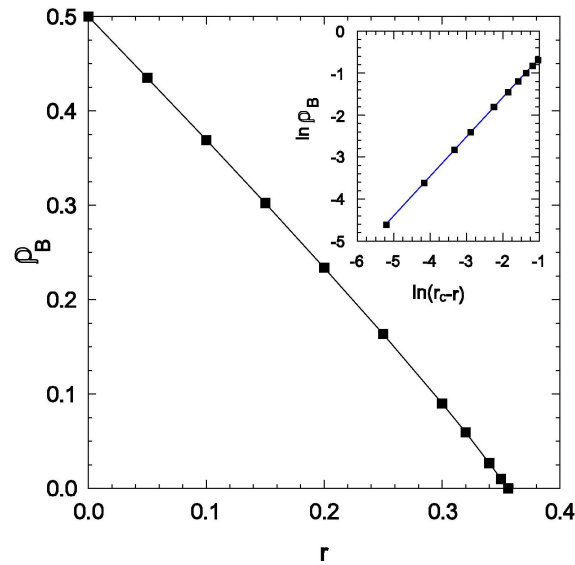


Fig. 5.10: Parâmetro de ordem ρ_B versus taxa de recuperação para $D_A = 4$, $D_B = 1$, e $\rho = 0.5$ no PED bidimensional. O ponto no eixo r a melhor estimativa para o ponto crítico $r_c = 0.3555(5)$. Detalhe: ρ_B versus $r_c - r$ em escala logarítmica. A inclinação da reta é 0.94.

O algoritmo usado é o mesmo apresentado na seção 4.3 com pequenas modificações para difusão em 2 dimensões. O modelo é simulado em re-

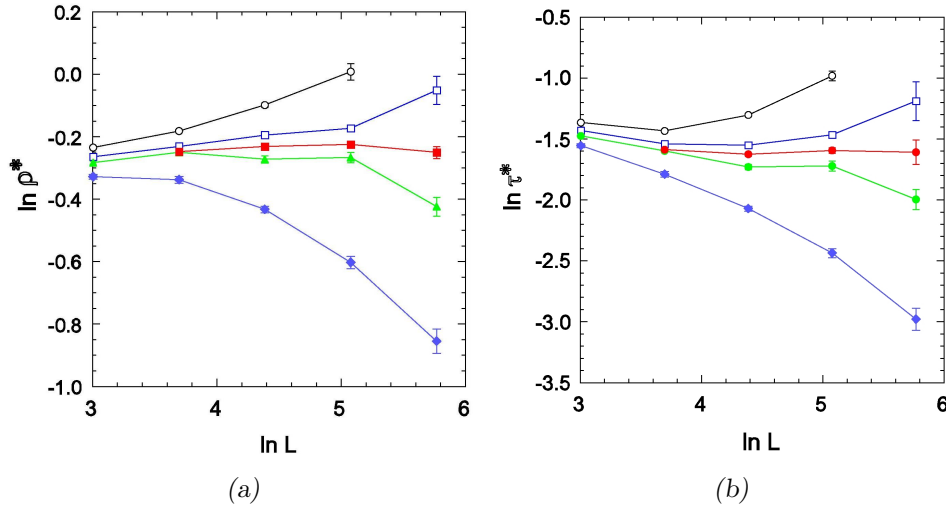


Fig. 5.11: a) Parâmetro de ordem reescalado $\rho_B^* = L^{\beta/\nu} \bar{\rho}_B$ versus tamanho linear do sistema L ; $\beta/\nu = 0.885(10)$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $\rho = 1$. De cima para baixo as taxas de recuperação são: $r = 0.735, 0.738, 0.739, 0.740, 0.745$. b) Tempo de vida QS reescalado $\tau^* = L^{-z} \tau$ versus tamanho do sistema. $z=1.9$ e os outros parâmetros são os mesmos de a).

des quadradas periódicas ($L \times L$ sítios) com $L = 40, 80, 160, 320, 640$. A distribuição inicial é Poissoniana com metade de ocupação A e metade B . Os resultados são obtidos das médias de 10 realizações independentes, cada uma durando 10^6 unidades de tempo, com uma porção de relaxação inicial descartada que variou de 10^4 a 10^5 dependendo do tamanho. O número de configurações salvas na lista usada para o procedimento QS variou de 100 para $L = 40$ até 10 para $L = 640$. O valor da probabilidade de reposição de um estado da lista variou de 10^{-3} a 10^{-4} à medida que L crescia.

A figura 5.10 mostra os resultados para o parâmetro de ordem $\bar{\rho}_B$, com densidade total da rede $\rho = 0.5$ (Os resultados para $\rho = 1$ são qualitativamente similares). Neste gráficos só estão plotados valores para os quais não há efeitos de tamanho finito; por exemplo, para $r = 0.35$ $\bar{\rho}_B = 0.00994(5)$ e $0.00998(10)$ para $L = 320$ e 640 respectivamente. Os resultados mostram que $\rho_B \rightarrow 0$ continuamente à medida que r tende a r_c ; os dados excluem efetivamente um salto maior que 0.01. A análise via escala de tamanho finito gera uma taxa de recuperação crítica de $r_c = 0.3555(5)$ para $\rho = 0.5$. No detalhe da mesma figura há um gráfico de $\bar{\rho}_B$ vs. $r_c - r$ em escala logarítmica, mostrando comportamento do tipo lei de potência com expoente $\beta = 0.94(2)$. Um ponto interessante é que o valor de β para o caso correspondente unidimensional é $0.93(14)$. Portanto, tanto em uma quanto em duas dimensões, β é muito próximo à previsão da TCM que é igual a 1 para $D_A > D_B$.

Tab. 5.3: Parâmetros críticos para o PED em duas dimensões no caso $D_A > D_B$.

ρ	r_c	$\beta/\nu_\perp$	z	β	$\nu_\perp$	m
0.5	0.3555(5)	0.87(4)	1.88(8)	0.94(2)	1.03(3)	1.34(3)
1.0	0.7390(5)	0.89(5)	1.90(8)	0.96(3)	1.10(4)	1.30(3)

Assim como no caso unidimensional, o argumento para uma transição contínua é fortalecido pela observação das leis de escala $\bar{\rho}_B \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ e $\tau \sim L^z$, no ponto crítico. A figura 5.11a mostra o parâmetro de ordem reescalado $\rho_B^* = L^{\beta/\nu} \bar{\rho}_B$ versus o tamanho do sistema $L \times L$, utilizando para isso nossa melhor estimativa para o expoente crítico $\beta/\nu = 0.885(10)$. Ao lado, está plotado o tempo de vida QS reescalado $\tau^* = L^{-z} \tau$, utilizando o expoente crítico $z = 1.9$. Fica evidente o comportamento de escala sobre o ponto crítico enquanto fora deste, os dados curvam fortemente para cima (subcrítico) ou para baixo (supercrítico).

5.2.2 Simulações quase-estacionárias em uma transição de fase descontínua

Uma questão importante é saber se o método quase-estacionário pode ser usado para identificar transições descontínuas. Para este fim recorreremos ao modelo de criação por tripletos (MCT) unidimensional, onde tal transição ficou provada para valores do coeficiente de difusão $D > 0.9$.

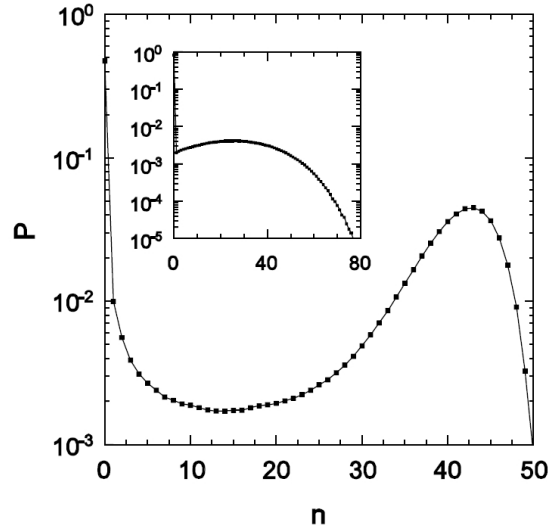


Fig. 5.12: Gráfico principal: histograma de ocupação para o MCT com $D = 0.95$ e $\lambda = 10.11$. Detalhe: histograma de ocupação de B 's para o PED com $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$, $r = 0.233$.

Inicialmente, a existência de transições descontínuas em sistemas unidimensionais foi questionada [38]. Entretanto, a transição descontínua foi reafirmada por estudos posteriores [39] e [40]. Em [27, 41] mostrou-se que a distribuição quase-estacionária de probabilidades deve ser bimodal nas vizinhanças de uma transição descontínua para o estado absorvente. Em [18], a simulação quase-estacionária é aplicada ao MCT. A descontinuidade da transição fica evidente e, assim como previsto em [27], a distribuição das probabilidades de ocupação tem um caráter bimodal. A figura 5.12 compara os resultados da simulação QS no MCT e no PED. Fica clara a distribuição bimodal no MCT enquanto no PED não há nenhum sinal de bimodalidade e portanto não deve haver transição descontínua.

5.2.3 Histerese

A marca clássica de uma transição descontínua é a histerese: iniciando em uma dada fase (I) e variando lentamente o parâmetro de controle, o sistema não mostra nenhuma mudança imediata ao cruzar o ponto limite para a outra fase, ao invés disso segue uma continuação metaestável da fase I até que uma flutuação forte provoque uma mudança rápida para a fase estável II. Ao reverter lentamente o processo, o sistema toma uma extensão metaestável da fase II até que uma flutuação o faça decair para a fase I. Este cenário familiar dos estudos de equilíbrio precisa ser ligeiramente modificado quando se lida com transições para o estado absorvente, já que o sistema não pode escapar da fase absorvente (vácuo). Bideaux, Boccaro e Chaté [42] mostraram que quando a transição é descontínua, adicionar uma fraca fonte de atividade converte a fase absorvente em uma fase de baixa atividade (II), distinta da fase de alta atividade (I). É então possível observar um ciclo de histerese entre as fases I e II ao se variar lentamente o parâmetro de controle nas vizinhanças da transição. Esta abordagem foi usada para demonstrar uma transição de fase descontínua em um tipo de autômato celular probabilístico [42] e no modelo de criação por tripletos [43].

No caso do PED, impomos uma fraca fonte de atividade adicionando ao conjunto de eventos possíveis o processo $A \rightarrow B$ com taxa $h \ll 1$. Isso quer dizer que cada partícula A é susceptível a uma contaminação espontânea, independente do número de partículas A e B presentes no mesmo sítio. O estado livre de B s não é mais absorvente e podemos simular o modelo diretamente, sem recorrer ao método quase-estacionário.

Dado um valor inicial da taxa de recuperação r , e uma distribuição inicial de partículas, espera-se um tempo τ de relaxação para em seguida acumular-se dados durante um período de 4τ , suficiente para determinar a densidade estacionária média $\rho_B(r)$. Em seguida, soma-se um δr a taxa recuperação e, continuando a partir da distribuição final anterior, espera-se novamente o sistema relaxar para então determinar a nova densidade estacionária. Este procedimento é repetido até que r alcance um valor limite superior pré-

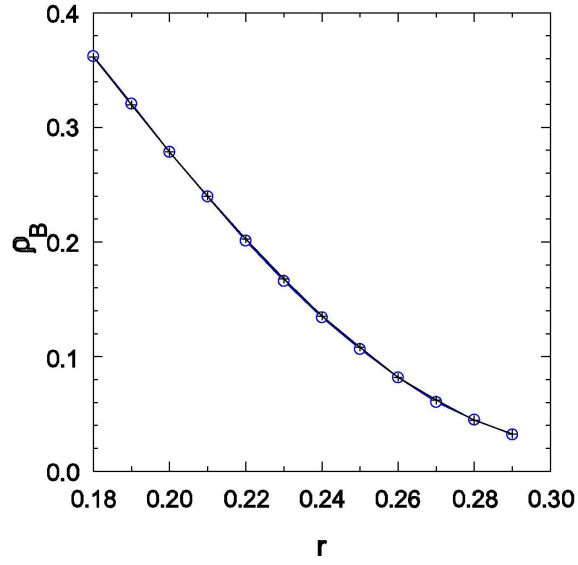


Fig. 5.13: Ausência de histerese para o PED em 1d. Média sobre 125 ensaios em $L = 4000$ com $\rho = 1$, $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$ e $h = 10^{-5}$. Símbolos: + aumentando r ; o diminuindo r .

