

**Aspectos Fractais em Sistemas Complexos**

Allbens Atman Picardi Faria

Outubro de 2002

# Aspectos Fractais em Sistemas Complexos

ALLBENS ATMAN PICARDI FARIA

Orientador: Prof. JOSÉ GUILHERME MOREIRA  
Co-orientador: Prof. RONALD DICKMAN

Outubro de 2002

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS  
GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de  
DOUTOR EM FÍSICA.

# Sumário

---

<b>RESUMO</b>	<b>v</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>vi</b>
<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>I Conceitos Básicos</b>	<b>5</b>
<b>1 Autômatos Celulares</b>	<b>7</b>
1.1 Autômatos Celulares Determinísticos . . . . .	7
1.2 Autômatos Celulares Probabilísticos . . . . .	10
1.2.1 Regras de Atualização . . . . .	12
1.3 Percolação . . . . .	15
1.3.1 Percolação Direcionada . . . . .	18
<b>2 Modelos de Crescimento de Interfaces</b>	<b>21</b>
2.1 Modelos Discretos . . . . .	22
2.1.1 Números Aleatórios . . . . .	23
2.1.2 Leis de Escala e Leis de Potência . . . . .	26
2.2 Equações de Crescimento . . . . .	31
2.2.1 Modelo Linear . . . . .	32

2.2.2	Modelo Não-Linear . . . . .	34
2.2.3	Ruídos Correlacionados . . . . .	36
<b>II</b>	<b>Aplicações</b>	<b>40</b>
<b>3</b>	<b>O Modelo de Domany-Kinzel</b>	<b>44</b>
3.1	Diagrama de Fases e o Método do Expoente de Crescimento . . . . .	45
3.1.1	Representação de Interfaces . . . . .	47
3.1.2	Espalhamento de Danos . . . . .	51
3.2	Expoentes de Escala . . . . .	53
3.2.1	Esquemas de Atualização . . . . .	54
3.2.2	Prescrições Teóricas . . . . .	57
3.2.3	Resultados . . . . .	61
3.3	Aproximação de Campo Médio Dinâmico . . . . .	65
3.4	Distribuições Quase-Estacionárias de Probabilidades . . . . .	68
3.4.1	Aproximação de Um Sítio . . . . .	69
3.4.2	Aproximação de Pares . . . . .	75
<b>4</b>	<b>PCA com Interações de Três Sítios</b>	<b>81</b>
4.1	O Modelo . . . . .	82
4.2	Teoria de Campo Médio . . . . .	83
4.2.1	Aproximação de Um Sítio . . . . .	83
4.2.2	Aproximação de Pares . . . . .	87
4.2.3	Espalhamento de Danos . . . . .	89
4.3	Simulações . . . . .	92

<b>5</b>	<b>Modelo discreto gerador de perfis auto-afins de solos</b>	<b>96</b>
5.1	O Modelo . . . . .	97
5.2	Resultados . . . . .	101
<b>6</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>105</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>108</b>
<b>A</b>	<b>Histórico: o Nascimento de uma Nova Ciência</b>	<b>109</b>
A.1	O Surgimento da Termodinâmica e a Consolidação do Paradigma Determinista . . . . .	112
A.2	Da Termodinâmica à Física Estatística: os Primórdios de uma Teoria Probabilística sob a Égide do Determinismo. . . . .	124
A.3	O Apogeu da Mecânica Estatística e o Limiar da Teoria do Crescimento Fractal . . . . .	132
<b>B</b>	<b>Transições de Fase e Fenômenos Críticos</b>	<b>142</b>
B.1	Relações Termodinâmicas . . . . .	144
B.2	Expoentes Críticos . . . . .	148
B.3	Teorias Clássicas . . . . .	151
B.3.1	Teoria Fenomenológica de Landau . . . . .	151
B.3.2	Teoria de Campo Médio para Sistemas Magnéticos . . . . .	155
B.3.3	A Função Correlação de Pares e a Teoria de Ornstein-Zernike . . . . .	158
B.4	Modelo de Ising . . . . .	162
B.5	Escala, Universalidade e o Grupo de Renormalização . . . . .	165
B.5.1	Hipótese de Escala para os Potenciais Termodinâmicos . . . . .	166
B.5.2	Hipótese de Escala para a Função Correlação . . . . .	168
B.5.3	A Construção de Kadanoff . . . . .	169

<b>C</b>	<b>Fractais</b>	<b>172</b>
C.1	Geometria Fractal . . . . .	173
C.1.1	Dimensão Fractal . . . . .	174
C.1.2	Autosimilaridade e Autoafinidade . . . . .	176
C.1.3	A Geometria de Superfícies Rugosas Auto-afins . . . . .	180
<b>D</b>	<b>Apêndice D</b>	<b>183</b>
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .	185

# Resumo

A teoria do crescimento fractal é um dos mais fascinantes temas que surgiu na Física durante a segunda metade do século XX, tanto pela interdisciplinaridade das suas aplicações quanto pelo sucesso da teoria em descrever uma gama diversa de fenômenos apresentados por sistemas complexos. Neste trabalho, propomos uma síntese do tema a partir do estudo de sistemas simples e de modelos discretos, de modo a constituir um arcabouço teórico suficiente para a análise detalhada de problemas aplicados, utilizando cálculos analíticos e simulações. A principal contribuição deste trabalho consiste em utilizar conceitos fractais para analisar o crescimento de superfícies rugosas geradas por sistemas fora do equilíbrio. Nesse contexto, introduzimos um método alternativo para a identificação de transições de fase a partir da medida de expoentes críticos, possibilitando de maneira natural a verificação de classes de universalidade e classificação de vários tipos de transições. Outra contribuição original é a introdução de um modelo de deposição no qual pode-se escolher tanto a distribuição de tamanhos para as partículas (agregados) quanto a morfologia das mesmas. Inicialmente projetado para simular perfis de solos, esse modelo representa uma generalização para o crescimento de superfícies fractais, o que lhe atribui versatilidade suficiente para sua aplicação em vários processos de deposição.

# Abstract

The fractal growth theory is one of the most attractive subjects that arose in the Physics during the second half of the 20<sup>th</sup> century, as much for the interdisciplinarity of its applications how much for the success of the theory in describing a wide range of phenomena present in complex systems. In this work, we propose a synthesis of the subject from the study of simple systems and discrete models, in order to constitute a theoretic background sufficient for a detailed analysis of applied problems, using analytic calculations and simulations. The main contribution of this work consists of using fractal concepts to analyze the growth of rough surfaces generated by nonequilibrium systems. In this context, we introduce an alternative method to identify phase transitions using the measure of critical exponents, making possible in natural way the verification of universality classes in these transitions. Another original contribution is the introduction of a deposition model which allows the choice as of the particle (agregate) size distribution as the agregate morfologies. Initially designed for simulate soil profiles, this model represents a generalization of the fractal surface growth, what ascribe to it enough versatility to its application in several deposition processes.

# Introdução

---

Desde sua origem, em meados do século XIX, a Física Estatística tem desempenhado um papel fundamental na descrição, compreensão e concepção dos fenômenos naturais. Originalmente criada para tratar sistemas onde o número de variáveis era proibitivamente grande, a disciplina experimentou um notável desenvolvimento a partir da segunda metade do século XX, devido em grande parte ao advento dos computadores. Desde então, a Mecânica Estatística tornou-se a principal ferramenta para lidar com a complexidade em diversos sistemas, e a Simulação computacional se firmou como uma nova ênfase na Física, ao lado da Teoria e do Experimento. Entre os vários conceitos oriundos dos desdobramentos da teoria, alguns causaram um impacto profundo na Física e na ciência em geral, caso da Geometria Fractal, da Teoria de Escala e do Caos, a ponto de podermos falar de uma verdadeira mudança de paradigma em curso.

Afim de enriquecer esta discussão, apresentamos no Apêndice A deste trabalho um histórico da Física Estatística a partir das suas origens, na Termodinâmica e na Teoria Cinética dos Gases, até o florescimento dos fractais no final do século XX, após o apogeu experimentado pela Mecânica Estatística com as técnicas do Grupo de Renormalização e a Hipótese de Escala e Universalidade. Dessa forma, esperamos deixar claro quais as principais motivações que nos levaram a trabalhar com o tema desta Tese e tornar explícita sua relevância para as demais áreas do conhecimento humano, já que o intuito central desse apêndice é mostrar o papel histórico da Física Estatística na mudança em nossa concepção da realidade.

Em particular, estaremos interessados na Teoria do Crescimento Fractal, tema que tem despertado um interesse enorme nos últimos anos, principalmente devido à aplicabilidade desta teoria na descrição e análise de fenômenos fora do equilíbrio termodinâmico. Neste trabalho, oferecemos uma síntese do assunto explorando aspectos fractais no crescimento de superfícies rugosas, em processos de deposição de partículas e no estudo de transições de fase em autômatos celulares probabilísticos, onde apresentamos os artigos publicados pelo autor, em colaboração com os orientadores, nos últimos dois anos.

Como é praxe em trabalhos dessa natureza, abordaremos no corpo da Tese apenas as contribuições originais do presente trabalho, deixando para os apêndices o arcabouço teórico necessário para a plena compreensão das aplicações, mas cuja leitura pode ser dispensada pelo leitor já familiarizado com os tópicos abordados. Dessa forma, apresen-

tamos nos apêndices e na primeira parte (Conceitos Básicos) alguns sistemas simples, modelos discretos e equações contínuas, onde o nível de complexidade permite o aparecimento de uma diversa gama de comportamentos, como transições de fase de 1ª e 2ª ordens, criticalidade auto-organizada e transições de enrugamento. Antes de fazermos a apresentação do corpo da Tese, introduziremos os assuntos abordados pelos apêndices, afim de que o leitor possa avaliar a necessidade ou não da leitura dos mesmos.

No Apêndice B, apresentaremos um resumo da teoria das Transições de Fase no contexto da Física Estatística do Equilíbrio, onde fazemos uma revisão dos principais conceitos termodinâmicos envolvidos, com atenção especial para sistemas magnéticos. Nesse ínterim, apresentamos a teoria de Curie-Weiss para o magnetismo e a teoria de Landau para as transições de fase, onde mostramos como o comportamento dos sistemas na criticalidade pode ser descrito por um conjunto de expoentes críticos. Em seguida, apresentamos o modelo de Ising, o primeiro a ser resolvido exatamente em um caso não-trivial e fornecer expoentes críticos compatíveis com os valores encontrados em experimentos em sistemas reais. O modelo de Ising se tornou o principal modelo estudado pela Mecânica Estatística e o estudo detalhado de suas propriedades na criticalidade levou ao desenvolvimento das leis de escala e do grupo de renormalização. Dessa forma, ao final da década de 1970, a Mecânica Estatística foi capaz de fornecer um panorama de classes de universalidade para as transições de fase, além de um formalismo rigoroso que poderia ser aplicado tanto a problemas no equilíbrio quanto fora dele, tal como detalhado na última seção desse apêndice.

Entretanto, este não foi o único desdobramento da teoria; as estruturas encontradas nos sistemas em seus pontos críticos levou à descoberta de uma nova geometria na natureza, a Geometria Fractal, capaz de descrever com alto grau de fidelidade tanto as estruturas formadas na criticalidade quanto uma diversidade de formas encontradas na natureza. No Apêndice C, fazemos um breve apanhado desta geometria, com atenção especial ao estudo de superfícies auto-afins, o tema central das aplicações desta Tese. Esta geometria é intrinsecamente associada à criticalidade e fornece ferramentas essenciais para quantificação e plena compreensão dos fenômenos críticos

Separamos o corpo da Tese em duas partes: na primeira parte apresentamos os conceitos básicos indispensáveis para a total compreensão das aplicações, mostradas na segunda parte. No primeiro capítulo, apresentamos os autômatos celulares, uma classe de modelos intrinsecamente computacionais que possuem um amplo espectro de aplicações, e nos quais se concentra a maior parte das contribuições deste trabalho. Em particular, estaremos interessados no estudo de dois autômatos celulares probabilísticos, cuja classe de universalidade é a mesma apresentada pela percolação direcionada, tema abordado na última seção desse capítulo.

No segundo capítulo, fazemos um breve estudo dos modelos de crescimento de superfícies, abordando tanto modelos discretos quanto equações contínuas de crescimento, bem como o problema de geração de números aleatórios. Mostraremos que a rugosidade das superfícies

geradas possuem propriedades de escala universais, as quais podem ser associadas a expoentes críticos que governam o comportamento do sistema e caracterizam as diferentes classes de universalidade associadas ao crescimento de superfícies.

Na segunda parte, apresentamos três problemas aplicados onde utilizamos os conceitos e as ferramentas apresentadas nos apêndices e na primeira parte: o estudo de perfis rugosos gerados por autômatos celulares probabilísticos, as propriedades quase-estacionárias das transições para o estado absorvente presente nesses modelos e um modelo discreto para simular perfis de solos. Como já dissemos, estes tópicos relacionam-se diretamente com os artigos científicos publicados pelo autor durante o período de doutoramento.

No terceiro capítulo, fazemos um estudo detalhado do autômato celular probabilístico de Domany-Kinzel em uma dimensão (DKCA), um dos principais modelos da Mecânica Estatística Fora do Equilíbrio. Em cada uma das três seções desse capítulo, exporemos o conteúdo de um artigo diferente, iniciando pelo estudo do diagrama de fases do DKCA. Através do método do expoente de crescimento para identificação de transições de fase, proposto pelo autor em colaboração com o orientador, levantamos o diagrama de fases do DKCA. O método consiste em medir o expoente de crescimento associado à representação de interfaces do DKCA que, na criticalidade, possui um máximo cujo valor está associado à classe de universalidade da percolação direcionada. Além do expoente de crescimento, pode-se utilizar a representação de interfaces para se determinar os outros expoentes críticos associado ao crescimento de superfícies rugosas auto-afins, que é o objetivo da seção seguinte. Na última seção do capítulo, mostramos um estudo analítico do DKCA, feito pelo autor em colaboração com o coorientador, onde é apresentado um formalismo para se estudar transições de fase para um estado absorvente em sistemas discretos que apresentam um regime quase-estacionário (caso do DKCA).

No capítulo seguinte, estudamos outro autômato celular probabilístico unidimensional que pode ser considerado a extensão natural do DKCA pois, apesar de apresentar um parâmetro a mais no diagrama de fases, encontra-se na mesma classe de universalidade. Este modelo foi proposto originalmente considerando-se apenas um plano do espaço tridimensional de parâmetros; neste trabalho estendemos a análise, esboçando o comportamento do rico diagrama de fases do modelo em três dimensões, que apresenta transições contínuas e descontínuas, uma linha de pontos tricríticos com um ponto bicrítico terminal e uma transição reentrante para o espalhamento de danos. Algumas das características descritas foram observadas pela primeira vez em diagramas de fase de autômatos celulares e encontram-se em um artigo recentemente submetido para publicação.

No quinto capítulo, apresentaremos um modelo de deposição de que considera partículas (agregados) com diferentes tamanhos e morfologias, cuja motivação inicial foi a simulação de perfis de solos. Esse trabalho foi publicado após um curto intercâmbio científico do autor no Instituto de Geologia da Universidade da Coruña, Espanha, onde vários projetos experimentais relacionados a esse tema têm sido desenvolvidos.

Finalmente, apresentamos nossas conclusões e perspectivas no capítulo final, onde incluímos um epílogo apontando alguns prováveis e outros *desejáveis* desdobramentos desta Tese.

**Parte I**

**Conceitos Básicos**

# Preâmbulo

---

Uma definição simplista, mas bastante disseminada, considera que sistemas complexos são redutíveis a subsistemas simples que, quando concatenados, desencadeiam um comportamento coletivo não trivial. Tais subsistemas podem ser idênticos ou diferentes, freqüentemente são conectados de maneira não trivial, podendo se diferenciar em partes, componentes ou estruturas. Exemplos de sistemas complexos são inúmeros, e freqüentemente envolvem disciplinas diversas como física, biologia, computação, química, ciências sociais, etc. Utilizando esta definição, faremos nesta primeira parte uma descrição sucinta de diferentes tópicos dentro da Física Estatística Fora do Equilíbrio que, ao lado dos Apêndices B e C, constituem o arcabouço teórico suficiente para a total compreensão das aplicações do trabalho.

Os dois capítulos seguintes são breves introduções para os assuntos mais intimamente ligados às aplicações da tese; inicialmente, apresentamos os autômatos celulares (CA), que se tornaram um dos principais modelos da Física Estatística Fora do Equilíbrio, apresentando uma vasta gama de aplicações [183], e que corroborou para a incorporação dos conceitos fractais pelo meio científico. Em particular, estaremos interessados no estudo dos autômatos celulares probabilísticos (PCA's). Finalizamos com uma pequena seção onde apresentamos alguns dos principais conceitos em percolação, sobretudo aqueles relacionados a percolação direcionada.

De fato, pode-se observar que a geometria fractal emerge naturalmente tanto nas imediações dos pontos críticos, nos padrões formados pelos CA e no aglomerado infinito no limiar de percolação, quanto no crescimento de superfícies fora do equilíbrio, tema do segundo capítulo desta parte. Para abranger os principais conceitos na análise do crescimento de superfícies, apresentaremos os principais modelos discretos, as leis de escala e potência associadas ao comportamento da rugosidade, o limite contínuo descrito pelas equações de crescimento e casos especiais de ruídos correlacionados, que fornecerão um panorama de classes de universalidade para o crescimento de superfícies rugosas fora do equilíbrio.

# Capítulo 1

---

## Autômatos Celulares

Autômatos Celulares (CA's) são modelos matemáticos simples totalmente discretizados - espacialmente, temporalmente e no número de estados de cada sítio. Os CA's foram propostos por John Von Neumann [175] na década de 1960, mas se considerarmos o algoritmo utilizado para se obter os coeficientes de uma expansão binomial, o conhecido "triângulo de Pascal", este pode ser considerado o CA pioneiro (vide Figura C.6). Estes modelos apresentam diversas aplicações em diferentes ramos da ciência e tecnologia, tais como na Física Fora do Equilíbrio [184, 166, 46, 167], reações químicas [91], dinâmica de populações [123], computação [135], biologia [165, 183], geologia [147], medicina [190], etc.

O interesse nestas estruturas tem crescido enormemente nos últimos anos [135], principalmente devido ao enorme sucesso dos CA's em descrever uma vasta gama de fenômenos nos mais variados sistemas, pertencentes a diferentes áreas do conhecimento [183]. As regras que determinam a evolução temporal dos CA's são locais, dependendo apenas do estado da vizinhança de um dado sítio e do seu próprio estado. Tais regras podem ser determinísticas ou probabilísticas. Na primeira seção, faremos uma breve análise dos CA's determinísticos que, além de produzirem estruturas fractais, apresentam os elementos essenciais para a ocorrência de um regime caótico. Na seção seguinte e na segunda parte, tratamos dos autômatos celulares probabilísticos (PCA's), o tema principal desta Tese. Finalmente, apresentamos na última seção um breve estudo sobre percolação, em especial da percolação direcionada, cuja classe de universalidade é a mesma das transições de fase em um dos principais PCA's: o autômato de Domany-Kinzel.

### 1.1 Autômatos Celulares Determinísticos

Depois de propostos por von Neumann na década de 1960, os CA's determinísticos só vieram a ser profundamente estudados por Wolfram [182] em 1983, que classificou os

padrões obtidos nesses modelos basicamente em quatro tipos:

- 1 Evolução para estado homogêneo;
- 2 Evolução para estados simples separados ou estruturas periódicas;
- 3 Evolução para padrão caótico;
- 4 Evolução para estruturas complexas localizadas.

Wolfram teve o mérito de ser o primeiro a demonstrar que um CA pode exibir comportamento complexo mesmo com regras locais. Sua classificação demonstra que tais regras podem levar a uma espécie de auto-organização, o que contribuiu inicialmente para uma maior compreensão do fenômeno de formação espontânea de padrões.

De um modo geral, um CA unidimensional consiste em um anel de  $N$  sítios, onde cada um deles pode estar em  $k$  estados possíveis:  $S_\nu = 0, 1, 2, 3, \dots, k - 1$ . Portanto, temos  $k^N$  configurações possíveis para uma cadeia. Cada configuração  $(S_1, S_2, \dots, S_N)$  pode ser indexada por um inteiro  $i$ . A probabilidade de uma dada configuração  $i$  evoluir no tempo é dada por  $P_i(t)$ , onde  $t$  é discreto. A taxa de transição,  $T_{ij}$ , para o sistema estar na configuração  $i$  no tempo  $t$ , se no tempo anterior ele estava na configuração  $j$ , é definida por

$$P_i(t) = \sum_{j=0}^{k^N-1} T_{ij} P_j(t-1) . \quad (1.1)$$

A matriz  $T_{ij}$  é definida a partir das regras locais de transição do CA que, em geral, dependem do estado do sítio,  $S_\nu$ , e de seus vizinhos.

Nos autômatos estudados por Wolfram, esta dependência se restringe aos primeiros vizinhos

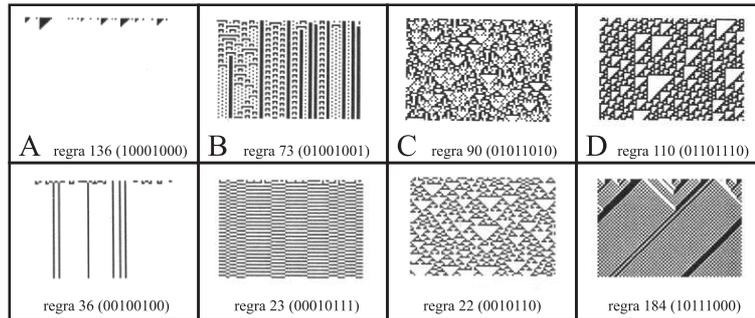
$$T_{ij} = \prod_{\nu=1}^N p(S_\nu^i | S_{\nu-1}^j, S_\nu^j, S_{\nu+1}^j) , \quad (1.2)$$

onde  $p(S_\nu^i | S_{\nu-1}^j, S_\nu^j, S_{\nu+1}^j)$  é a probabilidade local do sítio  $\nu$  estar no estado  $i$  dado que sua vizinhança estava na configuração  $j$  no passo de tempo anterior. Como os CA's são determinísticos,  $p = 0$  ou  $1$ , de modo tal que cada regra pode ser identificada a um inteiro,

$$n = \sum_{\alpha=0}^{k^3-1} S'(\alpha) k^\alpha , \quad (1.3)$$

onde  $\alpha = S_{\nu-1} k^2 + S_\nu k + S_{\nu+1}$  denota a vizinhança da variável  $S_\nu$  no tempo  $t$  e  $S'(\alpha)$  é o valor que a variável  $S_\nu$  toma no tempo  $t + 1$ , se o sistema está na configuração  $(S_{\nu-1}, S_\nu, S_{\nu+1})$  no tempo  $t$ .

Portanto, teremos  $k^{kz}$  regras possíveis para  $k$  estados e  $z$  vizinhos considerados. Se consideramos somente o estado dos primeiros vizinhos e do próprio sítio, em  $d = 1$  e  $k = 2$  existem  $2^{2^3} = 256$  regras e em cada uma delas o estado estacionário do sistema corresponde a um dos comportamentos enumerados acima. Geralmente, estaremos interessados em regras de transição que obedecem duas propriedades: um estado vazio,  $(0, 0, 0)$ , não pode levar a um estado ocupado, ou seja,  $p(1|0, 0, 0) = 0$ , e as probabilidades de transição devem ser totalísticas (dependem somente do número de sítios ativos), o que resulta nas simetrias,  $p(S'|1, 0, 0) = p(S'|0, 0, 1) = p(S'|0, 1, 0)$  e  $p(S'|1, 1, 0) = p(S'|0, 1, 1) = p(S'|1, 0, 1)$ . No caso de uma regra obedecer estas duas propriedades, dizemos que a regra é legal. Para  $k = 2$  e  $z = 3$  existem 32 regras legais [183].



**Figura 1.1:** *Classes de CA's determinísticos. Mostramos em cada coluna dois exemplos de CA's na mesma classe. Em A, temos a evolução para um estado homogêneo; em B, evolução para estados simples ou configurações periódicas; em C formação de padrões caóticos e em D, estruturas complexas localizadas. (Retirada de [183].)*

## Espalhamento de Danos

De maior interesse físico são os padrões que apresentam evolução para padrões caóticos. Para identificarmos se uma dada regra apresenta um regime caótico é preciso considerar a evolução conjunta de um par de autômatos aos quais se aplica o método de propagação de danos. Esse método consiste em considerar duas réplicas de um CA, onde em uma delas é feita uma alteração (dano), uma mudança nos estados em um certo número dos sítios; a seguir, ambas são colocadas para evoluir no tempo sujeitas à mesma regra e a distância de Hamming entre os CA's é medida ao longo do tempo,

$$D_H = \sum_i^N (\sigma_i(t) - \sigma'_i(t)) , \quad (1.4)$$

onde  $\sigma_i$  é o estado do sítio  $i$ , e  $\sigma'_i$  é o estado do mesmo sítio na réplica. O comportamento deste parâmetro determina se uma determinada regra leva a um comportamento caótico quando, para tempos longos e  $N \rightarrow \infty$ , a distância de Hamming diverge,  $D_H \rightarrow \infty$ .

Esse comportamento divergente entre duas réplicas idênticas, onde em uma delas foi feito um pequeno dano, demonstra a sensibilidade do sistema em relação a pequenas flutuações nas condições iniciais e é uma das características mais marcantes apresentada por sistemas caóticos [64, 135]. Nas Figuras 1.1 e 1.2 mostramos exemplos das diferentes classes de autômatos e ilustramos o método de espalhamento de danos aplicado a duas classes diferentes de autômatos.

A  regra 136 (10001000)	B  regra 73 (01001001)	C  regra 90 (01011010)	D  regra 110 (01101110)
 regra 36 (00100100)	 regra 23 (00010111)	 regra 22 (00101110)	 regra 184 (10111000)

**Figura 1.2:** Espalhamento de danos em cada uma das classes mostradas na Figura 1.1. O dano é provocado alterando-se o estado de um único sítio. Observe que na classe C o dano espalha por todo o sistema, indicando a divergência da distância de Hamming, o que é esperado em um regime caótico. (Retirada de [183]).

## 1.2 Autômatos Celulares Probabilísticos

Os autômatos celulares probabilísticos (PCA's) são processos markovianos discretos, descritos por um conjunto de variáveis discretas que são definidas em uma rede - um problema completamente discretizado! Dessa forma, os PCA's se adequam perfeitamente para serem estudados por simulação computacional. Antes de definirmos precisamente esta classe de autômatos, é necessário que façamos uma breve introdução ao estudo de processos estocásticos markovianos.

A teoria dos fenômenos estocásticos markovianos é mais um tema extremamente vasto, cujo estudo pormenorizado estaria muito além do escopo deste trabalho. Recentemente, Tomé e Oliveira [167] publicaram um ótimo trabalho abordando criteriosamente este tema, e que será a principal referência utilizada nas seções seguintes. Um processo markoviano é aquele onde a probabilidade de que um dado sistema esteja em um estado  $(y_n, t_n)$  depende apenas do estado do sistema no instante anterior,  $(y_{n-1}, t_{n-1})$ . Dessa forma, um processo markoviano corresponde ao limite de um processo estocástico, como mostrado a seguir.

Um processo estocástico fica completamente determinado pela distribuição de probabilidades conjunta,  $P_l(n_0, n_1, \dots, n_l)$ , onde  $y_t = n_0$  para  $t = 0$ ,  $n_1$  para  $t = 1$ , e assim sucessivamente. Uma variável aleatória que depende de um parâmetro  $t$  é chamada de estocástica se  $t$  corresponde ao tempo. No caso do tempo ser tomado como discreto, a

variável estocástica correspondente também será discreta. A probabilidade condicional,  $\mathcal{P}_{l+1}(n_{l+1} | n_0, n_1, \dots, n_l)$ , indica a probabilidade de que a variável estocástica  $y_n$  assuma o valor  $n_{l+1}$  em  $t = l + 1$  dado que, nos instantes anteriores  $t_0, \dots, t_l$ , ela tenha assumido os valores  $n_0, \dots, n_l$ . No caso em que esta probabilidade se reduzir à probabilidade condicional  $\mathcal{P}_{l+1}(n_{l+1} | n_l)$ , então o processo estocástico é denominado markoviano.

Os PCA's também podem ser classificados como sistemas irreversíveis com estados absorventes. Em sistemas irreversíveis, o estado estacionário do sistema não possui reversibilidade microscópica, e portanto, não obedece ao princípio do balanço detalhado, encontrando-se fora do equilíbrio termodinâmico. Há pelo menos duas espécies de sistemas irreversíveis estudados na literatura, aqueles que possuem simetria de inversão e os com um estado absorvente. No primeiro caso, os sistemas são invariantes à inversão dos estados  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ , aplicada a todos os sítios da rede; esse é o caso do modelo de Glauber-Ising e, segundo o princípio da universalidade do ponto crítico, irreversíveis ou não, modelos com uma mesma simetria devem pertencer à mesma classe de universalidade e apresentar o mesmo comportamento na criticalidade. Entre os sistemas irreversíveis com simetria de inversão mais estudados [166] estão o modelo do votante, o modelo do votante majoritário e o modelo de Glauber irreversível, que apresentam as mesmas propriedades universais independentemente dos detalhes microscópicos, desde que as regras sejam locais e de curto alcance.

No caso de sistemas irreversíveis com um estado absorvente, as taxas de transição violam o princípio do balanço detalhado, uma vez que a transição do estado absorvente para qualquer estado é proibida. Portanto, a irreversibilidade e a natureza fora do equilíbrio são características intrínsecas a estes modelos, que tampouco podem ser descritos por hamiltonianos. De um modo geral, os sistemas considerados são definidos em uma rede onde cada sítio está associado uma variável estocástica  $\sigma_i$ , que pode assumir  $k$  valores. Uma configuração do sistema é denotada por  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L)$ , considerando-se uma rede com  $L$  sítios. Existem dois tipos de dinâmica para a atualização dos estados em cada sítio: a atualização seqüencial, ou assíncrona, onde a cada intervalo curto de tempo no máximo um sítio da rede tem seu estado atualizado, e a atualização paralela, ou síncrona, onde a cada passo de tempo todos os sítios da rede possuem seus valores atualizados.

Entre os modelos de atualização assíncrona mais estudados estão o processo de contato [77], o modelo de Schögl [151], associado a reações químicas com um estado absorvente, modelos de dinâmica de populações [167] e modelos com múltiplos estados absorventes, como o processo de contato por pares [40]. No caso da atualização síncrona, os principais modelos estudados são os autômatos celulares probabilísticos (PCA's).

Os PCA's têm sido amplamente utilizados para simular os mais variados sistemas, abrangendo disciplinas diversas como biologia, computação, física, química, ciências sociais, etc. [46, 183, 190]. De um modo geral, os PCA's apresentam um grande sucesso em descrever fenômenos em todas estas áreas, caracterizando-se como um dos modelos fundamentais para descrever sistemas complexos. Na subseção seguinte apresentaremos os modelos que

estudaremos em detalhes nas aplicações da IIª parte.

### 1.2.1 Regras de Atualização

Já vimos que autômatos celulares são modelos definidos na rede, onde cada sítio pode estar em  $k$  estados. No caso mais simples,  $k = 2$  e  $\sigma_i = 0(1)$ . Os estados de cada sítio são atualizados de forma síncrona e obedece regras determinísticas, conforme já apresentamos. No caso dos autômatos celulares probabilístico (PCA's), as regras de atualização são probabilísticas, e o estado de cada sítio depende apenas do estado de seus vizinhos no passo de tempo anterior (processo markoviano).

A atualização síncrona do sistema impossibilita-nos escrever uma equação mestra para um PCA, mas podemos descrever a evolução temporal do sistema através da distribuição de probabilidades  $P(\sigma)$  de uma dada configuração  $\sigma$ . No passo de tempo  $\ell$ , teremos

$$P_{\ell+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma | \sigma') P_{\ell}(\sigma'), \quad (1.5)$$

onde  $W(\sigma | \sigma')$  é a probabilidade condicional de ocorrer a transição  $\sigma' \rightarrow \sigma$  entre duas configurações do sistema e possui as propriedades,  $W(\sigma | \sigma') \geq 0$  e  $\sum_{\sigma} W(\sigma | \sigma') = 1$ .

Para uma rede com  $N$  sítios, considerando que a atualização síncrona é simultânea e independente para todos os sítios, teremos

$$W(\sigma | \sigma') = \prod_{i=1}^N \omega_i(\sigma_i | \sigma') \quad (1.6)$$

onde  $\omega_i(\sigma_i | \sigma')$  é a probabilidade condicional de transição para o estado  $\sigma_i$  dado que o sistema se encontrava na configuração  $\sigma'$  no passo anterior. Desse modo, determinar  $\omega_i(\sigma_i | \sigma')$  é condição necessária e suficiente para se definir um PCA.

Neste trabalho, estaremos interessados em estudar dois diferentes PCA's: no autômato celular de Domany-Kinzel (DKCA), o estado  $\sigma_i$  depende apenas dos estados de seus primeiros vizinhos no instante imediatamente anterior,  $\omega_i(\sigma_i | \sigma') = \omega_{DK}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1})$ . Já no caso do PCA com interações de três sítios, o próprio nome revela a natureza das taxas:  $\omega_i(\sigma_i | \sigma') = \omega_{3s}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$ .

#### DKCA

Domany e Kinzel [46] introduziram os autômatos celulares probabilísticos em 1984, considerando que as variáveis aleatórias discretas  $\sigma_i$  poderiam assumir dois valores, tal como

nos autômatos estudados por Wolfram [183]. Os autores introduziram taxas de transição probabilísticas,  $\omega_i(\sigma_i | \sigma')$  e que assumem uma forma totalística,

$$\begin{aligned} p_0 &\equiv \omega(1 | 00) = 0; \\ p_1 &\equiv \omega(1 | 10) = \omega(1 | 01); \\ p_2 &\equiv \omega(1 | 11) . \end{aligned} \tag{1.7}$$

Obviamente,  $\omega_{DK}(0 | \sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}) = 1 - \omega_{DK}(1 | \sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1})$ .

Dependendo dos valores de  $p_1$  e  $p_2$ , o DKCA pode apresentar no regime estacionário tanto um estado absorvente, onde todos os sítios estão “congelados” no estado 0, quanto pode permanecer indefinidamente com uma densidade de sítios ativos no estado 1. Desse modo, o DKCA apresenta uma transição de fase contínua, mesmo para  $d = 1$ , entre as fases *congelada* e *ativa*. Ao lado do processo de contato, o DKCA é um dos modelos mais estudados na Mecânica Estatística Fora do Equilíbrio, possuindo todos os elementos básicos para irreversibilidade. O modelo possui regras locais de curto alcance, tal como o modelo de Ising, mas diferencia-se exatamente por possuir uma transição de fases em  $d = 1$ .

O parâmetro de ordem do modelo é a densidade de sítios ativos que, na criticalidade, apresenta um comportamento do tipo lei de potência,

$$\rho \sim (p_c - p)^\beta , \quad p \rightarrow p_c^+ , \tag{1.8}$$

onde  $\beta \simeq 0.273$  é o mesmo valor encontrado na classe de universalidade da percolação direcionada (DP), que apresentaremos na seção 1.3. Esse valor é encontrado ao longo de toda a linha de transição para o estado absorvente no DKCA, exceto no ponto terminal ( $p_2 = 1, p_1 = 1/2$ ) [46, 43]. Nesse ponto, o sistema pertence à classe de percolação direcionada compacta (CDP) e  $\beta = 0$ , indicando uma transição descontínua. Os expoentes críticos da classe DP não são conhecidos exatamente, enquanto a classe CDP possui resultados exatos [93].

Inicialmente, a caracterização do DKCA era feita estudando-se o espalhamento de atividade a partir de uma única fonte, que é associado a três expoentes críticos; o número médio de sítios ativos,  $n$ , comporta-se com

$$n \sim t^\eta , \tag{1.9}$$

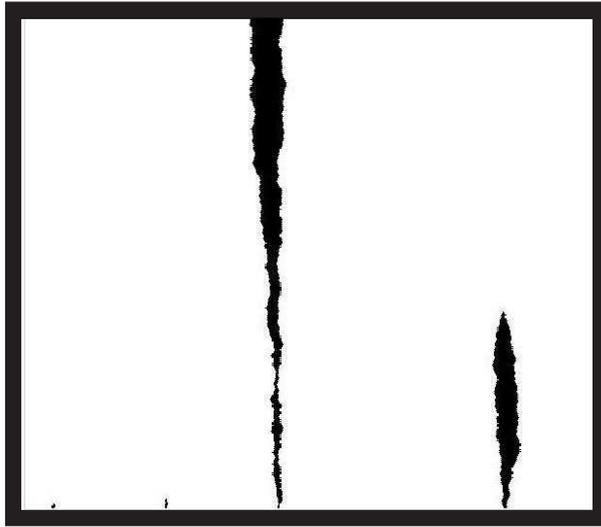
onde  $\eta \simeq 0.314$  para a DP e 0 para a CDP. A probabilidade de sobrevivência,  $P(t)$ , comporta-se com

$$P(t) \sim t^{-\delta} , \tag{1.10}$$

onde  $\delta \simeq 0.159$  para a DP e  $\delta = 1/2$  para a CPD. Finalmente, o espalhamento de sítios ocupados em torno da origem é descrito por

$$R^2 \sim t^\zeta, \quad (1.11)$$

onde  $\zeta = 1.279$  para a DP e  $\zeta = 1$  para a CDP. Dessa forma, para a CDP, a evolução dos autômatos na criticalidade leva a formação de domínios compactos, cujas fronteiras executam caminhadas aleatórias sem tendência [46, 93, 43]. Na Figura 1.3 mostramos algumas realizações do DKCA no ponto crítico ( $p_2 = 1, p_1 = 1/2$ ).



**Figura 1.3:** *Espalhamento a partir de uma única fonte para o DKCA,  $p_2=1$  e  $p_1=1/2$ . Mostramos quatro realizações diferentes, considerando diferentes sementes para a geração da sequência de números aleatórios para a mesma condição inicial. Note que a terceira amostra revela o comportamento da fronteira entre os domínios como uma caminhada aleatória, que eventualmente, pode se colapsar como nas outras amostras.*

O DKCA também apresenta uma fase caótica, associada ao espalhamento de danos envolvendo um par de autômatos. Essa e outras particularidades desse modelo serão estudadas na próxima parte, onde abordaremos o DKCA bem mais detalhadamente utilizando uma abordagem alternativa.

### PCA com interações de 3 sítios

Outro PCA que tem despertado interesse recente, e pode ser considerado como a extensão natural do DKCA, é o modelo proposto originalmente por Bagnoli *et al.* [15]. Neste modelo,  $\omega_i(\sigma_i | \sigma') = \omega_{3s}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$ , e novamente  $\omega_{3s}$  assume a forma totalística,

$$p_0 \equiv \omega(1 | 000) = 0;$$

$$\begin{aligned}
p_1 &\equiv \omega(1 | 100) = \omega(1 | 010) = \omega(1 | 100); \\
p_2 &\equiv \omega(1 | 110) = \omega(1 | 101) = \omega(1 | 011); \\
p_3 &\equiv \omega(1 | 111).
\end{aligned}
\tag{1.12}$$

Como no DKCA, a densidade de sítios ativos desempenha o papel do parâmetro de ordem, porém neste caso o sistema apresenta um grau consideravelmente maior de complexidade, já que o diagrama de fases depende de três parâmetros. Para  $p_3 = 1$ , Bagnoli *et al.* [15] demonstraram que o autômato apresenta transições de primeira e segunda ordens, dois estados absorventes e um ponto bicrítico. No presente trabalho, apresentamos um estudo mais detalhado deste PCA, onde abordamos também o caso  $p_3 = 0$ , que apresenta uma transição caótica reentrante, e demonstramos a existência de uma linha de pontos tricríticos no espaço de parâmetros tridimensional  $(p_1, p_2, p_3)$ . Esses resultados se encontram em um artigo recentemente submetido para publicação [11].