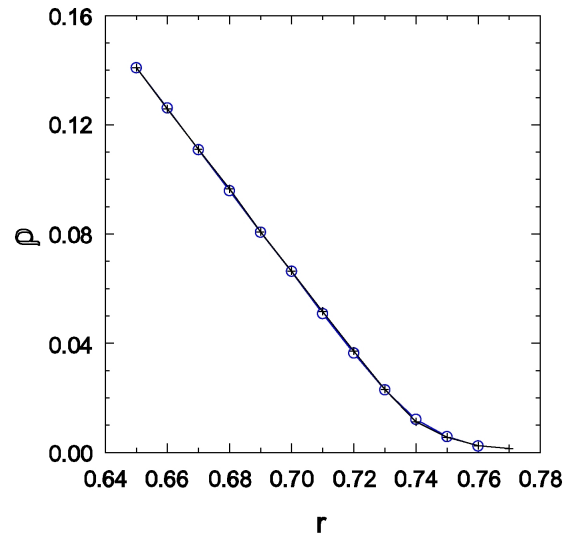


Fig. 5.14: Ausência de histerese para o PED em 2D. Ensaio em redes bidimensionais com $L = 320$, $\rho = 1$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $h = 10^{-5}$. Símbolos: + aumentando r ; o diminuindo r .

estabelecido. Continuando da configuração final de partículas, o valor da taxa de recuperação começa agora a ser subtraído de δr e o sistema evolui no sentido inverso até que r retome seu valor inicial, sempre aguardando-se o período de relaxação toda vez que a taxa é alterada. O caminho completo de ida e volta compõe um ensaio. A fim de se construir uma estatística confiável, vários ensaios são realizados cada vez partindo-se de uma distribuição inicial diferente (mas com a mesma densidade total e características poissonianas).

Em uma dimensão foram feitas simulações em anéis de 2000 e 4000 sítios, usando $h = 10^{-5}$ e τ variando entre 10^4 e 10^5 . Nestes estudos a densidade total de partículas é 1, $D_A = 0.5$ e $D_B = 0.25$, enquanto r varia lentamente de 0.18 a 0.29, que inclui o valor de transição $r_c = 0.2325(10)$. O resultado final após 125 ensaios está apresentado na figura 5.13.

Também se investigou o caso bidimensional, usando $D_A = 4$, $D_B = 1$, $h = 10^{-5}$ e densidade total de partículas igual a 1. Nenhum sinal de histerese foi encontrado para sistemas de 2 dimensões com $L = 160$ e 320 , com τ variando de 10^3 a 10^4 . A figura 5.14 mostra este resultado. Note que a medida que r é variado, o parâmetro de ordem $\bar{\rho}_B$ varia suavemente de 0.15 até $\approx 10^{-3}$. Com $h = 10^{-5}$ e $r = 0.77 > r_c$, o parâmetro de ordem estacionário $\bar{\rho}_B \rightarrow 1.4 \times 10^{-3}$ para tamanhos de sistemas grandes. Portanto, qualquer descontinuidade em ρ_B , se existisse, deveria ter uma amplitude $\leq 10^{-3}$.

A figura 5.15 destaca duas etapas de relaxação em uma simulação de histerese para $L = 2000$ (1d) no caso $D_A > D_B$. Em 5.15a vemos o que acontece imediatamente após a mudança da taxa r de 0.25 para 0.26. O novo valor da densidade estacionária (0.081) foi atingido após aproximadamente 11500 unidades de tempo. Já em 5.15b o sistema evolui no caminho de volta do ciclo imediatamente após a taxa mudar de 0.27 para 0.26. Mesmo depois de 100000 passos o valor estacionário ainda não foi atingido, alcançando apenas 0.079. A razão está na divergência do período de relaxação próximo ao ponto crítico quando a densidade de atividade inicial é muito baixa (0.05). Destaca-se portanto uma forte dependência do tempo de relaxação com a densidade inicial de atividade que pode gerar resultados falso-positivos caso os parâmetros de tempo ($\tau, 4\tau$) não forem ajustados cuidadosamente, para cada conjunto de valores ($r, \rho(0)$).

Essa pode ser a razão da aparente discordância entre os resultados deste trabalho e aqueles publicados em [8], no qual são realizadas simulações de histerese para um sistema bidimensional com taxas de infecção e recuperação fixas, $D_A/D_B = 8$, variando-se a densidade total ρ . Como há uma única linha de transição no plano $\rho - r$, a natureza da transição é a mesma se variamos r ou ρ . As simulações de Oerding *et al* de fato mostram que o parâmetro de ordem decresce *continuamente* a zero quando $\rho \searrow \rho_c$. Quando ρ aumenta o gráfico do parâmetro de ordem versus ρ exibe um patamar com $\rho_B \approx 0$ e, em algum ponto que varia consideravelmente de ciclo para ciclo, ρ_B começa a crescer rapidamente até atingir o valor correspondente no braço

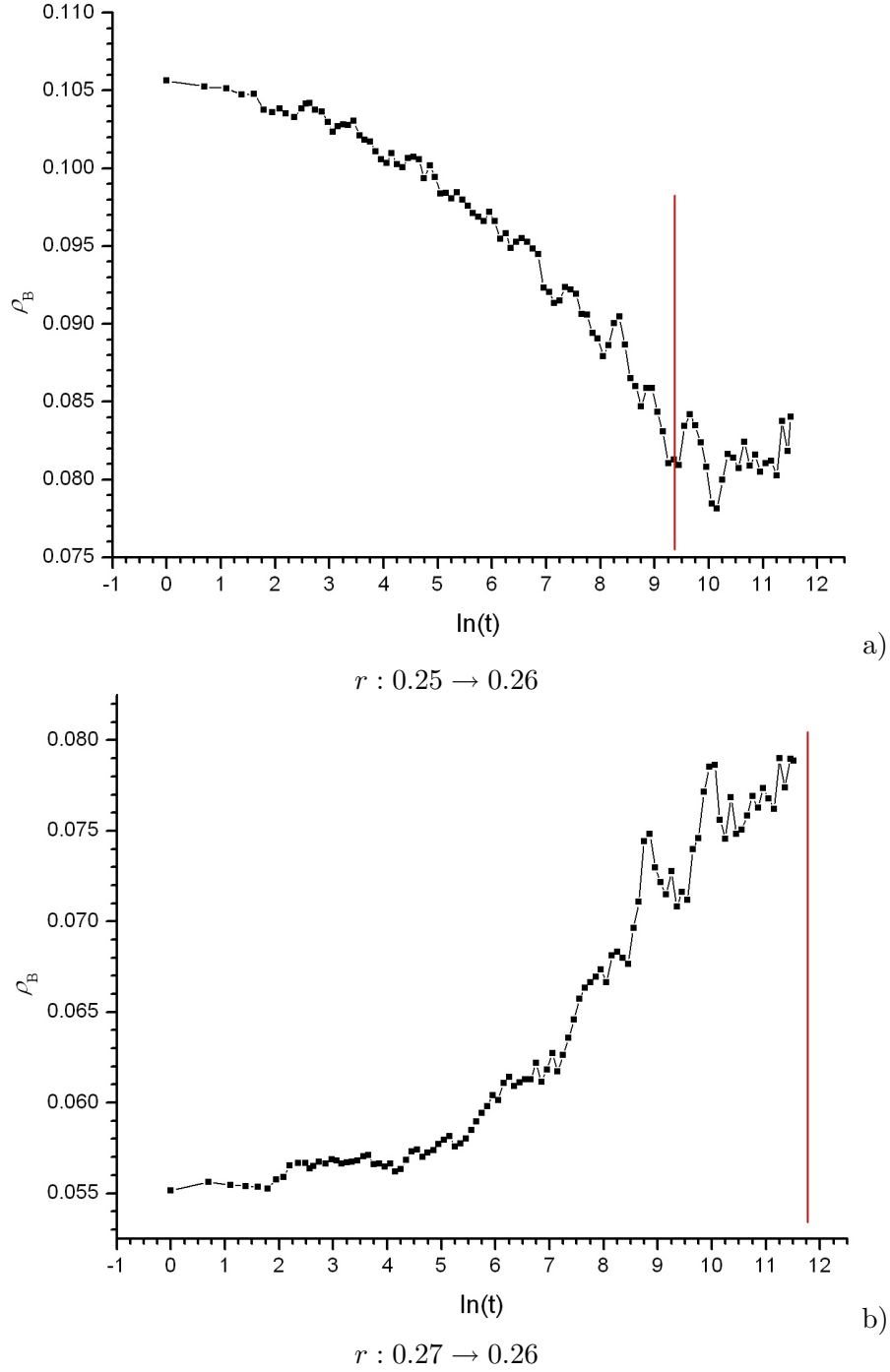


Fig. 5.15: Etapas de relaxação ao estado estacionário para o PED quando se muda o valor da taxa de recuperação. Parâmetros: $L = 2000$, $D_A = 0.5$ e $D_B = 0.25$, 200 ensaios. Em a) r passa de $0.25 \rightarrow 0.26$ e em b) $0.27 \rightarrow 0.26$. Quando a densidade inicial de atividade é baixa (0.05) o tempo de relaxação é muitas vezes maior.

descendente. O loop de histerese atribuído ao PED em [8] é triangular e não retangular como observado para o modelo de criação por tripletos TCM [43], sendo portanto consistente com uma variação contínua do parâmetro de ordem em função de ρ ou r .

5.2.4 Dependência da condição inicial como indicador de transição descontínua

Nesta seção apresentamos um método alternativo simples para identificar a natureza de uma transição (contínua ou descontínua). A idéia é que, próximo ao ponto crítico, em uma transição descontínua, a evolução do sistema depende fortemente da configuração inicial, e no caso de uma transição contínua o sistema alcançará o mesmo estado estacionário independente da condição inicial. Para ilustrar essa idéia, voltemos ao modelo de criação por tripletos (MCT), que tem uma transição descontínua conhecida para altas taxa de difusão D . Os resultados exibidos na figura 5.16 mostram que, no caso $D = 0.98$, onde a transição ocorre a uma taxa de reprodução $\lambda = 9.6$, o estado estacionário ativo ($\rho \simeq 0.83$) é alcançado partindo-se de uma densidade inicial $\rho_i = 1$ enquanto para $\rho_i \leq 0.3$ o sistema evolui rapidamente para o estado absorvente (fig.5.16).

Utilizando a mesma idéia, realizamos estudos deste tipo para o processo de epidemia difusiva no caso $D_A > D_B$ ¹. Os estudos de decaimento inicial nas proximidades do ponto crítico mostraram que, *independentemente* da densidade ou distribuição inicial das partículas, o mesmo estado quase-estacionário é atingido. Este resultado é mais uma evidência de que não há descontinuidade na transição de fase para o regime $D_A > D_B$, em sistemas unidimensionais ou bidimensionais.