### 1.3 Percolação

Percolação significa, literalmente, passagem de água através de um meio poroso. Do mesmo modo que a difusão, a percolação pode ser descrita por modelos estocásticos [167], porém há uma diferença essencial quanto à localização da aleatoriedade: enquanto na difusão um fluido aleatório propaga-se em um meio determinístico, na percolação um fluido determinístico escoar em um meio aleatório.

No contexto de meios binários desordenados, a percolação está associada a vários processos. Em todos eles, observamos a presença de microestruturas formadas por aglomerados de sítios em um dado estado, cercados por aglomerados em outros estados, distribuídos aparentemente de maneira aleatória para um observador macroscópico. Como exemplos de tais sistemas podemos citar sistemas compostos por duas espécies [162] (misturas binárias, reações químicas), superfícies catalíticas adsorventes, misturas de materiais isolantes e condutores (onde há uma transição entre um comportamento global isolante ou condutor), sistemas lacunares modelando sistemas porosos ou superfícies rugosas [128], géis poliméricos [117], dinâmica de populações [20], propagação de doenças [165], fraturas [120, 75], propagação de incêndios em florestas [19], etc.

Uma configuração do sistema é definida pelo conjunto de sítios ocupados em uma rede com  $N$  sítios. Chamando de  $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_N)$  uma dada configuração, cada sítio tem uma probabilidade  $p$  de estar no estado  $\eta_j = 1$ , e  $q \equiv 1 - p$  de estar no estado  $\eta_j = 0$ . Portanto, a probabilidade de uma dada configuração ocorrer é dada por,

$$P(\eta) = p^n q^{N-n}, \tag{1.13}$$

onde  $n$ , o número de sítios ocupados.

Supondo uma sequência de configurações para um  $p$  fixo, no limite  $N \rightarrow \infty$  a lei (forte) dos grandes números afirma que a concentração de sítios,

$$\frac{n}{N} = \sum_j \eta_j ,$$

coincide quase com certeza com a probabilidade de ocupação  $p$ . Por outro lado, o teorema do limite central garante que as flutuações são da ordem  $N^{-1/2}$ . A média de uma função de estado  $f$  é dada por,

$$\langle f \rangle = \sum_{\eta} f(\eta)P(\eta) . \quad (1.14)$$

Denominamos por *limite de percolação* o limiar que separa dois comportamentos distintos do sistema; acima deste limite uma fase percola por todo o sistema enquanto abaixo dele não há percolação. Considerando-se sistemas discretos, podemos classificar em quatro os tipos de percolação:

- **Percolação de sítios** - neste caso, cada sítio possui uma probabilidade  $p$  de estar ocupado, e  $1-p$  de estar vazio. Cada sítio é estatisticamente independente dos outros e existe um valor crítico,  $p_c$ , acima do qual uma fase percola por todo o sistema, correspondendo ao “aglomerado infinito” formado pela união de sítios ocupados primeiros vizinhos entre si.
- **Percolação de ligações** - neste caso, a ligação entre dois sítios estará presente com probabilidade  $p_b$  e ausente com probabilidade  $1 - p_b$ ; as ligações são idênticas entre si e estatisticamente independentes. Acima de  $p_b^c$ , há um caminho de ligações presentes conectando sítios primeiros vizinhos que estende-se por todo o sistema.
- **Percolação de sítios e ligações** - este caso é a combinação dos dois casos considerados acima.
- **Percolação direcionada** - pode ser definida do mesmo modo que a percolação de sítios, ligações, ou de sítios e ligações, porém as conexões só são permitidas se possuírem uma orientação pré-definida.

Enquanto a percolação de sítios é adequada ao estudo de processos de contágio ou para modelar sistemas adsorventes, os outros tipos de percolação são mais adequados para a descrição de fenômenos de transporte [102]. O modelo de percolação direcionada é largamente utilizado, e suas aplicações se estendem desde fenômenos de invasão de um fluido em meio poroso até redes neurais [81]. A diferença entre a percolação direcionada e

a percolação de ligações pode ser facilmente compreendida se considerarmos uma rede de resistores aleatoriamente distribuídos em uma malha quadrada; nesse caso, podemos ter a percolação de ligações; se substituirmos os resistores por diodos, teremos a percolação direcionada [102].

## Aglomerados e o limite de percolação

Um aglomerado é definido como um conjunto conexo de sítios ativos, formado exclusivamente por conexões entre primeiros vizinhos. (Note que uma conexão é definida diferentemente para cada um dos tipos de percolação). Por definição, um sítio ocupado isolado é considerado um aglomerado de tamanho unitário.

Considerando uma rede infinita, o limite de percolação é associado ao valor crítico da concentração,  $p_c$ , acima do qual um aglomerado de tamanho infinito percola no sistema. O valor de  $p_c$  depende do tipo de percolação que estamos considerando, da dimensão de imersão do sistema e da geometria utilizada para se construir a rede.

Desse modo, é fácil concluir que o parâmetro de ordem do sistema é a probabilidade de um sítio pertencer ao aglomerado infinito,  $P$ . Chamando de  $\rho_s$  a probabilidade de um sítio pertencer a um aglomerado de tamanho  $s$ , exceto o aglomerado infinito, teremos

$$\sum_s \rho_s + q + P = 1. \quad (1.15)$$

Obviamente,  $\sum_{s=1}^{\infty} \rho_s + P = p$ . Portanto, para  $p < p_c$ , o parâmetro de ordem é nulo,  $P = 0$ , enquanto para  $p > p_c$ ,  $P > 0$ . Na criticalidade, o parâmetro de ordem diverge como esperado,

$$P(p) \sim (p - p_c)^\beta.$$

No caso unidimensional, um pouco de abstração permite-nos concluir que  $p_c = 1$ , ou seja, basta que exista um sítio vazio para destruir o aglomerado infinito! Outro caso onde podemos obter o ponto crítico exatamente é na árvore de Cayley. Essa construção equivale a um sistema com dimensionalidade infinita e esta solução é conhecida como a aproximação de campo médio para a percolação [162]. Na tabela 1.1 apresentamos os valores obtidos para os expoentes críticos nesta aproximação (limite Clássico), bem como os resultados simulacionais para redes com dimensões menores. Os valores clássicos para os expoentes são válidos para sistemas com dimensões superiores à dimensão crítica da percolação,  $d_c = 6$  [162]).

Na Tabela 1.1, além do expoente  $\beta$  associado ao parâmetro de ordem, mostramos o expoente  $\nu$ , associado a divergência do comprimento de correlação. Na percolação, o

**Tabela 1.1:** Expoentes críticos para a percolação em diferentes dimensões (Retirada de [167]).

Expoente	$d = 2$	$d = 3$	Clássico
$\beta$	0.139	0.41	1
$\nu$	1.333	0.88	0.5

comprimento de correlação é proporcional à extensão linear dos aglomerados do sistema. Obviamente, a medida que nos aproximamos do limiar de percolação o comprimento de correlação aumenta até atingir o tamanho do sistema (aglomerado infinito).

### Estrutura fractal e universalidade da percolação

O aglomerado crítico no limite de percolação é uma estrutura na qual todas as noções introduzidas pela geometria fractal podem ser explicitamente observadas, como a lacunaridade em todas as escalas, a autosimilaridade e estrutura ramificada. A dimensão fractal do aglomerado pode ser relacionada aos expoentes críticos a partir da relação [1]

$$D = d - \frac{\beta}{\nu} \tag{1.16}$$

onde  $D$  é a dimensão fractal e  $d$  a dimensão de imersão. Esta relação revela uma hiper-universalidade para a percolação, uma vez que ela é válida para qualquer classe de universalidade dos expoentes.

Desse modo, três diferentes níveis de universalidade estão presentes na percolação [102],

- (i) o limite de percolação é independente da interpretação física dada para ele, mas depende da geometria da rede, da dimensionalidade e do tipo de percolação;
- (ii) os expoentes críticos dependem apenas da dimensão da rede;
- (iii) as relações entre os expoentes críticos podem ser utilizadas sempre que lidamos com um sistema de percolação (isto é, estados discretos, binários e não acoplados), e em qualquer dimensão.

#### 1.3.1 Percolação Direcionada

A classe de universalidade da percolação direcionada aplica-se a uma vasta gama de sistemas, como incêndios em florestas [19], propagação de doenças, quebra da rigidez dielétrica, impurezas em sólidos, até mesmo a formação de galáxias [117], e conjectura-se que várias transições de fase estão dentro desta classe, como as transições de espalhamento de danos [68] e transições para um estado absorvente, como o modelo de Domany-Kinzel [46].

Nesta subseção, iremos considerar um modelo de percolação direcionada construído a partir da percolação de sítios e ligações, tal como o descrito por Tomé e Oliveira [167]. Cada sítio pode estar ocupado com uma probabilidade  $p$ , e possui probabilidade  $1 - p$  de estar vazio, enquanto uma ligação entre dois sítios tem probabilidade  $q$  de estar presente, e  $1 - q$  de estar ausente. O nome percolação direcionada (ou *orientada*) deve-se ao fato de somente considerarmos conexões que obedeçam uma determinada orientação pré-definida. Segundo esta orientação, podemos dividir uma rede em “camadas” de modo que uma ligação somente estará *aberta* se conectar sítios em camadas diferentes; no caso de sítios situados em uma mesma camada, a ligação estará sempre *fechada*.

Desse modo, dois sítios são conexos se estão ativos, a ligação entre eles está presente e pertencerem a camadas diferentes do sistema. Definiremos uma variável,  $\eta_{li}$ , que indica a probabilidade do sítio  $i$  na camada  $l$  esteja conectado com a camada 0 por um caminho de ligações abertas:  $\eta_{li} = 1$  no caso do sítio pertencer ao aglomerado, e  $\eta_{li} = 0$  caso contrário. Denominando por  $P_l(\eta)$  a distribuição de probabilidades para uma configuração  $\eta$  ocorrer, podemos determinar as probabilidades marginais  $P_l(\eta_i)$  através da seguinte relação, (onde consideramos apenas os dois primeiros vizinhos),

$$P_{l+1}(\eta_i) = \sum_{\eta'_i} \sum_{\eta'_{i+1}} \omega(\eta_i | \eta'_{i-1}, \eta'_{i+1}) P_l(\eta'_{i-1}, \eta'_{i+1}) . \quad (1.17)$$

Dessa maneira,  $\omega(1 | 11)$  é interpretada como a probabilidade condicional de um sítio da camada  $l$  estar conectado com a origem por um caminho de ligações abertas entre primeiros vizinhos. Evidentemente,  $\omega(1 | 11)$  está associada ao parâmetro de ordem. Podemos escrever,

$$\omega(1 | 11) = 2pq(1 - q) + pq^2 = pq(2 - q) . \quad (1.18)$$

Do mesmo modo,  $\omega(1 | 10) = \omega(1 | 01) = pq$ . Obviamente,  $\omega(1 | 00) = 0$ , pois um sítio só está conectado a um sítio da camada 0 se pelo menos um de seus primeiros vizinhos também estiver. No limite  $l \rightarrow \infty$ , a grandeza  $P_l(\eta)$  representa a probabilidade de ocorrer o aglomerado infinito: se  $P_l = 1$ , há percolação; caso  $P_l = 0$ , não há percolação.

Notamos que a percolação direcionada pode ser exatamente mapeada no DKCA se fizermos as seguintes associações,

$$\begin{aligned} p_1 &= pq ; \\ p_2 &= pq(2 - q) . \end{aligned} \quad (1.19)$$

As transformações inversas são  $q = (2p_1 - p_2)/p_1$  e  $p = p_1^2/(2p_1 - p_2)$ , e não há uma correspondência biunívoca entre elas, já que o autômato de Domany-Kinzel é mais abrangente. Dois casos particulares de interesse são a percolação de sítios,  $q = 1$ , que

corresponde à linha  $p_2 = p_1$  do DKCA, e a percolação de ligações,  $p = 1$ , que corresponde à linha  $p_2 = 2p_1 - p_1^2$ .

Devido à orientação preferencial das ligações, os aglomerados formados na percolação direcionada apresentam dois comprimentos de correlação característicos, um paralelo à orientação das ligações,  $\xi_{\parallel}$ , e outro perpendicular,  $\xi_{\perp}$ . Como na percolação tradicional, esses comprimentos de correlação divergem à medida que se aproximam do limite de percolação, sendo governados por dois expoentes críticos,

$$\xi_{\perp} \sim |p - p_c|^{\nu_{\perp}}, \quad (1.20)$$

$$\xi_{\parallel} \sim |p - p_c|^{\nu_{\parallel}}, \quad (1.21)$$

onde os expoentes  $\nu_{\perp}$  e  $\nu_{\parallel}$  referem-se às direções perpendicular e paralela, respectivamente. Novamente, não há solução exata para este modelo, e os resultados numéricos de expansões em série fornecem [85],  $\nu_{\parallel} = 1.73383(3)$  e  $\nu_{\perp} = 1.09684(2)$ . Pode-se demonstrar que o aglomerado infinito no limite da percolação direcionada é um fractal auto-afim cujo expoente de Hurst é dado por  $H = \nu_{\perp}/\nu_{\parallel} \sim 0.63261(3)$  [146, 4].

# Capítulo 2

---

## Modelos de Crescimento de Interfaces

De um modo geral, os modelos de crescimento de superfícies podem ser classificados em quatro tipos [170], todos eles considerando o crescimento de estruturas formadas por partículas idênticas:

*A)* Modelos de Crescimento Local - correspondem aos modelos de percolação invasiva [33], gelação [74] e caminhadas aleatórias [170]. Nestes modelos as regras são locais, dependendo apenas da vizinhança onde será depositada a partícula, e geralmente formam estruturas fractais autosimilares com grande lacunaridade;

*B)* Modelos Limitados por Difusão - nestes modelos as regras de deposição são não locais e apresentam dependências espaciais de longo alcance. Nessa classe de modelos a equação de Laplace é obedecida e as estruturas fractais formadas apresentam grande complexidade e muitas ramificações, sendo apropriados para descrição de processos fora do equilíbrio tais como agregação [170, 117], crescimento de tumores [58], rompimento dielétrico [130], etc.

*C)* Estruturas Auto-Afins - correspondem aos crescimento de interfaces apresentados neste capítulo, onde veremos em detalhe os principais modelos de crescimento e uma abordagem analítica usando equações de crescimento [13];

*D)* Agregação de Aglomerados - nesse caso, os modelos consideram partículas que podem se difundir na rede; à medida que as partículas se encontram formam-se aglomerados que crescem continuamente. O principal exemplo nesta classe é a agregação coloidal [170, 117].

Neste capítulo apresentaremos os conceitos fundamentais para analisar o comportamento de uma interface durante seu crescimento. Inicialmente, consideraremos modelos discretos simples, que nos permitirão introduzir os principais conceitos para se analisar o crescimento de superfícies do ponto de vista simulacional, como o comportamento do tipo lei de potência e de escala e o problema de se gerar uma sequência de números aleatórios suficientemente grande em simulações. A seguir, apresentaremos uma análise analítica do problema considerando equações contínuas de crescimento. Finalmente, veremos modelos de crescimento com ruídos correlacionados, que resultam em outras classes de universalidade.

De fato, veremos que as equações de crescimento nada mais são do que equações de Langevin, e poderemos usar argumentos de escala e cálculos analíticos para obter os expoentes críticos. Desse modo, ao final do capítulo teremos um panorama de classes de universalidade, que nos será útil para a análise dos próximos capítulos.

## 2.1 Modelos Discretos

O primeiro modelo que iremos considerar, e o mais simples de todos, é a Deposição Aleatória (DA); a partir de uma rede unidimensional finita, com  $L$  sítios indexados por  $i = 1, 2, \dots, L$ , faremos uma deposição de partículas escolhendo aleatoriamente a posição em que cada uma delas será depositada. Suporemos ainda que as partículas possuem baixa energia, isto é, uma partícula se fixa exatamente no sítio sorteado, independente daquela posição corresponder a um máximo ou mínimo local de energia. Considerando este modelo de deposição, queremos saber como se comporta a interface à medida que aumentamos o número de partículas depositadas.

No Apêndice C apresentamos os principais parâmetros utilizados para caracterizar uma interface, definidos pelas relações (C.9) a (C.11). A rugosidade é o principal parâmetro utilizado para avaliar o comportamento temporal das correlações espaciais dentro do sistema. No modelo de deposição aleatória, como as partículas são depositadas em sítios escolhidos aleatoriamente, não existem correlações espaciais ou temporais durante a deposição. Desse modo, devido a ausência de tendências na deposição, esperamos que a rugosidade creça indefinidamente obedecendo uma lei de potência em relação ao tempo da forma  $w^2 \sim t$ , onde  $w$  é a rugosidade e  $t$  o tempo, indicando que a variância na distribuição de alturas cresce linearmente com o tempo. Na Figura 2.1 mostramos a evolução dos perfis gerados, exemplificando claramente o aumento da rugosidade com o tempo.

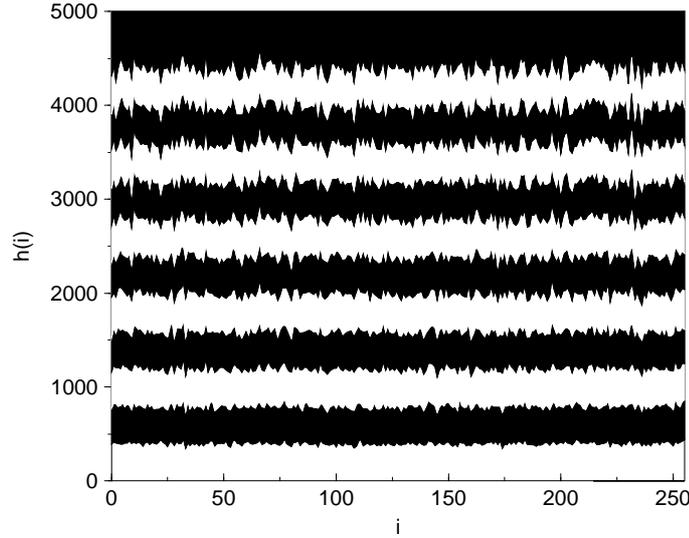
Outros dois parâmetros importantes para a caracterização de interfaces são o coeficiente de assimetria (*skewness* -  $S$ ) e a curtose (*kurtosis* -  $K$ ), definidos pelas relações,

$$S(L, t) = \frac{W_3(L, t)}{W_2^{3/2}(L, t)}, \quad (2.1)$$

$$K(L, t) = \frac{W_4(L, t)}{W_2^2(L, t)}, \quad (2.2)$$

onde os momentos  $W_n(L, t)$  são definidos pela relação C.10.

Para uma distribuição gaussiana, tanto o coeficiente de assimetria como a curtose são nulos. Para o coeficiente de assimetria este valor é o esperado, já que é notoriamente conhecido que a distribuição gaussiana é simétrica em relação a sua média, portanto, todos



**Figura 2.1:** Perfis gerados pela deposição aleatória em um substrato com  $L = 256$ . A cada 100 passos a cor das partículas é trocada.

seus momentos ímpares são nulos. Já a curtose está relacionada à forma do decaimento da distribuição em relação à média e é fácil mostrar que é nula para uma distribuição gaussiana [167]; de fato, na distribuição gaussiana todos os cumulantes são nulos para  $n > 2$ .

Voltemos agora ao problema original; considerando um tamanho de rede fixo, digamos  $L = 1024$ , podemos fazer um algoritmo e simular a deposição aleatória de um grande número de partículas, digamos  $10^{10}$  partículas, e verificar o comportamento da rugosidade, do coeficiente de assimetria e da curtose. Esse será o objetivo da próxima seção.

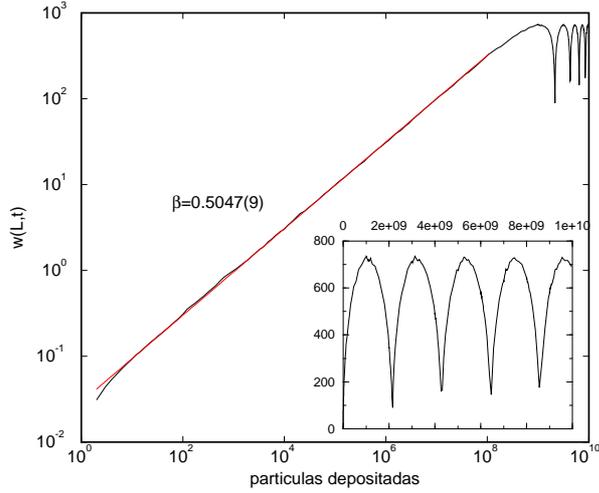
### 2.1.1 Números Aleatórios

Ao considerarmos o problema da deposição aleatória, passamos pela questão de se escolher aleatoriamente a posição em que cada partícula será depositada, a cada instante de tempo. Para isso, um algoritmo simples seria o seguinte:

- (i) sortear um número aleatoriamente dentro do intervalo  $[0, 1)$ ;
- (ii) multiplicar o número aleatório pelo tamanho da rede;
- (iii) depositar a partícula no sítio correspondente.

Esta operação pode ser repetida tantas vezes quanto for o número desejado de partículas depositadas. Entretanto, não é trivial gerar uma sequência decorrelacionada de números aleatórios, tão grande quanto se queira.

Existem diversas maneiras de se criar rotinas para geração de números aleatórios e os principais fatores que devem ser levados em consideração para escolher determinada rotina



**Figura 2.2:** Evolução da rugosidade para a deposição aleatória em um substrato com  $L=1024$  sítios usando a rotina tipo  $I_{n+1} = AI_n + B$ , em escala logarítmica. No detalhe, a mesma curva em escala linear. Note que o período do gerador é exatamente  $2^{31} \simeq 2.15 \times 10^9$ .

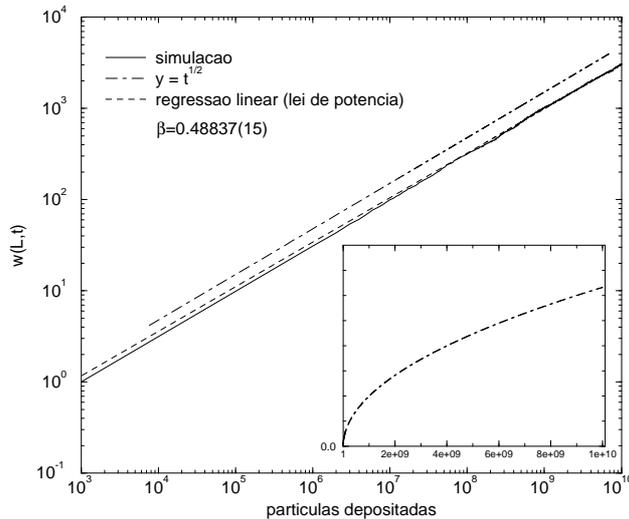
são o custo computacional para gerar uma sequência (o tempo gasto para produzi-la) e o limite de confiabilidade do gerador (período dentro do qual a sequência produzida é realmente aleatória). Neste trabalho, optamos por utilizar um gerador bastante rápido (baixo custo computacional), que considera uma rotina do tipo

$$I_{n+1} = AI_n + B, \quad \text{com } A = 843314861 \text{ e } B = 453816693,$$

onde  $I_n$  é um número inteiro positivo,  $I_{n+1}$  é o próximo número da sequência e  $A$  e  $B$  são chamados de *números mágicos* [159]. Esses números mágicos estão relacionados à quantidade de números inteiros que um computador é capaz de fornecer. Nossos computadores dispõem de 32 bits de memória para a operação com inteiros e optamos por utilizar a linguagem de programação C; portanto, temos a disposição  $2^{31}$  números inteiros. Com esse par de números mágicos, a rotina acima sorteia cada um dos  $2^{31}$  números disponíveis exatamente uma vez antes que a sequência volte a se repetir. Desse modo, se verificarmos o comportamento da rugosidade para a DA com este gerador, obteremos uma curva análoga à mostrada na Figura 2.2.

Na Figura 2.2 observamos que a rugosidade cresce com  $t^{1/2}$  até aproximadamente metade do período do gerador. Portanto, uma sequência de números aleatórios gerada por esta rotina tem seu limite de confiabilidade igual a aproximadamente  $\sim 10^8$  números. Para contornar esta limitação, há dois caminhos possíveis: pode-se escolher uma outra rotina para gerar números aleatórios, mais custosa computacionalmente, mas que forneça um limite de confiabilidade maior, ou utilizar a mesma rotina trocando-se periodicamente a semente para que a sequência recomece em outro ponto. A decisão de escolher um outro caminho dependerá da quantidade de números a serem gerados e do custo adicional do novo gerador por cada número gerado.

Existem alguns trabalhos na literatura comparando diferentes rotinas para gerar números

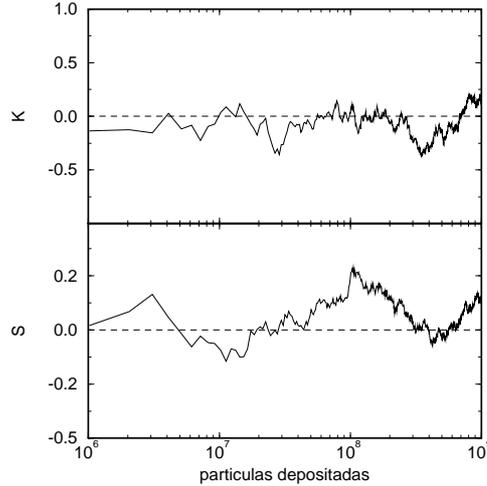


**Figura 2.3:** *Evolução da rugosidade para a deposição aleatória para uma única amostra, usando uma rotina mista, em escala logarítmica. Além dos dados simulacionais (linha cheia) mostramos a regressão linear (linha tracejada) e a curva  $y = t^{1/2}$ , deslocada para cima para melhor comparação com os dados. No detalhe, as mesmas curvas em escala normal, sem deslocamento. Note que a inclinação fornecida pela regressão é ligeiramente menor que  $1/2$ , indicando que o artifício de realizar trocas periódicas de semente não impede totalmente o desenvolvimento de correlações para um número muito grande de partículas ( $\geq 10^9$ ).*

aleatórios [144, 160], mas, sistematicamente essas rotinas alternativas são muito mais lentas que a já citada para a geração de cada número. Desse modo, optamos pelo segundo caminho, fazendo uma troca de semente na rotina a cada  $10^7$  números sorteados, ou seja, a cada  $10^7$  partículas depositadas a semente  $I_n$  usada no algoritmo de geração de números aleatórios é substituída aleatoriamente por outra, usando um segundo algoritmo. Este novo algoritmo é do tipo  $I_{n+1} = CI_n$ , onde  $C = 65539$  é um outro número mágico; este algoritmo possui um limite de confiabilidade cerca de 10 vezes menor que o primeiro. Na Figura 2.3 mostramos o comportamento da rugosidade considerando a mistura de sementes. Logo, utilizando a rotina mista descrita acima, podemos gerar uma sequência muito grande de números descorrelacionados entre si e depositar uma enorme quantidade de partículas aleatoriamente ( $> 10^{12}$  partículas).

Na Figura 2.4, verificamos o comportamento da curtose e do coeficiente de assimetria para a distribuição de alturas utilizando a rotina mista. Verifica-se que esses coeficientes tendem a zero, o que significa que a distribuição de alturas aproxima-se de uma distribuição gaussiana à medida que o número de partículas aumenta. Esse comportamento é o esperado para uma sequência espacial e temporalmente descorrelacionada - ruído *branco*.

Portanto, verificamos que para este modelo simples de deposição que a geração de números aleatórios é um problema crítico, porém contornável. O comportamento da interface produzida indica que há um crescimento indefinido da rugosidade com o tempo, segundo uma lei de potência, e que a distribuição de alturas se aproxima de uma distribuição gaussiana, como esperado para um modelo de deposição sem correlações espaciais ou temporais.



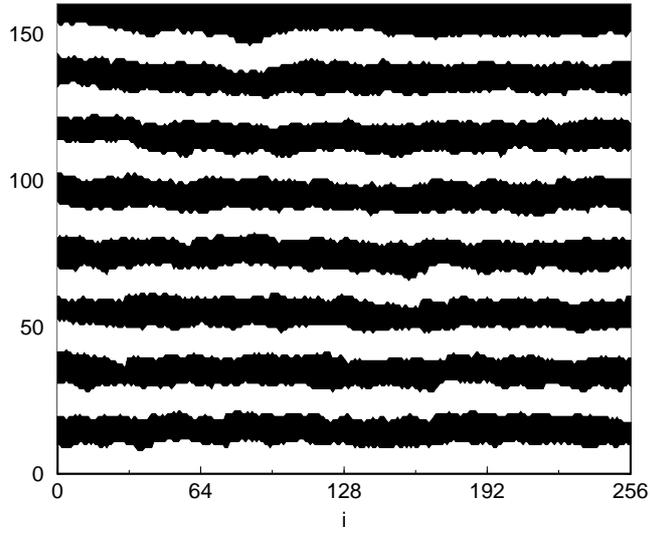
**Figura 2.4:** *Evolução do coeficiente de assimetria e da curtose para a distribuição de alturas na deposição aleatória, usando uma rotina mista, em escala semi-logarítmica. Note que, mesmo para uma única amostra, a distribuição de alturas tende para uma distribuição gaussiana.*

### 2.1.2 Leis de Escala e Leis de Potência

Nesta seção, apresentaremos dois comportamentos típicos observados quando lidamos tanto com o crescimento de superfícies quanto com fractais: leis de escala e leis de potência. Dois exemplos onde a rugosidade se comporta segundo uma lei de potência são no perfil da DA ( $w \sim t^{1/2}$ ) e na definição do expoente de Hurst, ( $w(\epsilon) \sim \epsilon^H$ ), mostrada no Apêndice C. A principal característica de uma grandeza que se comporta com uma lei de potência é sua invariância por escala. Desse modo, a rugosidade cresce com a mesma taxa na DA, independente da escala temporal de observação, e para um perfil auto-afim mantém-se invariante independente da escala de medida .

Grandezas que se comportam segundo uma lei de escala podem apresentar regimes distintos dependendo do intervalo temporal considerado. Para exemplificar, introduziremos um modelo de deposição com correlações espaciais, onde a rugosidade do perfil irá se comportar segundo uma lei de escala. Suponha que na DA as partículas possuam energia suficiente para realizarem uma relaxação superficial antes que sejam fixadas, ou seja, elas podem encontrar o mínimo local de energia na vizinhança do sítio escolhido para a deposição (a posição com a menor altura). Este modelo é conhecido como deposição aleatória com relaxação superficial - DARS [13]. A presença de tais correlações suaviza a interface, não permitindo o crescimento ilimitado da rugosidade; esse comportamento é confirmado por simulações, como observado nas Figuras 2.5 e 2.6; na Figura 2.5, onde verificamos que perfis obtidos para a DARS são muito mais suaves que as interfaces produzidas pela DA (vide Figura 2.1), e, além disso, o crescimento da rugosidade é bem mais lento.

Se definirmos um passo de tempo como a deposição de uma camada  $L$  de partículas, podemos estudar a evolução temporal da rugosidade. Como mostrado na Figura 2.6, a rugosidade cresce com uma lei de potência para escalas temporais curtas e atinge a



**Figura 2.5:** Perfis gerados pela DARS. A cada 10 camadas depositadas a cor das partículas é trocada. Note que os perfis são bem mais suaves que na DA e novamente ocorre a conservação da altura média.

saturação após um certo tempo, denominado tempo de saturação (ou de *crossover*),  $t_{\times}$ . Portanto, o comportamento da rugosidade para este modelo depende da escala temporal de observação. É importante notar que logo no início da deposição, a inclinação da curva  $w \times t$ , é maior que nos tempos seguintes. Esse comportamento denota a propagação das correlações no sistema: inicialmente, com o substrato liso e ausência de correlações a deposição se dá idênticamente como na DA ( $w \sim t^{1/2}$ ); à medida que o número de partículas depositadas aumenta, as correlações começam a crescer, diminuindo o ritmo de crescimento da rugosidade ( $w \sim t^{1/4}$ ); finalmente, as correlações atingem o tamanho do sistema fazendo com que a rugosidade entre em um regime estacionário.

Para escalas temporais longas, a rugosidade apresenta dependência com o tamanho do sistema, como observamos na Figura 2.7-A. À medida que o tamanho do sistema cresce, o tempo de saturação aumenta e, também, o valor da rugosidade de saturação. Portanto, podemos sintetizar o comportamento da rugosidade neste modelo através de três expoentes críticos:

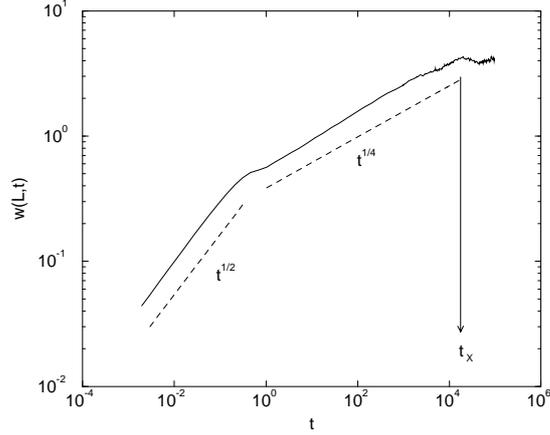
- Inicialmente a rugosidade cresce com uma lei de potência,

$$w(L, t) \sim t^{\beta_w} , \quad \text{para } t \ll t_{\times} , \quad (2.3)$$

onde  $\beta_w$  é denominado o expoente de crescimento, que caracteriza a dinâmica temporal da rugosidade e  $t_{\times}$  é o tempo de *crossover*.

- Para tempos longos a rugosidade de saturação,  $w(L, \infty)$ , cresce com o tamanho do sistema segundo uma lei de potência,

$$w(L, \infty) \sim L^{\alpha} , \quad \text{para } t \gg t_{\times} , \quad (2.4)$$



**Figura 2.6:** Evolução da rugosidade para a DARS. O tamanho do sistema é  $L = 1024$  e o resultado representa a média sobre 100 amostras. Note que ocorre a saturação da rugosidade para tempos acima do tempo de crossover, indicado por  $t_x$ ; este comportamento da rugosidade evidencia sua lei de escala. (Mostramos a curva da rugosidade para valores de tempo menores que 1 afim de realçar a propagação das correlações no sistema).

onde  $\alpha$  é o expoente de rugosidade, o segundo expoente crítico.

- O tempo de saturação também comporta-se segundo uma lei de potência em relação ao tamanho do sistema,

$$t_x \sim L^z, \quad (2.5)$$

onde  $z$  é o expoente dinâmico.

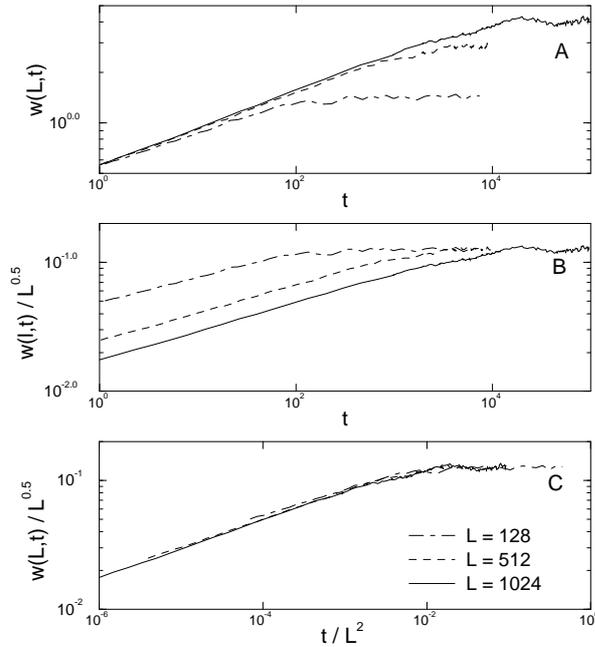
Family e Vicsek [53] propuseram uma lei de escala capaz de colapsar as várias curvas obtidas em 2.7-A em uma única função. O método proposto baseia-se na observação de que a rugosidade normalizada pela rugosidade de saturação é uma função do tempo normalizado pelo tempo de *crossover*, portanto

$$\frac{w(L, t)}{w(L, \infty)} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right), \quad (2.6)$$

onde  $f(u)$  é uma função de escala; substituindo as relações 2.4 e 2.5 em 2.6, teremos a relação de escala de Family-Vicsek:

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (2.7)$$

Como esperado, a forma da função de escala  $f(u)$  depende do regime de escala observado:  $f(u) \sim u^{\beta_w}$ , para  $u \ll 1$ , e  $f(u) = \text{const.}$ , para  $u \gg 1$ . A validade desta função de



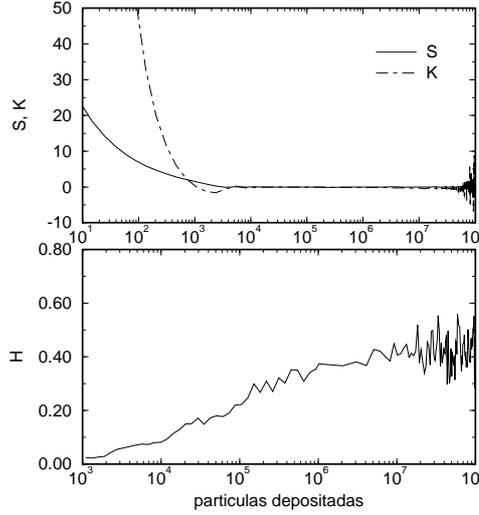
**Figura 2.7:** Colapso das curvas  $w(L,t) \times t$  para a DARS. Em A observamos várias curvas para diferentes tamanhos de sistema; em B, realizamos a normalização das rugosidades de saturação; em C, normalizamos o tempo, obtendo uma única curva colapsada. (Baseado na ref. [13]).

escala pode ser observada na Figura 2.7-B e 2.7-C. Nota-se que, com as definições acima, os três expoentes críticos não são independentes entre si, já que no limite de  $u \rightarrow 1$  deveremos ter a concordância dos dois comportamentos:  $t_{\times}^{\beta} \sim L^{\alpha}$ . Portanto, utilizando 2.5 concluímos que

$$z = \frac{\alpha}{\beta_w} . \quad (2.8)$$

Esta relação envolvendo os três expoentes críticos é válida em qualquer processo que obedeça a lei de escala (2.7).

Os expoentes da classe de universalidade do modelo DARS concordam com os obtidos analiticamente através da abordagem de equações de crescimento, tratada da próxima seção, e que fornece os seguintes valores (em  $d = 1$ ):  $\alpha = 1/2$ ,  $\beta = 1/4$  e  $z = 2$ . Podemos notar pelas Figuras 2.6 e 2.7, que as simulações confirmam estes valores, mesmo em um sistema não tão grande ( $L = 1024$ ). A evolução do coeficiente de assimetria e da curtose estão mostrados na Figura 2.8; notamos que a distribuição de alturas se aproxima rapidamente de uma distribuição gaussiana. Esse é o comportamento esperado para a distribuição de alturas no estado estacionário, onde o perfil obtido pode ser mapeado em uma caminhada aleatória, cujo perfil possui  $H = 1/2$ , indicando a ausência de correlações espaciais. A evolução do expoente de Hurst é mostrada na Figura 2.8; nota-se que o valor do expoente de Hurst se aproxima do valor esperado,  $H = 1/2$ , somente após o sistema entrar no estado estacionário. Essa observação é válida para a maioria dos modelos de crescimento fora de equilíbrio e o valor do expoente de Hurst só se iguala ao expoente da rugosidade no estado estacionário. No próximo capítulo, veremos modelos que possuem



**Figura 2.8:** *Acima: evolução do coeficiente de assimetria e curtose no modelo DARS em função do tempo, para um sistema com  $L = 1024$  sítios. Note como a distribuição de alturas tende rapidamente para uma distribuição gaussiana após o primeiro passo de tempo. Abaixo: evolução do expoente de Hurst em função do tempo; o expoente de Hurst só assume o valor esperado ( $H = 1/2$ ), no estado estacionário.*

$\alpha \neq H$ , mesmo no estado estacionário.

Definiremos agora dois outros modelos onde a rugosidade possui o mesmo comportamento de escala observado na DARS, porém com expoentes críticos pertencentes a outra classe de universalidade. Na **deposição balística** (DB) [118], após o sorteio aleatório da posição onde a partícula será depositada, a altura na qual ela irá se fixar depende da vizinhança do sítio sorteado, de modo que  $h_i(t+1) = \max[h_{i-1}(t), h_i(t) + 1, h_{i+1}(t)]$ . Esse modelo introduz correlações não lineares no sistema, produzindo reentrâncias na superfície. Os expoentes críticos desse modelo em  $1 + 1$  dimensões (rede unidimensional + evolução temporal) são:  $\alpha = 1/2$ ,  $\beta = 1/3$  e  $z = 3/2$ . No modelo de Kim e Kosterlitz (**KK**) [92], se o local sorteado para a deposição da partícula for um máximo local, a deposição é rejeitada, equivalendo-se a um modelo de deposição com desorção; apesar de não apresentar reentrâncias, este modelo está na mesma classe da DB.

Outro modelo que aparenta estar na mesma classe de universalidade da DB é o **modelo de Eden** [47], onde é definida uma *periferia* de sítios na qual ocorre a deposição de partículas. Esta periferia corresponde aos primeiros vizinhos dos sítios localizados na fronteira da superfície que não estão ocupados. Existem três variações do modelo de acordo com a probabilidade de ocupação dos sítios da periferia; na versão A, cada sítio da periferia tem a mesma probabilidade de ser ocupado; na versão B, a probabilidade de ocupação de um sítio da periferia será proporcional ao número de primeiros vizinhos ocupados; já na versão C, um vizinho da fronteira é sorteado aleatoriamente e em seguida escolhe-se um dos seus primeiros vizinhos desocupados para se fazer a deposição. Resultados simulacionais mostram que as três versões do modelo fornecem os mesmos valores para os expoentes críticos, porém o tempo de relaxação para o estado estacionário é diferente para cada um deles; a versão C é a mais rápida.

Passaremos agora para uma descrição analítica dos modelos apresentados, onde utilizaremos uma abordagem de equações diferenciais estocásticas, conhecidas como equações de Langevin, que fornecerão os diferentes expoentes críticos de cada modelo, definindo diferentes classes de universalidade, além de permitirem o estudo de outros modelos de crescimento.

## 2.2 Equações de Crescimento

Inicialmente, queremos escrever uma equação estocástica de crescimento que incorpore flutuações da interface [13]; consideremos então a seguinte equação contínua para o caso geral,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \Phi(\vec{x}, t) , \quad (2.9)$$

onde  $\Phi(\vec{x}, t)$  é o número de partículas por unidade de tempo chegando à posição  $x$ . Considerando a DA, podemos desmembrar  $\Phi(\vec{x}, t)$  em duas partes:

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = F + \eta(\vec{x}, t) , \quad (2.10)$$

onde  $F$  representa um fluxo médio de partículas e  $\eta(\vec{x}, t)$  é um ruído branco, responsável pelas flutuações nas alturas dos sítios, e com as seguintes propriedades,

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0 , \quad (2.11)$$

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t') , \quad (2.12)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  representa o valor esperado da variável e  $D$  é uma constante. Como esperado, o ruído possui valor médio nulo e ausência de correlações espaciais ou temporais, expressa pelas funções delta de Dirac. É importante notar que o ruído definido acima, que normalmente é uma variável gaussiana, possui exatamente as mesmas propriedades da sequência de números aleatórios gerada anteriormente.

Para obter as propriedades estatísticas das interfaces geradas, basta integrar (2.10)

$$h(\vec{x}, t) = Ft + \int_0^t \eta(\vec{x}, t) dt ; \quad (2.13)$$

a altura média é, portanto,

$$\bar{h}(t) = Ft ; \quad (2.14)$$

e para o valor quadrático médio teremos  $\langle h^2(\vec{x}, t) \rangle = F^2 t^2 + 2Dt$ . Esse resultado implica no seguinte comportamento para a rugosidade da interface

$$w(t) = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2} = \sqrt{2Dt} , \quad (2.15)$$

indicando o crescimento ilimitado da rugosidade com o tempo, segundo a lei de potência  $w \sim t^{1/2}$ , e em completo acordo com o obtido nas simulações anteriores. Como a rugosidade cresce indefinidamente, não são definidos expoentes de rugosidade e dinâmico para a DA.

### 2.2.1 Modelo Linear

Queremos agora introduzir correlações no sistema, alterando o modelo de deposição; inicialmente, consideremos o modelo DARS, apresentado na seção anterior. Introduziremos um termo linear que será responsável pela relaxação da superfície e, portanto, diretamente proporcional à curvatura local da interface

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t) , \quad (2.16)$$

onde  $\nu$  é o coeficiente linear, relacionado à tensão superficial. Aqui fizemos a transformação de coordenadas,  $h \rightarrow h - Ft$ , e  $\nabla^2 h(\vec{x}, t)$  indica que, para  $\nu > 0$ , os vales da interface (curvatura local positiva) são ocupados preferencialmente em relação aos picos (curvatura local negativa). Esta equação foi proposta por Edwards e Wilkinson [48] e a denominamos equação EW. De fato, a equação EW representa a equação mais simples de uma classe de equações que obedecem um grupo de simetrias. Afim de generalizar nossa discussão, iremos tratar esta classe de equações. Se consideramos a equação geral

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = G(h, \vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t) , \quad (2.17)$$

onde  $G(h, \vec{x}, t)$  é uma função geral que depende da altura  $h(\vec{x}, t)$ , as principais simetrias que esta equação deverá obedecer são [13]:

- (i) - invariância em relação à translação temporal, que faz com que a função  $G(h, \vec{x}, t)$  não dependa explicitamente do tempo;
- (ii) - invariância translacional ao longo da direção de crescimento, que retira a dependência explícita em relação a  $h$ ;
- (iii) - invariância translacional ao longo da direção perpendicular ao crescimento, que retira a dependência explícita com  $\vec{x}$ ;
- (iv) - simetrias de rotação e inversão na direção de crescimento, que excluem as derivadas ímpares em relação às coordenadas espaciais;

(v) - simetria *up and down*, que estipula que as flutuações na interface são similares em relação à sua altura média. Esta simetria exclui potências pares das derivadas de  $h$  ( $(\nabla h)^2, (\nabla h)^4, \dots$ ), e só é válida nos casos onde a velocidade média da interface é igual à taxa de deposição.

Portanto, a equação mais geral que obedece a estas simetrias é

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = (\nabla^2 h) + \dots + (\nabla^{2n} h) + (\nabla^2 h)(\nabla h)^2 + \dots + (\nabla^{2k} h)(\nabla h)^{2j} + \eta(\vec{x}, t) , \quad (2.18)$$

com  $n, k, j \in \mathbb{Z}^+$ , onde  $\mathbb{Z}$  representa o conjunto dos números inteiros. Como estamos interessados em propriedades de escala, consideremos no limite:  $h \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$ . Neste limite, podemos desprezar as derivadas de ordem superior, como mostrado a seguir, onde utilizaremos algumas propriedades de escala para mostrar a validade desta aproximação. Considerando que as interfaces possuam propriedades auto-afins é razoável supor que, para algum valor de  $\alpha$ , as interfaces sejam invariantes em relação as transformações,  $\vec{x} \rightarrow b\vec{x} \equiv \vec{x}'$  e  $h \rightarrow b^\alpha h \equiv h'$ ; dessa forma, teremos

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' \equiv b^{\alpha-2} \nabla^2 h \quad ,$$

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' \equiv b^{\alpha-4} \nabla^4 h \quad .$$

Fazendo  $b \rightarrow \infty$ , o termo  $\nabla^4 h$  claramente tende a zero mais rapidamente que  $\nabla^2 h$ , justificando a aproximação. A equação mais simples compatível com as simetrias do sistema, capaz de descrever o crescimento de uma interface é a equação EW.

Por ser linear, é possível obter a solução exata da equação EW através da análise de Fourier [127, 13]. Optaremos por obter os expoentes de escala desta equação através de um elegante argumento de escala [13]; consideremos a transformação de escala,

$$\begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow b\vec{x} \equiv \vec{x}' \quad , \\ h &\rightarrow b^\alpha h \equiv h' \quad , \\ t &\rightarrow b^z t \equiv t' \quad . \end{aligned}$$

Ora, para estas transformações os gradientes se tornam,

$$\frac{\partial}{\partial t'} = b^{-z} \frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}'^2} = b^{-2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \quad . \quad (2.20)$$

A reescala do ruído será obtida usando a propriedade da função delta  $\delta^d(a\vec{x}) = 1/a^d \delta\vec{x}$ ,

$$\begin{aligned} \langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle &\rightarrow \langle \eta(b\vec{x}, b^z t) \eta(b\vec{x}', b^z t') \rangle \\ &\rightarrow 2D \delta^d(b\vec{x} - b\vec{x}') \delta(b^z t - b^z t') \\ &\rightarrow b^{-(d+z)} \langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle . \end{aligned} \quad (2.21)$$

Logo, conclui-se que

$$\eta(\vec{x}', t') \rightarrow b^{-\frac{(d+z)}{2}} \eta(\vec{x}, t) \quad . \quad (2.22)$$

Portanto, a equação 2.16 se torna,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu b^{z-2} h(\vec{x}, t) + b^{-\frac{d}{2} + \frac{z}{2} - \alpha} \eta(\vec{x}, t) \quad . \quad (2.23)$$

Como queremos que esta equação seja invariante segundo estas transformações (já que a interface é auto afim), os expoentes dos coeficientes  $b$  serão todos nulos; logo,

$$z = 2, \quad \alpha = \frac{2-d}{2} \quad , \quad (2.24)$$

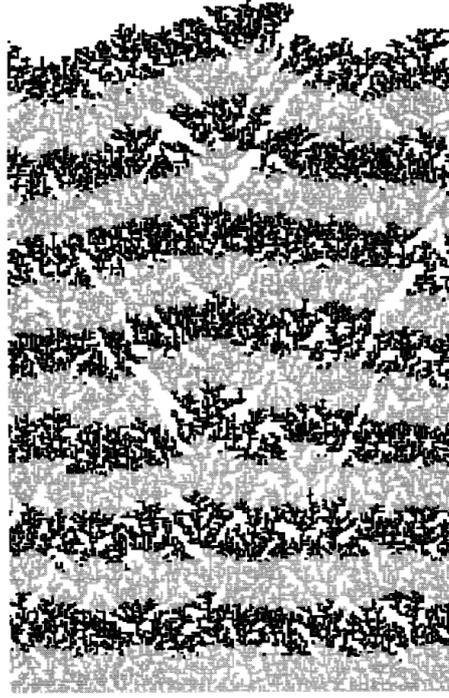
o que fornece

$$\beta = \frac{2-d}{4} \quad . \quad (2.25)$$

Se substituirmos  $d = 1$  nesta última equação veremos que a DARS pertence à mesma classe de universalidade da equação EW, conclusão que também é válida em dimensões superiores. Note que para  $d = 2$  o comportamento da rugosidade é logarítmico, enquanto que, para dimensões superiores, os expoentes críticos são negativos, o que indica o desenvolvimento de interfaces lisas (sem rugosidade).

## 2.2.2 Modelo Não-Linear

Consideremos agora um modelo de crescimento que viole explicitamente a quinta regra de simetria apresentada acima, onde a velocidade média da interface é maior que a taxa de deposição. Este é o caso do modelo de deposição balística (DB) onde, após o sorteio aleatório de um sítio, a partícula irá ser depositada na altura correspondente ao máximo local,  $h_i(t) = \max(h_{i-1}(t), h_i(t-1) + 1, h_{i+1}(t))$ . Portanto, as interfaces produzidas nesse



**Figura 2.9:** Perfis gerados pela deposição balística - DB. A cada 2500 partículas depositadas a cor é trocada; o total de partículas depositadas é 35000 em um sistema com  $L = 200$ . Note que a rugosidade é maior que na DARS, mas muito menor que na DA; além disso, é claro que não há conservação da altura média, devido a presença de reentrâncias no perfil. Retirado de [13].

processo podem apresentar reentrâncias, o que diminui a densidade do *bulk*, fazendo com que a altura média cresça bem mais rápido do que a taxa de deposição - Figura 2.9.

Para obter o termo adicional a ser adicionado à equação EW, afim de descrever a DB, consideraremos o ‘crescimento lateral’ da interface produzido pela regra de deposição; na Figura 2.10, representamos esquematicamente o crescimento lateral produzido pela deposição de uma partícula.

Pelo teorema de Pitágoras, teremos,

$$\begin{aligned} \delta h &= [(v\delta t)^2 + (v\delta t\nabla h)^2]^{1/2} \\ &= v\delta t[1 + (\nabla h)^2]^{1/2} . \end{aligned} \quad (2.26)$$

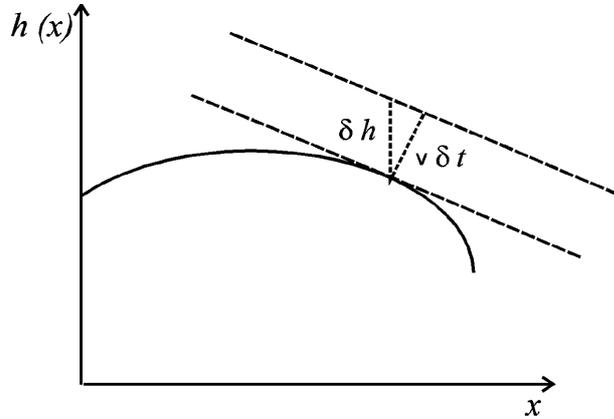
Para  $\nabla h \ll 1$ , podemos expandir o último termo da equação acima. Desse modo,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 + \dots ,$$

esta equação sugere um termo não linear da forma  $(\nabla h)^2$  para representar o crescimento lateral. Generalizando este resultado, teremos,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t) , \quad (2.27)$$

onde  $\lambda$  é o coeficiente não linear, relacionado à velocidade de propagação da interface; a equação 2.27 é conhecida como equação Kardar-Parisi-Zhang - KPZ [88].



**Figura 2.10:** *Crescimento Lateral.* As linhas paralelas tracejadas correspondem às posição da interface antes e depois da deposição de um partícula, que causa uma variação de altura na interface de  $\delta h$ , e a fronteira se desloca de  $v\delta t$ . (Retirada de [13])

A presença do termo não linear é uma evidente quebra em relação à simetria *up-down*. A causa desta quebra pode ser associada a existência de uma ‘força dirigida’ (*driving force*), perpendicular à interface, que seleciona uma direção preferencial para o seu crescimento. Uma solução completa desta equação para qualquer dimensão ainda não foi obtida, mas para  $d = 1$  pode-se obter o seguinte resultado [13],

$$\alpha = 1/2 \quad , \quad \beta = 1/3 \quad \text{e} \quad z = 3/2 \quad , \quad (2.28)$$

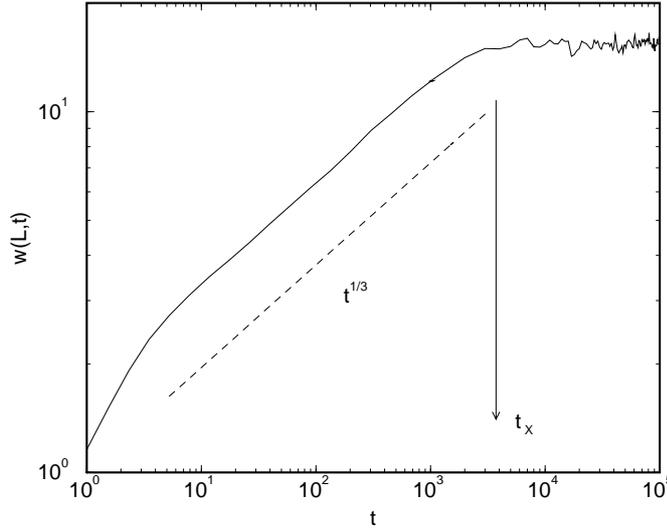
e demonstrar que a igualdade,

$$\alpha + z = 2 \quad , \quad (2.29)$$

é válida em qualquer dimensão [13, 117]. Dessa maneira, há uma nova classe de universalidade que engloba o modelo DB. Na Figura 2.11 apresentamos o comportamento da rugosidade na DB. Os expoentes críticos obtidos pela simulação concordam com a previsão teórica.

### 2.2.3 Ruídos Correlacionados

Até aqui discutimos modelos que apresentaram apenas um tipo de ruído,  $\eta(\vec{x}, t)$ , conhecido como ruído térmico, ou *annealed*. Este ruído é associado apenas à natureza do processo



**Figura 2.11:** *Evolução da rugosidade no modelo DB. Note o comportamento inicial da rugosidade crescendo com uma inclinação  $t^{1/2}$ , indicando um crescimento inicial aleatório, como esperado. Os parâmetros são os mesmos usados na Figura 2.5.*

de deposição. Neste trabalho, estaremos interessado em outros tipo de ruído, o ruído correlacionado.

O ruído correlacionado está associado a processos que apresentam correlações de longo alcance, *i.e.*, eventos arbitrariamente distantes entre si, podem influenciar um ao outro. Em contraste ao ruído térmico, descorrelacionado temporalmente e espacialmente, este ruído não possui uma distribuição Gaussiana; neste caso, o comprimento de correlação e o tempo de correlação são finitos, indicando que dois eventos não são independentes se estiverem separados por uma distância menor que  $\xi$ , ou dentro de um intervalo de tempo menor que  $\tau$ . Logo, se reescalarmos o sistema com um dos parâmetros ( $\xi$  ou  $\tau$ ), o ruído entre os eventos reescalados ficará novamente descorrelacionado.

Considerando a presença de correlações espaciais no ruído, a função delta na variável espacial do ruído térmico será substituída por uma lei de potência [13]

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle \sim |\vec{x} - \vec{x}'|^{2\phi_x - d} \delta(t - t') , \quad (2.30)$$

onde  $\phi_x$  é um expoente caracterizando o decaimento das correlações espaciais. Já considerando correlações temporais, teremos,

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle \sim \delta(\vec{x} - \vec{x}') |t - t'|^{2\phi_t - 1} , \quad (2.31)$$

onde  $\phi_t$  é um expoente caracterizando o decaimento das correlações temporais. No caso geral, teremos

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle \sim |\vec{x} - \vec{x}'|^{2\phi_x - d} |t - t'|^{2\phi_t - 1} . \quad (2.32)$$

Utilizando o argumento de escala apresentado anteriormente para a equação EW, podemos obter os expoentes de escala no caso do ruído correlacionado (CEW),

$$\alpha = \phi_x + 2\phi_t + \frac{2-d}{2} \text{ e } z = 2 .$$

Note que se considerarmos  $\phi_x = \phi_t = 0$ , obtemos novamente os expoentes da classe EW. Para a equação KPZ com ruído correlacionado (CKPZ) não há solução exata. Resultados analíticos em  $d = 1$  [13] indicam o comportamento dos expoentes críticos separadamente, considerando as duas possibilidades de correlação. Para o ruído espacialmente correlacionado (CeKPZ), os expoentes críticos permanecem os mesmos da classe KPZ para  $\phi_x \leq \phi_0 = 1/4$ ; para  $\phi_0 < \phi_x < 1$ , o ruído modifica os expoentes, que são função de  $\phi_x$

$$z(\phi_x) = 1 + \frac{2 - 2\phi_x}{3} \qquad \alpha(\phi_x) = 1 + \frac{2\phi_x - 2}{3} . \quad (2.33)$$

Para  $\phi_x > 1$ , o expoente de rugosidade se torna maior que 1 e, neste regime, o termo  $\nabla h \rightarrow b^{\alpha-1} \nabla h$  cresce sob reescalonamento, indicando que os termos de ordem superior devem ser considerados na equação KPZ. É necessário comentar que ainda não há estudos criteriosos em relação à correção das aproximações envolvidas nestes resultados, estando este tópico ainda em aberto e, portanto, trabalhos analíticos e numéricos abordando este tema podem fornecer resultados úteis.

Considerando o ruído temporalmente correlacionado (CtKPZ), o problema de se obter os expoentes analiticamente em uma dimensão é ainda mais complicado; isto deve-se ao fato que a invariância Galileana não se mantém, implicando na renormalização do coeficiente  $\lambda$  da equação KPZ. Resultados numéricos [13] indicam que o ruído temporalmente correlacionado só altera os expoentes no intervalo  $0.167 < \phi_t < 0.5$ , fornecendo

$$\alpha(\phi_t) = 1.69\phi_t + 0.22 \qquad \beta(\phi_t) = \frac{(1 + 2\phi_t)\alpha(\phi_t)}{2\alpha(\phi_t) + 1} . \quad (2.34)$$

**Tabela 2.1:** Sumário das Classes de Universalidade para Modelos de Crescimento de Superfícies.

Classe	$\alpha$	$\beta$	$z$	$H$
RD	-	1/2	-	0
EW	$2 - d/2$	$2 - d/4$	2	$H = \alpha$
KPZ (d=1)	1/2	1/3	3/2	$H = \alpha$
CEW (d=1)	$\phi_x + 2\phi_t + \frac{2-d}{2}$	$\alpha/z$	2	-
CeKPZ (d=1)	$1 + \frac{2\phi_x - 2}{3}$	$\alpha/z$	$1 + \frac{2-2\phi_x}{3}$	-
CtKPZ (d=1)	$1.60\phi_t + 0.22$	$\frac{(1+2\phi_t)\alpha(\phi_t)}{2\alpha(\phi_t)+1}$	$\frac{\alpha}{\beta}$	-

Se por um lado a adoção de diferentes ruídos permite uma variedade fenomenológica maior, por outro também introduz uma dificuldade crescente na identificação das diferentes

classes de universalidade. A diversidade de resultados experimentais e de modelos discretos têm mantido a questão da existência destas classes ainda em aberto. Na Tabela 2.1 apresentamos uma síntese das classes de universalidades estudadas neste capítulo.

# Parte II

## Aplicações

# Introdução

---

Apresentaremos as contribuições originais deste trabalho em três capítulos, onde os conceitos apresentados nos primeiros capítulos e nos Apêndices de A a C serão explorados de maneira interdisciplinar, ou seja, combinaremos mais de um conceito em cada aplicação. Estas contribuições concentram-se basicamente no estudo de três diferentes modelos: o modelo de Domany-Kinzel (DKCA), que foi detalhadamente estudado pelo autor e os orientadores em três artigos [8, 9, 10]; o autômato celular probabilístico com interações de três sítios (BPCA), introduzido por Bagnoli *et al.* [15] e considerado como uma extensão natural do modelo de Domany-Kinzel, este autômato foi alvo de nossa investigação em um artigo recentemente submetido para publicação [11]; um modelo de crescimento de superfícies, proposto pelo autor em colaboração com José Garcia Vivas Miranda durante um estágio na Universidade da Coruña [12], que considera partículas com tamanhos variados e diferentes morfologias.

O trabalho está dividido da maneira detalhada a seguir; no capítulo 3, faremos um estudo pormenorizado do autômato de Domany-Kinzel: na primeira seção, apresentamos o diagrama de fases do modelo estudando o comportamento crítico na fronteira da transição congelada/ativa no DKCA através do método do expoente de crescimento, proposto por Atman e Moreira [8], aplicado sobre a representação de superfícies do DKCA, que mapeia o autômato em um processo de crescimento de superfícies em (1+1) dimensões. No capítulo 2, mostramos que em um processo de enrugamento o expoente de crescimento,  $\beta_w$ , governa a evolução temporal da rugosidade ( $w$ ):  $w \sim t^{\beta_w}$ . No trabalho citado, Atman e Moreira determinam o expoente  $\beta_w$  do processo de crescimento gerado pelos padrões espaço-temporais de autômato de Domany-Kinzel. Os valores obtidos para  $\beta_w$  exibem uma cúspide na transição congelada/ativa que permite a determinação da linha de transição. Os valores de  $\beta_w$  na transição dependem do esquema de atualização usado no autômato: simétrico ou não-simétrico. Usando a técnica de espalhamento de danos, os autores determinaram também a linha de transição entre as fases ativa/caótica, que apresenta uma dependência da forma como as réplicas são atualizadas na evolução conjunta.

Na seção seguinte, utilizamos o método do expoente de crescimento para obter os outros expoentes de escala na criticalidade do DKCA. Na criticalidade, a representação de interfaces do DKCA apresenta uma transição enrugamento cinético, e os expoentes críticos são medidos através de simulações. Dois esquemas de atualização do DKCA são considerados: no esquema simétrico, o crescimento das superfícies pertence à classe de

universalidade da percolação direcionada (DP), exceto em um ponto terminal. Nesse ponto, a transição de fase é descontínua, e as superfícies pertencem à classe da percolação direcionada compacta. A mudança na indexação dos pontos espaço temporais no esquema não-simétrico altera significativamente o crescimento das superfícies, alterando o valor dos expoentes críticos. O comportamento crítico das superfícies rugosas na transição caótica/não-caótica também é estudado através da técnica de espalhamento de danos.

Na última seção do capítulo 3, apresentamos a aproximação de campo médio dinâmico para o autômato, seguindo o apresentado por Tomé e Oliveira [167]. Em seguida, reproduzimos o conteúdo de um artigo apresentado por Atman e Dickman [10], onde o estado *quase-estacionário* (QS) é construído para a distribuição de probabilidades do autômato de Domany-Kinzel (DKCA). As distribuições QS são derivadas ao nível de um sítio e de um par e caracterizadas por sua média, por várias taxas entre os momentos, pelo tempo de vida do estado QS e pelo tempo de relaxação até este estado ser atingido. De interesse particular são as propriedades de escala do estado QS ao longo da linha crítica separando as fases ativa e absorvente; tais propriedades exibem um alto grau de similaridade com o processo de contato [77] e o processo de Malthus-Verhulst [113] (o processo com tempo contínuo mais próximo ao DKCA) que estende-se até a forma de escala da distribuição QS [10].

No capítulo seguinte, estudamos um autômato celular probabilístico (PCA) com interações de três sítios intimamente relacionado com o modelo de Domany-Kinzel (DKCA), mas para o qual o estado de um dado sítio depende do estado de *três* sítios no passo de tempo anterior. Portanto, comparado com o DKCA, há um parâmetro adicional,  $p_3$ , representando a probabilidade de um sítio estar ativo no  $t$ , dado que seus primeiros vizinhos e ele próprio estavam ativos no tempo  $t - 1$ . O caso  $p_3 = 1$  foi recentemente estudado por Bagnoli *et al.* [15]. No capítulo 4, estudamos as transições de fases e o comportamento crítico para a atividade  $e$  para o espalhamento de danos usando aproximações de campo médio, ao nível de um sítio e de pares, e simulações, para  $p_3 = 0$  e  $p_3 = 1$ . Para construir o diagrama de fases, empregamos o método do expoente de crescimento sobre a representação de interfaces do autômato. Mostraremos que existe uma linha de pontos tricríticos no espaço de parâmetros  $(p_1, p_2, p_3)$ , que foi obtida através da aproximação de pares. Para  $p_3 = 0$ , verificamos que a transição de espalhamento de danos exhibe uma fronteira reentrante. O método do expoente de crescimento é capaz de identificar todas as transições de fase, contínuas ou descontínuas, os estados absorventes, o ponto bicrítico e a transição de espalhamento de danos.

Finalmente, apresentaremos no último capítulo desta parte um modelo de crescimento de superfícies que considera partículas com diferentes morfologias e cuja distribuição de tamanhos obedece uma lei de potência [12]. O intuito principal do modelo é gerar perfis rugosos adequados ao estudo de solos, mas suas aplicações podem ser muito mais abrangentes, uma vez que na maioria dos processos de crescimento naturais as partículas possuem tamanhos e formas variadas. Utilizando conceitos fractais para o crescimento

de superfícies [13], propomos um modelo com dois parâmetros de controle: a dimensão de fragmentação,  $D_f$ , e a massa máxima dos agregados depositados,  $M_{max}$ . A dimensão de fragmentação é relacionada com a distribuição de tamanhos das partículas através da relação,  $N(r \geq R) \sim R^{D_f}$ , onde  $N(r \geq R)$  é o número de agregados com raios maiores que  $R$ . Desse modo, o tamanho de cada agregado é sorteado obedecendo-se exatamente a lei de potência acima, e sua morfologia é escolhida aleatoriamente usando dois algoritmos: um baseado na percolação por ligações e outro considerando o modelo de Eden [47]. As regras de deposição utilizadas são as mesmas do modelo de sólido-sobre-sólido com relaxação superficial (modelo DARS discutido no capítulo 2). A comparação do modelo com dados experimentais revela que o expoente de Hurst medido para os perfis, usando o método do semivariograma [172] e a análise de flutuações sem tendência [121], concordam em sentido estatístico com os perfis simulados. Esse trabalho foi desenvolvido partir de um intercâmbio científico do autor no departamento de geologia da Univerdade da Coruña, durante o período de março a maio de 2000, em La Coruña, Espanha.

# Capítulo 3

---

## O Modelo de Domany-Kinzel

Como apresentado no capítulo 1, o autômato celular probabilístico de Domany Kinzel [46] é um processo markoviano em tempo discreto descrito por um conjunto de variáveis estocásticas discretas,  $\sigma_i$ , associadas a cada um dos  $L$  sítios de uma rede regular, e que exibe uma transição de fases de um estado ativo para um estado absorvente. Processos estocásticos com um estado absorvente aparecem frequentemente na física estatística [169, 113, 39, 9], e atraem atualmente grande interesse devido a sua conexão com a criticalidade auto-organizada [42] e fenômenos críticos fora do equilíbrio [80, 113]. Muitos estudos com o DKCA e outros PCA's têm sido publicados usando equações determinísticas do tipo campo médio [15, 70, 164], simulações de Monte Carlo [8, 83, 93, 94, 115] e grupo de renormalização [16, 89, 166]. Uma discussão sobre realizações experimentais da classe da percolação direcionada, a qual pertence o DKCA, encontra-se nos trabalhos de Hinrichsen [80, 81], onde o autor também aborda as relações entre essa classe e modelos de crescimento.

Na subseção 1.2.1, mostramos como uma configuração das variáveis  $\sigma_i$  é atualizada simultaneamente a cada passo de tempo  $t$ , para todo o sistema, obedecendo a regras probabilísticas. Podemos representá-la por  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L)$ , onde  $L$  é o número de sítios da rede. A evolução da distribuição de probabilidades  $P_t(\sigma)$ , da configuração  $\sigma$  no tempo  $t$ , é governada pela equação,

$$P_{t+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'} W(\sigma|\sigma')P_t(\sigma) \quad (3.1)$$

onde  $W(\sigma|\sigma')$  é a probabilidade condicional de transição da configuração  $\sigma'$  para a configuração  $\sigma$ , e obedece as relações:

$$W(\sigma|\sigma') \geq 0 \quad , \quad \sum_{\sigma} W(\sigma|\sigma') = 1 \quad . \quad (3.2)$$

Como no DKCA a atualização dos sítios é feita de forma síncrona, teremos

$$W(\sigma|\sigma') = \prod_{i=1}^N w_i(\sigma_i|\sigma') \quad , \quad (3.3)$$

onde  $w_i(\sigma_i|\sigma') \geq 0$  é a probabilidade condicional de transição para que o estado do sítio  $i$ , no tempo  $t + 1$ , seja  $\sigma_i$  dado que no tempo  $t$  o sistema estava na configuração  $\sigma'$ . Obviamente,  $\sum_{\sigma_i} w_i(\sigma_i|\sigma') = 1$ .

No DKCA, são permitidos dois estados para a variável  $\sigma_i$ : 0 e 1 - estados vazio e ocupado, respectivamente. As probabilidades de transição no DKCA são as mesmas para qualquer sítio, e possuem a forma

$$w_i(\sigma_i|\sigma') = w_{DK}(\sigma_i|\sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}) \quad . \quad (3.4)$$

Na subseção 1.2.1, já mostramos que as probabilidades  $w_{DK}$  são totalísticas e, através das relações (1.7), podemos resumir o espaço de parâmetros do sistema em um diagrama de fases bidimensional. Como o DKCA é um modelo essencialmente computacional, apresentaremos nas próximas seções como se obter o diagrama de fases do DKCA a partir de simulações e um estudo numérico da classe de universalidade do modelo; na última seção faremos um estudo analítico do DKCA, e mostraremos algumas aproximações para se obter o diagrama de fases. Cabe ressaltar que esta ordem coincide com a ordem cronológica dos artigos apresentados.

### 3.1 Diagrama de Fases e o Método do Expoente de Crescimento

O diagrama de fases do DKCA foi originalmente levantado por Domany e Kinzel [46] que mostraram a existência de duas fases; uma *ativa* e outra *congelada* (estado absorvente), como previsto na aproximação de campo médio. Um estudo simulacional mais detalhado do diagrama foi apresentado por Martins *et al.* [115], que descobriram uma nova fase na região ativa, a fase caótica, usando a técnica de espalhamento de danos, introduzida no capítulo 1. O diagrama de fases só foi determinado com grande precisão por Zebende e Penna [188], que utilizaram o método de gradientes. Gheuvoghlianian e Tomé [62] exploraram os detalhes da evolução conjunta de dois autômatos, considerando a questão da atualização simultânea de duas réplicas usando números pseudo-aleatórios; os autores apresentam duas prescrições para a evolução conjunta: uma usada por Martins *et al.* [115] e outra introduzida por Kohring e Schreckenberg [94].

Hinrichsen *et al* [83] descobriram uma nova fase na região ativa do diagrama através de uma análise criteriosa do espalhamento de danos. Os autores observaram uma região

caótica, onde o dano espalha para todo membro de uma família de procedimentos dinâmicos; uma região ativa, onde o dano desaparece para todos os membros dessa família, e outra região ativa, onde o dano se espalha somente para um subconjunto dos possíveis procedimentos dinâmicos, desaparecendo nos outros. Essa nova fase é obtida com uma terceira prescrição para a evolução conjunta de duas réplicas, onde as correlações entre os números aleatórios sorteados seriam mínimas.

Em 1997, de Sales *et al* [148] mostraram que o expoente de Hurst,  $H$ , poderia ser utilizado para classificar os autômatos determinísticos de Wolfram [183], aplicando-se uma representação de interfaces para os autômatos. Mais recentemente [149], os mesmos autores mostraram que o método também poderia ser utilizado para obter a transição de fases no DKCA diretamente das configurações do autômato, sem nenhuma referência ao parâmetro de ordem ou a função resposta. (Note-se que os autores se referiam ao expoente de Hurst como o expoente de rugosidade,  $\alpha$ , expressando a confusão discutida no Apêndice D.) Recentemente, Lauritsen e Alava [100] usaram um método bastante similar para estudar a equação de Edwards-Wilkinson com ruído colunar e também Dickman e Muñoz [41], para estudar o processo de contato. Esse método também pode ser utilizado em outros tipos de modelos, como o modelo de Potts. Redinz e Martins [142] usaram o expoente de Hurst para detectar transições de primeira e segunda ordem no modelo de Potts com  $q$ -estados (para  $q = 1, 3, 5$  e  $10$ ).

Além do expoente  $\alpha$ , o expoente de crescimento  $\beta_w$  também pode ser utilizado para descrever vários processos de enrugamento no contexto de crescimento de superfícies [13, 117]. Atman e Moreira [8], introduziram o *método do expoente de crescimento* para identificar transições de fase e o utilizaram para construir o diagrama de fases do DKCA. Basicamente, o método consiste em estudar o comportamento da rugosidade na interface auto-afim gerada pela representação de interfaces do DKCA. A representação de interfaces mapeia o autômato em um modelo de crescimento do tipo *sólido-sobre-sólido* (SOS) [117]. O expoente  $\beta_w$  está relacionado à evolução temporal da rugosidade (capítulo 2) e na transição entre as fases congelada e ativa o valor do expoente atinge um máximo, do mesmo modo que o expoente  $H$  [149].

Existem dois esquemas para se atualizar o DKCA: o esquema *simétrico*, que é equivalente a uma rede triangular, e o esquema *não-simétrico* [124], como mostrado na figura (3.1). Atman e Moreira mostraram no trabalho citado que o valor do expoente de crescimento na transição assume diferentes valores para cada um dos esquemas de atualização. Recentemente [10], mostramos que os valores do expoente  $\beta_w$  na transição pertencem à classe de universalidade da percolação direcionada, porém, no caso não-simétrico, existe a combinação de correlações temporais e espaciais no sistema, como mostrado na próxima seção.

Atman e Moreira consideraram também a transição para a fase caótica, utilizando a técnica de espalhamento de danos [73]: a diferença entre duas réplicas, que evoluem obedecendo a mesma dinâmica, é usada para se aplicar a representação de interfaces e a

linha de transição pode ser obtida pelo método do expoente de crescimento.

A seguir iremos apresentar em detalhes como construir a representação de interfaces e reproduziremos em seguida os resultados do método do expoente de crescimento obtidos por Atman e Moreira [8].