Na figura 5.17, quando $\rho_B(0) \simeq 0.1$, também podemos ver um fenômeno chamado 'escala de tempo curto' já previsto por Wijland *et al* [26] e estudado por Fulco *et al* [11] no sistema crítico $D_A = D_B$. Quando a densidade inicial de B's é baixa, em tempos muito curtos, há uma explosão inicial da população ativa para só então começar a relaxar lentamente para o valor estacionário. Durante essa fase é possível determinar o expoente crítico θ'

$$\rho_B(t) = \rho_B(0)t^{\theta'}, \quad \text{com } t_{micro} < t < t_{cross}. \quad (5.5)$$

Na equação acima t_{micro} representa tempos microscopicamente pequenos e t_{cross} é o tempo no qual há uma mudança de regime e a densidade inicia seu decaimento. A noção de tempo microscópico vem da definição do tempo para a realização de um único evento, feita na seção 4.1, $\Delta t = 1/W_T$, o que representa um acréscimo de aproximadamente $1/N$ por passo de Monte-Carlo. Em um sistema de 4000 partículas, mudanças globais poderiam acontecer a cada 4 unidades inteiras de tempo (na média).

¹ Obviamente, nesse tipo de estudo não se pode empregar o método quase-estacionário

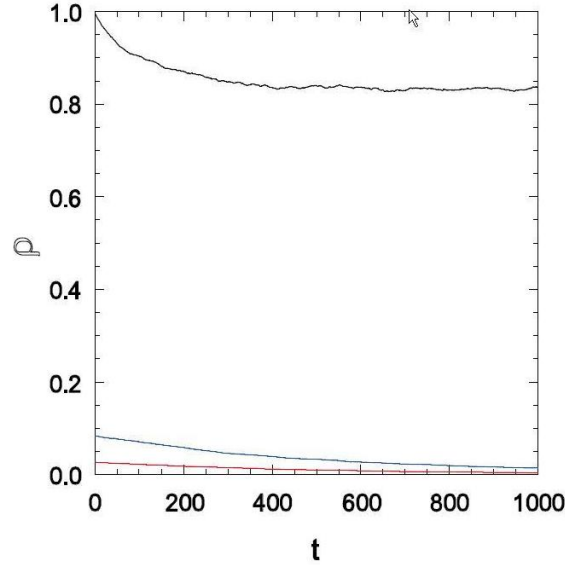


Fig. 5.16: Evolução da densidade de partículas em ensaios do MCT para $D = 0.98$, $\lambda_c = 9.6$ e $L = 10^4$ sítios. Densidade inicial (de cima para baixo): $\rho_i = 1, 0.083, 0.026$.

Wijland *et al* [26] previram que este expoente seria não universal, dependendo linearmente da correlação da distribuição inicial de partículas A , encontrando:

$$\theta' = \frac{2 - 9\Delta_\phi}{32}\epsilon \quad (5.6)$$

com $\Delta_\phi = \frac{1}{2\rho}[\langle \Delta n_a^2 \rangle - \langle n_a \rangle]$ ($D_A = D_B$). No entanto, os resultados simulacionais obtidos mostram que a relação deste expoente com a distribuição inicial é mais complexa. Quando a distribuição inicial é poissoniana $\Delta_\phi = 0$ e a equação 5.6 prevê $\theta = 1/16$, mas os valores encontrados na simulação são bem maiores. θ' é também fortemente influenciado pela densidade de atividade inicial $\rho_B(0)$, independente do grau de correlação das partículas A 's ou B 's.

Na figura 5.19, ao comparar a primeira e terceira curvas, fica claro que, mesmo para distribuições iniciais poissonianas, o expoente crítico θ' depende da concentração inicial de partículas B (e obviamente A).

5.3 Expansões em séries de potência

Tentamos também estudar a dinâmica do PED através de expansões sistemáticas em série como descrito na seção 4.4. O resultado da álgebra computacional é fiel ao cálculo analítico direto concluído até terceira ordem. Devido ao crescimento exponencial do número de termos envolvidos em cada geração (ordem de t), a quantidade de memória necessária por processo ultrapassava o limite do compilador (2 Gb) e portanto foi necessário

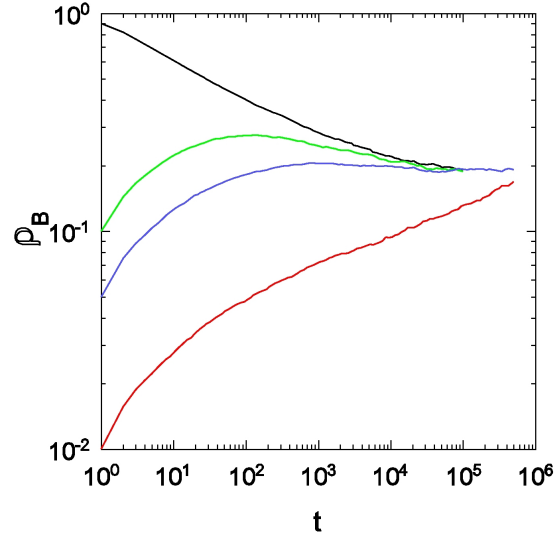


Fig. 5.17: Evolução do modelo PED em 1 dimensão (200 ensaios) com $L = 2000$, $D_A = 0.5$, $D_B = 0.25$ e $r = 0.20$. A densidade inicial de B's é, de cima para baixo: 0.9, 0.1, 0.05 e 0.01.

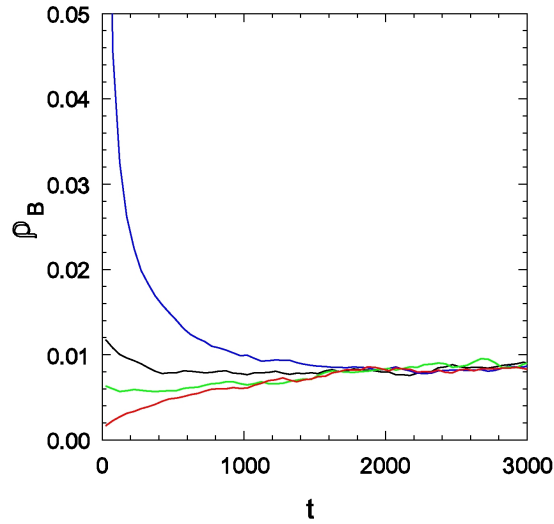


Fig. 5.18: Evolução do modelo PED em 2 dimensões com $L = 500$, $D_A = 4$, $D_B = 1$ e $r = 0.70$ ($r_c = 0.739$). A densidade inicial de B's é, de cima para baixo: 0.9, 0.1, 0.05 e 0.01.

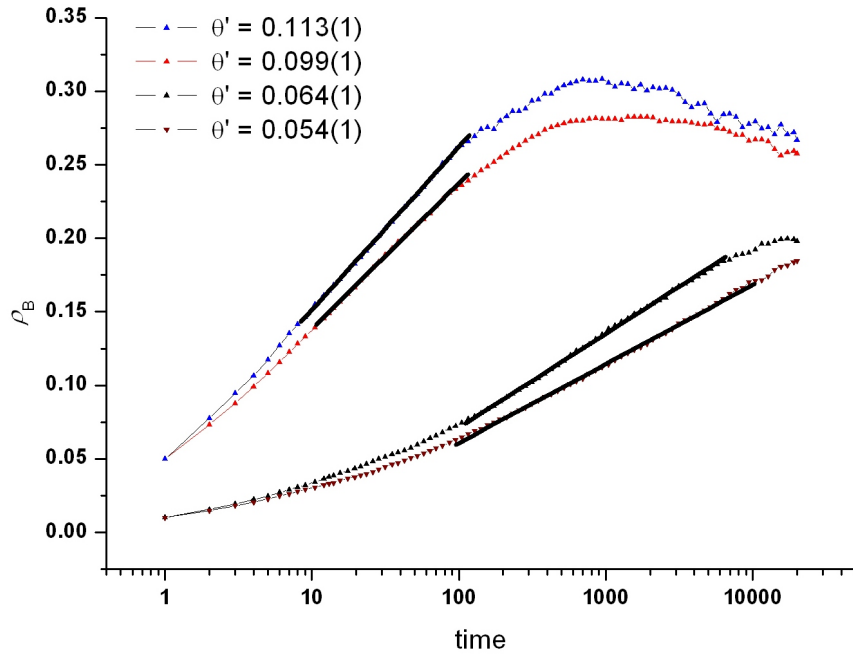


Fig. 5.19: Constatação da não-universalidade do expoente crítico θ' . $L = 2000$, $D_A = D_B = 0.5$ e $r = r_c = 0.192$. De cima para baixo:
 $\rho_B(0) = 0.05$; Distribuição inicial poissoniana (A's e B's)
 $\rho_B(0) = 0.05$; Distribuição inicial A's não-poissoniana
 $\rho_B(0) = 0.01$; Distribuição inicial poissoniana (A's e B's)
 $\rho_B(0) = 0.01$; Distribuição inicial A's não-poissoniana

implementar uma função de concatenação de termos idênticos ou relacionados por simetria (translação e rotação). Essa função resolveu o problema de memória mas prejudicou bastante a performance. Em um microcomputador Pentium 4 3.0 GHz, a expansão até ordem 8 pode ser calculado em 5.7 segundos, até ordem 9 em 1.54 minutos e para ordem 10 em 27.9 minutos. Estima-se que para atingir 14 termos seriam necessários cerca de 2 meses para cada conjunto de parâmetros do modelo.

Iniciamos o estudo com expansões até ordem 12. No caso $D_A = D_B = 0.5$, $r = 1$ e $\rho = 1$, os primeiros coeficientes da expansão $\rho_B(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n$ são:

n	c_n	n	c_n
0	1.00000000000000	7	-4.3473462301587
1	-1.00000000000000	8	6.6978856646825
2	1.00000000000000	9	-10.6506212022569
3	-1.16666666666667	10	17.4353461672936
4	1.50000000000000	11	-29.3276280928002
5	-2.04583333333333	12	50.6117219356300
6	2.92291666666667		

Nota-se que os primeiros termos são exatamente iguais ao cálculo analítico direto feito na seção 4.4.5 e que a razão dos coeficientes da série tem um comportamento regular. Após uma série de tentativas descobrimos que os dados ajustam bem a uma exponencial estendida com raio de convergência de aproximadamente 0.34.

$$|r_n| = |a_n/a_{n-1}| \approx \exp \left[\exp \left(0.085 - \frac{3.685}{n^{1/2}} \right) \right]. \quad (5.7)$$

Uma análise feita nos dados simulacionais confirmou que o decaimento é mais lento que uma exponencial, parecendo ser também uma exponencial estendida.

A figura 5.20a mostra que a expansão em séries (em vermelho) acompanha os resultados simulacionais (em preto) até $t = 0.4$ e depois diverge. Seguindo a metodologia detalhada na seção 4.4.4 aplicou-se a transformação de variáveis definida na equação 4.64 com $b = 1$, seguida pela construção dos aproximantes de Padé, o que melhorou bastante o resultado. A figura 5.20b compara os dados da simulação (em preto) com os aproximantes de Padé $[5, 5]$ (em azul) e $[4, 6]$ (em vermelho) construídos sobre a série transformada $y(t)$. Nota-se que os dados convergem agora até $t = 5$, mas depois se desviam. $\rho_B(t)$ deveria decair monotonicamente a zero, mas o aproximante de Padé construído aplicado à série transformada com $y = t/(b+t)$ vai para um valor constante quando $y \rightarrow 1$, e nada garante que este valor seja positivo...

O próximo passo foi analisar a série para $z = \ln \rho_B$. Os aproximantes de Padé desta série são sempre negativos, então fornecendo estes valores para

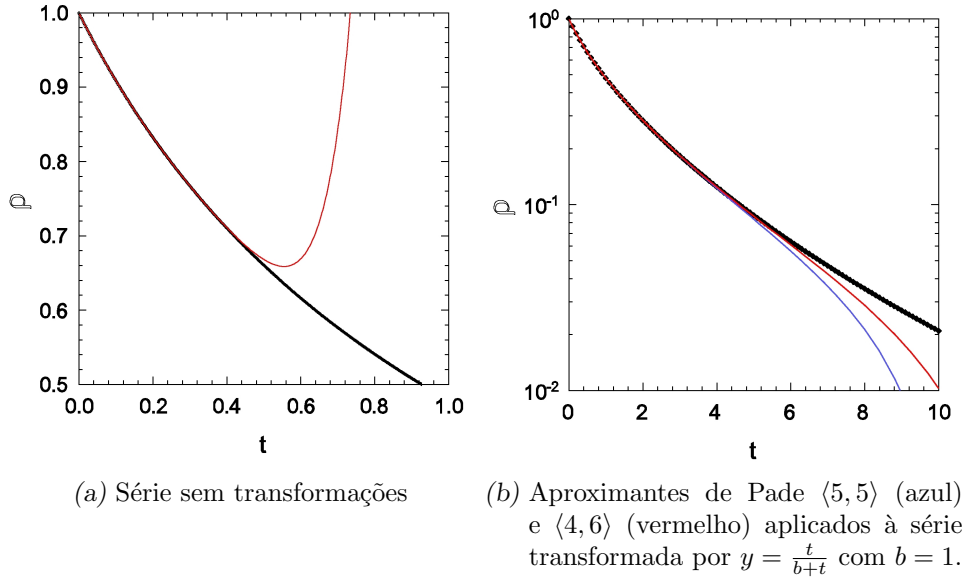


Fig. 5.20: Comparação dos dados simulacionais (preto) com a previsão via expansão em série (vermelho) com 12 termos, para o caso $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 1.0$.

z , $\rho_B = \exp(z)$ não pode ser negativo. Esta análise gerou um resultado que acompanha a simulação até $t \simeq 5$ e depois decai devagar demais. A razão é que mais uma vez z vai saturar quando $t \rightarrow \infty$. Definimos então $w = -(\ln \rho_B)/t$ (que acaba gerando uma série com um termo a menos). O aproximante de Padé para $w(y)$ também satura quando $y \rightarrow 1$, mas agora a previsão para a densidade de atividade é $\rho_B = \exp(-wt)$, que para tempos longos decai exponencialmente a zero ao invés de tender a um valor constante. A figura 5.21 mostra que o aproximante de Padé $[5, 4]$ acompanha bem os resultados da simulação até $t = 11$ e depois continua decaindo exponencialmente, enquanto a simulação decai mais lentamente (provavelmente uma exponencial estendida).

Também calculamos os primeiros termos da série para o ponto crítico $r_c = 0.192$, para $D_A = D_B = 0.5$ e $\rho = 1$.

n	c_n	n	c_n
0	1.00000000000000	7	-0.0676666928016
1	-0.19200000000000	8	0.0687307383162
2	0.11443200000000	9	-0.0724315805917
3	-0.0897556480000	10	0.0791453291584
4	0.0789486551040	11	-0.0894813137493
5	-0.0726789248680	12	0.1044240590088
6	0.0690105610873		

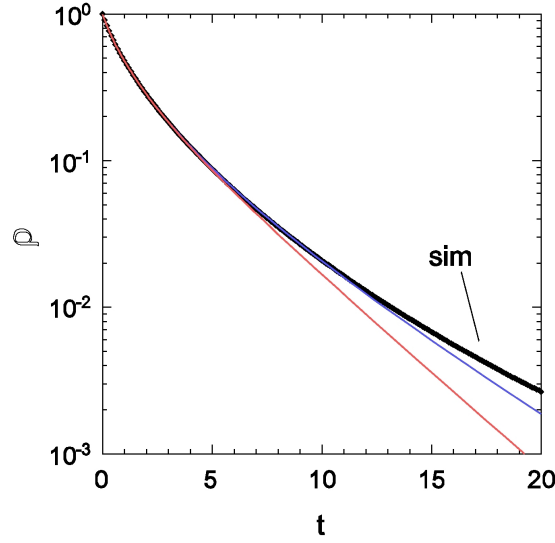


Fig. 5.21: Comparação dos resultados simulacionais (preto) com as séries obtidas após a construção dos aproximantes de Padé $\langle 5, 4 \rangle$ (azul) e $\langle 4, 5 \rangle$ (vermelho) para a série transformada $w = -\ln \rho/t$. Parâmetros: $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 1.0$.

Assim como no caso anterior, a série direta diverge rapidamente. O aproximante de Padé construído após a transformação $y = t/(b + t)$ ($b=0.48$) apresentou uma melhora significativa, mas também acaba tendendo a um valor negativo quando $t \rightarrow \infty$. Seguindo os mesmos passos de antes, definimos a série $w = -(\ln \rho_B)/t$ e em seguida aplicamos a transformação $y = w/(b + w)$. Sobre esta série transformada construímos o aproximante de Padé $[6, 5]$. A figura 5.22 Com isso a previsão para $\rho_B(t)$ acompanha exatamente a simulação até $t = 6$, mas depois desse ponto decai mais lentamente (comportamento inverso ao caso supercrítico).

O caso subcrítico apresentou um comportamento mais simples e foi capturado muito bem pela série original. Para $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 0.1$ a série resultante é:

n	c_n	n	c_n
0	1.00000000000000	7	-0.0209141389087
1	-0.10000000000000	8	0.0187617872696
2	0.05500000000000	9	-0.0174225335508
3	-0.04016666666667	10	0.0168143473019
4	0.03296250000000	11	-0.0168617085979
5	-0.02790508333333	12	0.0175222249281
6	0.0239444041667		

A figura 5.23 compara os resultados da simulação com a revisão do apro-

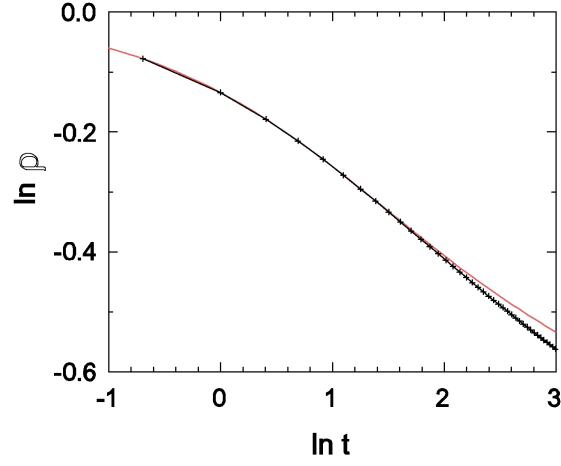


Fig. 5.22: Comparação dos resultados simulacionais (preto) com as séries obtidas após a construção do aproximante de Padé $\langle 6, 5 \rangle$ (vermelho) sobre a variável $w = -\ln \rho/t$ transformada por $y = t/(b+t)$. Parâmetros: $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = r_c = 0.192$.

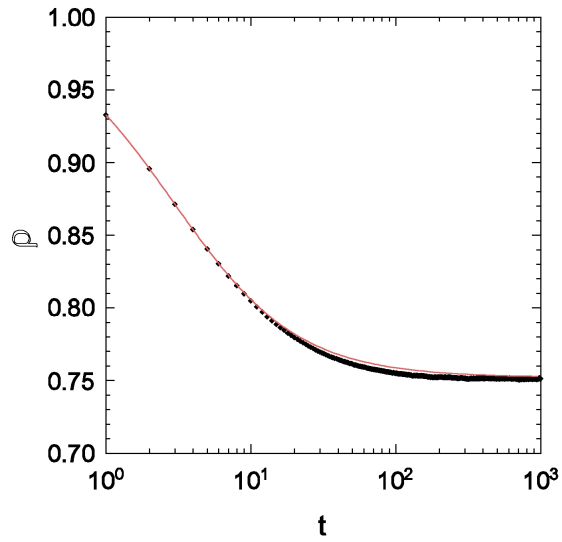


Fig. 5.23: Comparação dos resultados da simulação (em preto) com a previsão obtida via aproximante de Padé $\langle 6, 6 \rangle$ (em vermelho) aplicado à serie transformada por $y = \frac{t}{b+t}$ ($b = 0.85$) no caso subcrítico $D_A = D_B = 0.5$, $\rho = 1$ e $r = 0.10$.

ximantes de Padé [6,6] construídos sobre a série transformada por $y = \frac{t}{b+t}$, com $b = 0.85$. Não foi preciso recorrer à série para $\ln \rho$; a concordância é perfeita até $t = 100$ e muito boa depois disso até o final. O valor estacionário $\bar{\rho}_B$ obtido da série é 0.7522 enquanto nas simulações é 0.7510.

Vê-se que agora chegamos a uma comparação *quantitativa* entre os resultados simulacionais e a previsão via expansão em séries. No caso supercrítico o decaimento do tipo exponencial estendida se mostrou complexo demais para ser capturado por uma série de poucos termos, já no caso subcrítico a concordância após a construção dos aproximantes de Padé foi muito boa. Ao continuar os cálculos para taxas de recuperação cada vez mais próximas ao ponto crítico, nota-se que a concordância vai piorando, mas não chegamos a definir um valor limite para isso.

A conclusão final é de que a dinâmica desse modelo é complexa demais para ser capturada por uma série de apenas 12 termos, especialmente para $r \geq r_c$. A construção dos aproximantes de Padé melhorou bastante a convergência mas ainda falha para tempos longos. A análise da série para $w = \ln \rho/t$ seguida pela transformação de Euler $y = t/(b+t)$ é capaz de contornar parcialmente esse problema aumentando significativamente o raio de convergência.

A idéia para um próximo trabalho é modificar a rotina para rodar em clusters e com isso obter séries mais longas capazes de capturar o comportamento do sistema próximo ao ponto crítico.

6. CONCLUSÕES

O processo de epidemia difusiva (ou PED) pertence a uma importante classe de problemas que abrange os sistemas reativos-difusivos de duas espécies, caracterizados por quatro eventos principais: $A + B \xrightarrow{\lambda} 2B$, $B \xrightarrow{r} A$, difusão de partículas tipo A e B. O modelo apresenta três classes de universalidade distintas, dependendo se $D_A < D_B$, $D_A = D_B$ ou $D_A > D_B$. Conseguimos aqui, caracterizar com precisão o comportamento crítico do sistema unidimensional nos três regimes, utilizando aproximações de campo médio, simulações Monte-Carlo e expansões em série.

As simulações quase-estacionárias mostram com clareza que a transição de fase é contínua para os três regimes de difusão. Não obstante, foram realizados estudos de histerese e de decaimento inicial para confirmar esse ponto, e ambos mostraram que não há sinal de descontinuidade. Para investigar se a transição descontínua apareceria em $d = 2$, conduziram-se estudos extras para o caso $D_A > D_B$, mas nenhuma evidência de descontinuidade foi encontrada.

Os estudos de histerese, tanto em uma quanto em duas dimensões, mostram que se houver um salto no valor da densidade de atividade, ele deve ser menor que 0.01, ou seja, praticamente desprezível. As simulações de decaimento inicial mostraram de forma simples e inovadora que, caso houvesse um nível metaestável nas proximidades do ponto crítico, o estado quase-estacionário atingido dependeria da condição inicial do sistema; este fenômeno não acontece no PED, apenas o período de relaxação é influenciado por essa condição.

Para provar que as metodologias empregadas eram de fato capazes de identificar uma transição descontínua, todas elas foram testadas sobre o modelo de criação por tripletos que tem uma transição comprovadamente descontínua para $D > 0.9$, e o resultado foi sempre positivo.