### 3.1.1 Representação de Interfaces

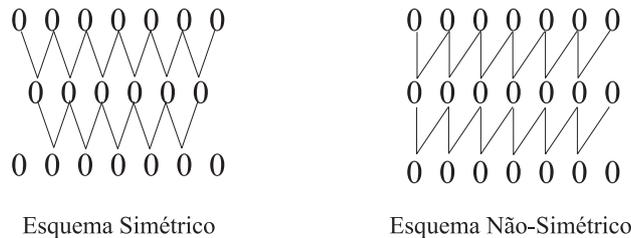
Do mesmo modo que na seção 1.2, consideramos o modelo de Domany-Kinzel unidimensional em um anel de  $L$  sítios. No esquema simétrico, as probabilidades condicionais de transição são dadas por,

$$P(\sigma_i(t+1) | \sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)) , \quad \text{e} \quad P(0 | \sigma_{i-1}, \sigma_i) = 1 - P(1 | \sigma_{i-1}, \sigma_i) .$$

Já para o esquema não-simétrico,

$$P(\sigma_i(t+1) | \sigma_{i-1}(t), \sigma_i(t)) , \quad \text{e} \quad P(0 | \sigma_{i-1}, \sigma_i) = 1 - P(1 | \sigma_{i-1}, \sigma_i) .$$

Os dois esquemas estão representados na Figura 3.1. Os valores das probabilidades condicionais são os mesmos nos dois esquemas, e assumem a forma totalística (vide as relações (1.7)). A representação de interfaces para estudar o DKCA foi proposta por

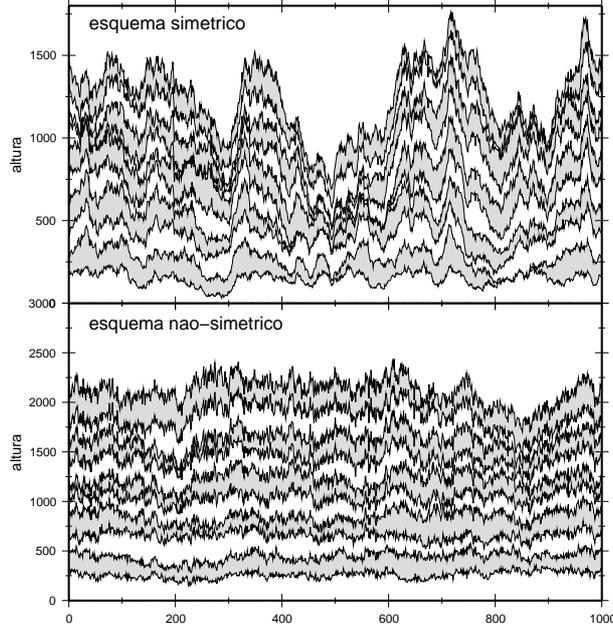


**Figura 3.1:** Esquemas utilizados para atualizar os autômatos.

Sales *et al.* [149], e gera um processo de crescimento SOS de superfícies rugosas em  $1 + 1$  dimensões. O processo consiste em acumular os estados assumidos pelas variáveis  $\sigma_i(t)$  durante uma dado número  $t$  de passos de tempo, em um vetor de alturas,

$$h_i(t) = \sum_{\tau=0}^t \sigma_i(\tau) . \tag{3.5}$$

Desse modo, obtemos processos de crescimento e a natureza das correlações pode ser investigada pela análise da rugosidade, definida pela equação (C.11). De fato, afim de



**Figura 3.2:** *Evolução dos perfis gerados pela representação de interfaces. Acima: perfis gerados no esquema simétrico em uma rede com  $L = 1000$ . Abaixo: perfis gerados pelo esquema não-simétrico,  $L = 1000$ . Ambas as figuras possuem a mesma condição inicial e são submetidos à mesma sequência de números aleatórios, e os perfis mostrados foram tomados nos mesmos instantes de tempo em ambos os casos. Cada perfil corresponde a 1000 passos de tempo.*

desconsiderar a rugosidade inicial dos perfis, trabalhamos com a flutuação da rugosidade [156]

$$\delta w(L, t) = \sqrt{w^2(L, t) - w^2(L, 0)} , \quad (3.6)$$

onde  $w^2(L, 0)$  é a rugosidade inicial do substrato, ou seja, o estado inicial do sistema.

As diferenças entre os esquemas ficam explícitas neste ponto. Na Figura 3.2 mostramos vários perfis na criticalidade, nos dois esquemas, gerados a partir da representação de interfaces. É evidente que diferentes esquemas levam a perfis completamente diferentes.

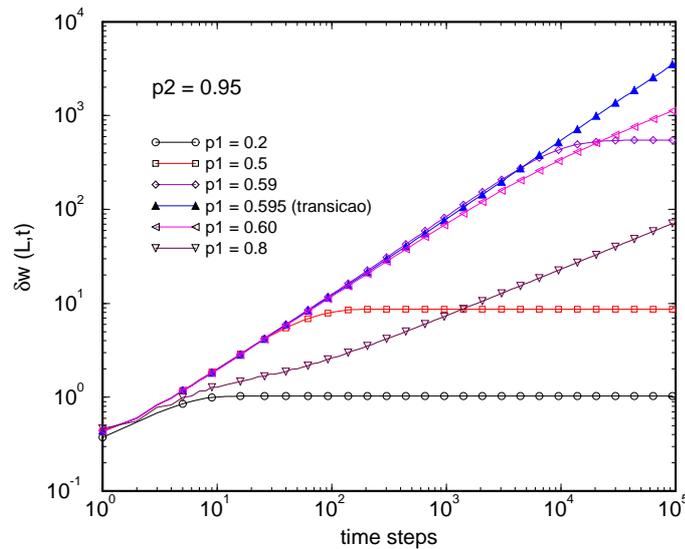
Para modelos de crescimento, vimos que o comportamento de  $w(L, t)$  tem a forma de escala,

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) . \quad (3.7)$$

Graças às propriedades da função de escala, para tempos curtos,  $t \ll L^z$ , esperamos que,  $\delta w(L, t) \sim t^{\beta_w}$ . Desse modo, podemos medir  $\beta_w$  calculando a inclinação do gráfico  $\log - \log$  de  $\delta w(L, t) \times t$ . O expoente de crescimento denota como a rugosidade do perfil cresce com o tempo:  $\beta_w = 1/2$  indica que o perfil não possui correlações e está na classe de universalidade da deposição aleatória, como mostrado no capítulo 2 [13]; se  $\beta_w > 1/2$ ,

o perfil tende a crescer mais nos “picos”, implicando em um crescimento mais rápido da rugosidade, enquanto se  $\beta_w < 1/2$ , os “vales” são privilegiados, e a rugosidade cresce mais lentamente.

Na Figura 3.3 mostramos alguns resultados típicos para a evolução da rugosidade no DKCA. Nessa figura, consideramos médias sobre 50 condições iniciais aleatórias, considerando  $10^5$  passos de tempo e um anel de  $L = 10^4$  sítios. Claramente, na fase congelada observamos que a rugosidade atinge um valor de saturação, enquanto na fase ativa a rugosidade cresce indefinidamente. Os valores de  $\beta_w$  em função de  $p_1$ , para  $p_2$  fixo, são mostrados na Figura 3.4, para ambos esquemas. O expoente  $\beta_w$  é calculado levando-se em conta pelo menos três décadas :  $10 < t < 10^5$  e  $10^{-1} < \delta w < 10^3$ . Na transição,  $\beta_w(p_1)$  possui um máximo, que rapidamente decai para o valor  $\beta_w = 1/2$  na fase ativa, mantendo-se assim até  $p_1 = 1$ . O valor de  $\beta_w$  na transição depende do esquema utilizado



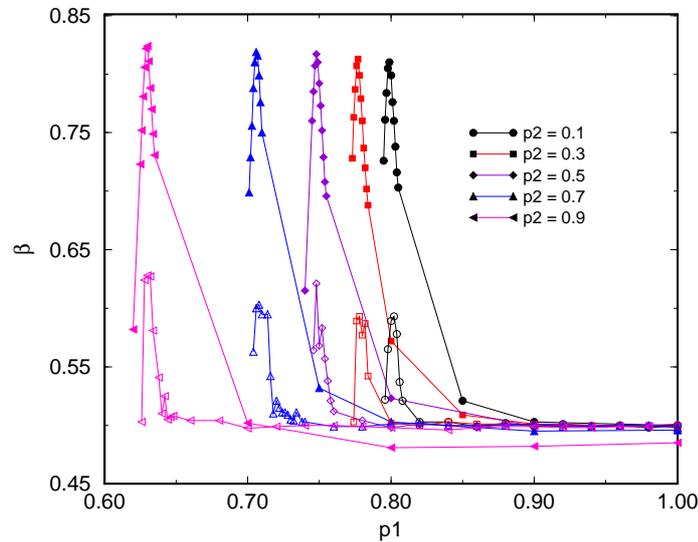
**Figura 3.3:** Evolução da flutuação da rugosidade  $\delta w(L, t)$  com o tempo  $t$  em um gráfico log – log, para  $p_2=0.95$  e cinco diferentes valores de  $p_1$ . Usamos  $L=10000$  e 50 amostras. Note que a transição de fases ocorre quando a rugosidade passa a crescer sem saturação ( $p_1 = 0.595$  - símbolos cheios).

para se atualizar o DKCA: no esquema *simétrico*, os sítios pares (ímpares) são atualizados nos passos de tempo pares (ímpares); no não-simétrico, todos os sítios são atualizados em cada passo de tempo, mas os primeiros vizinhos de um sítio  $(i, t+1)$  são  $(i-1, t)$  e  $(i, t)$ . No esquema simétrico,  $\beta_w = 0.81(2)$ , compatível com a previsão da classe de universalidade da percolação direcionada ( $\beta_w \sim 0.84$ ) [41]; já no esquema não simétrico,  $\beta_w = 0.61(2)$ . Na próxima seção, mostraremos argumentos teóricos que mostram que esse valor também pode ser obtido a partir da classe DP [10].

Uma análise de escala com tamanhos finitos pode ser feita para o expoente  $\beta_w$  e mostra que a largura do máximo tende a zero à medida que o tamanho do sistema tende para infinito. O valor do expoente de crescimento aproxima-se de  $\beta_w \sim 0.83(2)$  na transição congelada/ativa para o esquema simétrico e é aproximadamente o mesmo para todos os valores  $p_2 \neq 1$ .

Genericamente, a evolução temporal do DKCA em  $d$  dimensões é equivalente ao modelo de Ising em  $d + 1$  dimensões [46]. Na linha  $p_2 = 1$ , a transição é mapeada na transição de fases no modelo de Ising com o campo aplicado, em  $T = 0$ , em duas dimensões [46, 93] e o valor de  $\beta_w$  é significativamente maior nos dois esquemas:  $\beta_w = 0.99(1)$ , no esquema simétrico, e  $\beta_w = 0.75(1)$ , no não-simétrico. No esquema simétrico, o valor de  $\beta_w$  concorda com a previsão da literatura,  $\beta_w = 1$  [46].

O valor de  $\beta_w > 1/2$  indica uma tendência de crescimento das “pontas” dos perfis, e pode ser interpretado como uma tendência de conservação dos sítios ativos no sistema. Na criticidade, apenas alguns sítios permanecem ativos (veremos na última seção que no ponto crítico  $\langle N \rangle \rightarrow 0$ ), o que contribui para o crescimento da rugosidade. Na fase ativa há uma alta densidade de sítios ativos, mas descorrelacionados, o que faz que a altura de cada sítio,  $h_i(t)$ , cresça aleatoriamente resultando em  $\beta_w = 1/2$ .



**Figura 3.4:** Evolução do expoente de crescimento  $\beta_w$  como função de  $p_1$ , na transição congelada/ativa, considerando os dois esquemas de atualização; o tamanho do sistema é  $L = 10000$  e cinco diferentes valores de  $p_2$  são considerados. O máximo de  $\beta_w$  indica a transição. O esquema simétrico é representado por símbolos cheios e o esquema não-simétrico por símbolos vazios. As linhas são apenas guias para os olhos.

### 3.1.2 Espalhamento de Danos

Martins *et al* [115] foram os primeiros a usar a técnica de espalhamento de danos para mostrar que a região ativa do DKCA pode ser dividida em duas fases, uma caótica e outra não-caótica. O parâmetro de ordem dessa transição é a diferença entre duas réplicas com configurações iniciais levemente diferentes, como antecipamos no capítulo 1. Aqui, a técnica consiste em deixar um autômato evoluir até o estado quase-estacionário, quando cria-se uma réplica onde o estado de alguns sítios é alterado (dano). Submetendo as duas réplicas, uma com estados  $\sigma_i(t)$  e a outra com estados  $\varrho_i(t)$ , à mesma dinâmica, mede-se a diferença entre os estados correspondentes em cada autômato,

$$\Gamma_i(t) = |\sigma_i(t) - \varrho_i(t)| .$$

A fração de sítios cujos estados são diferentes nas duas réplicas corresponde à distância de Hamming,

$$D_H(t) = \frac{1}{L} \sum_i \Gamma_i(t) .$$

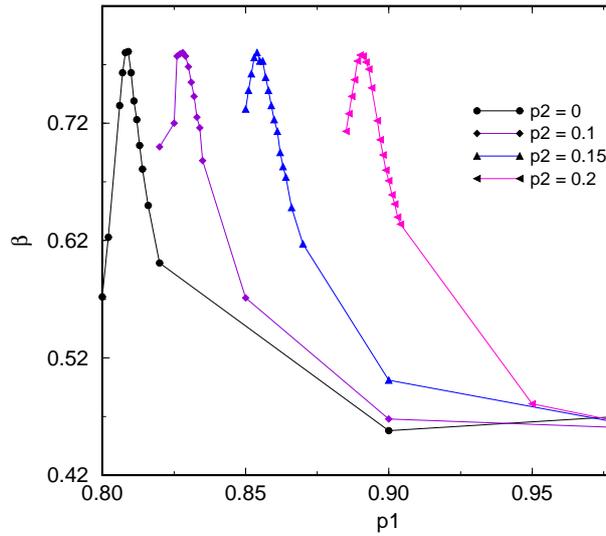
O valor estacionário da distância de Hamming permite que se diferencie as duas fases: na fase não-caótica a distância de Hamming se anula, enquanto no estado caótico seu valor é sempre positivo.

Para obter a linha de transição, usamos o método do expoente de crescimento, onde a diferença entre as réplicas é usada para se fazer a representação de interfaces,

$$h_i(t) = \sum_{\tau=0}^t \Gamma_i(\tau) . \tag{3.8}$$

Desse modo, o perfil gerado pelo autômato da diferença entre as réplicas comporta-se exatamente como os perfis gerados na subseção anterior: na fase não-caótica a rugosidade atinge um valor de saturação, enquanto na fase caótica a rugosidade cresce indefinidamente. Esse comportamento é esperado, uma vez que a diferença entre as réplicas se anula na fase não caótica, o que implica em nenhuma contribuição para o vetor de alturas  $h_i(t)$ , e é positiva na fase caótica, o que implica em uma contribuição persistente para o vetor de alturas. Novamente, o expoente  $\beta_w$  passa por um máximo exatamente na transição e seu valor depende do esquema utilizado.

Na Figura 3.5 mostramos  $\beta_w \times p_1$  para a transição caótica/não-caótica, no esquema simétrico. Para obtermos essa figura, usamos um autômato com  $L = 10^4$  e deixamos o sistema evoluir por  $10^4$  passos de tempo; então, criamos uma réplica com um “dano inicial”



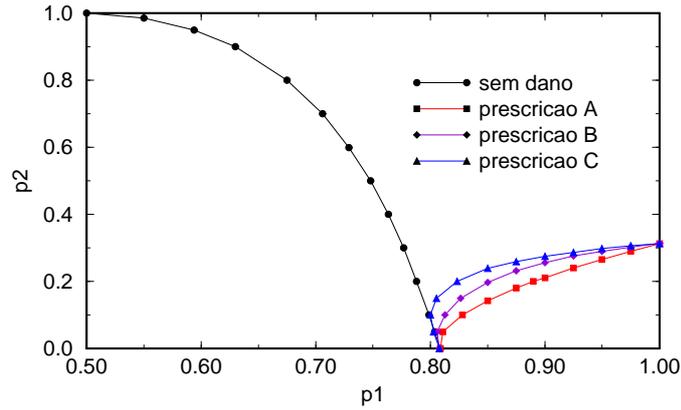
**Figura 3.5:** Evolução do expoente de crescimento  $\beta_w$  como função de  $p_1$ , usando o espalhamento de danos para localizar a linha de transição. O sistema possui  $L = 10000$  e quatro diferentes valores de  $p_2$  são mostrados, para a prescrição A.

devido à mudança no estado de aproximadamente 10% dos sítios. A partir desse ponto, deixamos as réplicas evoluírem com a mesma dinâmica durante  $10^5$  passos de tempo, e a diferença entre as réplicas é medida. Uma média sobre 50 realizações aleatórias diferentes foi considerada para os estados iniciais.

Neste ponto temos que enfatizar a questão da dinâmica de evolução conjunta de dois autômatos. Tomé [62, 164] estudou detalhadamente essa evolução conjunta e mostrou que há pelo menos duas prescrições diferentes: a prescrição A, usada por Martins *et al.* [115], considera a atualização de ambas as réplicas usando sempre o mesmo número aleatório,  $z$ ; a prescrição B, introduzida por Kohring e Schreckenberg [94], implica que algumas vezes dois diferentes números aleatórios são usados,  $z_1$  e  $z_2$ , para se atualizar as réplicas. Isso ocorre quando  $(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) = 1$  e  $(\varrho_{i-1} + \varrho_{i+1}) = 2$ , ou vice-versa. Realizamos simulações considerando as duas prescrições e verificamos que elas resultam em diferenças significativas na fronteira entre as fases caótica e não-caótica no diagrama de fases do DKCA, como mostrado na Figura 3.6. Essas diferenças no diagrama foram apontadas por Bagnoli [14], que estudou o espalhamento de danos no DKCA utilizando uma aproximação de campo médio; Atman e Moreira [8] confirmaram essa previsão numericamente.

No diagrama da Figura 3.6, mostramos uma terceira prescrição, C, na qual três números aleatórios podem ser sorteados,  $z_1$ ,  $z_2$  e  $z_3$ , para atualizar o sistema. Definindo  $U_i = \sigma_{i-1} + 2 * \sigma_{i+1}$  e  $V_i = \varrho_{i-1} + 2 * \varrho_{i+1}$ , temos os seguintes casos:

- se  $U_i = V_i$  → usamos o mesmo número aleatório,  $z_1$ , para atualizar o original e a réplica;



**Figura 3.6:** Diagrama de fases do DKCA obtido através do método do expoente de crescimento. Note que as três prescrições levam a diferentes fronteiras para a transição caótica/não-caótica. Para  $p_2=0$  temos  $p_{1c}=0.809(1)$  e para  $p_1=1$  temos  $p_{2c}=0.3135(10)$ , e as fronteiras de todas as prescrições se encontram nesses pontos.

- se  $U_i = 1$  e  $V_i = 2$  (ou vice-versa)  $\rightarrow$  usamos  $z_1$  para atualizar uma réplica e  $z_2$  para a outra;
- se  $U_i = 1$  e  $V_i = 3$  (ou vice-versa)  $\rightarrow$  usamos  $z_1$  para uma e  $z_3$  para a outra.
- se  $U_i = 2$  e  $V_i = 3$  (ou vice-versa)  $\rightarrow$  usamos  $z_2$  para uma e  $z_3$  para a outra.

Para essa prescrição, a fronteira fica levemente acima da prescrição B.

As diferenças observadas entre as fronteiras de fase parecem ser devidas às diferentes correlações entre os números pseudo-aleatórios utilizados em cada uma das prescrições: na prescrição A as correlações são máximas (já que se trata do mesmo número aleatório); na prescrição B as correlações são menores, e na prescrição C as correlações são mínimas [15, 83]. A prescrição C foi utilizada na tentativa de se obter a terceira fase ativa reportada por Hinrichsen *et al* [83], mas não obtivemos sucesso.

## 3.2 Expoentes de Escala

Mostramos na seção anterior que o DKCA possui um único estado absorvente, e seu diagrama de fases possui uma linha de transição separando a fase absorvente da fase ativa. Há uma conjectura afirmando que modelos com um estado absorvente devem pertencer genericamente à classe de universalidade da percolação direcionada [67]. As evidências numéricas confirmam essa conjectura [8, 41, 93], exceto para um dos pontos terminais,  $(p_1 = 0.5, p_2 = 1)$ , onde o comportamento assintótico pertence à classe de universalidade da percolação direcionada compacta (CDP) [43, 46, 49]. Nesse ponto terminal, a transição de fases é descontínua, pois, de fato, o sistema possui dois estados absorventes: o já

mencionado estado “congelado”, e o estado completamente ocupado. A transição para a fase caótica observada por Martins *et al.* [115] também deve pertencer à classe DP, como esperado com base no conceito de universalidade [68], pois também é uma transição para um estado absorvente.

Nesta seção, continuaremos a utilizar a representação de interfaces introduzida por de Salles *et al.*[149] e detalhada na seção anterior. Cabe ressaltar que Bhattacharyya [21] também estudou as propriedades dinâmicas críticas de um PCA através de uma representação de interfaces, usando dois procedimentos diferentes para gerar as superfícies; um deles corresponde a um mapeamento SOS idêntico ao considerado por de Salles e neste trabalho.

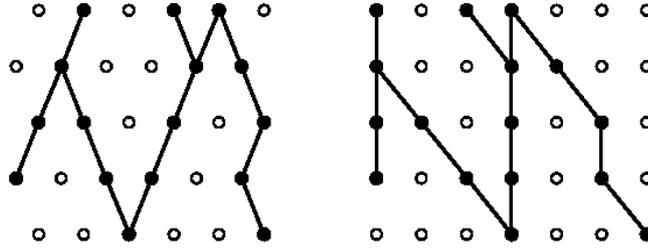
A natureza da interface resultante do mapeamento é uma interessante questão em aberto, pois existem várias fórmulas para se mapear sistemas dinâmicos em superfícies e, na maioria dos casos, o resultado é completamente desconhecido *a priori*. A razão para isso é que algumas vezes as interfaces geradas possuem tensão superficial e espera-se que pertençam a classes de universalidade conhecidas, enquanto em outros casos as superfícies não apresentam tensão superficial, o que ocorre com o DKCA.

Na próxima subseção, abordamos com maiores detalhes os dois esquemas utilizados para se atualizar o DKCA, e mostramos uma maneira alternativa para se estudar o espalhamento de danos. Na subseção seguinte, compararemos os resultados numéricos e discutiremos os valores obtidos com as previsões teóricas para os expoentes, propostas por Bhattacharyya [21] e Dickman and Muñoz [41].

### 3.2.1 Esquemas de Atualização

Como vimos, há dois diferentes esquemas para se atualizar o DKCA: o simétrico, proposto originalmente por Domany e Kinzel [46], e o não-simétrico, usado por Nagy *et al.* [124] para simplificar o algoritmo. No esquema simétrico, o processo é definido nos pontos espaço-temporais nos quais  $\sigma_i(t)$  possui  $i + t$  *par*. Como antes, o estado do sítio  $i$  no tempo  $t + 1$  depende de  $\sigma_{i-1}(t)$  e  $\sigma_{i+1}(t)$  através das probabilidades condicionais definidas no capítulo 1 (definições 1.7). Vimos também que, no esquema não-simétrico, o processo é definido em *todos* os pontos, e o estado do sítio  $i$  no tempo  $t + 1$  depende de  $\sigma_{i-1}(t)$  e  $\sigma_i(t)$ , ao invés de  $\sigma_{i-1}(t)$  e  $\sigma_{i+1}(t)$ , como no esquema simétrico. Portanto, a probabilidade de transição passa a ser  $P[\sigma_i(t+1)|\sigma_{i-1}(t), \sigma_i(t)]$ , e esta assume os mesmos valores que no caso simétrico.

É fácil ver que os dois esquemas são conectados por uma mudança simples na indexação dos pontos espaço-temporais (veja a Figura 3.7). Consideremos, por exemplo, uma *história*  $h^S$  no esquema simétrico (isto é, uma sequência de configurações  $\{\sigma_i^S(t)\}$  para  $t = 0, \dots, t'$ , com  $t'$  finito), iniciando-se em  $t = 0$  com um número finito de sítos ativos. Dada uma configuração inicial, a probabilidade de que uma história ocorra é  $P[h^S | \{\sigma^S(0)\}]$ .



**Figura 3.7:** Representação espacial do DKCA, nos esquemas simétrico (esquerda) e não-simétrico (direita), mostrando que padrões espaço-temporais são idênticos nos dois esquemas, i.e., histórias correspondentes são idênticas.

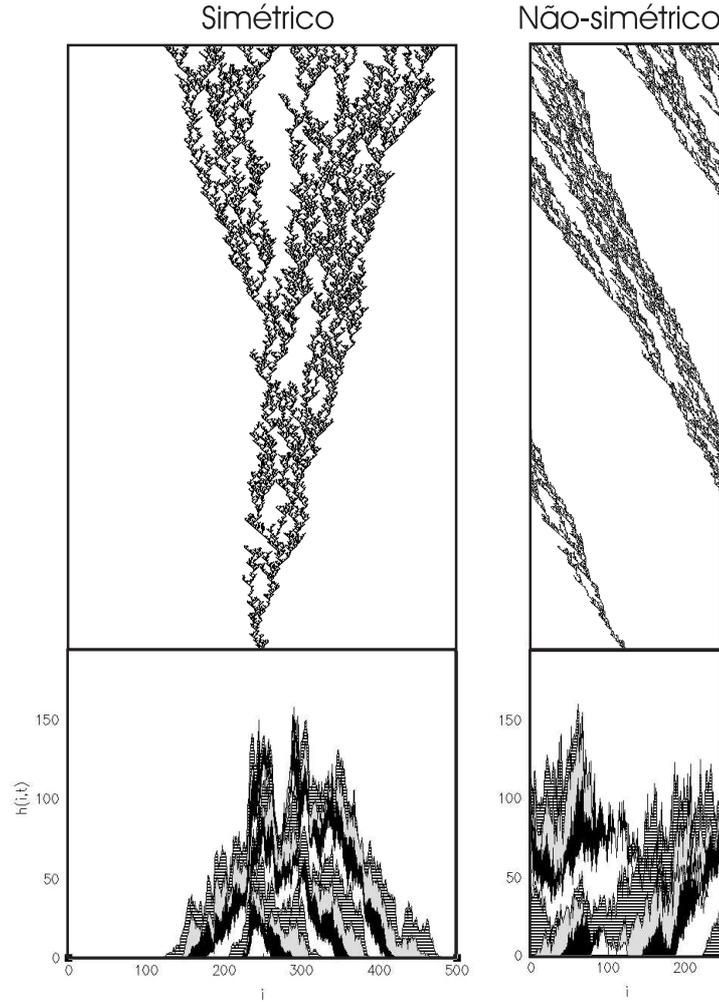
Uma história  $h^{NS}$  no esquema não simétrico pode ser definida da mesma maneira e há uma correspondência biunívoca entre as histórias nos dois esquemas, dada por

$$\sigma_i^{NS}(t) \equiv \sigma_{2i-t}^S(t). \quad (3.9)$$

Desde que as probabilidades de transição são as mesmas nos dois esquemas, as probabilidades de histórias correspondentes também serão. Estendendo-se a análise para fronteiras periódicas, notamos que, se o esquema simétrico está definido em um anel de  $L$  sítios, então o esquema não-simétrico correspondente possui  $2L$  sítios; para o mapeamento definido acima,  $i^S = 2i^{NS} - t \pmod{2L}$ .

Uma consequência imediata desta correspondência é que todas as propriedades de escala (*e.g.*, expoentes críticos), bem como propriedades não universais (*e.g.*, fronteiras entre as fases congelada, ativa, e caótica no diagrama  $p_1 - p_2$ ) são idênticas nos dois esquemas. Naturalmente, histórias correspondentes nos dois esquemas *parecem* diferentes: o esquema não simétrico equivale a um referencial em rotação no qual as distâncias são reescaladas por um fator de  $1/2$ . Logo, para  $p_1 = 1/2$  e  $p_2 = 1$ , uma interface entre domínios de 1's e 0's executa uma caminhada aleatória sem tendência no esquema simétrico, enquanto no esquema não-simétrico tal caso corresponde a uma interface com média velocidade igual a  $1/2$ . O “cone de luz”  $i = \pm t$  no esquema simétrico se torna o par de linhas  $i = 0$  e  $i = t$  no esquema não-simétrico. Veremos que essas diferenças entre os referenciais implica em importantes consequências para a dinâmica da superfície no esquema não-simétrico.

Após a aplicação da representação de superfícies, detalhada na seção anterior, as diferenças entre os dois esquemas de atualização ficam explícitas. Na Figura 3.8, mostramos a evolução espaço-temporal do autômato e os perfis gerados pela representação de interfaces, na região de criticalidade ( $p_2 = 0.5, p_1 = 0.75$ ), em cada esquema. É evidente como diferentes esquemas levam a perfis totalmente diferentes. (Na figura foi escolhida a condição inicial com apenas um sítio ativo para realçar a evolução dos autômatos e dos perfis.)



**Figura 3.8:** Representação de interfaces gerada pelos padrões espaço-temporais do DKCA, utilizando diferentes esquemas de atualização: o esquema simétrico é mostrado na esquerda e o não-simétrico na direita. Painéis superiores: padrões espaço-temporais do autômato. Sítios com a cor negra estão ativos e o tempo cresce no sentido vertical para cima. Painéis inferiores: representação de interfaces aplicada aos padrões mostrados acima. Aqui o eixo  $y$  corresponde a altura  $h(i,t)$  dos perfis e o eixo  $x$  corresponde às posições na rede. A cor de preenchimento é trocada a cada 50 passos de tempo para evidenciar a evolução temporal da rugosidade. O tamanho do sistema é  $L=500$  para o esquema simétrico e  $L=250$  para o não-simétrico; 900 passos de tempo são mostrados. Ambos os sistemas estão muito próximos à criticalidade ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.75$ ), na fase ativa.

## Espalhamento de Danos

Já mostramos na seção anterior como podemos usar o método do expoente de crescimento para estudar a propagação de danos no DKCA. No momento em que o dano é feito, o sistema se encontra no estado quase-estacionário e a alteração aleatória nos sítios introduzida pelo dano muito provavelmente perturba o valor estacionário da densidade de partículas e das funções de correlação. Isso introduz uma assimetria indesejável entre as réplicas, uma vez que a dinâmica de espalhamento de danos estará misturada à relaxação do sistema de volta ao estado estacionário (na réplica alterada). Afim de evitar tais complicações e visando preservar a densidade quase-estacionária de sítios ativos no

momento em que o dano é feito, introduzimos o “dano por rotação”, que consiste em criar uma réplica cuja configuração foi girada  $180^\circ$  em relação ao autômato original, em um determinado tempo  $t_0$  após o sistema ter chegado ao estado quase-estacionário.

Portanto,

$$\varrho(i, t_0) = \sigma(i + L/2, t_0) ,$$

sujeita a condições periódicas de contorno. Isso representa um dano inicial grande ( com distância de Hamming  $\simeq 2\rho(1-\rho)$ , onde  $\rho$  é a densidade estacionária de partículas), que é estatisticamente uniforme ao longo do sistema.

### 3.2.2 Prescrições Teóricas

Uma das primeiras análises teóricas para os expoentes críticos na classe de universalidade da percolação direcionada foi apresentada por Kértész and Wolf [90], para um modelo de crescimento polinuclear. Descrições teóricas para o comportamento de escala observado em transições de fase com estados absorventes em modelos de crescimento foram propostas por Bhattacharyya [21], e Dickman and Muñoz [41]. Bhattacharyya propôs um tratamento analítico em analogia com o processo de deposição aleatória (DA). Esclarecemos que esta descrição não é geral e só é válida na criticalidade.

Considerando um estado inicial desordenado, o processo de crescimento pode ser descrito por uma equação contínua de crescimento similar à da deposição aleatória,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = F + \eta(x, t) \tag{3.10}$$

onde  $F$  é o número médio de partículas depositadas e  $\eta(x, t)$  corresponde ao ruído. A diferença entre a representação de interfaces para o DKCA e a deposição aleatória está exatamente nas propriedades do ruído  $\eta(x, t)$ .

Enquanto na DA o ruído é descorrelacionado espacialmente e temporalmente (ruído branco), as correlações no tempo e espaço presentes no DKCA aparecem como flutuações no ruído durante o crescimento da interface na representação de superfícies. Para valores de  $(p_1, p_2)$  distantes da criticalidade (na fase ativa), o comprimento de correlação  $\xi$  e o tempo de correlação  $\tau$  do DKCA são finitos, o que significa que o ruído no processo de deposição é correlacionado dentro de uma faixa pequena de distâncias. Nesse limite, a autocorrelação do ruído decai exponencialmente [13]:

$$\langle \eta(x, t), \eta(x', t') \rangle \sim e^{-|x-x'|/\xi} e^{-|t-t'|/\tau} . \tag{3.11}$$

Portanto, para tempos maiores que  $\tau$ , o ruído parece descorrelacionado e os expoentes da DA são obtidos nesse limite. Esse comportamento já havia sido confirmado por simulações anteriores [8].

À medida que o ponto crítico se aproxima,  $\xi$  e  $\tau$  crescem, e cada vez demora mais para se alcançar o limite da DA. Finalmente, na transição tanto  $\xi$  quanto  $\tau$  divergem, e as correlações são de longo alcance, representadas por decaimentos do tipo lei de potência na autocorrelação do ruído [13],

$$\langle \eta(x, t), \eta(x', t') \rangle \sim |x - x'|^{-2\beta/\nu_\perp} |t - t'|^{-2\beta/\nu_\parallel} , \quad (3.12)$$

onde  $\beta$ ,  $\nu_\perp$  e  $\nu_\parallel$  são, respectivamente, os expoentes críticos do parâmetro de ordem, do comprimento de correlação e do tempo de correlação no DKCA. (Em analogia ao apresentado para a percolação direcionada na seção 1.3.)

O valor do expoente de crescimento  $\beta_w$  na linha de transição pode ser derivado a partir da equação contínua (3.10), e da autocorrelação do ruído, equação (3.12); a altura  $h(x, t)$  pode ser obtida integrando-se a equação 3.10,

$$h(x, t) = \int_0^t d\tau F + \int_0^t d\tau \eta(x, \tau) . \quad (3.13)$$

Se agora fazemos a mudança de variáveis,  $h(x, t) \rightarrow h(x, t) - Ft$ , considerando apenas as flutuações em torno da altura média, podemos escrever a rugosidade do perfil como,

$$w^2(t) = \int_0^t d\tau \int_0^\tau dt' \langle \eta(x, \tau) \eta(x, t') \rangle , \quad (3.14)$$

Logo, usando a equação 3.12, e fazendo as mudanças de variáveis,  $\omega = \tau - t'$ , teremos

$$\begin{aligned} w^2(t) &\sim \int_0^t d\tau \int_{\omega_0}^\tau d\omega \omega^{-2\beta/\nu_\parallel} \\ &\sim \int_0^t d\tau (\omega^{1-2\beta/\nu_\parallel})_{\omega_0}^\tau \\ &\sim t^{2-2\beta/\nu_\parallel} . \end{aligned}$$

Tomamos o limite inferior da integral como  $\omega_0 \sim 1$  pois a equação (3.12) é válida para  $|t - t'| \gtrsim 1$ , quando o comportamento de escala domina o decaimento exponencial das correlações para grandes separações espaciais e temporais. Esse resultado implica que a rugosidade de um substrato infinito ( $L \rightarrow \infty$ ), para o esquema simétrico, obedeça a seguinte lei de potência,

$$w(\infty, t) \sim t^{1-\beta/\nu_\parallel} . \quad (3.15)$$

Como esperado, esta transição pertence à classe de universalidade DP cujos valores para os expoentes foram obtidos por Jensen [85], resultando na seguinte previsão para o expoente de crescimento,

$$\beta_w = 1 - \frac{\beta}{\nu_{\parallel}} = 1 - \frac{0.27649(2)}{1.733825(3)} \simeq 0.84053(2) .$$

Para o esquema não-simétrico, devido à correspondência entre as histórias mostrada anteriormente pela relação (3.9), a altura será definida por,

$$h(x, t) = \int_0^t d\tau \eta(2x - \tau, \tau) , \quad (3.16)$$

resultando em

$$\begin{aligned} w^2(t) &= \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} dt' \langle \eta(2x - \tau, \tau) \eta(2x - t', t') \rangle \\ &= \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} d\omega \langle \eta(\phi - \omega, t' + \omega) \eta(\phi, t') \rangle , \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde  $\phi = 2x - t'$ . Logo, usando a equação 3.12

$$\begin{aligned} w^2(t) &\sim \int_0^t d\tau \int_{\omega_0}^{\tau} d\omega |\omega|^{-2\beta(1/\nu_{\parallel} + 1/\nu_{\perp})} \\ &\sim t^{2-2\beta(1/\nu_{\parallel} + 1/\nu_{\perp})} . \end{aligned}$$

Isso implica que a rugosidade de um sistema infinito, para o esquema não-simétrico, obedece a seguinte lei de potência em relação ao tempo,

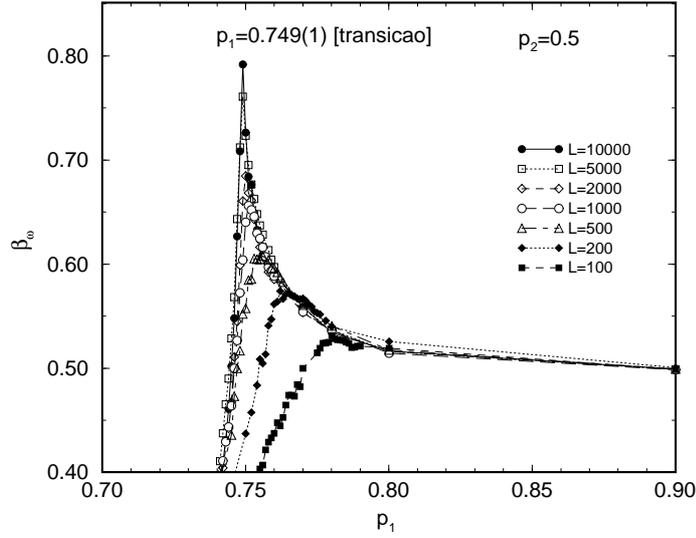
$$w^{NS}(\infty, t) \sim t^{1-\beta(1/\nu_{\parallel} + 1/\nu_{\perp})} . \quad (3.18)$$

Considerando [85]  $\nu_{\perp} = 1.096854(2)$ , a previsão teórica para o valor do expoente de crescimento no esquema não-simétrico é

$$\beta_w \simeq 0.58846(2) ,$$

em concordância com os valores encontrados na seção anterior.

Tamém na seção anterior, mostramos como  $\beta_w$  atinge um valor máximo na transição de fase. Pode-se explicar esse comportamento do expoente  $\beta_w$  com o seguinte argumento: a



**Figura 3.9:** Expoente de crescimento  $\beta_w$  no DKCA para vários tamanhos de sistemas, no esquema simétrico. Note que  $\beta_w$  atinge um máximo na transição congelada/ativa e depende fortemente do tamanho do sistema. O ponto de transição foi escolhido como o ponto de máximo no valor de  $\beta_w$  em um sistema com  $L=10000$ , onde a transição é bastante localizada. No exemplo considerado,  $p_2=0.5$  e  $p_1=0.749$ .

taxa de crescimento,  $dh_i/dt$ , para o sítio  $i$ , é proporcional ao *excesso* de atividade naquele sítio (em relação ao referencial movendo-se com a velocidade média  $d\langle h \rangle/dt$ ). Longe da transição, a atividade possui o comprimento de correlação  $\xi$  e o tempo de correlação  $\tau$  finitos. Logo, para escalas maiores que  $\xi$  ou  $\tau$ , o ruído no crescimento da superfície se torna descorrelacionado, e o processo cai na classe DA, com  $\beta_w = 1/2$ . No ponto crítico,  $\xi$  e  $\tau$  divergem, resultando na seguinte relação de escala,  $\beta_w = 1 - \theta$  [41], onde o expoente  $\theta$  é definido pela relação,  $\rho(t) \sim t^{-\theta}$ , para o decaimento inicial da densidade de atividade  $\rho$  no ponto crítico, considerando uma densidade inicial  $\rho(0) = 1$ . Desse modo, em uma dimensão,  $1 - \theta > 1/2$ , e esperamos um salto no valor de  $\beta_w$  na fronteira da transição. Nas simulações de sistemas finitos não esperamos uma descontinuidade no valor de  $\beta_w$ , mas um pico bem definido na transição - Figura 3.9 (muito próximo a transição,  $\xi > L$ , de modo que nas simulações todo o sistema está correlacionado).