Um dos primeiros estudos deste modelo foi realizado por Wijland *et al* [26] utilizando a técnica do grupo de renormalização. Eles previram a existência das três classes de universalidade, mas só encontraram pontos fixos estáveis para os regimes $D_A = D_B$ e $D_A < D_B$. O primeiro caso foi imediatamente identificado como pertencente à classe KSS previamente descrita em [7], já o regime $D_A < D_B$ configurava uma classe totalmente nova. Como não foi possível encontrar um ponto fixo estável para o último regime, os autores conjecturam a existência de uma transição descontínua, embora

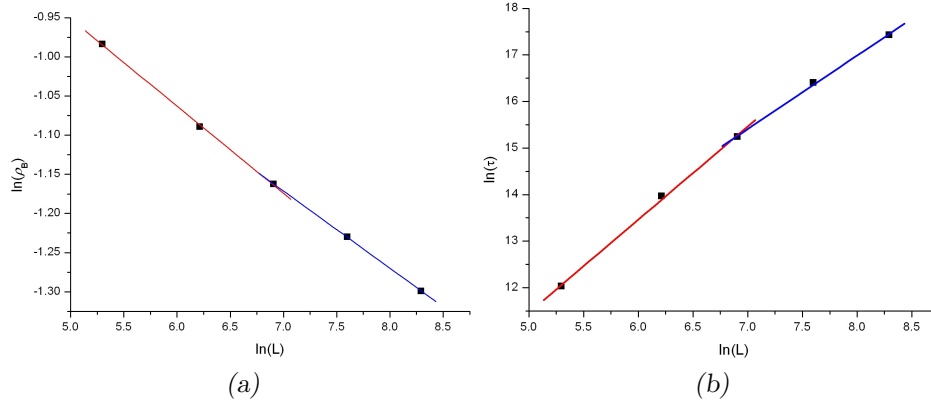


Fig. 6.1: Estudos com sistemas até 1000 sítios podem apresentar uma falsa idéia de escala, quando na verdade o comportamento para redes maiores é um pouco diferente.

os mesmos admitam que os termos desprezados na expansão ϵ podem ser relevantes para $d = 2$ ou 1, estragando as previsões obtidas. Simulações Monte-Carlo logo se seguiram [12, 10, 11, 2], todas elas mostrando uma transição contínua nos três casos, quando $d = 1$. Ainda assim, houve divergência entre os valores dos expoentes críticos encontrados em cada trabalho. Isso foi suficiente para que estes resultados fossem criticados em [13] que dá argumentos em favor da análise via grupo de renormalização. Na mesma época, o mesmo grupo de autores de [26] publicou uma curva experimental de histerese em duas dimensões para o caso $D_A > D_B$, alegando mais uma vez a descontinuidade da transição nesse domínio. Toda essa controvérsia levantou o interesse da comunidade e até o momento tem sido ponto de discussão. Sugere-se aqui algumas possíveis causas para as variações dentre os expoentes críticos encontrados via simulação.

A primeira delas está ligada a maneira na qual as reações são implementadas. Devido ao grande esforço computacional necessário, cada autor criou o seu artifício para aumentar a performance muitas vezes violando as taxas e processos microscópicos que levariam a uma simulação rigorosamente fiel à descrição dada pela equação mestra do processo. É claro que, devido à fundamentação da hipótese de universalidade, estes detalhes podem não ser relevantes para o comportamento crítico. Entretanto, sem a devida argumentação de prova, resta sempre uma dúvida se o processo simulado é realmente o mesmo estudado via teoria de campos.

Outro fator limitante das simulações publicadas até então, também devido à carga computacional, foi o tamanho das redes. Nos estudos próximos ao ponto crítico foram utilizadas redes muito pequenas. Logo de início percebemos que uma falsa idéia de escala surgiria se estudássemos sistemas somente até 1000 sítios. A figura 6.1 ilustra isso. Se considerarmos apenas

sistemas entre 200 e 1000 sítios, visualizamos um ajuste perfeitamente linear. Entretanto, quando analisamos exclusivamente sistemas maiores (para este fim usamos redes até $L=5000$), vemos uma inclinação ligeiramente diferente e de fato descartamos os dados para os sistemas menores do que 500 sítios.

Notamos também que, próximo ao ponto crítico, o tempo de relaxação do sistema até o estado estacionário é extremamente dependente da densidade inicial de atividade (B) e da correlação inicial entre partículas. Quando esta densidade é por exemplo 1%, o tempo necessário para atingir o estado estacionário é até cem vezes maior do que quando a densidade inicial é apenas 5%. No regime de densidade inicial baixa, a curva de relaxação tem uma fase inicial de rápido crescimento (ou decaimento) e depois toma um caráter *assintótico* bastante lento. Desta forma, é necessário um longo tempo de espera e também um longo tempo de acúmulo de dados para determinar corretamente o valor estacionário $\bar{\rho}_B$. Caso tudo isso não seja considerado, poderíamos, por exemplo, gerar um resultado falso positivo em um ciclo de histerese; todos os pontos no caminho de ida teriam um valor "estacionário" menor do que no caminho de volta. É possível que este fenômeno tenha gerado o ciclo de histerese triangular apresentado por Oerding *et al* em [8] que de fato acaba mostrando uma transição contínua do estado ativo para o absorvente.

No presente trabalho considerou-se tamanhos de 500 até 4000 ou 5000 sítios em uma dimensão e tamanhos de até 640×640 nas simulações em duas dimensões. Embora visualmente não pareça haver necessidade de correção à escala, não descartamos a hipótese de que se incluíssemos redes ainda maiores teríamos novas (porém pequenas) mudanças nos ajustes.

Como era nossa intenção fazer uma comparação *quantitativa* entre os resultados obtidos via simulação e aqueles derivados da expansão em série da equação mestra, o algoritmo Monte-Carlo aqui implementado (seção 4.3), apesar do alto custo computacional, segue à risca a dinâmica microscópica da equação. Este é o único trabalho até agora com esta característica. Para cada tamanho e cada conjunto de parâmetros (r, D_A, D_B) as simulações somam mais de 10^9 unidades de tempo (e cada unidade de tempo abrange na ordem de 10^3 eventos microscópicos, ou passos de Monte-Carlo).

Os expoentes críticos encontrados nas nossas simulações estão de acordo com a análise via grupo de renormalização que prevê $z = 2$ e $\nu_{\perp} = 2/d$ em todos os casos, *exceto* para $D_A < D_B$ no qual nossas previsões são significativamente menores. É fato que a expansão ϵ feita por WOH pode ser falha em uma ou duas dimensões, mas também não descartamos completamente a hipótese de que, especialmente neste regime, seja necessário usar redes ainda maiores (usamos $L_{max} = 5000$ aqui) e tempos mais longos para a determinação precisa do expoente dinâmico. Essa extensão não mudaria a natureza da transição (contínua) mas poderia melhorar a exatidão dos expoentes.

A existência de transições de fase descontínuas em sistemas unidimensi-

onais (fora do equilíbrio) com estados absorventes já foi um assunto controverso [43, 38, 39, 40]. O fato agora parece estar definitivamente comprovado no caso do modelo de criação por tripletos, tanto em sua versão simétrica quanto na assimétrica. No caso do processo de epidemia difusiva (PED), acreditamos não restar dúvida sobre a continuidade da transição para todos os três regimes em sistemas uni e bidimensionais. Como as simulações quase-estacionárias poderiam de alguma forma ter obscurecido algum estado de curta duração, foram realizados estudos extras de decaimento inicial e também de histerese; em nenhum deles foi encontrada evidência alguma que justifique uma transição descontínua.

A teoria de campo médio de um sítio, impressionantemente, já fornece uma descrição qualitativamente correta do diagrama de fase, revelando a dependência não-monotônica da taxa de recuperação crítica com a taxa de difusão das partículas B (resultado que foi confirmado pelas simulações). Isto reflete uma tendência (para $D_B \ll D_A$) de várias partículas se acumularem em um mesmo sítio, e eventualmente formarem ilhas. A distribuição marginal de probabilidade $P(b)$ comprova tal resultado. Estas instabilidades locais amplificadas poderiam levar a uma transição de primeira ordem, mas na verdade o tamanho do aglomerado sobrevivente cresce linearmente com $\rho - \rho_c$, ou de modo inverso com $r - r_c$, garantindo uma transição contínua, pelo menos em $d = 1$ (veja [2]). Em adição vimos neste trabalho que a distribuição do número médio de partículas B por sítio cai lentamente e suavemente, mostrando que não há interfaces abruptas entre aglomerados e que existem aglomerados de vários tamanhos.

A teoria de campo médio de dois sítios melhora ainda mais as previsões e captura também a anti-correlação entre partículas A e B no mesmo sítio (e em sítio vizinhos) assim como a forte correlação positiva entre as partículas B de um mesmo sítio e seus vizinhos. Especialmente no limite $D_A \gg D_B$ a teoria fornece resultados *quantitativamente* próximos à simulação.

O PED conserva o número total de partículas, assim como a pilha de areia estocástica conservada e o gás em rede estocástico [29], que pertencem a uma mesma classe de universalidade. Na pilha de areia, as partículas isoladas são inativas enquanto as partículas em movimento são ativas. Uma partícula imóvel é ativada (ganhando a habilidade de se difundir) quando uma partícula ativa pula para o seu sítio. Ao comparar a pilha de areia com o PED podemos tentar identificar as partículas inativas e ativas com as do tipo A e B , respectivamente. Uma vez que aceitamos essa identificação como válida, o PED poderia ser equivalente à pilha de areia conservada no caso especial $D_A = 0$. Não obstante, ao comparar os expoentes críticos da pilha unidimensional, $\beta/\nu_\perp = 0.21(1)$, $z = 1.50(4)$ e $\nu_\perp = 1.35(2)$, com os valores correspondentes ao caso $D_A < D_B$ da tabela 5.2 vemos que os processos não podem pertencer à mesma classe de universalidade.

A expansão sistemática da equação mestra em séries de potência de tempo possibilitou uma comparação quantitativa com os resultados da si-

mulação para tempos curtos. Infelizmente devido ao número limitado de termos que nos foi possível alcançar esse estudo não foi totalmente concluído. Nota-se que no regime supercrítico o decaimento ao estado estacionário é mais lento que uma exponencial (provavelmente uma exponencial estendida) e por isso é muito difícil capturar esse comportamento com um número limitado de termos. Já no caso subcrítico, a concordância foi excelente. O algoritmo foi escrito de forma modular e com poucas modificações pode ser colocado para rodar em 'clusters'. Espera-se que estes resultados sirvam como ponto de referência para mais estudos baseados em expansões sistemáticas da equação mestra com mais termos.

BIBLIOGRAFIA

- [1] J. Marro and R. Dickman. *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*. Cambridge University Press, 1999.
- [2] H. Hinrichsen. *Adv. Phys.*, 49:815, 2000.
- [3] S. Lübeck. *Int. J. Mod. Phys.*, 49:815, 2004.
- [4] G. Ódor. *Rev. Mod. Phys.*, 76:663, 2004.
- [5] I. Jensen. *Phys. Rev. Lett.*, 70:1465, 1993.
- [6] I. Jensen and R. Dickman. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 26, 1993.
- [7] R. Kree, B. Schaub, and B. Schmittmann. *Phys. Rev. A*, 39:2214, 1999.
- [8] K. Oerding, F. van Wijland, J. P. Leroy, and H. J. Hilhorst. *J. Stat. Phys.*, 99:1365, 2000.
- [9] F. van Wijland, K. Oerding, and H. J. Hilhorst. *Physica A*, 251:179, 1998.
- [10] U. L. Fulco, D. N. Messias, and M. L. Lyra. *Physica A*, 295:49, 2001.
- [11] U. L. Fulco, D. N. Messias, and M. L. Lyra. *Phys. Rev. E*, 63:066118, 2001.
- [12] J. E. de Freitas, L. S. Lucena, L. R. da Silva, and H. J. Hilhorst. *Phys. Rev. E*, 61:6330, 2000.
- [13] H. K. Janssen. *Phys. Rev. E*, 64:058101, 2001.
- [14] J. E. de Freitas, L. S. Lucena, L. R. da Silva, and H. J. Hilhorst. *Phys. Rev. E*, 64:058102, 2000.
- [15] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [16] S. R. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. EdUsp, 1999.
- [17] T. Tomé and M. J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. EdUsp, 2001.

-
- [18] D. F. S. Maia and R. Dickman. *J. Phys.: Cond. Matter*, 19:065143, 2007.
 - [19] D. F. S. Maia and R. Dickman. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 41, 2008.
 - [20] N. Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and the renormalisation group*. Addison-Wesley, 1992.
 - [21] T. Aukrust, D.A. Browne, and I. Webman. *Phys. Rev. A*, 41:5294, 1990.
 - [22] K. G. Wilson. *Rev. of Mod. Phys.*, 47:773, 1975.
 - [23] K. G. Wilson and J. Kogut. *Phys. Reports*, 12:75, 1974.
 - [24] L. Peliti. *Physique*, 46:1469, 1985.
 - [25] R. Dickman and R. Vidigal. *Brazilian J. of Phys.*, 33:73, 2003.
 - [26] F. van Wijland, K. Oerding, and H.J. Hilhorst. *Physica A*, 251:179, 1998.
 - [27] R. Dickman and R. Vidigal. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37:1147, 2002.
 - [28] R. Dickman and M. M. de Oliveira. *Physica A*, 357:134, 2005.
 - [29] R. Dickman. *Phys. Rev. E*, 73:036131, 2006.
 - [30] R. Dickman, J-S. Wang, and I. Jensen. *J. Chem. Phys.*, 94:8252, 1991.
 - [31] R. Dickman. *J. Stat. Phys.*, 55:997, 1989.
 - [32] I. Jensen and R. Dickman. *J. Stat. Phys.*, 71:89, 1993.
 - [33] I. Jensen. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32:5233, 1999.
 - [34] C.M. Bender and S.A. Orseag. *Adv. Math. for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill, New York, 1978.
 - [35] R. Dickman and J. K. Leal da Silva. *Phys. Rev. E*, 58:4266, 1998.
 - [36] S-C. Park and H. Park. *Phys. Rev. E*, 73:025105, 2006.
 - [37] J. Kockelkoren and H. Chaté. *Phys. Rev. Letters*, 90:125701, 2003.
 - [38] H. Hinrichsen. *cond-mat*, page 0006212, 2000.
 - [39] C. E. Fiore and M. M. de Oliveira. *Phys. Rev. E*, 70:046131, 2004.
 - [40] G. O. Cardozo and J. F. Fontanari. *Eur. J. Phys. B*, 51:555, 2006.
 - [41] M. M. de Oliveira and R. Dickman. *Physica A*, 343:525, 2004.

-
- [42] R. Bidaux, N. Boccara, and H. Chaté. *Phys. Rev. A*, 39:3094, 1989.
- [43] R. Dickman and T. Tomé. *Phys. Rev. A*, 44:4833, 1991.

APÊNDICE

A. ALGORITMO PARA EXPANSÃO EM SÉRIE DA EQUAÇÃO MESTRA DO PED

Este apêndice traz o algoritmo em Fortran 95 para o cálculo dos primeiros termos de uma expansão em série de $\rho_B(t)$ segundo a descrição feita na seção 4.4.3. A álgebra implementada não envolve aproximações e baseia-se no cálculo sucessivo e recursivo de comutadores. Para uma melhor performance recomenda-se o uso do compilador Intel Fortran que faz uso de instruções vetorizadas SSE3.

O primeiro arquivo, *epdscommon.f90* é na verdade um módulo comum a todos os outros blocos de código que define as variáveis e constantes importantes do programa.

O código principal está no arquivo *epds_recursive.f90*. A partir dele são feitas chamadas para as subrotinas presentes nos arquivos citados abaixo.

comutg1.f90 - Traz os resultados para a primeira geração de comutadores pré-calculados à mão.

createcomut.f90 - Implementa o cálculo em árvore explicado na seção 4.4.3.

concatena.f90 - Após cada cálculo de comutação, é feita uma busca por outro termo semelhante na mesma geração. Termos relacionados por simetria de translação ou rotação também são concatenados.

writeresults.f90 - Calcula os resultados parciais da aplicação dos operadores de cada geração sobre a distribuição inicial poissoniana.

comutL1.f90 - Calcula o comutador reduzido de um termo fornecido com o operador $L_i^{(1)}$ como definido na equação 4.11. Idem para os arquivos *comutL2*, *comutL3* e *comutL4.f90*.

```

!*****
!   Definicoes de variaveis comuns a todos os subprograms do projeto
!   As modificações referentes a geração 0 devem ser feitas dentro
!   de epds_recursive
!*****
Module Epdscommon

Implicit None

Integer, parameter :: nmax = 10
! Ordem maxima da expansao para as funcoes f_1i
! A expansão para densidade B irá até nmax+2

! Parametros do modelo de epidemia difusiva

Real(8), parameter :: da=0.5d0, db=0.25d0, r=0.10d0, rho=1.0d0,&
& precision = 1.0d-15

Integer, parameter :: nng = 5, &
! Cada termo gera, em média, nng termos na geracao posterior
! (apos concatenacao).
& maxterms = 5*int((nng**nmax)-1)/(nng-1)
! Numero maximo de termos na ordem n. Após concatenação, cada
! termo gera ate nng termos na geracao posterior. O total e'
! a soma de uma P.G. finita.

Integer, target :: jini(nmax), &
! jini(g) aponta onde começa a geracao 'g' (j-esimo termo)
& jmax(nmax), &
! jmax(g) aponta onde termina a geracao 'g'
& imax(nmax)
! posicao maxima do sitio ja visitado ate ger.'g'

Integer nterms(nmax), &
! numero total de termos na geracao 'g'
& ntermxg(nmax)
! (numero maximo de termos por geracao necessario no vetor)

Integer*1 pa(-2:2*nmax+1,maxterms),&
! pa(i,j) potencia de A_i no j-esimo de Cn
& pb(-2:2*nmax+1,maxterms)
! pb(i,j) potencia de B_i no j-esimo de Cn

Real*8 coef(maxterms), c(0:nmax)
! coef(j) coeficiente do j-esimo termo de Cn

Common /vet/imax,nterms
Common /apt/jini,jmax
Common /mat1/pa
Common /mat2/pb
Common /double/coef,c

End Module EpdsCommon

!-----
!   Atencao para os blocos comuns definidos !
!   Todas as procedures compartilham estes blocos e portanto
!   nao precisam destes como argumentos explicitos.
!-----

```

```

! *****
!
! PROGRAM: Epds
!
! Proposito:  Calcular o valor da densidade de atividade no modelo de
!             epidemia difusiva, utilizando-se uma expansao em serie ate'
!             ordem n. Este rotina utiliza chamadas recursivas, mantendo
!             na memória os comutadores da geracao anterior ate que eles
!             nao sejam mais necessarios. Como o numero de termos a cada
!             geracao cresce muito, adicionou-se uma funcao de concatenacao,
!             que reduziu bastante a quantidade de memoria necessaria.
!             No entanto, essa funcao prejudica bastante a performance.
! *****

Program Epds

Use EpdsCommon
Implicit None

! Interface
!   Subroutine Pade(cof)
!       Real(8), intent(inout) :: cof(0:)
!   end subroutine Pade
! End Interface
!
! Interface
!   Subroutine VarTrans(cof)
!       Real(8), intent(inout) :: cof(1:)
!   end subroutine
! End Interface

! -----
!   Atencao para os blocos comuns definidos em EpdsCommon!
!   Todas as procedures compartilham estes blocos e portanto nao precisam
!   destes como argumentos
! -----

! Variaveis auxiliares

Real(8), Parameter :: const = -(1.d0 +r +da +db)

Integer :: g, fatorial, i, ntg(nmax), ntot(nmax), &
           & unt1, j, f, st1, st2, pA0, pB0, pA1
Real(8), save :: cf(0:nmax), f1(0:nmax+1), rb(0:nmax+2)
Character caux*2, name*16, filename(nmax)*32
Real time_begin, time_end, time(5)

cf = 0.0d0
ntot = 0
ntmaxg = 0

! Calculando o tamanho maximo (em numero de termos) em cada geracao
jini(1) = 1
ntg(1) = 6

do j=2,nmax
    jini(j) = jini(j-1) +ntg(j-1)
    ntg(j) = ntg(j-1)*nng
    ! cada termo gera ate nng termos na geracao posterior

```

```

enddo

do f = 1,4      ! Os quatro termos que compoe o resultado.
                ! O quinto esta ali apenas por questoes de teste

    unt1 = 20 + f
    c = 0.0d0

    Select Case(f)
        Case (1)
            call cpu_time(time_begin)
            pA0 = 0
            ! potencia de A0 (0 ou 1) no computador da geracao 0
            pB0 = 2
            ! potencia de B0 (0 ou 1) no computador da geracao 0
            pA1 = 0
            ! potencia de A1 (0 ou 1) no computador da geracao 0
            name = "epdsB02.dat"
            c(0) = (rho**2)
        Case (2)
            call cpu_time(time_begin)
            pA0 = 1
            pB0 = 2
            pA1 = 0
            name = "epdsB02-A0.dat"
        Case (3)
            call cpu_time(time_begin)
            pA0 = 2
            pB0 = 1
            pA1 = 0
            name = "epdsB0-A02.dat"
        Case (4)
            call cpu_time(time_begin)
            pA0 = 0
            pB0 = 1
            pA1 = 1
            name = "epdsB0-A1.dat"
        !
        ! Case (5)
        !     call cpu_time(time_begin)
        !     pA0 = 1
        !     pB0 = 1
        !     pA1 = 0
        !     name="epdsA0-B0.dat"
    End Select

    !-----
    !   Arquivos para saída parcial dos termos.
    !   Apenas para conferencia.
    !   Esta secao esta ligada a um trecho no arquivo writeresults.f90
    !   do j=1,2
    !       write(unit=caux,fmt='(I2)') j
    !       filename(j) = 'g'//trim(adjustl(caux))//'_ '//trim(name(5:))
    !       open(unit=j,file=filename(j),status='replace',buffered='yes')
    !   enddo
    !-----

    open(unit=unt1,file=name,status='replace',buffered='yes')

    nterms = 0

    do i = 0,1

```

```

    nterms(1) = 0
    coef = 0.0d0
    pa = 0
    pb = 0

    g = 1
    call ComutG1(i, pA0, pB0, pA1)
    ! insere os valores dos comutadores da geracao 1
    call WriteResults(g)

    ! na verdade, quando i=1 calcula-se tambem os comutadores g1
    ! para i=-1 e i=2 e depois aplica-se as operações de simetria
    ! para centralizar o resultado em 0.

    ntmaxg(1) = max(ntmaxg(1), nterms(1))
    g = 2
    st1 = -1
    st2 = imax(1)+1
    call CreateComut(g, st1, st2)
    ! cria os comutadores de g=2 ate g=nmax

enddo ! gen1

do j=1, nmax
    c(j) = c(j)/dble(fatorial(j))
    write(unt1, *) c(j), nterms(j)
    close(j)
enddo

Select Case(f)
!   Os 4 componentes da equação diferencial para f1 tem coeficientes
!   que multiplicam os comutadores
    Case(1)
        cf = cf + r*c
    Case(2)
        cf = cf - c
    Case(3)
        cf = cf + c
    Case(4)
        cf = cf +(da+db)*c
!   Case(5)
!   cf = c
End Select
!   ntot = ntot +nterms

call cpu_time(time_end)
time(f) = time_end-time_begin
write(unt1, *) time(f), " s"
close(unt1)

enddo ! f

open(97, file='nterms.dat', status='replace', buffered='yes')

do i=1, nmax
    write(97, 9) i, ntmaxg(i)
enddo
write(97, *) "Tempo total gasto para calcular os comutadores (s):", &