Desde que a saturação da rugosidade superficial é forçada pelo estado absorvente (congelado) do DKCA, na criticalidade o tempo de *crossover*,  $t_x$ , comporta-se exatamente como na DP e o expoente dinâmico  $z$  é dado por:

$$t_x \sim L^z, \quad z = z^{DP} = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp} \simeq 1.580725(20). \quad (3.19)$$

Logo, o expoente de rugosidade na criticalidade é dado por,

$$\alpha = z \cdot \beta_w \simeq 1.3286(3). \quad (3.20)$$

**Tabela 3.1:** Sumário dos valores para os expoentes de escala,  $d=1$ .

Trabalhos anteriores	$\alpha$	$\beta_w$	$z$	$H$
DP	1.3286	0.8405	1.5808	0.643
CP (Simulação) [41]	1.33	0.839(1)	-	0.63(3)
CA (Simulação) [21]	-	0.837(11)	-	-
CDP	2	1	2	1
Presente trabalho	Esquema	Simétrico		
congelada/ativa $p_2 = 0.5$	1.32(1)	0.82(2)	1.59(1)	0.61(3)
congelada/ativa $p_2 = 1$	2.01(1)	0.99(1)	2.08(5)	0.99(2)
não-caótica/caótica $p_1 = 1$	1.325(9)	0.81(1)	1.61(1)	0.60(3)
não-caótica/caótica $p_2 = 0$	1.32(1)	0.78(2)	1.64(2)	0.61(3)
Presente trabalho	Esquema	Não-simétrico		
congelada/ativa $p_2 = 0.5$	0.92(7)	*	1.58(4)	0.26(6)
congelada/ativa $p_2 = 1$	0.984(7)	*	1.9(1)	0.501(25)
não-caótica/caótica $p_1 = 1$	0.93(1)	*	1.67(2)	0.30(2)
não-caótica/caótica $p_2 = 0$	0.910(7)	*	1.66(1)	0.28(3)

\* O asterisco denota dois regimes para o comportamento da rugosidade, como discutido nos resultados .

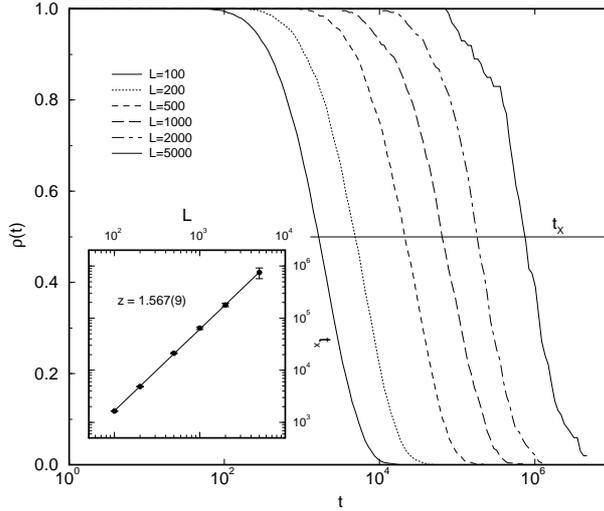
Dickman e Muñoz [41] estudaram o processo de contato usando a representação de interfaces e demonstraram que o expoente de Hurst apresenta sinais claros de escala anômala ( $\alpha > H$ ), mas nenhum sinal de multiescala. Os autores verificaram também a validade da relação de escala de López [104]:  $H = \alpha - z\kappa$ , onde  $\kappa = 0.4336(4)$  é o expoente associado à divergência da raiz quadrada do gradiente de alturas na equação contínua de crescimento que descreve o processo de contato e modelos associados, como a DP. Inserindo os valores conhecidos para os expoentes, a previsão para o expoente de Hurst na classe DP se torna,

$$H = \alpha - z\kappa \simeq 0.643(2) . \quad (3.21)$$

### 3.2.3 Resultados

Na Tabela 3.1 resumimos os resultados obtidos para os expoentes de escala nas transições congelada/ativa e caótica/não-caótica no DKCA, e comparamos com os valores das classes de universalidade DP e CDP.

Nas simulações, os expoentes foram obtidos diretamente das relações (como detalharemos em seguida):  $w(L, \infty) \sim L^\alpha$ , válida em tempos longos;  $w(L, t) \sim t^{\beta_w}$ , válida em tempos curtos; e  $t_\times(L) \sim L^z$ . Os resultados mostram uma forte dependência em relação ao esquema de atualização utilizado - simétrico ou não-simétrico. Considerou-se 10000, 5000, 2500, 1000, 500, 250 e 100 amostras no ponto crítico ( $p_2^c, p_1^c$ ) em sistemas com  $L = 50, 100,$



**Figura 3.10:** Expoente dinâmico  $z$  para a representação de interfaces do DKCA. Mostramos a evolução temporal da densidade  $\rho(t)$  de amostras ativas, em sistemas de diversos tamanhos, para o esquema simétrico ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$ ). A linha horizontal ressalta o valor  $\rho = 1/2$ , que corresponde ao tempo de crossover. No detalhe mostramos o tempo de crossover  $t_x$  em função do tamanho dos sistemas. A inclinação dessa curva fornece o valor do expoente dinâmico  $z$ . As barras de erro são calculadas considerando-se um erro de 1% no número de amostras congeladas em um dado tempo.

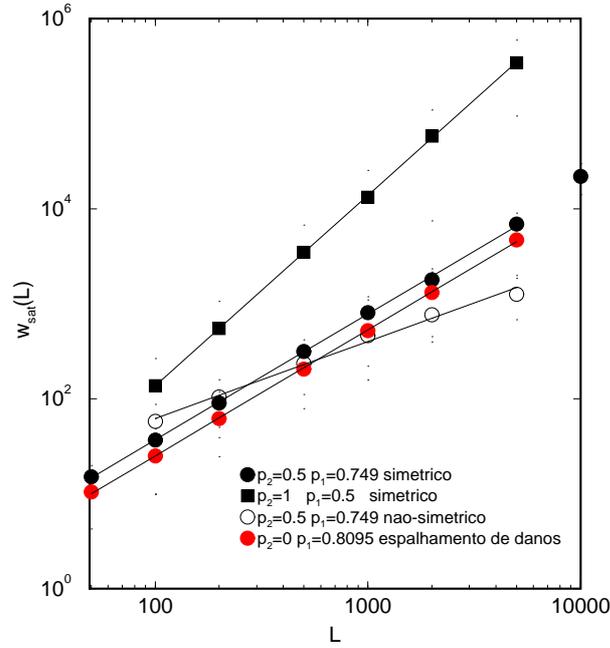
200, 500, 1000, 2000 e 5000 sítios, respectivamente. As condições iniciais são distribuições aleatórias com 50% dos sítios ativos.

Para determinar o tempo de *crossover*,  $t_x(L)$ , acompanhamos o comportamento da fração de amostras com pelo menos um sítio ativo ao longo do tempo (vide Figura 3.10). O tempo de *crossover* é definido como o momento no qual metade do número inicial de amostras atingem o estado congelado, no ponto crítico. No detalhe da Figura 3.10, mostramos o comportamento tipo lei de potência do tempo de *crossover* em função do tamanho do sistema; a inclinação deste gráfico corresponde ao expoente  $z$ .

A rugosidade de saturação é obtida após todas as amostras atingirem o estado absorvente, e se fazer a média dos valores finais das rugosidades. O expoente  $\alpha$  é medido a partir da inclinação do gráfico  $w(L, \infty) \times L$ , em escala logarítmica. Na Figura 3.11 mostramos os resultados para a rugosidade de saturação nos seguintes casos: percolação direcionada ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$ , esquema simétrico), DP ( $p_2=0$ ,  $p_1=0.8095$ , espalhamento de danos), CDP ( $p_2=1$ ,  $p_1=0.5$ , simétrico) e DP não-simétrica ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$ ).

Para verificar a escala de Family-Vicsék na criticalidade, usamos os valores medidos para os expoentes de escala para colapsar as várias curvas de rugosidade, obtidas em sistemas com diferentes tamanhos, em uma única curva, como mostrado na Figura 3.12. Note que este colapso corrobora a hipótese de Family-Vicék.

O expoente de Hurst foi medido segundo o procedimento explicado no Apêndice C.1. Os resultados mostrados na Tabela 3.1 correspondem a uma média sobre 100 condições iniciais aleatórias, em sistemas com  $L = 10000$ . Observa-se uma mudança significativa no expoente



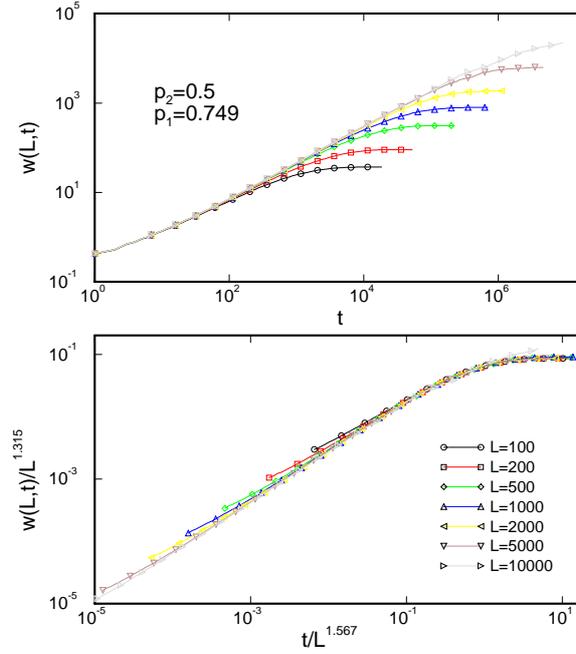
**Figura 3.11:** *Expoente de rugosidade  $\alpha$  para o DKCA na representação de interfaces. Quatro casos são mostrados: percolação direcionada ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$  simétrico), DP ( $p_2=0$ ,  $p_1=0.8095$  espalhamento de danos), percolação direcionada compacta ( $p_2=1$ ,  $p_1=0.5$  simétrico) e não-simétrico DP ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$ ). A linha corresponde a regressão linear considerando uma lei de potência e fornece o valor do expoente de rugosidade  $\alpha$ . As barras de erro são os desvios padrão na rugosidade de saturação das amostras consideradas em cada tamanho de sistema.*

de Hurst dependendo do tipo de esquema de atualização utilizado: no esquema simétrico  $H > 1/2$ , denotando uma interface positivamente correlacionada; já no esquema não-simétrico,  $H = 0.25(3)$ , denotando uma correlação negativa. Esse comportamento pode ser entendido se consideramos que o esquema não-simétrico equivale a uma deposição sobre um referencial em movimento, o que implica em uma propagação lateral das correlações.

### Esquema Simétrico

Os resultados para os expoentes críticos no esquema simétrico concordam com os valores da classe DP, exceto no ponto terminal  $p_2 = 1$  onde os valores da classe CDP foram obtidos. Os pontos de transição ( $p_2^c, p_1^c$ ) são determinados através do método do expoente de crescimento [8] (Figura 3.9), que consiste basicamente em fixar  $p_2$  e variar  $p_1$  até o máximo do expoente  $\beta_w$  ser atingido, como descrito na seção anterior.

É importante notar que os expoentes  $\beta_w$  e  $z$  medidos na transição caótica/não-caótica em  $p_2 = 0$  são levemente diferentes daqueles medidos longe da criticalidade. Isso pode representar uma evidência de correlações de longo alcance devido a coincidência das transições de espalhamento de danos e a transição congelada/ativa, como apontado por Grassberger [68], mas também é consistente com correções de escala. Até o momento não fomos capazes de distinguir esses efeitos, através de resultados analíticos ou simulacionais.

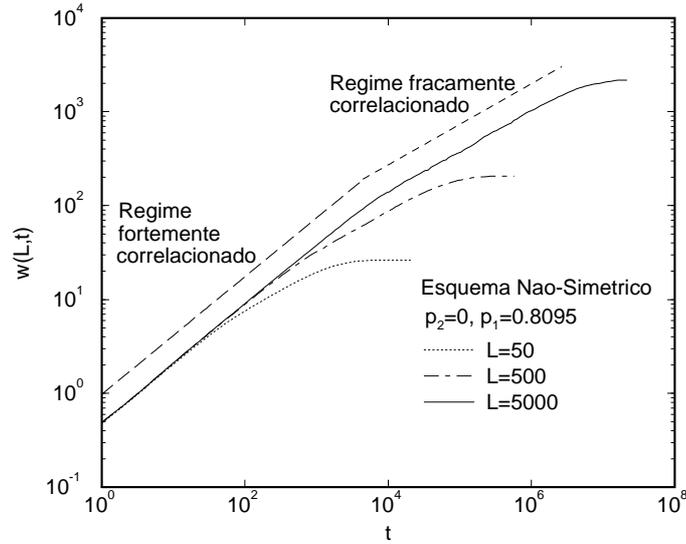


**Figura 3.12:** Escala de Family-Vicsek. Painel superior: rugosidade dos perfis gerados em diferentes tamanhos de sistemas. Inferior: colapso das curvas acima usando os expoentes medidos através das simulações, na criticalidade ( $p_2=0.5$ ,  $p_1=0.749$ ).

### Esquema Não-simétrico

Uma mudança significativa no enrugamento ocorre no esquema não-simétrico, como mostrado na Figura 3.13; observamos dois regimes de crescimento da rugosidade: um regime fortemente correlacionado ( $\beta \sim 0.65$ ), para tempos  $t \lesssim L$ , e um regime fracamente correlacionado ( $\beta \sim 0.45$ ), para tempos longos. Novamente, esse comportamento pode ser entendido considerando o esquema não-simétrico como uma deposição em um referencial em movimento. As correlações inerentes da dinâmica são propagadas no referencial em movimento até alcançarem o tamanho do sistema; então, as correlações devido às regras locais do autômato passam a dominar, diminuindo a taxa de crescimento da rugosidade. Esses dois regimes implicam que não é possível colapsar todas as curvas de rugosidade usando a relação de escala de Family- Vicsek.

Os valores aparentes do expoentes de crescimento medidos no esquema não-simétrico são marcadamente menores:  $\alpha \sim 0.92(1)$  para as transições caótica/ não-caótica e ativa/congelada; em  $p_2 = 1$ ,  $p_1 = 0.5$ ,  $\alpha \sim 0.984(7)$ . Como discutido acima, o expoente de crescimento apresenta dois valores dependendo do regime de crescimento. (O símbolo \* na Tabela 3.1 denota esse comportamento.) O expoente dinâmico  $z$  deve assumir o mesmo valor da classe DP, como discutimos na seção anterior; de fato,  $z \sim 1.6(1)$  para as transições caótica/não-caótica e ativa/congelada (para  $p_2 \neq 1$ ), enquanto  $z \sim 1.9(1)$  (para  $p_2 = 1$ ,  $p_1 = 0.5$ ), em concordância com a previsão da classe CDP.



**Figura 3.13:** Comportamento da rugosidade no esquema não-simétrico. Note os dois regimes da curva  $w(L,t) \times t$ ; para  $t \lesssim L$  temos um regime fortemente correlacionado com  $\beta_w \sim 0.65$  e para  $L < t < t_x$ , um regime fracamente correlacionado com  $\beta_w \sim 0.45$ .

### 3.3 Aproximação de Campo Médio Dinâmico

Esta abordagem foi apresentada originalmente por Tomé [164] e reproduz qualitativamente o diagrama de fases do modelo. Para simplificarmos os cálculos, consideraremos a seguinte transformação (que corresponde ao esquema não-simétrico),

$$w_{DK}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}) \rightarrow w_{DK}(\sigma_j | \sigma'_j, \sigma'_{j+1})$$

onde  $j = (i - t)/2 \pmod{L/2}$ . Esta transformação é permitida no DKCA uma vez que, de fato, coexistem duas sub-redes distintas no autômato: a dos sítios pares que possuem vizinhos ímpares e vice-versa. Utilizando as relações (3.1) e (3.3) podemos escrever para a distribuição de probabilidades de um sítio,

$$P_{t+1}(\sigma_i) = \sum_{\sigma'_i} \sum_{\sigma'_{i+1}} w_{DK}(\sigma_i | \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) P_t(\sigma'_i, \sigma'_{i+1}). \quad (3.22)$$

Na Tabela 3.2 apresentamos as probabilidades de transição do DKCA, exatamente como descrito pelas relações (1.7). Considerando que o estado do sítio em questão seja ativo e utilizando a Tabela 3.2, obtemos

$$P_{t+1}(1) = 2p_1 P_t(1, 0) + p_2 P_t(1, 1). \quad (3.23)$$

Naturalmente,

$$P_{t+1}(0) + P_{t+1}(1) = 1 . \quad (3.24)$$

**Tabela 3.2:** Probabilidades de transição do DKCA

$\sigma_i   \sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}$	1,1	1,0	0,1	0,0
1	$p_2$	$p_1$	$p_1$	0
0	$1 - p_2$	$1 - p_1$	$1 - p_1$	1

Para a distribuição de probabilidades de um par de de sítios, teremos

$$P_{t+1}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_{\sigma'_i} \sum_{\sigma'_{i+1}} \sum_{\sigma'_{i+2}} w_{DK}(\sigma_i | \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) w_{DK}(\sigma_{i+1} | \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2}) P_t(\sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2}) . \quad (3.25)$$

Novamente, com auxílio da Tabela 3.2, teremos para um par de sítios ativos

$$P_{t+1}(1, 1) = p_1^2 P_t(0, 1, 0) + p_1^2 P_t(1, 0, 1) + p_2^2 P_t(1, 1, 1) + 2p_1 p_2 P_t(0, 1, 1) . \quad (3.26)$$

Obviamente

$$P_t(1, 0) + P_t(1, 1) = P_t(1) . \quad (3.27)$$

Portanto, percebemos que as equações de evolução de  $N$  sítios envolvem probabilidades relativas a  $(N + 1)$  sítios. Esse conjunto hierárquico de equações pode ser analisado a partir do esquema de truncamento que resulta na aproximação denominada campo médio dinâmico. Aqui, faremos uma abordagem análoga à apresentada por Tomé e Oliveira [167].

Para a abordagem de um sítio, teremos a seguinte aproximação

$$P_t(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \simeq P_t(\sigma_i) P_t(\sigma_{i+1}) , \quad (3.28)$$

que considera a probabilidade conjunta de uma configuração como o produto das probabilidades individuais, ou seja, que as probabilidades de ocupação de cada sítio sejam independentes entre si.

Aplicando a aproximação (3.28) nas equações (3.23) e (3.24), e fazendo as substituições,  $x_t = P_t(1)$  e  $(1 - x_t) = P_t(0)$ , teremos para a aproximação de um sítio,

$$x_{t+1} = p_2 x_t^2 + 2p_1 x_t (1 - x_t) . \quad (3.29)$$

No estado estacionário ( $x_{t+1} = x_t = x$ ), esta equação se torna,

$$(p_2 - 2p_1)x^2 + (2p_1 - 1)x = 0 . \quad (3.30)$$

As soluções para a equação (3.30) correspondem às duas fases possíveis para o DKCA: a fase congelada ( $x = 0$ ), e a fase ativa, onde

$$x = \frac{2p_1 - 1}{2p_1 - p_2} . \quad (3.31)$$

A transição de fase irá ocorrer quando  $x \rightarrow 0$  na fase ativa; logo, para  $p_1 = 1/2$ .

Considerando agora a aproximação no nível de pares,

$$P_t(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \sigma_{i+2}) \simeq \frac{P_t(\sigma_i, \sigma_{i+1})P_t(\sigma_{i+1}, \sigma_{i+2})}{P_t(\sigma_{i+1})} , \quad (3.32)$$

onde usamos a melhor estimativa para  $P_t(\sigma, \sigma', \sigma'')$  dados  $P_t(\sigma, \sigma')$ , ou seja, considerando as probabilidades de pares como independentes a menos do sítio central que, obviamente, deve ser o mesmo para os dois pares.

Fazendo  $z_t = P_t(1, 1)$  e considerando as substituições já mencionadas, teremos que a equação (3.27) se torna

$$P_t(1, 0) = x_t - z_t ; \quad (3.33)$$

aplicando estes resultados na equação (3.26), teremos

$$z_{t+1} = p_1^2 \frac{(x_t - z_t)^2}{x_t} + 2p_1 p_2 \frac{(x_t - z_t)z_t}{x_t} + p_1^2 \frac{(x_t - z_t)^2}{1 - x_t} + p_2 \frac{z_t^2}{x_t} . \quad (3.34)$$

No estado estacionário, podemos reescrever (3.23) como

$$z = \frac{1 - 2p_1}{p_2 - 2p_1} x ; \quad (3.35)$$

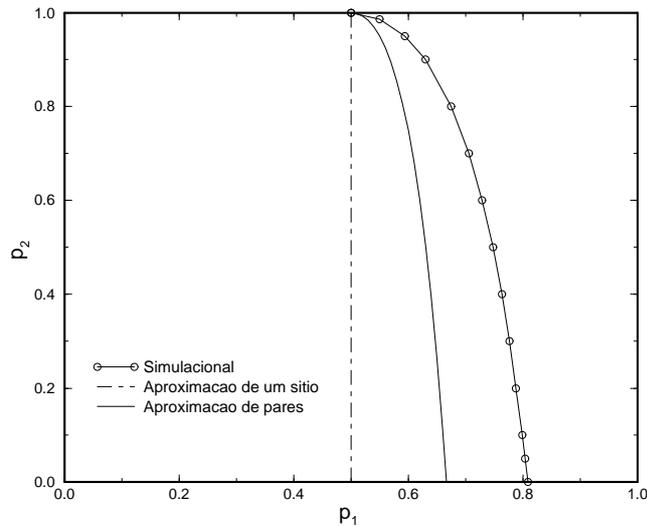
substituindo esta relação na equação (3.34), no estado estacionário obtemos,

$$x = \frac{p_2(p_1 - 1)^2 + p_1(3p_1 - 2)}{(2p_1 - 1)(2p_1 - p_2)} . \quad (3.36)$$

Novamente, a transição será obtida no limite  $x \rightarrow 0$ , resultando em

$$p_2 = \frac{p_1(2 - 3p_1)}{(p_1 - 1)^2}. \quad (3.37)$$

O comportamento das aproximações de campo médio dinâmico para um sítio e um par podem ser visualizadas na Figura 3.14, onde também mostramos o resultado simulacional, discutido na seção 3.1, afim de podermos comparar a precisão das aproximações.



**Figura 3.14:** Diagrama de fases do DKCA obtido pela aproximação de campo médio, considerando um sítio e um par, e pelas simulações.

### 3.4 Distribuições Quase-Estacionárias de Probabilidades

Nesta seção iremos mostrar como obter uma distribuição *quase estacionária* (QS) de probabilidades para o DKCA em sistemas finitos. Recentemente, Dickman e Vidigal [44] desenvolveram métodos para se estudar o estado quase-estacionário de sistemas finitos com um estado absorvente. As propriedades quase-estacionárias convergem para o verdadeiro estado estacionário no limite  $L \rightarrow \infty$ . Dessa maneira, o estado quase-estacionário fornece o raciocínio correto para se estudar o comportamento “estacionário” de simulações de modelos com um estado absorvente, já que estas necessariamente tratam de sistemas finitos.

Portanto, o *real* estado estacionário das simulações corresponde ao estado absorvente, para quaisquer valores de  $p_1$  e  $p_2$ . Esse comportamento é devido às flutuações que invariavelmente levam sistemas finitos para a fase congelada (mesmo que o tempo para isto ocorrer em sistemas grandes seja extremamente longo). A aproximação de campo médio mostrada na seção anterior não leva em conta tais flutuações, e portanto não pode ser utilizada para descrever sistemas finitos. Desse modo, uma vez que os métodos numéricos e as simulações sempre levam em conta tais sistemas, é de grande interesse desenvolver descrições teóricas aproximadas que considerem sistemas finitos.

Uma maneira natural de estudar sistemas finitos é através das distribuições *quase-estacionárias* que, quando existem, descrevem fielmente as propriedades do sistema [57, 126, 186]. No artigo citado, Dickman e Vidigal constroem as distribuições quase-estacionárias para vários sistemas, todos considerando tempos contínuos. Recentemente, Atman e Dickman [10] estudaram as propriedades quase-estacionárias do DKCA considerando aproximações de um sítio e de pares, estendendo a análise de Dickman e Vidigal para sistemas possuindo tempo discreto.

Mostramos na seção anterior como obter as soluções estacionárias no DKCA, considerando aproximações de um sítio e de pares, dadas respectivamente pelas relações (3.31), (3.35) e (3.36). Como essas aproximações consideram o limite  $L \rightarrow \infty$ , as densidades (de sítios  $x$ , de pares  $z$ , etc.) são, de fato, variáveis determinísticas. No trabalho citado, Atman e Dickman constroem aproximações estocásticas reduzidas considerando sistemas finitos, de maneira análoga à utilizada na aproximação de campo médio dinâmico, e determinam as propriedades quase-estacionárias do sistema, que reproduzimos a seguir.

### 3.4.1 Aproximação de Um Sítio

Consideraremos inicialmente uma aproximação considerando apenas um sítio. Nesse caso, o DKCA é um anel com  $L$  sítios e o estado do sistema é especificado pelo número  $N$  de sítios ativos no tempo  $t$ . Seja  $p_t(N)$ , ( $N = 0, \dots, L$ ), a probabilidade de termos exatamente  $N$  sítios ativos no tempo  $t$ ; o vetor de probabilidades,  $p_t = [p_t(0), p_t(1), \dots, p_t(L)]$ , satisfaz a relação

$$p_t(N) = \sum_{N'} W(N|N') p_{t-1}(N') , \quad (3.38)$$

onde  $W$  é a matriz de transição, e  $W(N|N')$  representa a probabilidade de termos  $N$  sítios ativos no tempo  $t$ , dado que havia  $N'$  ativos no tempo  $t - 1$ .

Na aproximação de um sítio consideramos o estado de cada sítio da rede como um evento independente; se temos  $N'$  sítios ativos no tempo  $t$ , a probabilidade  $x$  de que um sítio

esteja ativo no próximo passo de tempo será dada por (ver equação (3.29)):

$$x = y [2p_1 - (2p_1 - p_2)y] , \quad (3.39)$$

onde  $y = N'/L$ . Logo, as taxas de transição na aproximação de um sítio são dadas por

$$W(N|N') = \frac{L!}{(L-N)!N!} x^N (1-x)^{L-N} . \quad (3.40)$$

Desse modo, na aproximação de um sítio  $p_t(N)$  é uma superposição de distribuições binomiais cujo peso estatístico depende somente da população média no passo anterior.

Como para  $L$  finito a distribuição de probabilidades sempre evolui para o estado absorvente, ( $p(N) = \delta_{N,0}$ ), estaremos interessados em estudar a distribuição *quase-estacionária* (QS),  $\bar{p}(N)$ . Considerando que a distribuição de probabilidades, *condicionada aos estados ativos*, atinja uma forma independente do tempo, para  $t \rightarrow \infty$ , teremos que

$$p_t(N) = A_t \delta_{N,0} + S_t \bar{p}(N), \quad (3.41)$$

onde toda dependência temporal restringe-se às variáveis  $A_t$  e  $S_t$ . Como a distribuição  $\bar{p}(N)$  é condicionada a estados ativos,  $\bar{p}(0) \equiv 0$ . Se adotarmos a normalização

$$\sum_{N=1}^L \bar{p}(N) = 1, \quad (3.42)$$

$S_t$  na equação (3.41) representa a probabilidade de sobrevivência e  $A_t = 1 - S_t$  representa a probabilidade de cair no estado absorvente.

A hipótese do estado quase-estacionário é verificada numericamente a partir da relação (3.41). A distribuição de probabilidades no passo de tempo  $t + 1$  é dada por

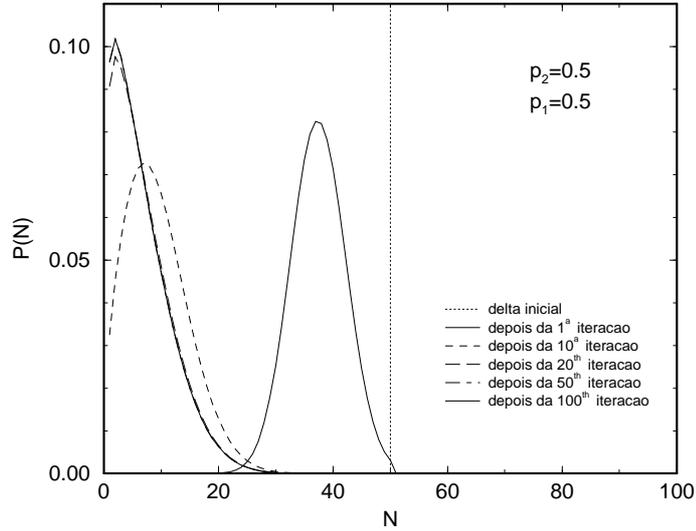
$$\begin{aligned} p_{t+1}(N) &= A_t \delta_{N,0} + S_t \sum_{N'=0}^L W(N|N') \bar{p}(N') \\ &= A_{t+1} \delta_{N,0} + S_{t+1} \bar{p}(N), \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde,  $S_{t+1} = \alpha S_t$ , e

$$\alpha = 1 - \sum_{N=1}^L W(0|N) \bar{p}(N) . \quad (3.44)$$

Restrito aos estados  $1, \dots, N$ ,  $\bar{p}$  é um autovetor da matriz  $W$  cujo autovalor correspondente é  $\alpha$ . O tempo de sobrevivência,  $\tau$ , de um estado quase-estacionário é dado por,

$$\tau = -\frac{1}{\ln \alpha} . \quad (3.45)$$



**Figura 3.15:** Evolução da distribuição de probabilidades, condicionada aos estados ativos, na aproximação de campo médio ao nível de um sítio. A distribuição inicial é  $p_0(N) = \delta_{N,50}$ . O tamanho do sistema é  $L = 100$ , e  $p_1 = 0.5$ ,  $p_2 = 0.5$ .

A distribuição quase-estacionária pode ser obtida iterando-se a equação de evolução (3.38), até a distribuição,  $q_t(N) \equiv p_t(N)/S_t$  (para  $N = 1, 2, \dots, L$ ), atinja uma forma independente do tempo. Esta não é a única maneira de se obter o estado estacionário, como mostrado por Dickman [39] e, no trabalho citado [10], os autores consideram um método alternativo [39]. Esse segundo método é baseado na seguinte relação,

$$\Delta p_t(N) \equiv p_{t+1}(N) - p_t(N) = -w(N)p_t(N) + r_t(N), \quad (3.46)$$

onde  $r_t(N) = \sum_{N' \neq N} W(N|N')p_t(N')$  e  $w(N) = \sum_{N' \neq N} W(N'|N)$ . Inserindo a distribuição QS normalizada  $\bar{p}(N)$  no lado direito da relação acima, teremos

$$(\alpha - 1)\bar{p}(N) = -w(N)\bar{p}(N) + \bar{r}(N), \quad (3.47)$$

onde  $\bar{r}(N) = \sum_{N'} W(N|N')\bar{p}(N')$ . Notando que  $1 - \alpha = \bar{r}(0)$ , essa equação pode ser escrita na forma,

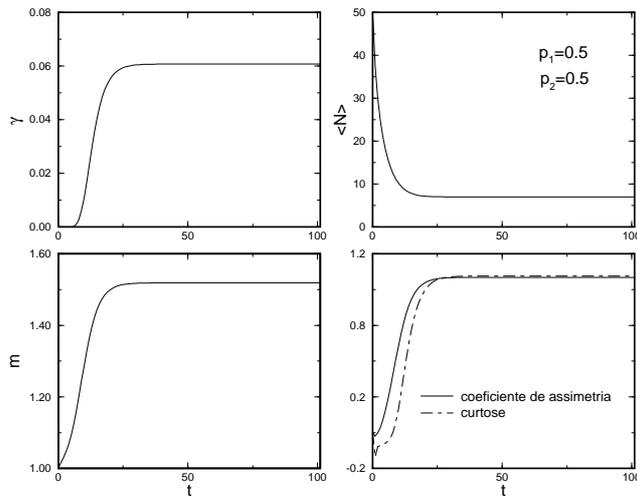
$$\bar{p}(N) = \frac{\bar{r}(N)}{w(N) - \bar{r}(0)}, \quad N \geq 1 . \quad (3.48)$$

Essa relação sugere o seguinte esquema iterativo

$$p'(N) = ap(N) + (1-a)\frac{r(N)}{w(N) - r(0)}, \quad (3.49)$$

onde  $a$  é um parâmetro e  $r(N)$  é obtido a partir da distribuição  $p(N)$ . A cada iteração, a nova distribuição  $p'(N)$  deve ser normalizada. Desse modo, podemos construir o estado quase-estacionário a partir de qualquer distribuição inicial  $p(N)$ , normalizada e não-negativa. Como discutido por Dickman [39], uma boa convergência é obtida para  $a \simeq 0$ . Referiremos a este método como *iterativo*, enquanto o método a partir da equação (3.38) é chamado de método *direto*.

Na Figura 3.15, mostramos a evolução temporal da distribuição de probabilidades na aproximação de um sítio, usando o método direto. É fácil ver que a distribuição atinge uma forma quase-estacionária após 50 passos de tempo, aproximadamente. Na Figura 3.16 mostramos a evolução para os valores quase-estacionários da população média,  $\langle N \rangle$ , da razão entre o segundo e primeiro momentos,  $m = \langle N^2 \rangle / \langle N \rangle^2$ , (ambos condicionados aos estados ativos), e da taxa de decaimento,  $\gamma = r_t(0)/S_t$ , considerando os mesmos parâmetros usados na figura 3.15. ( Note que  $\gamma$  é a taxa de transição para o estado absorvente.)

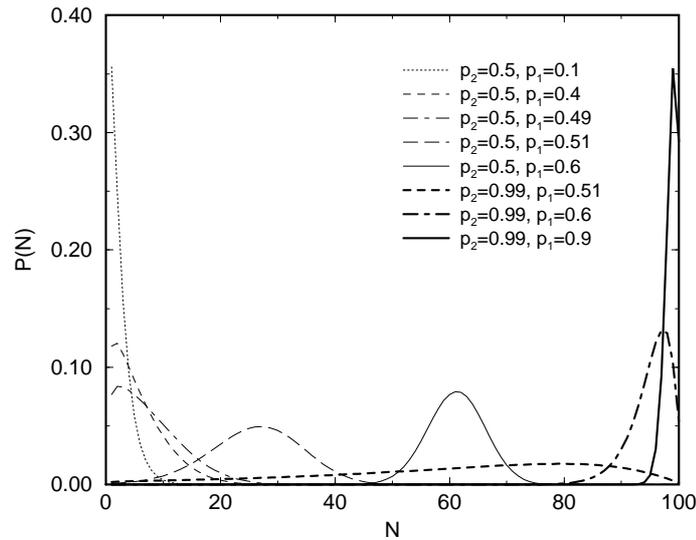


**Figura 3.16:** Evolução em direção ao estado QS na aproximação de um sítio; os parâmetros são os mesmos usados na figura 3.15. Acima à esquerda: taxa de decaimento  $\gamma$ ; à direita: número médio de sítios ativos. Abaixo à esquerda: razão entre momentos  $m$ ; à direita: coeficiente de assimetria e curtose da distribuição.

A relaxação para o estado quase-estacionário parece consistir em dois estágios: um transiente inicial, que depende fortemente da condição inicial, e um longo período de aproximação exponencial para os valores finais. Por exemplo, se observarmos a Figura 3.16 notaremos que a população média obedece uma relação do tipo,  $|\langle N \rangle - \langle N \rangle_{QS}| \sim e^{-t/\tau_R}$ ;  $m$  e  $\gamma$  também relaxam com esta taxa, que é *independente da distribuição inicial*. Desse

modo, a relaxação assintótica para o estado QS é governada por um tempo de relaxação,  $\tau_R$ , que parece depender apenas dos parâmetros  $p_1$  and  $p_2$  e do tamanho do sistema,  $L$ . A distribuição QS também pode ser caracterizada por seu coeficiente de assimetria,  $S$ , e pela curtose,  $K$ , definidos no capítulo anterior. A evolução do coeficiente de assimetria e da curtose também são mostrados na Figura 3.16.

Na Figura 3.17 mostramos a distribuição quase-estacionária em diversos pontos do espaço de parâmetros  $(p_2, p_1)$ . Observa-se que na fase congelada (por exemplo  $p_2 = 0.5, p_1 = 0.4$ ) a distribuição QS colapsa próxima de  $N = 1$ , enquanto na fase ativa ( $p_2 = 0.5, p_1 = 0.6$ ) ela fica concentrada próxima a  $N = 60$ , indicando que, na fase ativa, quanto maior a distância do ponto crítico,  $N_{QS} \rightarrow L$  ( $p_2 = 0.99, p_1 = 0.9$ ). De interesse particular são as propriedades de escala QS no ponto crítico ( $p_2 = p_1 = 0.5$ ), onde verificamos que  $\langle N \rangle \sim L^{1/2}$ ; os tempos de vida QS (ou seja, o número médio de passos que o sistema se mantém ativo no estado QS) comportam-se da mesma maneira. Em particular, o tempo de relaxação  $\tau_R$  também cresce segundo a mesma lei de potência no ponto crítico, onde encontramos a relação,  $\tau_{QS}/\tau_R \sim 2.67$ , para  $p_1 = p_2 = 1/2$ .



**Figura 3.17:** Distribuições quase-estacionárias em vários pontos do diagrama de fases do DKCA, para  $L=100$ .

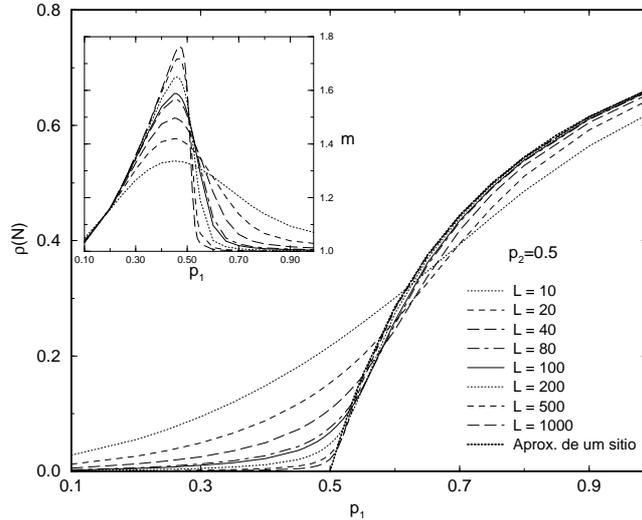
Entretanto, na fase ativa  $\tau_{QS} \sim \exp[\text{const.} \times (p_1 - p_{1c})L]$ , enquanto  $\tau_R$  varia suavemente com  $p_1, p_2$ , e  $L$ . Isso leva a uma clara separação de escalas temporais,  $\tau_{QS} \gg \tau_R$ , para sistemas finitos suficientemente grandes. (Por exemplo, para  $L = 100, p_1 = 0.6$  e  $p_2 = 0.5$ ,  $\tau_{QS} \simeq 2000$  enquanto  $\tau_R \simeq 8$ .)