```

```

        & sum(time)
    close(97)
9    format("g", I2, I)

    call cpu_time(time_begin)

    ! f1 e' um vetor que representa a funcao
    ! df1/dt = const*f1 +f21 +f22 +f23
    ! f21 +f22 +f23 e' representado pela serie cujos coeficientes sao cf
    ! Se expandirmos f1 em potencias da seguinte forma:
    ! f1 = f1(0) + f1(1)t +(f1(2)/2)t^2 + (f1(3)/3)t^3...
    ! df1/dt = f1(1) + f1(2)t +f1(3)t^2 + ...
    !         = const*[ f1(0) +f1(1)t +(f1(2)/2)t^2 + ...]
    !         + cf(0) +cf(1)t +cf(2)t^2 + cf(3)t^3 + ...

    f1(0) = 0.0d0
    f1(1) = const*f1(0) +cf(0)
    do i=1,nmax
        f1(i+1) = const*f1(i)/dble(i) +cf(i)
    enddo

    ! drb/dt = -r*rb +f1
    ! rb = rb(0) + rb(1)t +(rb(2)/2)t^2 + (rb(3)/3)t^3 + ...
    ! drb/dt = rb(1) +rb(2)t +rb(3)t^2 + ...
    !         = -r*[rb(0) + rb(1)t + (rb(2)/2)t^2 + ...]
    !         + f1(0) +f1(1)t +(f1(2)/2)t^2 +(f1(3)/3)t^3

    rb(0) = rho
    rb(1) = -r*rb(0) +f1(0)
    do i=1,nmax+1
        rb(i+1) = ( -r*rb(i) +f1(i) )/dble(i)
    enddo

    ! Na saída de dados, rb(n) já representará rb(n)/n, ou seja,
    ! o coeficiente do termo t^n da série para rb.

    do i=1,nmax+2
        rb(i) = rb(i)/dble(i)
    enddo

    open(98,file='epds_r010.dat',status='replace')
    write(98,*) "Coeficientes da série rb_0 + rb_1*t +rb_2*t^2 + ..."
    write(98,'(A)') "n          rb_n"
    do j=0,nmax+2
        write(98,10) j,rb(j)
    enddo
    close(98)
10    format(I2, "          ",F21.16)

    ! open(99,file='epds_vartrans.dat',status='replace')
    ! call vartrans(rb)
    ! write(99,*) "Transformacao y = (1/b)[1-e^{bt}]"
    ! write(99,*) "Coeficientes da série rb_0 + rb_1*y +rb_2*y^2 + ..."
    ! do j=0,nmax+2
    !     write(99,*) rb(j)
    ! enddo
    ! close(99)
    !
    ! open(100,file='epds_trpade.dat',status='replace')
    ! call Pade(rb)

```

```

!
!   write(100,*) "Coeficientes de Pade (P0,...,PN,1,Q1,...,QN)"
!   write(100,*) "           Ordem   Valor"
!   do j=0,(nmax+2)/2
!       write(100,*) rb(j)
!   end do
!   write(100,*) "1.00000000000000"
!   do j=((nmax+2)/2)+1,(nmax+2)
!       write(100,*) rb(j)           !j-((nmax+2)/2), rb(j)
!   end do
11  format(I2,F21.16)

!   call cpu_time(time_end)
!   write(100,*)
!   write(100,*) "Tempo gasto com transformacoes e Pade (s): ", &
!               & (time_end-time_begin)
!   close(100)

End Program Epds

! *****

Function Fatorial(n)

Implicit None
Integer n, fatorial, i

fatorial = 1
do i=n,1,-1
    fatorial = fatorial*i
enddo

Return
End Function Fatorial

```

Recursive Subroutine CreateComut(g,st1,st2)

```

Use Epdscommon
Implicit None
Integer, intent(in) :: g, st1, st2

Integer i, p1, p2, p3, j

if(g.ne.nmax) then

    do i = -1,st2
        nterms(g) = 0
        jmax(g) = jini(g)-1
        imax(g) = max(imax(g-1),i)

! Esse 'apontador' começa propositalmente abaixo do inicio da geração
! Toda vez que um termo é gerado o valor de jmax(g) é aumentado

        call CcAux(i,g)
        call WriteResults(g)

        ntermxg(g)=max(ntermxg(g),nterms(g))

        p1 = g+1
        p2 = -1
        p3 = imax(g)+1
        call CreateComut(p1,p2,p3)

    enddo

else

    nterms(g) = 0
    imax(g) = imax(g-1)+1
    jmax(g) = jini(g)-1

    do i = -1,st2
        call CcAuxLast(i,g)
    enddo

    call WriteResults(g)

    ntermxg(g) = max(ntermxg(g),nterms(g))

endif

Return

```

End Subroutine CreateComut

! *****

Subroutine CcAux(i,g)

```

Use Epdscommon

Implicit None
Integer, intent(in) :: i,g

Integer t,gm

```

```

gm = g-1

do t=jini(gm),jmax(gm)
  if( (i.le.imax(gm)).and.(i.ge.0) ) then
    call Comut_L1(i,t,g)
    call Comut_L2(i,t,g)
  endif
  call Comut_L3(i,t,g)
  call Comut_L4(i,t,g)
enddo

! As subrotinas ComutL aumentam o valor de jmax(g)
! sempre que calculam um termo nao nulo.

Return

End Subroutine CcAux

! *****

Subroutine CcAuxLast(i,g)

  Use Epdscommon

  Implicit None
  Integer, intent(in) :: i,g

  Integer t,gm

  gm = g-1

  do t=jini(gm),jmax(gm)
    if( (i.le.imax(gm)).and.(i.ge.0) ) then
      call Comut_L2(i,t,g)
    endif
  enddo

  ! Todos os outros termos produzem resultados nulos quando
  ! aplicados a distribuicao inicial poissoniana

  Return

End Subroutine CcAuxLast

```

```
Subroutine ComutG1(i, pA0, pB0, pA1)
```

```
!   Insere os valores dos comutadores da primeira geracao
```

```
Use Epdscommon
```

```
Implicit None
```

```
Integer, intent(in) :: i, pA0, pB0, pA1
```

```
pa(-1:2,1:5) = 0
```

```
pb(-1:2,1:5) = 0
```

```
if(pA1.eq.0) then
```

```
    if( (pA0.eq.1).and.(pB0.eq.1) ) then
```

```
        if(i.eq.0) then
```

```
            coef(1) = -(1.d0+r+da+db)
```

```
            pa(0,1) = 1
```

```
            pb(0,1) = 1
```

```
            coef(2) = -1.d0
```

```
            pa(0,2) = 1
```

```
            pb(0,2) = 2
```

```
            coef(3) = 1.d0
```

```
            pa(0,3) = 2
```

```
            pb(0,3) = 1
```

```
            coef(4) = r
```

```
            pb(0,4) = 2
```

```
            nterms(1) = nterms(1) +4
```

```
            jmax(1) = 4
```

```
            imax(1) = 0
```

```
        elseif(i.eq.1) then
```

```
            coef(1) = da+db
```

```
            pa(1,1) = 1
```

```
            pb(0,1) = 1
```

```
            nterms(1) = nterms(1) +1
```

```
            jmax(1) = 1
```

```
            imax(1) = 1
```

```
        endif
```

```
    elseif( (pA0.eq.0).and.(pB0.eq.2) ) then
```

```
        if(i.eq.0) then
```

```
            coef(1) = 2.d0
```

```
            pa(0,1) = 1
```

```
            pb(0,1) = 1
```

```
            coef(2) = 2.d0
```

```
            pa(0,2) = 1
```

```
            pb(0,2) = 2
```

```
            coef(3) = -2.d0*(r+db)
```

```
            pa(0,3) = 0
```

```
            pb(0,3) = 2
```

```
        nterms(1) = nterms(1) +3
        jmax(1) = 3
        imax(1) = 0
    else
        coef(1) = 2.d0*db
        pb(0,1) = 1
        pb(1,1) = 1

        nterms(1) = nterms(1) +1
        jmax(1) = 1
        imax(1) = 1
    endif

elseif( (pA0.eq.1).and.(pB0.eq.2) ) then

    if(i.eq.0) then
        coef(1) = 2.0d0
        pa(0,1) = 2
        pb(0,1) = 2

        coef(2) = 2.0d0
        pa(0,2) = 2
        pb(0,2) = 1

        coef(3) = -1.0d0
        pa(0,3) = 1
        pb(0,3) = 3

        coef(4) = -2.0d0*(1.0d0 +r +da*0.5d0 +db)
        pa(0,4) = 1
        pb(0,4) = 2

        coef(5) = r
        pb(0,5) = 3

        nterms(1) = nterms(1) +5
        jmax(1) = 5
        imax(1) = 0
    else
        coef(1) = da
        pa(1,1) = 1
        pb(0,1) = 2

        coef(2) = 2.0d0*db
        pa(0,2) = 1
        pb(0,2) = 1
        pb(1,2) = 1

        nterms(1) = nterms(1) +2
        jmax(1) = 2
        imax(1) = 1
    endif

elseif( (pA0.eq.2).and.(pB0.eq.1) ) then

    if(i.eq.0) then
        coef(1) = 1.0d0
        pa(0,1) = 3
```

```

        pb(0,1) = 1

        coef(2) = -2.d0
        pa(0,2) = 2
        pb(0,2) = 2

        coef(3) = -(2.0d0 +r +2.0d0*da +db)
        pa(0,3) = 2
        pb(0,3) = 1

        coef(4) = 2.0d0*r
        pa(0,4) = 1
        pb(0,4) = 2

        nterms(1) = nterms(1) +4
        jmax(1) = 4
        imax(1) = 0

    else
        coef(1) = 2.0d0*da
        pa(0,1) = 1
        pa(1,1) = 1
        pb(0,1) = 1

        coef(2) = db
        pa(0,2) = 2
        pb(1,2) = 1

        nterms(1) = nterms(1) +2
        jmax(1) = 2
        imax(1) = 1

    endif

endif

elseif( (pA1.eq.1).and.(pB0.eq.1) ) then
    if(i.eq.0) then
        coef(1) = 1.d0
        pa(0,1) = 1
        pa(1,1) = 1
        pb(0,1) = 1

        coef(2) = -(r+db)
        pa(1,2) = 1
        pb(0,2) = 1

        coef(3) = 0.5d0*da
        pa(0,3) = 1
        pb(0,3) = 1

        nterms(1) = nterms(1) +3
        jmax(1) = 3
        imax(1) = 1

    else
        coef(1) = -da
        pa(1,1) = 1
        pb(0,1) = 1
    
```

```
coef(2) = db*0.5d0  
pa(1,2) = 1  
pb(1,2) = 1
```

```
coef(3) = -1.0d0  
pb(0,3) = 1  
pa(1,3) = 1  
pb(1,3) = 1
```

```
coef(4) = r  
pb(0,4) = 1  
pb(1,4) = 1
```

```
coef(5) = (da+db)*0.5d0  
! foi aplicada translacao ao termo B-1A1  
! somou-se ao resultado o comutador [B0A1,L_2(3)] = 0.5da*B0A2  ⚡
```

```
pa(2,5) = 1  
pb(0,5) = 1  
nterms(1) = nterms(1) +5  
jmax(1) = 5  
imax(1) = 2
```

```
endif
```

```
endif
```

```
End Subroutine ComutG1
```

Subroutine Comut_L1(i,t,g)

! t e' o numero do termo na geracao anterior
! j e' o numero de termos na geracao atual, ate este momento

Use Epdscommon

Implicit None

Integer, intent(in) :: i,t,g

Integer m,n,ls1,ls2

Integer, pointer :: j, i2

j => jmax(g)
i2 => imax(g)
ls1 = i2 +1
ls2 = 2*g +1

m = pa(i,t)
n = pb(i,t)

```

if( (m+1).le.(nmax-g) ) then
  if(n.ne.0) then
    nterms(g) = nterms(g) +1
    jmax(g) = jmax(g)+1
    coef(j) = n*coef(t)
    pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
    pa(ls1:ls2,j) = 0
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pa(i,j) = m+1
    pb(i,j) = n
    call Concatena(g)
  endif

  if((n*(n-1)).ne.0) then
    nterms(g) = nterms(g) +1
    jmax(g) = jmax(g)+1
    coef(j) = n*(n-1)*coef(t)
    pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
    pa(ls1:ls2,j) = 0
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pa(i,j) = m+1
    pb(i,j) = n-1
    call Concatena(g)
  endif
endif

if( (m.gt.0) .and. (m.le.(nmax-g)) ) then
  nterms(g) = nterms(g) +1
  jmax(g) = jmax(g)+1
  coef(j) = -m*coef(t)
  pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
  pa(ls1:ls2,j) = 0
  pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
  pb(ls1:ls2,j) = 0
  pa(i,j) = m
  pb(i,j) = n+1

```

```
    call Concatena(g)

    if(n.ne.0) then
        nterms(g) = nterms(g) +1
        jmax(g) = jmax(g)+1
        coef(j) = -m*n*coef(t)
        pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
        pa(ls1:ls2,j) = 0
        pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
        pb(ls1:ls2,j) = 0
        pa(i,j) = m
        pb(i,j) = n
        call Concatena(g)
    endif
endif

Return
End Subroutine Comut_L1
```

Subroutine Comut_L2(i,t,g)

! t e' o numero do termo na geracao anterior
! j e' o numero de termos na geracao atual, ate este momento

Use Epdscommon

Implicit None

Integer, intent(in) :: i,t,g

Integer m,n,ls1,ls2

Integer, pointer :: j, i2

j => jmax(g)
i2 => imax(g)
ls1 = i2 +1
ls2 = 2*g +1

m = pa(i,t)
n = pb(i,t)

if(m.ne.0) **then**
 nterms(g) = nterms(g) +1
 jmax(g) = jmax(g)+1
 coef(j) = m*r*coef(t)
 pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
 pa(ls1:ls2,j) = 0
 pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
 pb(ls1:ls2,j) = 0
 pa(i,j) = m-1
 pb(i,j) = n+1
 call Concatena(g)
endif

if((n.ne.0) .and.(m.le.(nmax-g))) **then**
 nterms(g) = nterms(g) +1
 jmax(g) = jmax(g)+1
 coef(j) = -n*r*coef(t)
 pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
 pa(ls1:ls2,j) = 0
 pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
 pb(ls1:ls2,j) = 0
 pa(i,j) = m
 pb(i,j) = n
 call Concatena(g)
endif

Return

End Subroutine Comut_L2

Subroutine Comut_L3(i,t,g)

! t e' o numero do termo na geracao anterior
! j e' o numero de termos na geracao atual, ate este momento

Use Epdscommon

Implicit None

Integer, intent(in) :: i,t,g

Integer k,m,n,im1,is1,ls1,ls2

Integer, pointer :: j, i2

j => jmax(g)
i2 => imax(g)
ls1 = i2 +1
ls2 = 2*g +1
im1 = i-1
is1 = i+1

k = pa(im1,t)
m = pa(i,t)
n = pa(is1,t)

```

if( (m+1).le.(nmax-g) ) then
  if(k.ne.0) then
    nterms(g) = nterms(g) +1
    jmax(g) = j +1
    coef(j) = k*da*0.5*coef(t)
    pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
    pa(ls1:ls2,j) = 0
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pa(im1,j) = k-1
    pa(i,j) = m+1
    pa(is1,j) = n
    call Concatena(g)
  endif

  if(n.ne.0) then
    nterms(g) = nterms(g) +1
    jmax(g) = j +1
    coef(j) = n*da*0.5*coef(t)
    pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
    pa(ls1:ls2,j) = 0
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pa(im1,j) = k
    pa(i,j) = m+1
    pa(is1,j) = n-1
    call Concatena(g)
  endif
endif

if( (m.gt.0) .and. (m.le.(nmax-g)) ) then
  nterms(g) = nterms(g) +1
  jmax(g) = j +1
  coef(j) = -m*da*coef(t)
  pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)

```

```
    pa(ls1:ls2,j) = 0
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pa(im1,j) = k
    pa(i,j) = m
    pa(is1,j) = n
    call Concatena(g)
endif

Return
End Subroutine Comut_L3
```

Subroutine Comut_L4(i,t,g)

! t e' o numero do termo na geracao anterior
! j e' o numero de termos na geracao atual, ate este momento

Use Epdscommon

Implicit None

Integer, intent(in) :: i,t,g

Integer k,m,n,im1,is1,ls1,ls2

Integer, pointer :: j, i2

j => jmax(g)
i2 => imax(g)
ls1 = i2 +1
ls2 = 2*g +1
im1 = i-1
is1 = i+1

k = pb(im1,t)
m = pb(i,t)
n = pb(is1,t)

if(k.ne.0) **then**
 nterms(g) = nterms(g) +1
 jmax(g) = jmax(g)+1
 coef(j) = k*db*0.5*coef(t)
 pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
 pa(ls1:ls2,j) = 0
 pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
 pb(ls1:ls2,j) = 0
 pb(im1,j) = k-1
 pb(i,j) = m+1
 pb(is1,j) = n
 call Concatena(g)
endif

if(n.ne.0) **then**
 nterms(g) = nterms(g) +1
 jmax(g) = jmax(g)+1
 coef(j) = n*db*0.5*coef(t)
 pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
 pa(ls1:ls2,j) = 0
 pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
 pb(ls1:ls2,j) = 0
 pb(im1,j) = k
 pb(i,j) = m+1
 pb(is1,j) = n-1
 call Concatena(g)
endif

if(m.ne.0) **then**
 nterms(g) = nterms(g) +1
 jmax(g) = jmax(g)+1
 coef(j) = -m*db*coef(t)
 pa(0:i2,j) = pa(0:i2,t)
 pa(ls1:ls2,j) = 0

```
    pb(0:i2,j) = pb(0:i2,t)
    pb(ls1:ls2,j) = 0
    pb(im1,j) = k
    pb(i,j) = m
    pb(is1,j) = n
    call Concatena(g)
endif

Return
End Subroutine Comut_L4
```

```

Subroutine Concatena(g)

! Procura por termos com potencias iguais e concatena-os somando os
! coeficientes e reduzindo o valor de jmax(g)

Use Epdscommon
Implicit None

Integer, intent(in) :: g

logical checka,checkb, hit
Integer, pointer :: ifim,ji,jf
Integer k,n,iaux

ifim => imax(g)
ji => jini(g)
jf => jmax(g)
hit = .False.

! Caso exista um operador sob o sitio '-1', faz-se uma translacao para 0

if( (pa(-1,jf).gt.0).or.(pb(-1,jf).gt.0) ) then
  do k = ifim+1,0,-1
    pa(k,jf)=pa(k-1,jf)      ! Aplicando simetria de translacao
    pb(k,jf)=pb(k-1,jf)
  enddo
  pa(-1,jf) = 0
  pb(-1,jf) = 0
  if( (pa(ifim+1,jf).gt.0).or.(pb(ifim+1,jf).gt.0)) then
    imax(g) = ifim+1
  endif
  go to 11
endif

! Caso não exista operador sobre o sitio '0' faz-se uma translacao.

if( (pa(0,jf).eq.0).and.(pb(0,jf).eq.0) ) then
  do k=1,ifim
    if( (pa(k,jf).gt.0).or.(pb(k,jf).gt.0) ) then
      do n=k,ifim
        pa(n-k,jf) = pa(n,jf)
        pb(n-k,jf) = pb(n,jf)
      enddo
      pa(ifim-k+1:ifim,jf) = 0
      pb(ifim-k+1:ifim,jf) = 0
      exit
    endif
  enddo
endif

11 do k = jf-1,ji,-1
  checka = .not.(any(pa(0:ifim,jf).ne.pa(0:ifim,k)))
  checkb = .not.(any(pb(0:ifim,jf).ne.pb(0:ifim,k)))
  if( checka .and. checkb) then
    coef(k) = coef(k) + coef(jf)
    coef(jf) = 0.0d0
    jmax(g) = jf-1      ! similar a jf=jf-1
  endif

```

```

        nterms(g) = nterms(g) -1
        if(abs(coef(k)).lt.1E-8) then
            coef(k) = coef(jf)
            pa(0:ifim,k) = pa(0:ifim,jf)
            pb(0:ifim,k) = pb(0:ifim,jf)
            coef(jf) = 0.0d0
            jmax(g) = jf-1
            nterms(g) = nterms(g) -1
        endif
        hit = .True.
        exit
    endif
enddo

if (.not.hit) then

    n = (ifim +1)/2
    do k=0,n-1
        ! Aplicando simetria de reflexão+translação

       iaux = pa(k,jf)
        pa(k,jf)=pa(ifim-k,jf)
        pa(ifim-k,jf) = iaux

       iaux = pb(k,jf)
        pb(k,jf)=pb(ifim-k,jf)
        pb(ifim-k,jf) = iaux
    enddo

    do k = jf-1,ji,-1
        ! Tentando concatenar de novo

        checka = .not.(any(pa(0:ifim,jf).ne.pa(0:ifim,k)))
        checkb = .not.(any(pb(0:ifim,jf).ne.pb(0:ifim,k)))
        if( checka .and. checkb) then
            coef(k) = coef(k) + coef(jf)
            coef(jf) = 0.0d0
            jmax(g) = jmax(g)-1
            nterms(g) = nterms(g) -1
            if(abs(coef(k)).lt. precision) then
                coef(k) = coef(jf)
                pa(0:ifim,k) = pa(0:ifim,jf)
                pb(0:ifim,k) = pb(0:ifim,jf)
                coef(jf) = 0.0d0
                jmax(g) = jmax(g)-1
                nterms(g) = nterms(g) -1
            endif
        endif
        exit
    endif
enddo

endif

Return

End Subroutine Concatena

```

Subroutine WriteResults(g)

Use Epdscommon

Implicit None

Integer, intent(in) :: g

Character frase*((nmax+1)*6), parte(2)*2

Integer ai, bi, soma_pa, soma_pb, j

Integer, pointer :: i2

i2 => imax(g)

do j=jini(g),jmax(g)

```
!      0 trecho abaixo gera arquivos com todos os termos de cada geração.
!      Eles podem ficar muito grandes !
!      Por isso está limitado apenas até a segunda geracao
!
!      if (g.lt.3) then
!          frase = ''
!          do ai=0,i2
!              if(pa(ai,j).ne.0) then
!                  write(unit=parte(1),fmt='(I2)') ai
!                  parte(1) = adjustl(parte(1))
!                  write(unit=parte(2),fmt='(I2)') pa(ai,j)
!                  frase = trim(frase)//' '//A//trim(parte(1))//'^'//parte(2)
!              endif
!          enddo
!          do bi=0,i2
!              if(pb(bi,j).ne.0) then
!                  write(unit=parte(1),fmt='(I2)') bi
!                  parte(1) = adjustl(parte(1))
!                  write(unit=parte(2),fmt='(I2)') pb(bi,j)
!                  frase = trim(frase)//' '//B//trim(parte(1))//'^'//parte(2)
!              endif
!          enddo
!          write(unit=g,FMT=10) coef(j),frase
!      endif
!      Comente o trecho acima se nao quiser escrever as saidas parciais
!      Verifique também a abertura dos arquivos no arquivo principal
!      epds_recursive.f90

!      Lembrando que  $a|P\rangle \geq 0$  e  $b^n|P\rangle = \rho^n$ 
soma_pa = 0
do ai=0,i2
    soma_pa = soma_pa +pa(ai,j)
enddo
if(soma_pa.eq.0) then
    soma_pb = 0
    do bi=0,i2
        soma_pb = soma_pb +pb(bi,j)
    enddo
    c(g) = c(g) +coef(j)*(rho**soma_pb)
endif

enddo

!if(g.lt.3) write(g,*)
```

```
10  format(F8.3, '\t'C, A)
```

```
Return
```

```
End Subroutine WriteResults
```