Na Figura 3.18 mostramos a densidade QS de sítios ativos  $\rho(N)$  versus  $p_1$  na aproximação de um sítio, para diversos tamanhos de sistemas. Pode-se verificar a convergência para

a previsão determinística da aproximação de campo médio. A razão entre os momentos,  $m \times p_1$ , também é mostrada, no detalhe da Figura 3.18, para os mesmos tamanhos de sistemas. Os dados para  $L = 10^3$  a  $10^5$  (vide Figura 3.19) indicam que no ponto crítico, para  $L \rightarrow \infty$ , a razão entre os momentos se aproxima do valor 1.660, encontrado também para o processo de contato (PC) e no processo de Malthus-Verhulst (MVP) [44]. A razão entre os momentos parece aproximar desse mesmo valor limite ao longo de toda a linha crítica, para  $p_2 < 1$ . Esse comportamento sugere que a distribuição QS crítica tenha a seguinte forma de escala, para  $L \rightarrow \infty$

$$\bar{p}(N) \simeq \frac{1}{\langle N \rangle} \mathcal{P}(N/\langle N \rangle), \quad (3.50)$$

onde  $\mathcal{P}(u)$  é uma função de escala. Na Figura 3.20 comparamos (para  $p_1 = p_2 = 0.5$ ),  $\langle N \rangle \bar{p}(N)$  como função de  $N/\langle N \rangle$ , para sistemas com  $L = 10^3, 10^4$ , e  $10^5$ , do mesmo modo que a função de escala exata encontrada para os processos PC e PMV [44].

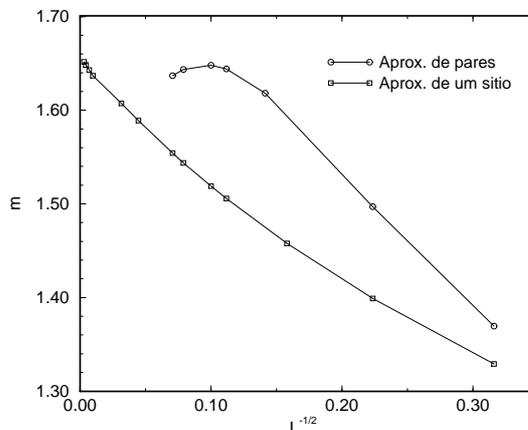


**Figura 3.18:** Densidade quase-estacionária para o DKCA, na aproximação de um sítio, para vários tamanhos de sistemas. No detalhe mostramos a razão entre momentos  $m$  versus  $p_1$  para os mesmos tamanhos de sistemas.

É interessante notar que a distribuição QS para o DKCA tem a mesma forma de escala encontrada no PC e no PMV, embora no ponto crítico do DKCA, o máximo de  $\bar{p}(N)$  ocorre para  $N > 1$ . A posição desse máximo varia muito lentamente com o tamanho do sistema (aproximadamente  $\sim \ln L$ ), de modo que sua posição quase não se altera no limite  $L \rightarrow \infty$ . Uma explicação provável para esse comportamento no DKCA é que as transições para o estado absorvente são possíveis para vários valores de  $N$ , enquanto no PC essa transição só é possível para  $N = 1$ .

No detalhe da Figura 3.20, mostramos para vários valores de  $p_2$ , as curvas  $\langle N \rangle \bar{p}(N) \times N/\langle N \rangle$ , para  $p_1 = 0.5$ ,  $L = 2000$ . O colapso dos dados confirmam a hipótese de escala,

exceto para  $p_2 \simeq 1$ . Esse comportamento distinto é esperado, já que  $p_2 = 1$  corresponde a uma outra classe de universalidade, a *percolação direcionada compacta*, como veremos em detalhe na próxima seção, e possui *dois* estados absorventes.



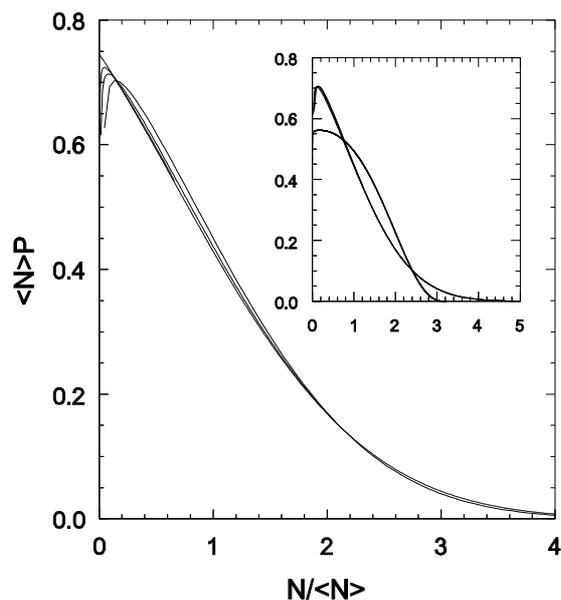
**Figura 3.19:** Razão entre os momentos  $m$ , no ponto crítico ( $p_1=p_2=1/2$  na aproximação de um sítio e  $p_1=0.6306$ ,  $p_2=0.5$  na aproximação de pares), versus  $L^{-1/2}$ . Cada ponto neste gráfico corresponde ao valor quase-estacionário da razão entre momentos, obtido na criticalidade, em cada uma das aproximações. Note que no caso da aproximação de pares, o valor esperado para o sistema infinito é atingido rapidamente com o aumento dos tamanhos da rede.

Para qualquer configuração inicial não concentrada em  $N = 0$ , o sistema evolui para a distribuição QS; portanto, esta é independente da condição inicial. (A unicidade da distribuição QS é esperada no caso do DKCA, que possui apenas um estado absorvente e um estado ativo. Distribuições QS não únicas podem ser observadas em processo nos quais o estado ativo apresenta uma quebra de simetria.)

Os métodos direto e iterativo levam (como deveriam) para a mesma distribuição QS. Para  $-0.4 < a < 0$ , observamos que o método iterativo converge para o estado QS levemente mais rápido que o método direto (que requer cerca de 30% menos passos). Em contraste com o caso onde  $t$  é contínuo, no qual o esquema iterativo pode ser ordens de magnitude mais rápido que a integração da equação mestra [44, 39], aqui o ganho em eficiência é bem mais modesto. Isto não causa surpresa, uma vez que, no caso contínuo, o enorme ganho de eficiência no método iterativo é devido ao pequeno tempo requerido para manter a estabilidade numérica, em relação ao método direto de integração.

### 3.4.2 Aproximação de Pares

Nesta subseção, obteremos a distribuição quase-estacionária de probabilidades para o DKCA considerando uma aproximação de pares. Nesse caso, existem duas variáveis



**Figura 3.20:** Lei de escala para a distribuição QS de probabilidades, na criticalidade, para a aproximação de um sítio ( $p_1=p_2=1/2$ ), com  $L = 10^3, 10^4$  e  $10^5$  (curvas com os máximos se aproximando do eixo  $y$  à medida que  $L$  aumenta), e a função de escala assintótica para o processo de contato encontrada por Dickman [44] (com máximo em  $x=0$ ). No detalhe: Lei de escala das distribuições QS, com  $L=2000$ , para  $p_1=1/2$  e  $p_2 = 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.999$ . As primeiras quatro curvas colapsam, enquanto a última tem uma distribuição mais larga.

estocásticas relevantes: o número de sítios ocupados,  $N$ , e o número de pares de primeiros vizinhos ocupados,  $Z$ . Novamente, consideramos um anel com  $L$  sítios. Por conveniência, introduzimos uma nova notação para os estados dos sítios,  $\varphi_i = \sigma_{i/2}$ , para  $t$  par e  $\varphi_i = \sigma_{(i+1)/2}$ , para  $t$  ímpar. Dessa maneira, o índice para os sítios sempre assume os valores  $1, \dots, L$  em todos os passos de tempo e os pares de primeiros vizinhos (NN) possuem variáveis de estado  $\varphi_i$  e  $\varphi_{i+1}$ .

Inicialmente, iremos estabelecer a faixa de valores permitidos para  $Z$ , dado o número de sítios ativos  $N$ . Como na seção anterior, usaremos ‘1’ e ‘0’ para denotar sítios ocupados e vazios, respectivamente; desse modo,  $K$  denota o número de pares NN (10). (Por simetria, o número de pares (01) é também  $K$ .) Como esperado,  $K$  não é uma variável independente:  $N = Z + K$ . Da mesma forma, o número de pares (00),  $V$ , é dado por  $V = L - 2N + Z$ . Como  $K \geq 0$  e  $V \geq 0$ , existem certos limites para  $Z$  em um anel de  $L$  sítios, como mostrado na Tabela 3.3.

Em seguida, precisamos construir as taxas de transição,  $W(N, Z|N', Z')$ . Notando que a presença de  $V'$  pares NN no estado (00), no tempo  $t$ , implica que existam pelo menos esse mesmo número de sítios vazios no passo de tempo posterior,  $t+1$ ; logo,  $W = 0$  para  $N > 2N' - Z'$ . Como na aproximação de um sítio, dados  $N'$  e  $Z'$ , primeiramente determinamos as densidades de pares,  $z = Z/L$ ,  $k = K/L$ , e  $v = V/L$ , usando as identidades mostradas

**Tabela 3.3:** Valores permitidos de  $Z$  em um anel.

$N$	$Z$
0,1	0
2,..., $L/2$	0,..., $N - 1$
$L/2, \dots, L - 1$	$2N - L, \dots, N - 1$
$L$	$L$

a seguir (na figura 3.21 mostramos como obter cada identidade):

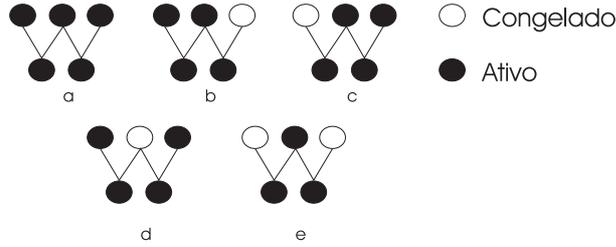
$$z_{t+1} = \frac{1}{\rho_t} [p_2 z_t + p_1 k_t]^2 + p_1^2 \frac{k_t^2}{1 - \rho_t}, \quad (3.51)$$

$$k_{t+1} = \frac{1}{\rho_t} (p_2 z_t + p_1 k_t)(q_2 z_t + q_1 k_t) + \frac{p_1 k_t}{1 - \rho_t} (q_1 k_t + v_t), \quad (3.52)$$

onde  $q_i \equiv 1 - p_i$ ; para  $v_t \equiv P_t(0, 0)$  teremos,

$$v_{t+1} = \frac{1}{\rho_t} [q_2 z_t + q_1 k_t]^2 + \frac{1}{1 - \rho_t} [q_1 k_t + v_t]^2. \quad (3.53)$$

De fato, a identidade (3.51) já havia sido antecipada na seção anterior através da relação (3.34). Nessas relações,  $z$ ,  $k$ , e  $v$  representam as densidades no tempo  $t + 1$ , enquanto as variáveis do lado direito das equações são dadas por,  $\rho_t = N'/L$  e  $z_t = Z'/L$ .



**Figura 3.21:** Relações de recorrência para as densidades de pares. Mostramos na figura as cinco configurações possíveis para se obter um par de sítios ativos no tempo  $t + 1$ ; é fácil ver que cada uma destas configurações equivale a um termo da equação (3.34). Para se obter as relações para  $k$  e  $v$  basta proceder de modo equivalente.

Considerando que todas as configurações possuindo os mesmos valores de  $N$  e  $Z$  são igualmente prováveis, podemos estimar a probabilidade de uma dessas configurações como,

$$Q(N, Z; \rho, z) \equiv \left[ \frac{z^Z k^{2K} v^V}{\rho^N (1 - \rho)^{L - N}} \right] \frac{1}{L} \left[ Z \frac{\rho^2}{z} + 2K \frac{\rho(1 - \rho)}{k} + V \frac{(1 - \rho)^2}{v} \right] \sum_{j=1}^L \frac{s_j s_{j+1}}{p_j}, \quad (3.54)$$

onde  $k = \rho + z$ . O primeiro fator (entre colchetes) é o produto de todas as probabilidades de pares dividida pelo produto de todas as probabilidades de um sítio, exatamente como na aproximação utilizada na seção anterior. O segundo fator é uma correção necessária para a normalização de  $Q$  (Veja Apêndice D). Esse fator de correção corresponde à média para as diferentes maneiras de se escolher a posição inicial em uma anel. No caso do número de pares assumir seus *valores esperados* ( $Z = Lz$ , etc.), o fator de correção é unitário.

A taxa de transição na aproximação de pares é o produto entre a probabilidade configuracional,  $Q(N, Z; \rho, z)$ , e o número de configurações,  $\Gamma(N, Z; L)$ , possuindo exatamente  $N$  sítios ativos e  $Z$  pares ativos. Portanto, em um anel de  $L$  sítios,

$$W(N, Z|N', Z') = \Gamma(N, Z; L)Q(N, Z; \rho, z) , \quad (3.55)$$

para  $(N, Z) \neq (N', Z')$  e  $N \leq 2N' - Z'$ ; para  $N > 2N' - Z'$ ,  $W = 0$ , como vimos anteriormente; já para  $(N, Z) = (N', Z')$ ,

$$W(N, Z|N', Z') = 1 - \sum_{N, Z}^* \Gamma(N, Z; L)Q(N, Z; \rho, z) , \quad (3.56)$$

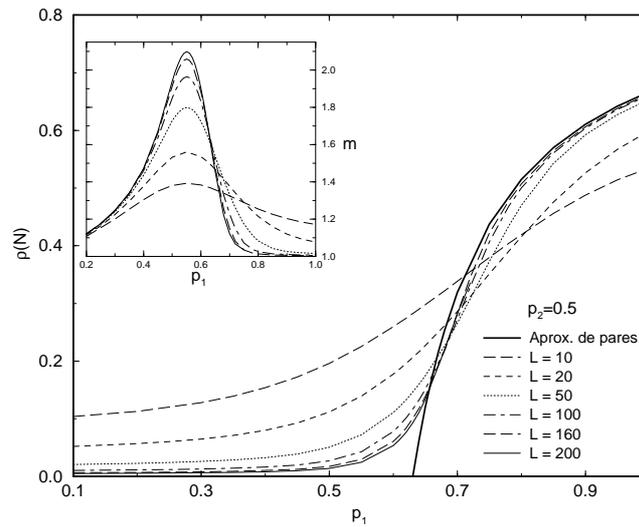
onde (\*) denota a exclusão de um único termo  $N = N'$ ,  $Z = Z'$ . Uma expressão para este fator combinatório é derivada no Apêndice G. (Note que  $\Gamma = 0$  para valores de  $N$  e  $Z$  fora dos limites mostrados na Tabela 3.3.)

Finalmente, a evolução temporal da distribuição de probabilidades na aproximação de pares é dada por

$$p_{t+1}(N, Z) = \sum_{N', Z' / 2N' - Z' \geq N} W(N, Z|N', Z') p_t(N', Z') . \quad (3.57)$$

No artigo citado, Atman e Dickman [10] constroem as distribuições QS na aproximação de pares para o DKCA considerando sistemas com até 200 sítios, concentrando-se no comportamento na vizinhança da linha crítica. (Os cálculos nessa aproximação consomem consideravelmente mais memória e tempo de processamento do que a aproximação de um sítio; a principal limitação é na geração dos coeficientes  $\Gamma$ .)

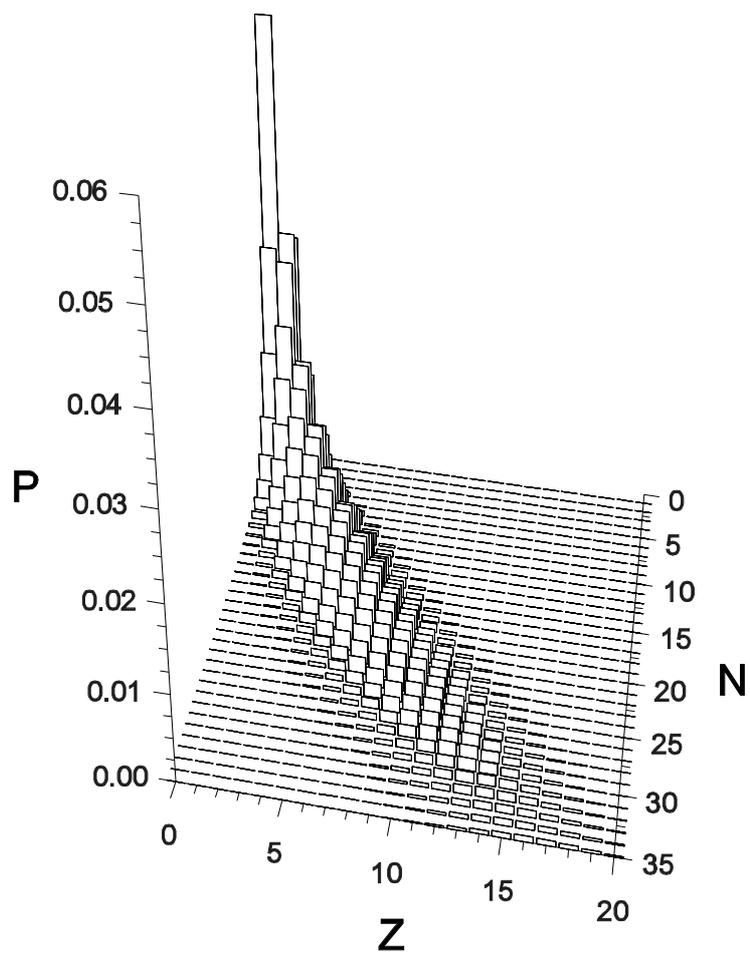
A Figura 3.22 mostra o comportamento do parâmetro de ordem QS *versus*  $p_1$  na aproximação de pares, considerando sistemas de vários tamanhos. Note que na aproximação de pares o valor crítico de  $p_1$  está mais próximo do obtido simulacionalmente e a convergência para o comportamento do limite  $L \rightarrow \infty$  é mais rápida que na aproximação de um sítio, como esperado. No detalhe da figura mostramos o comportamento da razão entre os primeiros momentos,  $m$ , onde pode-se verificar que os pontos de interseção entre as curvas



**Figura 3.22:** Densidade quase-estacionária de sítios ativos em função de  $p_1$  na aproximação de pares para o DKCA, para diversos tamanhos de sistemas. No detalhe mostramos a razão entre momentos  $m$  para os mesmos tamanhos.

(para cada tamanho de sistema) se aproximam do ponto crítico à medida que  $L \rightarrow \infty$ . O comportamento de  $m$  versus  $L$ , na criticalidade, é mostrado na Figura 3.19.

Na Figura 3.23, mostramos a distribuição quase-estacionária,  $\bar{p}(N, Z)$ , na criticalidade ( $p_2 = 0.5$ ,  $p_1 = 0.6306$ ), para  $L = 100$ . Pode-se notar que distribuição é restrita à região  $Z < N$ , como esperado, e se concentra ao longo da linha  $Z = N/2$  para valores pequenos de  $Z$ . A distribuição marginal,  $\bar{p}(N)$ , é similar à encontrada na aproximação de um sítio, assim como o comportamento da população média, razão entre os momentos, taxa de decaimento, coeficiente de assimetria e curtose.



**Figura 3.23:** *Distribuição QS de densidades de pares, condicionada a estados ativos, na criticalidade ( $p_2 = 0.5$ ,  $p_1 = 0.6306$ ).*

## Capítulo 4

---

### PCA com Interações de Três Sítios

Apresentaremos neste capítulo resultados para um autômato celular probabilístico que pode ser considerado a extensão natural do modelo de Domany-Kinzel (DKCA), uma vez que o estado de um sítio no tempo  $t + 1$  depende do estado dos seus primeiros vizinhos no tempo  $t$ , como no DKCA, e também do seu próprio estado no tempo  $t$ ; desse modo, este autômato celular probabilístico (PCA) possui interações de três sítios, do mesmo modo que os autômatos determinísticos estudados por Wolfram [183]. Como no DKCA, estudaremos o caso em que as probabilidades condicionais de transição possuam a forma totalística; desse modo, em relação ao DKCA haverá um terceiro parâmetro,  $p_3$ , representando a probabilidade de um sítio estar ativo no tempo  $t$ , sendo que seus primeiros vizinhos e ele próprio estavam ativos no tempo  $t - 1$ . Para este modelo, o espaço de fases depende de três parâmetros,  $(p_1, p_2, p_3)$ , o que torna o problema de se determinar o diagrama de fases bastante robusto, do ponto de vista simulacional, e complexo, do ponto de vista analítico.

O caso  $p_3 = 1$  foi recentemente estudado por Bagnoli *et al.* [15], onde os autores encontraram um rico diagrama de fases, possuindo dois estados absorventes, transições de primeira e segunda ordem, um ponto bicrítico e uma fase caótica (associada ao espalhamento de danos). Exceto pela linha  $p_2 = 1$  no DKCA, este é o modelo mais simples a exibir uma transição de primeira ordem [15]. Os estados absorventes são o estado 0 ou congelado, correspondendo à configuração sem nenhum sítio ativo, e o estado 1, correspondendo à configuração onde todos os sítios estão ativos. Como no DKCA, o parâmetro de ordem é a densidade de sítios ativos, e os autores usaram aproximações de campo médio (considerando um sítio), simulações e argumentos teóricos análogos a teoria de campos para estudar o modelo. A partir de agora nos referiremos a este modelo como BPCA. Neste trabalho, apresentamos resultados recém submetidos para arbitragem [11], onde estendemos a análise do BPCA considerando dois casos: o já estudado  $p_3 = 1$ , que corresponde a um modelo *tipo* magnético, e o caso  $p_3 = 0$ , que representa um modelo *tipo* jogo-da-vida, em alusão ao autômato introduzido por Conway [37, 17].

Neste capítulo, estudamos as transições de fase e o comportamento crítico da atividade e do espalhamento de danos usando aproximações de campo médio (considerando um sítio e um par), e simulações, para  $p_3 = 0$  e  $p_3 = 1$ . Para construir o diagrama de fases empregamos o método do expoente de crescimento na representação de interfaces do BPCA, tal como mostrado na seção 3.1, e verificamos que o método é capaz de identificar todas as transições. Utilizando as aproximações de campo médio, mostramos que há uma linha de pontos tricríticos no espaço de fases, que esboçamos usando a aproximação de pares. Para  $p_3 = 0$ , observamos uma transição reentrante na região caótica.

## 4.1 O Modelo

O PCA unidimensional com interações de três sítios (BPCA) foi proposto por Bagnoli *et al.* [15], considerando um anel de  $L$  sítios ( $i = 1, 2, \dots, L$ ), com condições periódicas de contorno. Cada sítio  $i$  pode estar em dois estados, denotados convenientemente por  $\sigma_i = 0, 1$ . A configuração do sistema no tempo  $t$  é dada por,  $\sigma \equiv \{\sigma_i(t)\}$ . Em contraste com os autômatos determinísticos estudados por Wolfram, o BPCA é estocástico, e as regras de atualização do sistema são dadas por probabilidades condicionais; em particular, o estado do sítio  $i$  no tempo  $t + 1$  depende dos estados  $\sigma_{i-1}(t)$ ,  $\sigma_i(t)$  e  $\sigma_{i+1}(t)$ , *via* probabilidade de transição,  $P(\sigma_i(t+1)|\sigma_{i-1}(t), \sigma_i(t), \sigma_{i+1}(t))$ . Como já dissemos, a última assume a forma totalística, *i.e.*, depende apenas da soma  $S_i = \sigma_{i-1}(t) + \sigma_i(t) + \sigma_{i+1}(t)$ . Escolhendo  $S = 0$ ,  $\sigma_i(t+1) = 0$  com probabilidade 1 e restam apenas três parâmetros, que definem as probabilidades de transição:

$$P(1|0, 0, 1) = P(1|0, 1, 0) = P(1|1, 0, 0) \equiv p_1 ,$$

$$P(1|0, 1, 1) = P(1|1, 0, 1) = P(1|1, 1, 0) \equiv p_2 ,$$

$$P(1|1, 1, 1) \equiv p_3 .$$

$$\text{Evidentemente, } P(0|\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) = 1 - P(1|\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}).$$

Dependendo do valor de  $(p_1, p_2, p_3)$ , o estado assintótico ( $t \rightarrow \infty$ ) do sistema pode estar na fase congelada, com todos os sítios no estado 0, na fase 1 com todos os sítios no estado 1, ou na fase ativa, onde a densidade estacionária de sítios ativos é diferente de 0 ou 1. Como já dissemos, a determinação completa do diagrama de fases no espaço tridimensional de parâmetros é um problema bastante custoso. Estaremos interessados aqui principalmente nos casos  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$ . No primeiro, o modelo possui os dois estados absorventes citados acima, uma região ativa, e uma região caótica (associada ao espalhamento de danos). Nesse caso o PCA é equivalente a um modelo *tipo* magnético. Para  $p_3 = 0$ , o estado 1 não é mais absorvente (embora o estado congelado continue sendo), o modelo possui também uma fase ativa e apresenta uma fase caótica reentrante. O caso  $p_3 = 0$  descreve uma situação onde o excesso de indivíduos provoca a sua destruição, análogo ao considerado no *jogo-da-vida* de Conway [37, 17].

As transições entre as fases ativa/absorvente são de segunda ordem, caracterizadas por

expoentes críticos dentro da classe de universalidade da percolação direcionada. A transição congelada/plena é descontínua [15], e os expoentes são aqueles da percolação direcionada compacta. As transições de espalhamento de danos (DS) também pertencem à classe DP, consistente com a previsão de Grassberger [67]. O encontro de duas linhas críticas em uma transição descontínua define um ponto *bicrítico*, como o encontrado no BPCA para  $p_3 = 1$  [15]. Para  $p_3 < 1$ , a fase 1 não é mais absorvente, de modo que uma das fronteiras (*i.e.*, entre a fase ativa e a fase 1) deixa de estar presente. Usando aproximações de campo médio, mostramos que o ponto bicrítico é na verdade o término de uma linha de pontos tricríticos: para  $p_3 < 1$ , mas suficientemente próximo a 1, a transição congelada/ativa é descontínua para  $p_1 < p_t$  e contínua para  $p \geq p_t$ , onde  $p_t$  é o ponto tricrítico correspondente.

## 4.2 Teoria de Campo Médio

### 4.2.1 Aproximação de Um Sítio

Inicialmente, apresentamos a aproximação de campo médio no nível de um sítio, para  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$ , e construímos o diagrama de fases a partir das equações obtidas nesta aproximação. O BPCA é um processo markoviano no qual todos os sítios são atualizados simultaneamente. A configuração  $\sigma$  é um conjunto de variáveis estocásticas cuja distribuição de probabilidades no tempo  $t$  é dada por  $P_t(\sigma)$ .

A evolução dessa última é governada por,

$$P_{t+1} = \sum_{\sigma'} \omega(\sigma|\sigma') P_t(\sigma') , \quad (4.1)$$

onde  $\omega(\sigma|\sigma')$  denota a probabilidade de transição  $\sigma' \rightarrow \sigma$ , e possui as propriedades  $\omega(\sigma|\sigma') \geq 0$  e  $\sum_{\sigma} \omega(\sigma|\sigma') = 1$ . A probabilidade de transição para o BPCA é um produto de fatores associados a cada sítio:

$$\omega(\sigma|\sigma') = \prod_{i=1}^L w_i(\sigma_i|\sigma') , \quad (4.2)$$

onde  $w_i(\sigma_i|\sigma') \geq 0$  é a probabilidade condicional de que um sítio  $i$  esteja ativo no tempo  $t + 1$ , dada a configuração  $\sigma'$  no passo de tempo precedente. As probabilidades  $w_i$  são translacionalmente invariantes e, de fato, dependem somente dos estados  $\sigma_{i-1}$ ,  $\sigma_i$  e  $\sigma_{i+1}$  no passo de tempo anterior,

$$w_i(\sigma_i|\sigma') = w_{3s}(\sigma_i|\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) . \quad (4.3)$$

Na Tabela 4.1 listamos  $w_{3s}$  considerando as regras totalísticas definidas na seção anterior.

**Tabela 4.1:** Transição de Probabilidades para o BPCA

$\sigma_i   (\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$	(1,1,1)	(1,1,0) ou (1,0,1) ou (0,1,1)	(0,0,1) ou (1,0,0) ou (0,1,0)	(0,0,0)
1	$p_3$	$p_2$	$p_1$	0
0	$1 - p_3$	$1 - p_2$	$1 - p_1$	1

De interesse são as probabilidades relativas a  $n$ -sítios. A evolução da distribuição  $P_t(\sigma_i)$ , é dada por

$$P_{t+1}(\sigma_i) = \sum_{\sigma'_{i-1}} \sum_{\sigma'_i} \sum_{\sigma'_{i+1}} w_{3s}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) , \quad (4.4)$$

onde  $P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$  é a distribuição para um conjunto de três sítios. A evolução da distribuição para dois sítios é dada por,

$$P_{t+1}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_{\sigma'_{i-1}} \sum_{\sigma'_i} \sum_{\sigma'_{i+1}} \sum_{\sigma'_{i+2}} w_{3s}(\sigma_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) \times w_{3s}(\sigma_{i+1} | \sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2}) P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2}) . \quad (4.5)$$

Evidentemente, temos uma hierarquia infinita de equações. Na aproximação de  $n$ -sítios, truncamos essa hierarquia estimando a probabilidade para  $(n + 2)$  sítios com base nas distribuições de  $n$  sítios. O caso mais simples é a aproximação de um sítio, na qual  $P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$  é fatorada do seguinte modo:  $P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) = P_t(\sigma'_{i-1})P_t(\sigma'_i)P_t(\sigma'_{i+1})$ . Isso leva à relação de recorrência,

$$\rho_{t+1} = p_3 \rho_t^3 + 3p_2 \rho_t^2 (1 - \rho_t) + 3p_1 \rho_t (1 - \rho_t)^2 , \quad (4.6)$$

onde  $\rho_t \equiv P_t(1)$  é a densidade de sítios ativos (*i.e.*, o parâmetro de ordem).

Dependendo do valor de  $(p_1, p_2, p_3)$ , a equação (4.6) admite diferentes soluções estacionárias, correspondendo às possíveis fases discutidas acima: *congelada* ( $\rho = 0$ ), *fase 1* ( $\rho = 1$ ) e *ativa* ( $0 < \rho < 1$ ). De modo a verificar a estabilidade das soluções estacionárias,

consideramos uma pequena perturbação no valor estacionário  $\rho^*$ ,  $\rho_t = \rho^* + \Delta\rho_t$ . Introduzindo esta relação na equação 4.6, obtemos para a aproximação de campo médio no nível de um sítio,

$$\begin{aligned} \Delta\rho_{t+1} = & \Delta\rho_t [3\rho^{*2}(p_3 + 3p_1 - 3p_2) + 6\rho^*(p_2 - 2p_1) + 3p_1] + \\ & (\Delta\rho_t)^2 [3\rho^*(p_3 + 3p_1 - 3p_2) + 3(p_2 - 2p_1)] + \\ & (\Delta\rho_t)^3 [p_3 + 3p_1 - 3p_2] , \end{aligned} \quad (4.7)$$

que pode ser escrita de modo simplificado,

$$\Delta\rho_{t+1} = a(\rho^*)\Delta\rho_t + b(\rho^*)(\Delta\rho_t)^2 + c(\Delta\rho_t)^3 ,$$

onde os coeficientes  $a(\rho^*)$ ,  $b(\rho^*)$  e  $c$  podem ser associados à estabilidade das soluções.

Inicialmente, consideraremos a solução  $\rho^* = 0$ ; a condição de estabilidade,  $a(\rho^*) < 1$ , é obedecida para  $p_1 < 1/3$ . No caso de  $a(\rho^*) = 1$  ( $p_1 = 1/3$ ), a solução será estável somente para  $b(\rho^*) < 0$ ; logo, para esse caso,  $p_3 < 2/3$ . Se  $a(\rho^*) = 1$  e  $b(\rho^*) = 0$ , a condição de estabilidade passa a ser  $c < 0$ , resultando em  $p_3 < 1$ . Logo, a solução  $\rho^* = 0$  é sempre estável para  $p_1 < 1/3$ ,  $p_2 < 2/3$  e  $p_3 < 1$ . O ponto  $(1/3, 2/3, 1)$  corresponde ao ponto tricrítico nesta aproximação.

Se considerarmos agora a solução,  $\rho^* = 1$ , a condição de estabilidade  $a(\rho^*) < 1$  exige que  $p_3 - p_2 < 1/3$ . No caso  $a(\rho^*) = 1$  ( $p_3 = p_2 + 1/3$ ), a condição  $b(\rho^*) < 0$  implica em  $p_2 - p_1 > 1/3$ . Para  $a(\rho^*) = 1$  e  $b(\rho^*) = 0$ , a condição de estabilidade  $c < 0$  resulta em  $p_3 < 1$ . Portanto, o ponto  $(1/3, 2/3, 1)$  é também um ponto tricrítico para a solução  $\rho^* = 1$ ! Logo, o ponto  $(1/3, 2/3, 1)$  corresponde na realidade a um ponto *bicrítico*, como Bagnoli *et al.* já haviam mostrado. De fato, a solução  $\rho^* = 1$  é absorvente apenas para  $p_3 = 1$  (desde que para  $p_3 < 1$ , a dinâmica da atualização do sistema destrói a fase plena); portanto, esta solução é estável somente para  $p_2 > 2/3$ ,  $p_3 = 1$ .

No caso  $0 < \rho^* < 1$ , a condição de estabilidade  $a(\rho^*) < 1$  implica em uma inequação de segundo grau em relação a  $\rho^*$ . Considerando  $a = 1$ , podemos resolver a equação correspondente, e obtemos

$$\rho^* = \frac{(2p_1 - p_2) \pm \sqrt{(p_2 - 2p_1)^2 - (p_3 + 3p_1 - 3p_2)(3p_1 - 1)}}{p_3 - 3p_1 - 3p_2} .$$

Note que  $\rho^*$  se anula na linha  $(1/3, 2/3, p_3)$ . É fácil ver que a solução positiva,  $\rho^*_+$ , é válida para qualquer valor de  $(p_1, p_2, p_3)$ , mas a solução negativa,  $\rho^*_-$ , é válida apenas para  $p_2 < 2p_1$ . Considerando o plano  $p_1 = 1/3$ , a linha de transição para  $p_2 > 2/3$  coincide com a linha onde a raiz quadrada se anula, já que a densidade não pode assumir valores

complexos,  $\rho^* \in \mathbb{R}$ . Isso implica em uma transição de fase descontínua para  $p_2 > 2/3$ , e a linha  $(1/3, 2/3, p_3)$  corresponde a linha de pontos tricríticos no espaço de fases  $(p_1, p_2, p_3)$ , para a aproximação de um sítio.

Como nas simulações consideramos os casos  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$ , vamos resumir o comportamento do diagrama de fases utilizando o critério de estabilidade analisado acima. Para  $p_3 = 1$ , a equação (4.7) pode ser escrita como,

$$\rho \left( (3p_1 - 3p_2 + 1)\rho^2 + (3p_2 - 6p_1)\rho + 3p_1 - 1 \right) = 0 . \quad (4.8)$$

As três soluções desta equação são:

- $\rho = 0$  - fase congelada, estável para  $p_1 < 1/3$  e  $p_2 < 2/3$ ;
- $\rho = 1$  - fase 1, estável para  $p_2 > 2/3$  e  $p_1 > 1/3$ ;
- fase ativa, estável para  $p_2 < 2/3$  e  $p_1 > 1/3$ , onde a densidade estacionária é dada por:

$$\rho = \frac{3p_1 - 1}{3p_1 - 3p_2 + 1} . \quad (4.9)$$

Para  $p_2 > 2/3$  e  $p_1 < 1/3$ , temos uma transição de descontínua separando a fase congelada da fase 1 (ambas estáveis). Nessa região, possui duas bacias de atração, correspondentes às fases absorventes, e uma linha de pontos fixos instáveis que representa a fronteira entre as fases. Escolhendo-se a densidade inicial de sítios  $\rho_0 = 1/2$ , a linha de transição é dada por  $p_2 = 1 - p_1$ .

No caso  $p_3 = 0$ , teremos

$$\rho \left( (3p_1 - 3p_2)\rho^2 + (3p_2 - 6p_1)\rho + (3p_1 - 1) \right) = 0 . \quad (4.10)$$

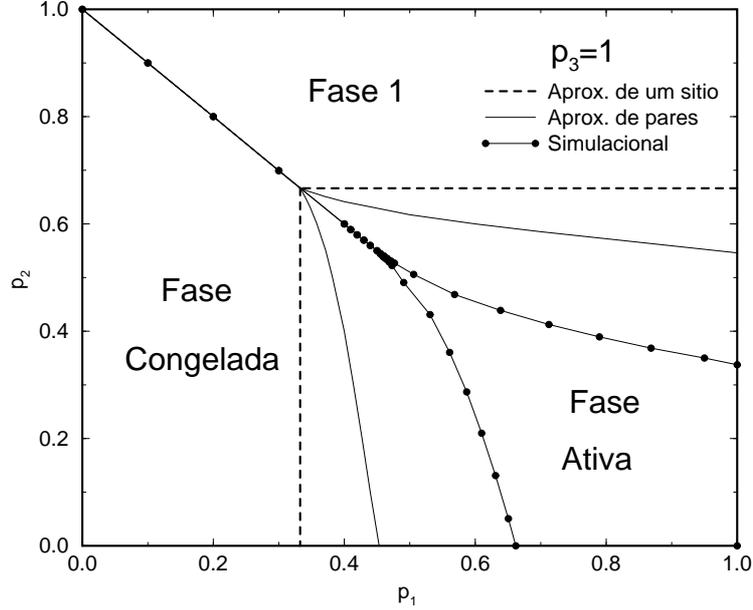
Para essa equação existem apenas duas fases distintas:

- $\rho = 0$  - fase congelada, estável para  $p_1 < 1/3$  e  $p_2 \leq 2/3$ ;
- fase ativa, válida para  $p_1 > 1/3$  e  $p_1 \neq p_2$ , onde a densidade estacionária é dada por:

$$\rho = \frac{6p_1 - 3p_2 \pm \sqrt{9p_2^2 - 12p_2 + 12p_1}}{6p_1 - 6p_2} ; \quad (4.11)$$

a raiz negativa é válida para  $p_2 < 2p_1$ , enquanto a raiz positiva é válida para  $p_2 > 2p_1$ .

Para  $p_2 > 2/3$ , a solução da equação (4.11) é complexa ou estritamente maior que 0, resultando em uma transição *descontínua* entre as fases ativa e congelada, como antecipamos.



**Figura 4.1:** Diagrama de fases para o BPCA,  $p_3 = 1$ . As soluções obtidas nas aproximações de um sítio e um par são comparadas com os resultados simulacionais.

O diagrama de fases na aproximação de um sítio, para  $p_3 = 1$ , é mostrado na Figura 4.1; para  $p_3 = 0$  o diagrama é mostrado na Figura 4.2. Para  $p_3 = 1$ , o diagrama de fases comporta-se exatamente como o esperado [15]. Para  $p_3 = 0$ , esperávamos um único estado absorvente, porém o comportamento observado para  $p_2 > 2/3$ , onde a linha de transição é côncava na direção da região ativa, coincidindo com uma transição descontínua entre valores complexos e positivos da densidade estacionária, não era esperado.

## 4.2.2 Aproximação de Pares

No nível de pares, a probabilidade  $P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2})$  é fatorada da mesma forma como descrita na seção 2.3.

$$P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2}) = \frac{P_t(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i)P_t(\sigma'_i, \sigma'_{i+1})P_t(\sigma'_{i+1}, \sigma'_{i+2})}{P_t(\sigma'_i)P_t(\sigma'_{i+1})}. \quad (4.12)$$

Definindo  $z \equiv P(1, 1)$ , e notando que  $P(1) = P(1, 0) + P(1, 1)$ , podemos escrever

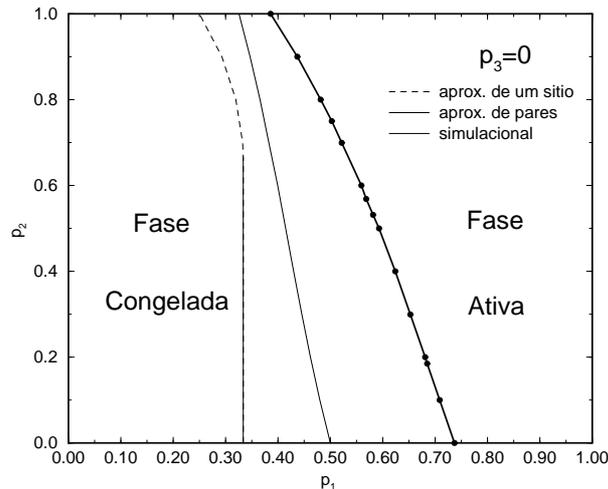
$$k \equiv P(1, 0) = P(0, 1) = \rho - z,$$

e  $v \equiv P(0,0) = 1 - 2\rho + z$ . As relações de recorrência para a densidade de sítios ativos,  $\rho$ , e para a densidade de pares ativos,  $z$ , são

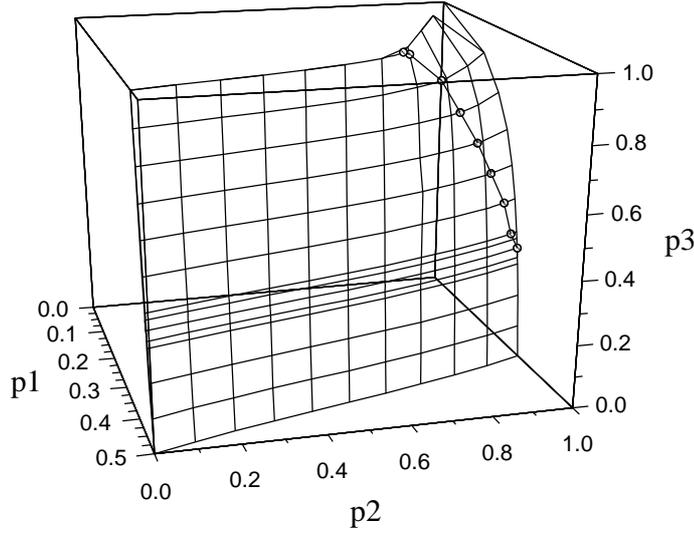
$$\begin{aligned} \rho_{t+1} = & p_3 \frac{z_t^2}{\rho_t} + p_2 \left( \frac{2z_t(\rho_t - z_t)}{\rho_t} + \frac{(\rho_t - z_t)^2}{1 - \rho_t} \right) + \\ & + p_1 \left( \frac{2(\rho_t - z_t)(1 - 2\rho_t + z_t)}{1 - \rho_t} + \frac{(\rho_t - z_t)^2}{\rho_t} \right), \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} z_{t+1} = & p_1^2 \frac{(\rho_t - z_t)^2 (1 - 2\rho_t + z_t)(2 - \rho_t)}{\rho_t (1 - \rho_t)^2} + \\ & + 2p_1 p_2 \frac{(\rho_t - z_t)}{\rho_t (1 - \rho_t)} (z_t (1 - 2\rho_t + z_t) + (\rho_t - z_t)^2) + \\ & + p_2^2 \frac{z_t (\rho_t - z_t)^2 (1 + \rho_t)}{\rho_t^2 (1 - \rho_t)} + 2p_2 p_3 \frac{z_t^2 (\rho_t - z_t)}{\rho_t^2} + p_3^2 \frac{z_t^3}{\rho_t^2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Iterando-se essas relações numericamente até o estado estacionário ser atingido, podemos construir o diagrama de fases na aproximação de pares. Resultados para  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$  são mostrados nas Figuras 4.1 e 4.2. Usando a aproximação de pares, equações (4.13) e (4.14), encontramos numericamente a linha de pontos críticos para  $p_3 < 1$ , como mostrado na Figura 4.3. Na região  $p_3 < 1$  a fase plena desaparece, e a linha de transição descontínua para a fase absorvente encontra a linha de transição contínua nos pontos tricríticos.



**Figura 4.2:** Diagrama de fases para o BPCA,  $p_3 = 0$ . Note que a aproximação de um sítio prevê um ponto tricrítico unindo as transições contínua (linha cheia) e descontínua (linha tracejada). Esta previsão desaparece na aproximação de pares.



**Figura 4.3:** Superfície crítica e linha de pontos tricríticos para o BPCA, na aproximação de pares.

### 4.2.3 Espalhamento de Danos

Bagnoli *et al.* [15] derivou aproximações de campo médio para a transição de espalhamento de danos (DS), no caso  $p_3 = 1$ , mostrando que existe uma região caótica na fase ativa do BPCA. Para obter a aproximação de um sítio para o BPCA, em  $p_3 = 0$ , usamos a abordagem apresentada por Tomé [164]; denotando as configurações em cada réplica por  $\{\sigma_i\}$  e  $\{\tau_i\}$ , a distância de Hamming é dada por

$$H_t = \langle (\sigma_i - \tau_i)^2 \rangle, \quad (4.15)$$

onde a média é feita sobre diferentes amostras. A evolução da probabilidade conjunta é dada por

$$P_{t+1}(\sigma; \tau) = \sum_{\sigma', \tau'} W(\sigma; \tau | \sigma'; \tau') P_t(\sigma'; \tau'), \quad (4.16)$$

onde

$$W(\sigma; \tau | \sigma'; \tau') = \prod_i \varpi(\sigma_i; \tau_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}; \tau'_{i-1}, \tau'_i, \tau'_{i+1}), \quad (4.17)$$

é a probabilidade de transição para os dois sistemas (submetidos ao mesmo ruído), do estado  $(\sigma'; \tau')$  para  $(\sigma; \tau)$ . As probabilidades de transição

$$\varpi(\sigma_i; \tau_i | \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}; \tau'_{i-1}, \tau'_i, \tau'_{i+1}),$$

possuem as propriedades:

$$\sum_{\tau_i} \varpi(\sigma_i; \tau_i \mid \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}; \tau'_{i-1}, \tau'_i, \tau'_{i+1}) = w_{ds3}(\sigma_i \mid \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) \quad (4.18)$$

$$\sum_{\sigma_i} \varpi(\sigma_i; \tau_i \mid \sigma'_{i-1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}; \tau'_{i-1}, \tau'_i, \tau'_{i+1}) = w_{ds3}(\tau_i \mid \tau'_{i-1}, \tau'_i, \tau'_{i+1}) \quad (4.19)$$

Usando as probabilidades de transição definidas na Tabela 4.1, podemos calcular as probabilidades conjuntas de transição, como mostramos na Tabela 4.2.

**Tabela 4.2:** Probabilidades conjuntas de transição para dois BPCA sujeitos ao mesmo ruído.

$\sigma_i, \tau_i$	(1,1,1;1,1,1)	(1,1,1;1,1,0)	(1,1,1;1,0,0)	1,1,1;0,0,0
1,1	$p_3$	$\min(p_2, p_3)$	$\min(p_1, p_3)$	0
1,0	0	b	b'	$p_3$
0,1	0	c	c'	0
0,0	$1 - p_3$	$1 - \min(p_2, p_3)$	$1 - \min(p_1, p_3)$	$1 - p_3$
$\sigma_i, \tau_i$	(1,1,0;1,1,0)	(1,1,0;1,0,0)	(1,1,0;0,0,0)	
1,1	$\min(p_1, p_2)$	0	$p_1$	
1,0	b''	$p_2$	0	
0,1	c''	0	0	
0,0	$1 - \min(p_1, p_2)$	$1 - p_2$	$1 - p_1$	
$\sigma_i, \tau_i$	(1,0,0;1,0,0)	(1,0,0;0,0,0)	(0,0,0;0,0,0)	
1,1	$p_2$	0	0	
1,0	0	$p_1$	0	
0,1	0	0	0	
0,0	$1 - p_2$	$1 - p_1$	1	

Agora podemos escrever as equações para a evolução do parâmetro de ordem associado à transição caótica, a distância de Hamming, definida pela equação (4.15). Chamando  $\psi_t \equiv P_t(1;0) = P_t(0;1)$ , e usando a relação (4.16), podemos escrever

$$\psi_{t+1} = \langle \varpi(1;0 \mid \sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}; \tau_{i+1}, \tau_i, \tau_{i+1}) \rangle ;$$

usando a Tabela 4.2,  $\psi_t$  se torna

$$\begin{aligned} P_{t+1}(1;0) &= p_3 P_t(1,1,1;0,0,0) + 3p_2 P_t(1,1,0;0,0,0) + 3(b+c) P_t(1,1,1;1,1,0) \\ &+ 3p_1 P_t(1,0,0;0,0,0) + 3(b'+c') P_t(1,1,1;1,0,0) + \\ &+ 9(b''+c'') P_t(1,1,0;1,0,0) . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Chamando  $P_t(1) \equiv x_t$ , e usando a propriedade (4.18), podemos escrever

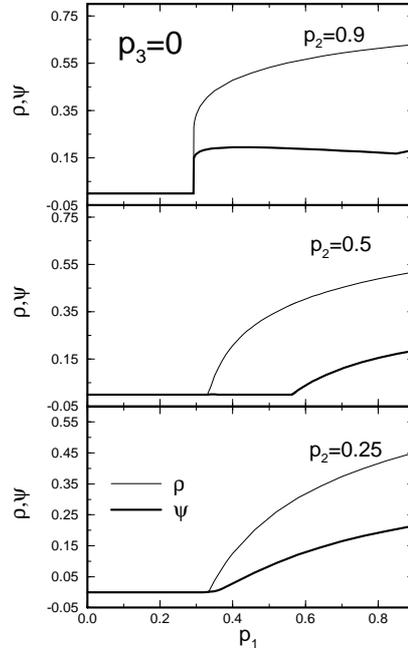
$$P_t(1;1) = x_t - \psi_t \quad \text{e} \quad P_t(0;0) = 1 - x_t - \psi_t ;$$

então, usando a aproximação de campo médio para um sítio,

$$P_t(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}; \tau_{i-1}, \tau_i, \tau_{i+1}) = P_t(\sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})P_t(\tau_{i-1}, \tau_i, \tau_{i+1}) ,$$

podemos escrever a equação (4.20) como

$$\begin{aligned} \psi_{t+1} = & \psi_t [p_3 \psi_t^2 + 3p_2 \psi_t (1 - x_t - \psi_t) + 3p_1 (1 - x_t - \psi_t)^2 + 3(b+c)(x_t + \psi_t)^2 + \\ & + 3(b'+c')\psi_t(x_t - \psi_t) + 9(b''+c'')(x_t - \psi_t)(1 - x_t - \psi_t)] . \end{aligned} \quad (4.21)$$



**Figura 4.4:** Densidade de sítios ativos e distância de Hamming na aproximação de campo médio, considerando um sítio para  $p_3=0$ .

Finalmente, considerando o caso  $p_3 = 0$ , temos

$$(b+c) = p_2 , \quad (b'+c') = p_1 \quad \text{e} \quad (b''+c'') = |p_1 - p_2| ;$$

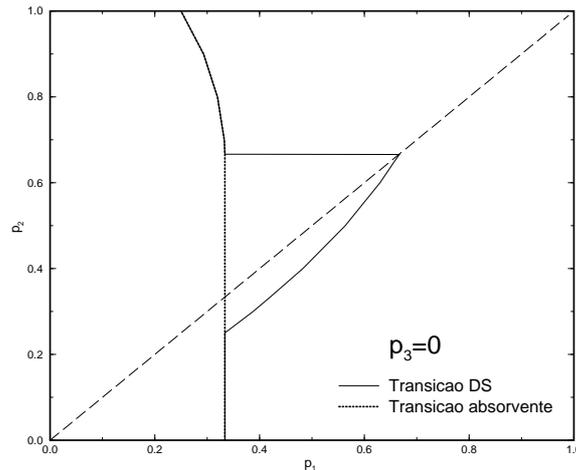
inserindo esses valores na equação (4.21) obtemos

$$\psi_{t+1} = 3\psi_t \{ 3 |p_1 - p_2| \psi_t^2 + [(p_2 - 2p_1) - 3 |p_1 - p_2| + 3(p_1 - p_2)x_t] \psi_t \} \quad (4.22)$$

$$+[(p_1 + p_2 - 3 | p_1 - p_2 |)x_t^2 + (3 | p_1 - p_2 | - 2p_1)x_t + p_1] \} .$$

Essa equação pode ser iterada numericamente usando os valores estacionários de  $x_t$  obtidos a partir da equação (4.10); existem três possibilidades para as soluções conjuntas das equações (4.10) e (4.22):  $x = \psi = 0$ , correspondendo a fase congelada;  $x = 0$ ,  $\psi \neq 0$ , correspondendo a fase ativa; e  $x, \psi \neq 0$ , correspondendo à fase caótica. Na Figura 4.4 mostramos as soluções estacionárias para essas equações para três diferentes valores de  $p_2$ , onde podemos verificar cada um dos comportamentos descritos acima; para  $p_2 = 0.25$ , o ponto crítico para a transição absorvente coincide com o obtido para a transição DS e ambas são contínuas; para  $p_2 = 0.5$ , observamos que as duas transições ocorrem em pontos distintos, mas ainda são contínuas. Para  $p_2 = 0.9$ , as transições voltam a coincidir, mas agora são descontínuas.

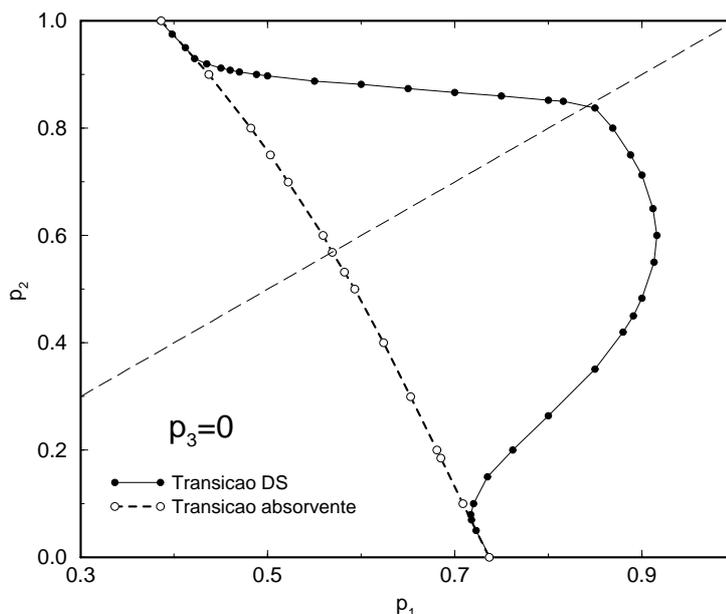
Na Figura 4.5, mostramos a linha de transição DS nesta aproximação; note que para  $p_2 > p_1$ ,  $\psi$  é sempre positivo, se  $x > 0$ . Isso implica que a linha de transição DS, para  $p_2 > p_1$ , recai na transição descontínua analisada na primeira subseção.



**Figura 4.5:** Linha de transição DS, para  $p_3 = 0$ , na aproximação de um sítio.

### 4.3 Simulações

Construímos o diagrama de fases do BPCA, para  $p_3 = 0$  e  $p_3 = 1$ , usando simulações de sistemas com até  $L = 10^4$  sítios, com condições periódicas de fronteira. Aplicamos o método do expoente de crescimento [8] para localizar as linhas de transição, como mostrado na Figura 4.7. A condição inicial nessas simulações é um estado aleatório com 50% de sítios ativos. O diagrama de fases para os casos  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$  são mostrados

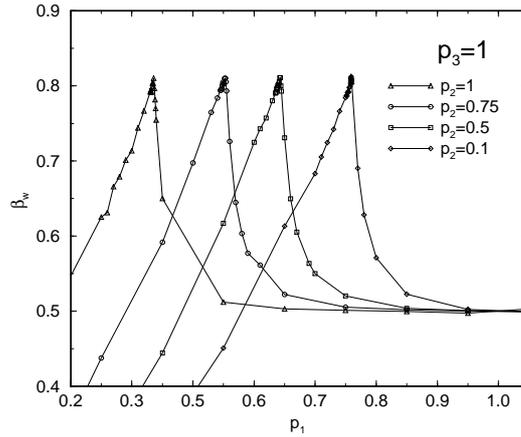


**Figura 4.6:** Linha de transição DS, para  $p_3 = 0$ , obtido por simulação. Observamos o comportamento reentrante tal como na aproximação de um sítio (figura 4.5).

nas Figuras 4.1 e 4.2, respectivamente. Como esperado, comparada com a simulação, a previsão da aproximação de pares é melhor que no caso de um sítio.

Qualitativamente, o diagrama de fases para  $p_3 = 0$  é quase idêntico ao apresentado pelo DKCA [8, 115]; a principal diferença é que a região ativa é bem maior no caso do BPCA. Para  $p_3 = 1$ , a aproximação de pares fornece uma previsão melhor para a transição, embora a posição do ponto bicrítico permaneça a mesma,  $p_1 = 1/3, p_2 = 2/3$ , tal como encontrado na aproximação de um sítio. Nas simulações, o ponto bicrítico é localizado na posição ( $p_1=0.460(3), p_2=0.540(3)$ ). É importante notar que há apenas três transições neste diagrama: entre as fases absorventes *congelada/fase 1* (descontínua), e as de segunda ordem entre as fases *ativa/fase 1* e *congelada/ativa*. Todas as transições são localizadas utilizando-se o método do expoente de crescimento, demonstrando que o método é capaz de detectar tanto transições de primeira quanto de segunda ordem.

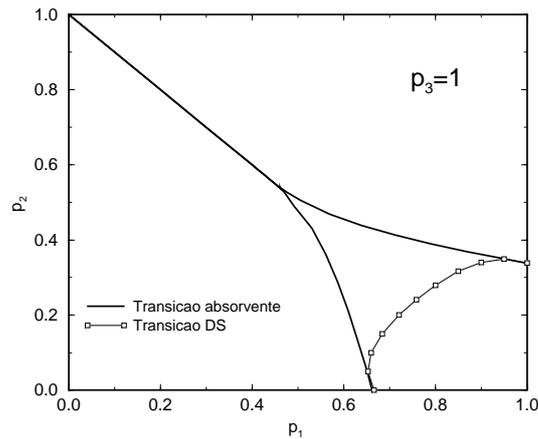
Os diagramas de fase para as transições de espalhamento de danos são mostrados nas Figuras 4.6 e 4.8, para  $p_3 = 0$  e  $p_3 = 1$ , respectivamente. No caso  $p_3 = 1$ , confirmamos os resultados de Bagnoli *et al.* [15], mas alguns comentários são necessários; no artigo citado, os autores comentam que as regiões de caos que aparecem ao longo da linha de transição entre as fases congelada/ativa aparecem devido à divergência do tempo de relaxação ou ao fato de pequenas diferenças nas configurações iniciais poderem levar o sistema a um estado absorvente diferente. Na Figura 4.9, comparamos as transições DS obtidas quando usamos (1) o dano por “rotação”, apresentado no capítulo anterior, e (2) um dano aleatório, onde trocamos o valor do estado em 10% dos sítios de um autômato no estado estacionário e medimos a evolução da distância de Hamming. Concluímos que os domínios caóticos observados por Bagnoli *et al.* sobre as linhas de transição absorventes



**Figura 4.7:** Método do expoente de crescimento para o BPCA.

são associados somente à divergência do tempo de relaxação próximo a criticidade. Esse comportamento pode aparentar transições reais quando usamos o método do expoente de crescimento, como mostrado na Figura 4.9, ou através da técnica usual da distância de Hamming. De fato, existe apenas uma linha de transição bem definida para a transição caótica no caso  $p_3 = 1$ , como mostramos na Figura 4.8.

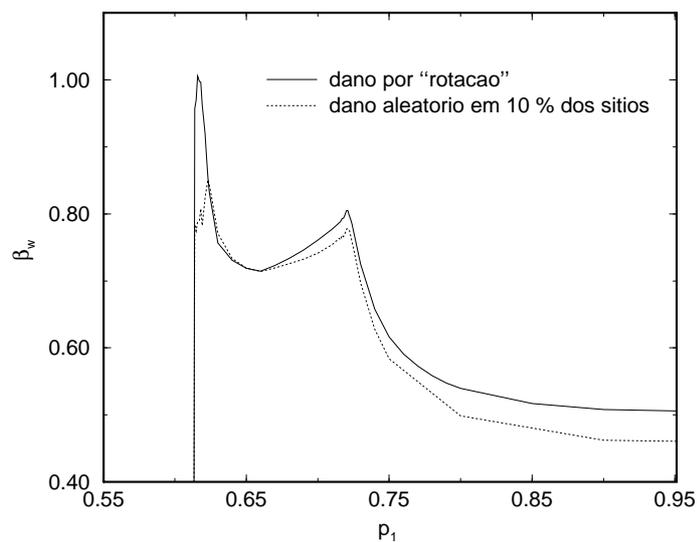
No caso  $p_3 = 0$ , as simulações confirmam a transição caótica reentrante prevista na aproximação de um sítio. Como mostrado na Figura 4.6, a linha de transição DS é côncava na direção da fase ativa, e apresenta comportamentos distintos para  $p_1 > p_2$  e  $p_1 < p_2$ , como esperado; entretanto, não há descontinuidades em  $p_2 = p_1$  como havia sido previsto na aproximação de um sítio.



**Figura 4.8:** Transição DS para o BPCA,  $p_3 = 1$ .

Cabe ressaltar que o método do expoente de crescimento aplicado às transições descontí-

nuas é utilizado apenas para identificar as transições, pois não há uma definição para os expoentes críticos em transições descontínuas, como existe para as transições contínuas. O valor  $\beta \simeq 1$  encontrado nas simulações é compatível com a previsão para a classe CDP (como discutido na subseção 3.2.2), tendo em vista que o expoente  $\delta$  (seção 1.2) que governa a densidade de sítios ativos é igual a 0.



**Figura 4.9:** Método do expoente de crescimento para a transição DS considerando dois modos diferentes para se fazer o dano inicial, para  $p_3 = 1$ . Os resultados indicam que há apenas uma linha de transição caótica, sem a presença de “ilhas” da regiões caóticas como afirmado por Bagnoli et al [15].

## Capítulo 5

---

# Modelo discreto gerador de perfis auto-afins de solos

Os conceitos da geometria fractal têm sido largamente usados para descrever e quantificar a irregularidade na natureza, e propriedades auto-afins foram recentemente identificadas em vários terrenos terrestres [45] e perfis de solos [116]. Diversos trabalhos na ciência dos solos incorporam a geometria fractal na descrição e modelagem de propriedades e processos físicos do solo e para quantificar a variabilidade espacial dos solos [187, 138, 63, 114].

Uma propriedade muito importante intimamente relacionada à geometria fractal é a rugosidade superficial do solo, definida como a configuração do *microrelêvo* do solo. A rugosidade superficial do solo exerce grande influência na infiltração de água, processos erosivos e efeitos de escoamento. Sua quantificação é importante para a compreensão do comportamento do solo durante processos de degradação, como erosão pluvial ou mudanças abruptas tais como aquelas introduzidas pela aragem [172]. Nos últimos anos, um esforço considerável tem sido feito para simular a estrutura dos solos e, entre os vários modelos propostos, há aqueles que simulam a distribuição de tamanhos das partículas [114], a rugosidade superficial do solo [187, 32], a morfologia da estrutura de poros [139], etc. As principais propriedades consideradas nesses modelos são a dimensão fractal da superfície do solo,  $D$ , a distribuição dos tamanhos das partículas (PSD), a distribuição de tamanhos dos poros, além, claro, da rugosidade superficial.

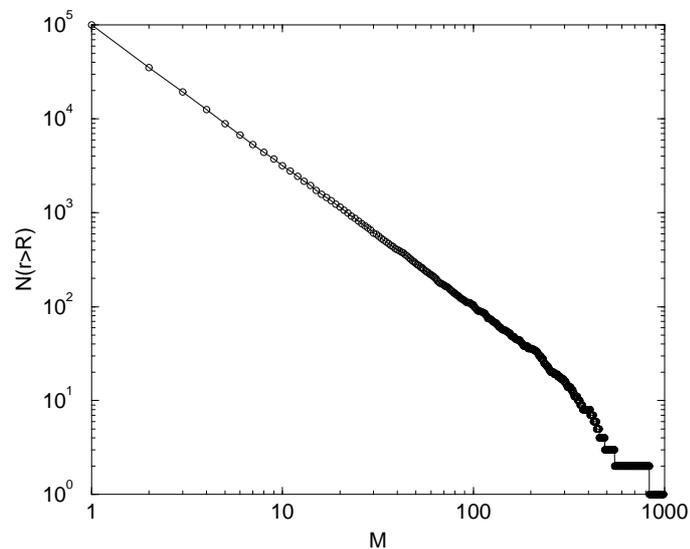
Neste capítulo propomos um modelo simples, definido em uma rede, para simular a estrutura de um solo e reproduzir sua rugosidade superficial. Basicamente, utilizamos as idéias de crescimento fractal de superfícies [13] para gerar perfis aproximadamente auto-afins, no sentido que as propriedades de escala desses perfis são válidas somente em uma faixa limitada de valores. A dimensão fractal dos perfis gerados foi medida e comparada com os dados experimentais. As duas principais contribuições de nosso modelo é considerar uma distribuição no tamanho das partículas segundo uma dada lei de potência e permitir diferentes morfologias para os agregados. Até onde sabemos, essas características não haviam sido consideradas ainda por nenhum outro modelo e são

responsáveis pela estrutura dos “solos” gerados em nosso modelo.

O capítulo está organizado da seguinte maneira: na seção a seguir, apresentamos uma descrição detalhada do modelo, onde mostraremos como obter a distribuição de tamanhos em lei de potência e descrevemos os algoritmos utilizados para gerar as morfologias dos agregados. Também apresentamos um breve sumário da teoria de crescimento fractal de superfícies. Em seguida, apresentamos os resultados considerando diferentes dimensões de fragmentação e vários tamanhos máximos para os agregados. Finalmente, na última seção, apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

## 5.1 O Modelo

A principal motivação para definirmos o modelo encontra-se na capacidade do mesmo em reproduzir as principais propriedades observadas em solos agrícolas, como auto-afinidade e estrutura de poros. O modelo deve possuir também alguns parâmetros de controle, como a dimensionalidade da distribuição dos tamanhos das partículas (agregados) que serão depositados e a massa do maior agregado. Apenas com esses dois parâmetros esperamos reproduzir a variabilidade estrutural observada em solos naturais.

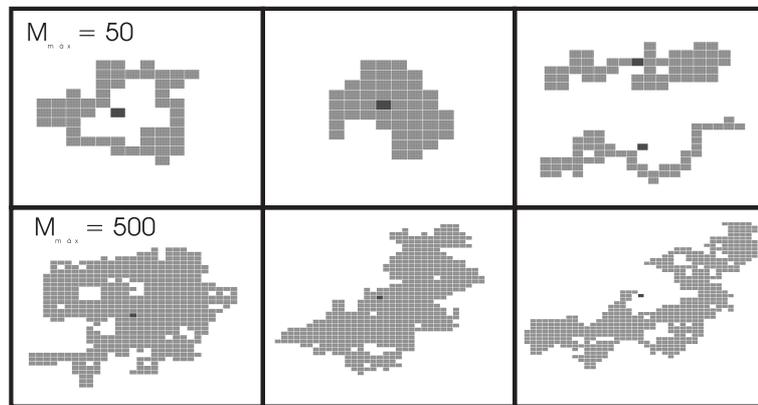


**Figura 5.1:** Distribuição de tamanhos de agregados gerada em uma simulação, com  $M_{max} = 1000$ . O raio das partículas é calculado via a expressão:  $r = \sqrt{M/\pi}$ , que aproxima os agregados por esferas (discos) de massa (área)  $M$ . Note que a distribuição obedece uma lei de potência pelo menos para uma década.

A distribuição dos tamanhos dos agregados possui a forma de uma lei de potência [138,

63], cujo expoente,  $D_f$ , é um dos parâmetros do sistema, e é chamada de dimensão de fragmentação. Em contraste com os modelos clássicos definidos em uma rede, nos quais todas as partículas tem a mesma morfologia, esse modelo simula a variabilidade de solos naturais gerando agregados através de um dado algoritmo. Neste trabalho, consideramos dois algoritmos diferentes: um considerando a percolação de ligações e outro construído a partir do modelo de Eden.

As principais vantagens em se trabalhar com modelos definidos na rede são a simplicidade para se montar os algoritmos e a velocidade de execução dos programas, o que possibilita a simulação de sistemas relativamente grandes (até  $L = 10^5$  sítios) e deposição de uma enorme quantidade de partículas ( $\sim 10^9$ ). Essa quantidade de partículas depositadas são necessárias afim de se evitar o efeito de uma adição constante de microvariabilidade aleatória, representada pela morfologia dos agregados.



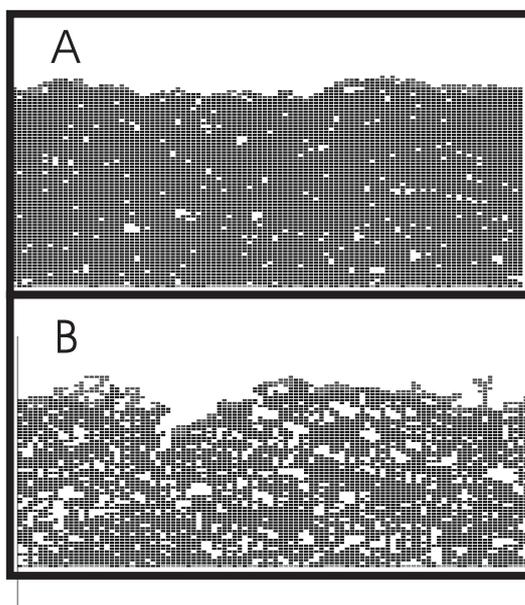
**Figura 5.2:** Morfologias geradas pelo algoritmo de percolação de ligações. Acima: Algumas morfologias para  $M_{max}=50$ , três agregados são mostrados. Note a estrutura porosa e o formato aleatório, características observadas em solos. Abaixo: Algumas morfologias para  $M_{max}=500$ .

Consideraremos a estrutura do solo como composta de um conjunto de partículas e agregados cujos raios são distribuídos segundo a relação, conhecida como a lei empírica de Turcotte [138],

$$N(r > R) \sim R^{-D_f} \quad , \quad (5.1)$$

onde  $N(r > R)$  é o número acumulado de partículas (ou agregados) com raio  $r$  maior que  $R$ , e  $D_f$  é a dimensão de fragmentação da distribuição de tamanhos das partículas (PSD). Existe alguma controvérsia na literatura a respeito da faixa de valores permitidos para  $D_f$ . Tyler e Wheatcraft [168] argumentam que  $D_f < 3$ , pois, considerando-se as hipóteses usuais (densidade constante, partículas esféricas, etc.) a distribuição de massas escala com  $M(r > R) \sim R^D \sim R^{3-D_f}$ , onde  $D$  é dimensão fractal do solo e somente os valores  $D_f < 3$  teriam sentido físico, considerando uma distribuição fractal. Martin e Taguas [114]

apresentaram vários argumentos matemáticos suportando essa conjectura e realizaram simulações de algumas PSD. Entretanto, existem vários resultados experimentais que apontam para o contrário, conforme o apresentado por Perfect e Kay [138], onde a faixa dos valores encontrados foi  $2.6 < D_f < 3.5$ . Gimenez *et al* [2] também afirmam que não há uma nenhuma relação experimental entre a dimensão fractal e a dimensão de fragmentação. Neste trabalho, consideramos que a hipótese de densidade constante não deve manter-se válida à medida que o raio médio das partículas cresça, devido à presença de poros na estrutura. Portanto, dimensões de fragmentação maiores que três são possíveis, a princípio.



**Figura 5.3:** *Deposição utilizando o algoritmo de percolação por ligações. A) deposição típica em uma rede com  $L = 100$ , 5000 partículas depositadas,  $M_{max} = 10$  e  $D_f = 3.0$ . B: o mesmo, com  $D_f = 1.0$  e 2500 partículas depositadas. Note a variabilidade da estrutura do solo simulado com a variação da dimensão de fragmentação. As partículas em destaque correspondem a última camada depositada.*

Uma classificação geral para a classificação dos tamanhos dos agregados é a seguinte [129]

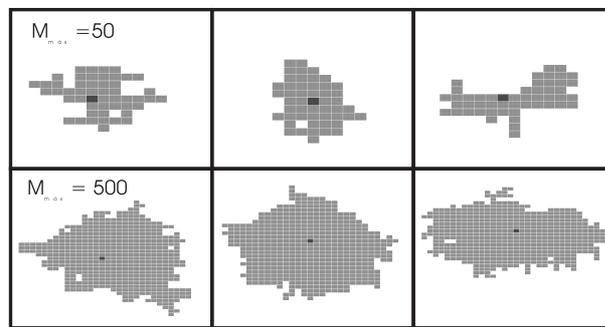
- areia:  $50 < r < 2000 \mu m$
- aluvião:  $2 < r < 50 \mu m$
- argila:  $r < 2 \mu m$ .

As percentagens de cada tamanho de agregado pode variar bastante em solos reais. Nemes *et al* [129] propuseram uma padronização para a classificação dos solos europeus utilizando vários dados experimentais.

Os dois parâmetros do modelo são a dimensão de fragmentação,  $D_f$ , e o número de massa máximo permitida para os agregados,  $M_{max}$ . A cada instante de tempo, o algoritmo sorteia um número de massa,  $M$ ; se  $M > 1$ , uma configuração aleatória é selecionada de acordo com a morfologia desejada; neste trabalho, utilizamos a percolação de ligações,

onde a configuração de um agregado corresponde a um aglomerado com tamanho  $M$ , e o modelo de Eden do tipo C, tal como descrito na seção 2.1, onde depositamos  $M$  partículas em uma rede quadrada com uma semente ocupando o sítio central (simetria esférica). Nas Figuras 5.2 e 5.4, mostramos algumas das possíveis morfologias para os agregados. Com apenas esses parâmetros, o modelo é capaz de reproduzir de maneira simples a variabilidade estrutural encontrada nos solos naturais.

Na Figura 5.1 apresentamos uma PSD típica gerada pelo algoritmo do modelo. Essa PSD é construída considerando que os agregados podem ser aproximados por discos, de tal modo que existe uma relação direta entre a massa e o raio do agregado, que é utilizada para se construir a PSD.

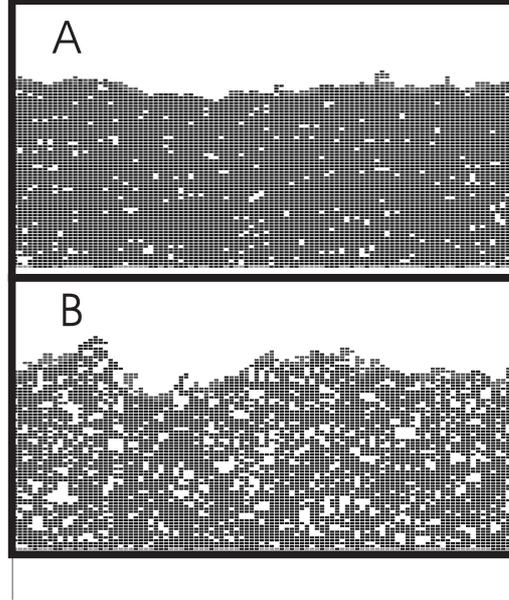


**Figura 5.4:** *Morfologias geradas pelo modelo de Eden. Acima: Possíveis morfologias para  $M = 50$ . Três agregados são mostrados em cada caso. Note que com o algoritmo de Eden os agregados formados são menos fragmentados e possuem uma simetria esférica predominante, mais próximos dos encontrados em solos reais.*

A deposição de cada agregado obedece o modelo de deposição sólido-sobre-sólido com relaxação superficial [13]. A posição inicial para a deposição é escolhida aleatoriamente entre os  $L$  sítios da rede, e o aglomerado segue uma linha reta (em relação ao seu centro de massa) até o primeiro toque na superfície do “solo” (não são permitidas rotações para as partículas). Então, o algoritmo simula a relaxação superficial para o aglomerado, que só se adere ao substrato quando o mínimo local de energia potencial for alcançado. A escolha desse mecanismo é baseada no comportamento real de agregados em superfícies naturais.

Considerando a teoria de crescimento de superfícies, a deposição sólido-sobre-sólido pertence à classe de universalidade da equação de Edwards-Wilkinson, descrita no capítulo 2, e a rugosidade das interfaces obtidas deve obedecer a relação de Family-Vicsék. Na classe EW, em  $d = 1$ , os expoentes críticos são conhecidos exatamente:  $\alpha = 1/2$ ,  $z = 2$ . Outra classe de universalidade relacionada à deposição SOS é a da equação de Kardar-Parisi-Zhang, também apresentada no capítulo 4. Nesse caso, os expoentes exatos são:  $\alpha = 1/2$ ,  $z = 3/2$ .

Desse modo, realizamos simulações em  $d = 1$  afim de testar a influência dos parâmetros do modelo ( $D_f$  e  $M_{max}$ ) nos valores medidos para os expoentes e na dimensão fractal dos perfis obtidos, e comparamos os resultados com os dados experimentais disponíveis. A dimensão fractal é obtida através da relação  $D = d - H$  (vide Apêndice C), onde  $H$  é o expoente de Hurst.



**Figura 5.5:** A) Deposição de 5000 partículas com o algoritmo de Eden, em uma rede com  $L=100$ ,  $M_{max}=10$  e  $D_f=3.0$ ; B) o mesmo, para 2500 partículas depositadas e  $D_f = 1$ .

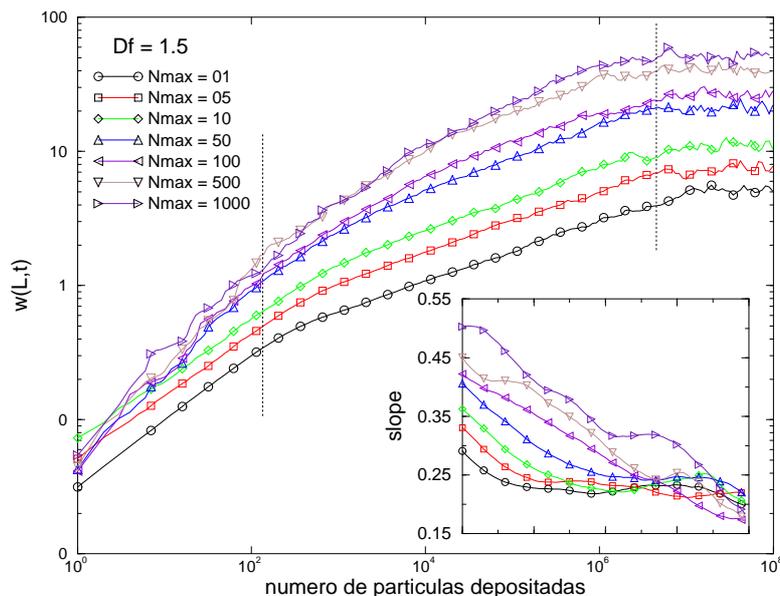
## 5.2 Resultados

Realizamos simulações utilizando substratos unidimensionais com até  $L = 10^5$  sítios, mas na maioria das amostras usamos  $L = 10^3$ . Os resultados correspondem a uma média sobre 20 amostras para cada par de valores dos parâmetros, onde cada uma delas possui uma sequência de deposição própria para os agregados. O número de agregados depositados em cada amostra foi de  $N = 10^8$ , mas em alguns casos utilizamos até  $10^9$  partículas. Calculamos a rugosidade,  $w(L, t)$ , definida por

$$w^2(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2, \quad (5.2)$$

em função dos parâmetros do modelo, como mostrados nas Figuras 5.6 e 5.7, considerando a percolação de sítios e o modelo de Eden, respectivamente. Note que a rugosidade

de saturação é atingida após cerca de  $N \sim 10^7$  partículas depositadas. A dimensão fractal do perfil final é estimada utilizando-se o expoente de Hurst,  $H$ , tal qual detalhado no Apêndice C. O expoente de Hurst está associado à dimensão fractal *via* a relação  $D = 2 - H$ , onde  $d = 2$  é a dimensão de imersão dos perfis. Além do método da análise de flutuações sem tendência (apresentada no Apêndice C e introduzida por Moreira *et al* [121]), utilizamos o método do semivariograma, que usa a função correlação de alturas e é o método usualmente empregado nos experimentos.



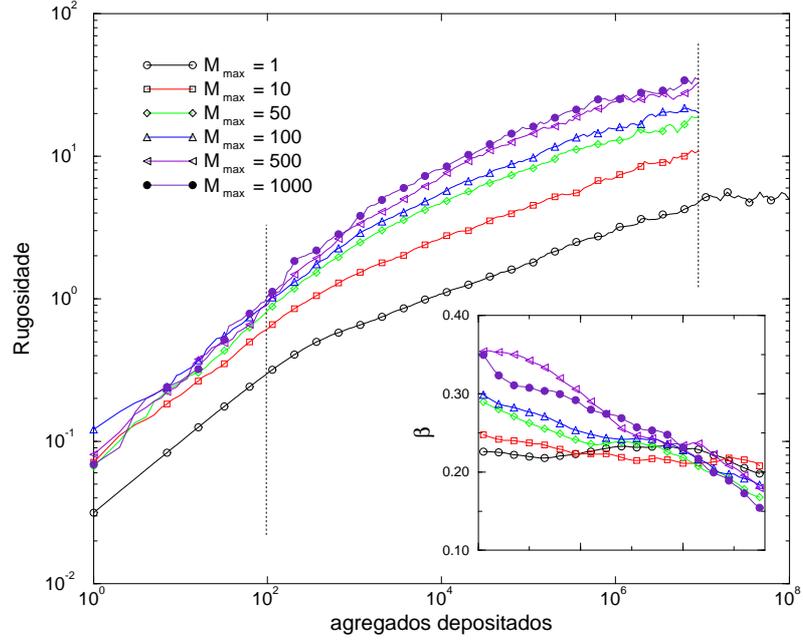
**Figura 5.6:** Rugosidade dos perfis simulados, considerando vários valores para  $M_{max}$  e  $D_f = 3.0$ . Note a variação da inclinação das curvas de rugosidade entre as linhas pontilhadas mostradas. A inclinação de uma dada curva é medida fixando-se a escala de medida (régua) e fazendo a média das inclinações obtidas considerando-se diferentes pontos iniciais entre as duas linhas pontilhadas.

O método do semivariograma estima a variabilidade espacial através do cálculo da semi-variância em função da distância entre os pontos considerados. Essa função é definida como,

$$\gamma(\epsilon) = \frac{1}{2} \langle [h(x) - h(x + \epsilon)]^2 \rangle, \quad (5.3)$$

onde  $\epsilon$  representa a distância entre os pontos,  $h(x)$  a altura na posição  $x$  e os  $\langle \dots \rangle$  representam uma média sobre todo o domínio de  $h(x)$ . Esse método é especialmente útil nos casos onde os dados não são regularmente espaçados, e por esta razão, é largamente utilizado para estimar a dimensão fractal em perfis de solos [138].

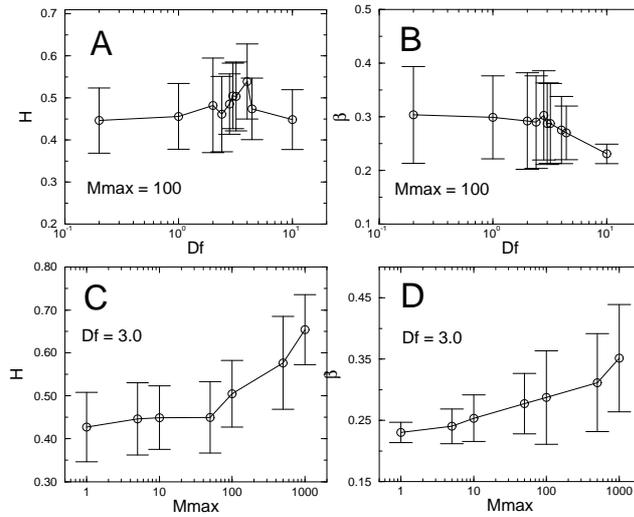
Nas Figuras 5.6 e 5.7, mostramos a evolução da rugosidade para os perfis simulados, considerando os algoritmos de percolação e do modelo de Eden, respectivamente, e vários



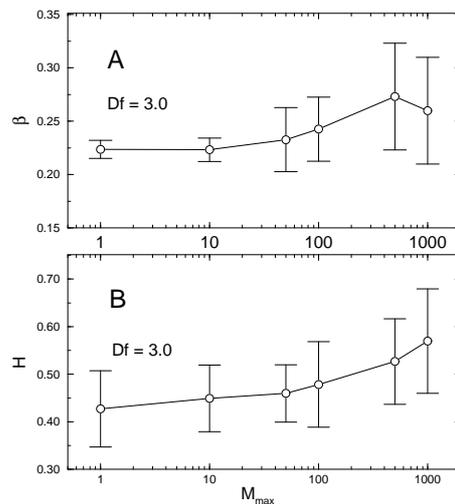
**Figura 5.7:** Rugosidade dos perfis simulados, considerando vários valores para  $M_{max}$  e  $D_f = 3.0$ , para o modelo de Eden. As características observadas são as mesmas encontradas com o modelo de percolação de ligações.

valores para a massa máxima permitida para os aglomerados. Pode-se observar que a curva correspondente a  $M_{max} = 1$  comporta-se exatamente como a DARS (apresentada no capítulo 4), independentemente do algoritmo utilizado, como esperado.

A faixa de valores obtidos para  $H$  é mostrada na Figura 5.8, para o algoritmo de percolação de ligações, onde também mostramos a dependência do expoente de crescimento,  $\beta_w$ , com os parâmetros do modelo. Pode-se concluir que o aumento da massa máxima permitida tem efeitos similares ao decréscimo da dimensão de fragmentação: ambos introduzem correlações não lineares no sistema (indicadas pelo valor do expoente  $\beta_w$ ), alterando a classe de universalidade da deposição. Por outro lado, a dimensão fractal não mostra uma dependência tão forte com os valores dos parâmetros. Para o modelo de Eden os resultados são similares, como mostrado na Figura 5.9.



**Figura 5.8:** *Sumário dos expoentes críticos medidos, considerando-se os agregados gerados pela percolação de ligações. A) e C): Comportamento de expoente de Hurst com os parâmetros do modelo. Note que não existe nenhuma dependência forte do valor do expoente com os parâmetros. A faixa dos valores experimentais é  $0.3 < H < 0.7$ . B) e D): Comportamento de expoente de crescimento com os parâmetros do modelo. Aqui existe uma dependência do valor de  $\beta_w$  com o raio máximo das partículas: à medida que o raio aumenta, o expoente de crescimento também aumenta, até atingir o valor esperado para a deposição não linear. A dependência de  $\beta_w$  como a dimensão de fragmentação é exatamente o inverso.*



**Figura 5.9:** *Sumário dos expoentes obtidos considerando-se os agregados gerados pelo modelo de Eden. Pode-se verificar que as características observadas nesse caso são análogas às verificadas no caso da percolação de sítios (figura 5.8).*

# Capítulo 6

---

## Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho apresentamos um estudo teórico e simulacional do crescimento de interfaces rugosas auto-afins e analisamos as superfícies obtidas utilizando conceitos fractais. Entre as contribuições originais, destacamos o método do expoente de crescimento para detecção de transições de fase, capaz de determinar com alta precisão as linhas de transição tanto para transições contínuas quanto descontínuas. A grande vantagem deste método é a possibilidade de detecção de transições de fase sem a necessidade de se calcular potenciais termodinâmicos, parâmetros de ordem ou funções resposta, o que diminui consideravelmente o custo computacional.

Na seção 3.1 mostramos como o método pode ser usado para se obter o diagrama de fases a partir da representação de interfaces do DKCA. Na transição, verificamos que o valor do expoente  $\beta_w$  depende do esquema de atualização utilizado:  $\beta_w = 0.83(2)$  para o esquema simétrico e  $\beta_w = 0.61(2)$  para o não simétrico. O método também foi aplicado para se obter a fronteira entre as fases caótica e não-caótica no DKCA. Finalmente, três prescrições diferentes para a evolução conjunta de dois autômatos foi considerada, e cada uma delas resulta em uma fronteira de fases diferente, como mostrado no diagrama de fases completo para o DKCA (Figura 3.6).

A vantagem do método do expoente de crescimento para se determinar o diagrama de fases do DKCA é que não há a necessidade do sistema alcançar o estado quase-estacionário, como nos métodos utilizados por Martins *et al* [115] e Zebende and Penna [188], o que economiza considerável tempo de computação. Além disso, o expoente de crescimento pode detectar a fronteira caótica/não-caótica muito mais claramente que o método usual da distância de Hamming, que apresenta flutuações muito grandes na transição. Esse método também pode ser utilizado para detectar transições de fase em outros modelos onde a representação de interfaces pode ser aplicada [10, 41, 142].

Outro trabalho original foi a determinação dos expoentes de escala na representação de interfaces para o autômato de Domany-Kinzel que, por pertencer à classe de universalidade da percolação direcionada, possui grande relevância para diversas áreas. Na seção 3.2

estudamos as superfícies geradas pelos padrões espaço-temporais do DKCA ao longo de suas linhas críticas. Os expoentes críticos, cuja previsão teórica apontava para a classe de universalidade da percolação direcionada, foram medidos utilizando as relações tipo lei de potência válidas na criticalidade. Exceto no ponto terminal  $p_2 = 1$ , todos os expoentes de escala confirmaram as previsões da classe DP, no esquema simétrico, e a lei de escala  $\beta_w = \alpha/z$  foi observada. Em  $p_2 = 1$ , confirmamos os valores da classe CDP para os expoentes. Desde que as flutuações em regiões descorrelacionadas são efetivamente superpostas, não é surpreendente que os valores aparentes de  $\beta_w$  e  $\alpha$  são menores no esquema não-simétrico. Na transição caótica/não-caótica os expoentes medidos concordam com os valores da classe DP.

Já na seção 3.4 fizemos um estudo analítico das propriedades quase-estacionárias para o DKCA. Por envolver somente iterações, a análise numérica de sistemas com tempo discreto é mais simples, se comparada a processos com tempo contínuo onde há a necessidade de integrar equações diferenciais. Essa observação é evidente na aproximação de um sítio, mas em níveis superiores essa vantagem é compensada pelo fato de haver várias transições possíveis partindo de uma dada configuração, dificultando a obtenção dos fatores combinatórios (*e.g.*,  $\Gamma(N, Z; L)$ ), que limitam severamente a análise.

Um resultado interessante do estudo apresentado é o comportamento de escala ao longo da linha crítica: ele é o mesmo tanto para sistemas com tempo contínuo (como o processo de contato ou o intimamente relacionado processo de Malthus-Verhulst), quanto para aqueles com tempo discreto. Em particular, o parâmetro de ordem QS decresce proporcionalmente a  $\sim 1/L^{1/2}$  em ambos os casos, enquanto o tempo de vida do estado QS cresce com  $\sim L^{1/2}$ . Embora a universalidade do comportamento de escala global já poderia ter sido antecipado com base no teorema central do limite, a similaridade estende-se para detalhes da forma da função de escala que governa a distribuição de probabilidades QS, e também para os momentos associados. Portanto, a situação é análoga à encontrada numericamente em estudos de transições de fase para um estado absorvente: não somente os expoentes críticos, mas também os momentos e o parâmetro de ordem assumem valores universais no ponto crítico [40].

No capítulo 4 utilizamos o método do expoente de crescimento em simulações, e aproximações de campo médio, considerando um sítio e um par, para construir o diagrama de fases do BPCA, para  $p_3 = 1$  e  $p_3 = 0$ . O método é capaz de detectar as transições contínuas e descontínuas do modelo, bem como pode ser usado nas transições de espalhamento de danos. Os valores obtidos para os expoentes indicam que todas as transições contínuas pertencem a classe de universalidade da percolação direcionada, enquanto os expoente medido na transição descontínua concordam com a previsão da classe de percolação direcionada compacta. Na aproximação de campo médio, encontramos uma linha de pontos tricríticos no espaço de fases, considerando um sítio e um par, que denota a grande complexidade do diagrama de fases do BPCA. Além disso, para  $p_3 = 0$ , encontramos uma transição caótica reentrante, que foi confirmada pelas simulações. Essas duas particulari-

dades foram observadas pela primeira vez em modelos utilizando autômatos celulares.

O modelo de geração de perfis auto afins de solos é outra contribuição original e que possui aplicabilidade bem mais extensa do que o originalmente proposto; de fato, qualquer sistema onde há uma distribuição no tamanho das partículas e diferentes morfologias para cada uma delas pode ser simulado com o algoritmo proposto, como por exemplo, na deposição de polímeros.

Dessa forma, vimos no capítulo 5 um modelo inédito para simular a estrutura de solos e sua rugosidade superficial. Dois parâmetros foram usados para controlar os perfis simulados: o tamanho máximo das partículas e a dimensão de fragmentação. As principais inovações do modelo são a possibilidade de se gerar morfologias aleatórias para os agregados, utilizando modelos de morfogênese previamente escolhidos, e a distribuição de tamanhos de agregados segundo uma lei de potência em relação ao raio médio dos agregados. Essas duas características não haviam sido estudadas por nenhum outro modelo descrito na literatura, e por si só são capazes de reproduzir a variabilidade observada em solos naturais.

Os resultados obtidos mostram boa concordância do expoente de Hurst com os valores experimentais. Também observa-se uma forte dependência do expoente de crescimento com os parâmetros do modelo: à medida que  $M_{max}$  cresce (ou a dimensão de fragmentação diminui), o valor do expoente  $\beta_w$  afasta-se da classe EW ( $\beta = 1/4$ ), e aproxima-se da classe KPZ ( $\beta = 1/3$ ). Desse modo, o aumento do raio médio das partículas depositadas corresponde à introdução de correlações não-lineares no sistema. Esses resultados são observados independentemente do algoritmo de morfogênese considerado.

## Perpectivas

Nossas perspectivas se concentram na simulação do autômato de Domany-Kinzel em  $d = 2$ , trabalho que já se encontra em curso, na realização de simulações para identificar a superfície crítica no espaço tridimensional de parâmetros do BPCA e a simulação do modelo de perfis de solos sobre um substrato bidimensional.

Apesar de apresentar uma aplicabilidade maior, a simulação de sistemas bidimensionais demanda recursos computacionais mais robustos, como já destacamos no texto. Em particular, no DKCA bidimensional a atualização de cada sítio depende do estado de seus quatro vizinhos no instante de tempo anterior. Dessa forma, se consideramos regras totalísticas e  $p_0 = 0$ , existem três parâmetros independentes e, a exemplo do BPCA, o diagrama de fases é tridimensional. Para contornar essa dificuldade, pretendemos estudar o caso onde  $p_3 = 1 - p_1$ , o que reduz o diagrama de fase apenas a um plano; esse escolha é feita a partir de critérios de simetria. É interessante notar que na classe de universalidade DP,  $1 - \theta \simeq 0.55, 0.27$  e  $0$  para  $d = 2, 3$  e  $4$ , respectivamente. Logo, esperamos que a cúspide no valor de  $\beta_w$  seja bem menos pronunciada em  $d = 2$  e que  $\beta_w$  *decreça* na

transição de fases em  $d = 3$ .

Outras perspectivas possíveis se concentram na aplicação do método do expoente de crescimento em outros modelos, onde poderia ser aplicado para a determinação de transições de fase. Resultados preliminares de simulações mostram que o método pode ser aplicado com sucesso na detecção da transição de fases no modelo de Ising; dessa forma, o método poderia ser aplicado também no modelo de Blume-Capel (que é uma extensão do modelo de Ising), onde há uma controvérsia a respeito da localização das linhas de transição do diagrama de fases [99].

Para o BPCA, nossas expectativas se concentram na determinação simulacional da superfície crítica no espaço tridimensional de parâmetros, o que permitiria a verificação da linha de pontos tricríticos. Caso seja confirmada por simulações, esta transição colocaria por terra uma conjectura apresentada por Hinrichsen [82], na qual o autor afirma que, em  $d = 1$ , não seria possível a existência de uma transição descontínua entre uma fase absorvente e uma ativa.

Para o modelo de solos, nossas expectativas se concentram na simulação da deposição de agregados com  $d = 3$  sobre substratos bidimensionais, o que seria bem mais verossímil do ponto de vista experimental. Outra perspectiva é simular o efeito da chuva sobre os perfis gerados, afim de verificar a dependência do expoente de Hurst com o volume de chuva, conforme verificado experimentalmente por Vivas Miranda [172]. De fato, esse era o objetivo inicial do intercâmbio realizado pelo autor e é uma das perspectivas *desejáveis* a que nos referimos inicialmente. Dentro dessa mesma categoria está nossa expectativa da simulação de outros sistemas utilizando nosso modelo, como por exemplo a deposição de polímeros, onde poderia-se um algoritmo de morfogênese apropriado.

# Apêndice A

---

## Histórico: o Nascimento de uma Nova Ciência

É um fato notório que as teses apresentadas no ramo da Física Teórica dificilmente fornecem um estudo histórico da disciplina e do tema abordado, com indicação cronológica e sistemática das contribuições relevantes e principais implicações da área do conhecimento em questão para o restante da comunidade científica e a sociedade em geral. Esta abordagem, que denominaremos por “visão histórica”, desempenha uma função essencial no âmbito da divulgação científica, pois permite que o leitor possa situar o trabalho no contexto científico geral e a abrangência de seus principais resultados. Na maioria das vezes, estes fatores ficam ocultos por textos demasiado técnicos, restritos a um pequeno número de leitores especializados, e que levam ao extremo o ideal de concisão e de especificidade da ciência.

Neste trabalho, ousaremos apresentar um apêndice contendo um Histórico da Física Estatística, com o intuito de destacar seu papel fundamental na consolidação e formação de paradigmas. A partir de sua origem, logo após o estabelecimento da Termodinâmica e da Teoria Cinética dos Gases, iremos estudar seus principais fundamentos e recordar a participação dos personagens mais importantes para sua formação. A seguir, mostraremos a profunda mudança filosófica desencadeada pela compreensão e aplicação de seus princípios, sua relação com o advento da Física Quântica e da Teoria Atômica da Matéria, para então chegarmos ao seu apogeu: a afirmação da Mecânica Estatística como disciplina capaz de tratar com sucesso fenômenos críticos e transições de fase, estendendo sua abrangência a quase todos fenômenos naturais, no equilíbrio ou fora dele.

Finalmente, mostraremos o cenário de florescimento de uma nova ciência: o estudo do Caos e da Geometria Fractal, e com isto esperamos esboçar o atual “estado-da-arte” dentro da Mecânica Estatística de Fora do Equilíbrio. Estas disciplinas têm causado um forte impacto em diversas áreas da ciência, ao ponto de muitos considerarem que há uma mudança de paradigma em curso. Neste trabalho, defendemos uma incipiente “Teoria do Crescimento Fractal”, que possui natureza intrinsecamente interdisciplinar, e

apresentamos uma síntese de suas origens, o alcance de suas aplicações e sua generalidade na última seção do capítulo.

Desse modo, acreditamos que ao final desta visão histórica será possível identificar as principais motivações desta Tese, destacar sua relevância e inserí-la no contexto científico atual.

Para a elaboração deste capítulo, utilizamos diversas fontes que não serão citadas repetidamente, em prol de uma leitura com maior fluidez; porém, é mister que sejam devidamente reconhecidas, antes de começarmos a reproduzi-las: a principal referência nas duas próximas seções foi a obra de Stephen G. Brush [25] que fornece uma visão completa do surgimento da Termodinâmica e da Física Estatística e o papel da última na consolidação da Teoria Atômica da Matéria; além dessa, outra fonte rica em detalhes para estas seções foi a biografia de Einstein escrita por Albert Pais [133], principalmente no período inicial do século XX. Outras obras utilizadas nesta etapa foram: os textos brilhantes de Herbert B. Callen [29], Dietrich Stauffer e H. Eugene Stanley [163], Lev Davidovitch Landau [98] e H. E. Stanley [158], e em menor parte as obras de Reif [143], S.K. Ma [106], Michael Plischke e Birger Bergersen [141], R. K. Pathria [134], entre outros.

Já na última seção as principais referências são em geral obras bem mais recentes como os trabalhos de Paul Meakin [117], Albert-László Barabási e H. E. Stanley [13], Tamás Vicsék [170], Annick Lesne [102] e Hermann Haken [71], os textos de divulgação científica de Roger Penrose [137] e James Gleick [64], e ainda coletâneas de artigos como as de Fereydoon Family e Tamás Vicsék [54] e Leo P. Kadanoff [86], entre vários outros trabalhos e obras relevantes, que serão devidamente citados nos próximos capítulos, quando os estudaremos mais detalhadamente.

## **Preâmbulo: o Papel da Teoria na Consolidação, Quebra e Formação de Paradigmas**

Antes de iniciarmos a discussão, é necessário que se esclareça o conceito de *paradigma*; segundo uma corrente de historiadores da ciência, articulada por Alexander Koyré, Thomas Kuhn, Imre Lakatos, entre outros, a origem e destino de uma hipótese científica não depende tanto de sua adequação a dados experimentais, sendo mais importante sua relação com a teoria já estabelecida, com o núcleo de um programa científico em curso, ou com a crença metafísica do mundo em um dado momento - o **paradigma** dominante em uma sociedade. Portanto, um paradigma não diz respeito somente a modelos, princípios ou leis de uma teoria, mas abrange ainda o rol de questões a serem consideradas de interesse científico e até os possíveis exemplos de soluções válidas. Cientistas que partilham um paradigma formam uma comunidade hermética, que dificilmente questiona sua validade, perpetuando-o em seus livros, trabalhos e encontros científicos e até no provimento de cargos dentro das instituições de pesquisa. Vista sob este ângulo, uma possível transição entre paradigmas só seria possível por um processo descontínuo, levando ao conceito de

“Revoluções Científicas”, largamente divulgado pela corrente já citada.

Dentro desse contexto, tanto a Termodinâmica quanto a Física Estatística são consideradas contra-exemplos, já que, a despeito das profundas mudanças decorrentes de seus postulados, estas disciplinas se estabeleceram lenta e gradualmente, muitas vezes através de longos e acalorados debates. Talvez por isso, não lhes é atribuído nenhum papel relevante no estabelecimento de paradigmas, nem lhes é associada nenhuma “revolução”. Neste trabalho, faremos um questionamento dessa perspectiva, abordando três momentos onde a Física Estatística desempenhou papel fundamental no estabelecimento, quebra e possível formação de paradigmas:

- **A formação do paradigma determinista e a consolidação da Termodinâmica**, onde relataremos como a concepção aristotélica foi abandonada em prol do método científico, como ocorreu a ascensão do mecanicismo concomitante ao longo estabelecimento da Termodinâmica, e a formulação do primeiro modelo reducionista: a Teoria Cinética dos Gases;
- **O nascimento da Física Estatística e subsequente quebra do paradigma determinista**, onde apontaremos o papel da Física Estatística no surgimento da Física Quântica, a supremacia da interpretação probabilística da natureza, e os primórdios da Teoria de Transições de Fase e de Fenômenos Críticos;
- **O apogeu da Mecânica Estatística**, o modelo de Ising, a solução de Onsager, o Grupo de Renormalização e a hipótese de Escala; simulações computacionais, sistemas complexos e o florescimento do Caos e dos Fractais: **a formação de um novo paradigma?**

Os historiadores da ciência são unânimes em reconhecer duas “Revoluções Científicas” desde a renascença: a Primeira Revolução Científica, oriunda dos trabalhos de Copérnico, Kepler, Galileu, Descartes e Newton, foi responsável pela concepção mecanicista da natureza e pelo princípio da causalidade, permitindo a ascensão do determinismo; a segunda Revolução Científica é associada às teorias de Maxwell, Planck, Einstein, Heisenberg e Schrödinger, e implicou no abandono do determinismo em prol de uma interpretação probabilística da natureza, cujo significado filosófico último permanece obscuro. Os dois primeiros momentos destacados acima correspondem exatamente às duas primeiras Revoluções Científicas; desse modo, na próxima seção nos ocuparemos do primeiro momento, enquanto o segundo será o tema abordado na seção seguinte. Deixaremos para a última seção a análise do terceiro momento, que se estende aos dias atuais.

## A.1 O Surgimento da Termodinâmica e a Consolidação do Paradigma Determinista

Este primeiro momento se estendeu pelos séculos XVI a XIX, período ao longo do qual se ergueu o paradigma determinista, sustentado por três pilares: o método científico, a causalidade e o reducionismo. Este período corresponde também à lenta consolidação da Termodinâmica, que esteve intrinsecamente relacionada ao estabelecimento dos dois primeiros, enquanto que o terceiro é associado ao surgimento da Teoria Cinética dos Gases.

O conceito da Termodinâmica como a *parte da Física que estuda os processos de transformação de energia e o comportamento macroscópico dos sistemas envolvidos*, deixa explícito o caráter fenomenológico da teoria, ao limitar o escopo da disciplina à leis estritamente empíricas. Já segundo Herbert Callen [29], esta seria “*o estudo das restrições sobre as possíveis propriedades da matéria que decorrem de propriedades de simetria de leis fundamentais da Física*”, conceito mais abrangente, que revela tanto o caráter universal da teoria quanto seu caráter axiomático. O que está *implícito* nestes conceitos é a estreita relação entre eles e o estabelecimento da 1ª Lei da Termodinâmica, ou “Lei de Conservação da Energia”, um dos mais longos processos na história da ciência, que se estendeu por mais de 200 anos.

Remontar suas origens é uma árdua tarefa, haja visto o longo e tortuoso caminho enfrentado pela disciplina até o seu conceito atual. Desde a primeira formulação de um princípio de conservação no século XVII, até o enunciado final da 2ª lei na segunda metade do século XIX, foram dois séculos de debates acirrados, durante os quais muitos mitos foram derrubados, vários cientistas condenados ao ostracismo e outros imortalizados por suas contribuições. Ao fim desse período, verificou-se a substituição da visão de mundo aristotélica pelo paradigma determinista (newtoniano-cartesiano).

Durante toda a Idade Média, o pensamento aristotélico foi predominante na Europa e no ocidente, em boa parte graças à Igreja que canonizou suas idéias, impondo-as como a verdade revelada e incontestável, pois estas se adequavam aos interesses clericais da época. De fato, ao entrarmos em contacto com a obra do grande Aristóteles (384-322 AC), mesmo hoje somos tomados por uma enorme admiração, seja pela amplitude e generalidade de seu trabalho, seja pela exorbitante força intelectual do filósofo grego. Portanto, não é surpreendente que sua cosmologia tenha sobrevivido durante tantos séculos após ser proposta e, até hoje, não raro se manifesta no senso comum. Em relação ao estabelecimento da ciência moderna, essencialmente são três os aspectos dos *Tratados Físicos* [6] que estaremos interessados: a concepção aristotélica de movimento, contida no ensaio *Física* [6], a visão geocêntrica do universo defendida em *Dos Céus* [6], e a crença na continuidade da matéria em detrimento do atomismo, expressado em *Da Geração e Corrupção* [6]. Estas concepções foram perpetuadas durante a Idade Média e delas derivaram-se dois “conceitos” largamente admitidos no período: de que a natureza

possuiria “horror ao vácuo”, já que este inexistente por definição, pois uma substância tênue, inerte e perfeitamente elástica - o “éter”, deveria preencher uniformemente todo o espaço, afim de possibilitar a propagação de luz e de calor.

O marco inicial da ciência moderna é a obra de Nicolau Copérnico (1473-1543) sobre as revoluções das órbitas celestes, estabelecendo o sistema heliocêntrico. Entretanto, o heliocentrismo só obteve reconhecimento após o método científico introduzido por Galileu Galilei, que também representou o início de uma longa e conflituosa cisão entre religião e ciência. Somente no século XIX, após o estabelecimento do método científico, o Racionalismo passou a prevalecer na elaboração de teorias científicas, fazendo com que os dogmas canônicos fossem banidos definitivamente.

Galileu Galilei (1564-1642) foi o principal divulgador do heliocentrismo e responsável por retirar a principal objeção ao modelo introduzindo o princípio de inércia; através dele, Galileu explicou porque não percebemos o movimento da Terra, mesmo estando em rotação e translação em torno do Sol. Até então, o dogma rezava que a Terra estaria estática e no centro do universo, palco central da criação divina. Por seu trabalho, Galileu hoje é um dos patronos da ciência moderna, mas em sua época foi condenado como herege em 1633, e somente 350 anos depois (1983!) a Igreja reconheceu seu erro. No célebre *As Duas Novas Ciências* (1638), Galileu lançou as principais idéias sobre o movimento de corpos acelerados na superfície terrestre, formulou pela primeira vez um princípio de inércia e apresentou uma discussão sobre o atomismo. Este trabalho se tornou mais tarde um dos pilares da Mecânica Clássica, pois pela primeira vez uma lei física - queda livre - foi proposta e demonstrada obedecendo uma metodologia científica: *observação, hipótese e experimento*.

Nesta época a Igreja representava um forte entrave para o pensamento científico; exemplo disso foi a rejeição medieval ao atomismo, devido ao seu pretenso caráter ateísta. Segundo um antigo argumento do poeta romano Lucrécio(99-55 AC), se considerarmos que o mundo natural se resume apenas à ‘matéria (partículas) e ao movimento’, poder-se-ia dispensar a existência de agentes sobrenaturais e também a idéia de que tudo se mantém unido graças a um substrato de forças e éteres. Para um pensador medieval, era natural explicar a existência de um universo regular e harmônico nesse cenário; por outro lado, seria difícil de crer que partículas soltas no espaço vazio, sujeitas apenas a seus próprios movimentos aleatórios e a colisões com outras partículas, poderiam resultar na harmonia celeste observada. Curiosamente, só a partir do início do século XVII foi que o atomismo passou a ser entronizado, graças a um argumento proposto por Pierre Gassendi (1592-1655), no qual os átomos não determinavam seu próprio movimento mas eram postos a se mover por Deus, como em um intrincado mecanismo. Esta figura de um ‘Deus relojoeiro’, desenvolvida principalmente por Robert Boyle (1627-1691), foi uma das idéias mais populares da época e ajudou a realçar uma concepção mecanicista da Natureza: esta seria colocada em movimento por Deus em *perpetuum mobile*, e estaria sujeita às leis físicas, que poderiam ser determinadas segundo o método criado por Galileu.

Os principais responsáveis pelo mecanicismo - além de Galileu - foram Descartes, Boyle e Newton. Após a proposição do empirismo por Francis Bacon (1561-1626), patrono da Real Academia de Ciências da Inglaterra, René Descartes (1596-1650) em seu *Discurso sobre o Método* (1637) sustentou que as teorias deveriam ser preferencialmente deduzidas a partir de fundamentos auto-evidentes no lugar da observação, elevando o papel da razão em detrimento do experimento, o que deu origem à dicotomia *empirismo* versus *pensamento apriorístico*. Apesar de não ser atomista, Descartes contribuiu para esta idéia, pois acreditava que o espaço era preenchido por partículas de todos os tamanhos, sem limitação (na direção do *continuum* aristotélico), que se movimentariam presas a vórtices, em turbilhões que se repetiriam em todas as escalas. Para suportar suas criativas idéias, Descartes propôs um ‘princípio de conservação’ do que chamou de ‘movimento’ - o produto escalar entre massa e velocidade ( $mv$ ). A versão correta deste princípio é a conhecida Lei de Conservação do Momento Linear, enunciada por Christian Huygens (1629-1695), John Wallis e Christopher Wren em 1668.

É importante ressaltar a importância das idéias de Descartes para o desenvolvimento posterior da ciência, já que desde então o objetivo da maioria dos cientistas foi corroborar ou confrontar as idéias cartesianas. Isto se aplica ao trabalho de Huygens, que deixou uma importante contribuição na conceituação da *vis viva* (ou  $mv^2$ ), uma quantidade alternativa ao *movimento* cartesiano e que também seria candidata a uma lei de conservação. De fato, Gottfried Wilhelm Leibnitz (1646-1716) desenvolveria essa idéia, enunciando em 1693 o “princípio de conservação da energia mecânica”, que consistia na soma da *vis viva* com a energia gravitacional dos corpos. Mais tarde, no século XIX, o termo “teoria da *vis viva*” foi associado à hipótese de que o calor contido em um corpo devia-se ao movimento de suas moléculas - explicando-se daí sua posterior denominação como energia *cinética*.

Porém, durante o fim do século XVII, havia uma grande controvérsia em relação ao conceito de *vis viva*: cartesianos associavam-na ao produto  $mv$  enquanto os seguidores de Leibnitz utilizavam o produto  $mv^2$ ; modernamente, sabemos que ambas as visões podem ser utilizadas na medida do movimento, bastando se alterar a variável associada a uma força: se for aplicada durante um intervalo de tempo, uma força causa um incremento no momento; se aplicada ao longo de uma certa distância, implica em um acréscimo na energia cinética. Essa compreensão do problema só foi possível após *sir* Isaac Newton (1642-1727) apresentar seus *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica* em 1687, e conceber que forças impulsivas atuando em colisões são similares a forças contínuas atuando a distância.

Newton desempenhou papel fundamental para a consolidação do determinismo. Através das equações de movimento enunciadas em suas Leis, se em um dado instante a posição e velocidade de uma partícula eram conhecidos, então era possível prever a trajetória daquele ponto material em qualquer momento posterior; este enunciado ilustra o “princípio de causalidade”, intrínseco às leis determinísticas. Uma contribuição marcante desse período é a “mente divina” imaginada por Pierre Simon Laplace (1749-1827), que seria

capaz de saber as posições e velocidades de cada partícula além, é claro, de conhecer as Leis de Newton; portanto, para esta “mente divina” seria prever exatamente o comportamento de qualquer sistema, numa espécie de “determinismo absoluto” que décadas mais tarde acabarai por suscitar questões acerca do livre arbítrio.

Outro conceito essencial derivado do trabalho de Newton foi o princípio de ação à distância. Na concepção mecanicista, uma força entre dois corpos só existiria se houvesse um meio que os interligasse; de fato o próprio Newton era mecanicista, e comungava a crença cartesiana de que somente forças de contacto impulsivas deveriam existir na natureza; entretanto, após derivar sua segunda lei para forças impulsivas,  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  (que somente foi escrita nesta forma por Euler em 1750), Newton utilizou-se de uma controvertida alegoria pictórica (veja Brush [25]) para tratar o efeito gravitacional em um planeta em órbita, e concebeu que, no limite onde forças impulsivas individuais fossem muito fracas, mas em número e frequência elevadíssimos, estas seriam equivalentes a forças *contínuas* agindo a distância. Portanto, nesse limite tanto forças impulsivas de contacto quanto forças contínuas de ação à distância eram conceitos válidos para descrever fenômenos naturais.

Estendendo este conceito para o movimento das moléculas em um gás, percebemos que a pressão exercida por um gás pode ser vista como o limite contínuo da infinidade de choques moleculares individuais. Esta concepção, originalmente apresentada por Newton, foi crucial para a formulação de um modelo cinético molecular para os gases.

### **A Pressão Exercida por um Gás e os Primórdios da Teoria Cinética**

O “horror ao vácuo”, que Aristóteles afirmava como um dos princípios da Natureza, foi sistematicamente posto a prova pelos cientistas durante o século XVII, através de vários experimentos; Galileu em 1638 demonstrou, utilizando bombas de sucção, que uma coluna de água não poderia ser alçada além de aproximadamente  $9m$ , impondo um limite para o fenômeno; o italiano Evangelista Torricelli (1608-1647) teve a idéia de utilizar mercúrio no experimento, e inventou seu famoso barômetro. Blaise Pascal (1623-1662) demonstrou que a altura da coluna de mercúrio do barômetro de Torricelli variava com a altitude; o trabalho de Jean Pecquet, sugerindo que o ar podia ser composto por pequenos pontos materiais capazes de se expandir quando submetidos ao vácuo e, conseqüentemente, exercer pressão. A culminância destes trabalhos ocorreu com as investigações do físico inglês Robert Boyle (1627-1691), celebrado pela lei entre pressão e volume,  $PV = constante$ , válida quando a temperatura é mantida fixa. Boyle demonstrou de maneira indubitável que a pressão atmosférica era a responsável pela elevação da coluna de mercúrio no barômetro de Torricelli, assumindo para isto a hipótese de que o ar era constituído de pequenas ‘molas’ densamente empacotadas, que se manteriam afastadas uma das outras devido a contínuas colisões.

Nesse ponto, retornamos ao trabalho de Newton: utilizando-se do conceito de um gás estático, composto por partículas estáticas que se repelissessem, Newton conjecturou que se

este modelo estivesse correto, **então** era possível derivar a lei de Boyle, considerando que as forças de repulsão entre as partículas são inversamente proporcionais à separação entre elas. Devido a esta conjectura, muitos cientistas creditaram erroneamente a Newton a **prova** que um gás era formado por partículas. De fato, a discussão sobre a realidade física dos átomos ainda resistiria por mais de uma centena de anos, mas já havia tomado forma um modelo molecular para os gases.

Leonhard Euler(1707-1783) refinou as idéias de Newton, expressando-as em uma forma matemática bwm mais clara. Utilizando-se de um controverso conceito de partículas movendo-se em turbilhões sobre o éter, Euler foi capaz de prever que  $PV \propto Nmv^2$  (onde  $N$  é o número de partículas). Por este trabalho, Euler é considerado por alguns como o primeiro a propor um modelo cinético para um gás; porém, ao supor uma origem rotacional para a velocidade  $v$  das partículas, e não translacional como deveria, este crédito se torna indevido.

Euler foi o maior expoente de um grupo de matemáticos suíços que, anos após a morte de Newton, retomou seus trabalhos e foi responsável pelo desenvolvimento de boa parte do que chamamos hoje de Mecânica Clássica: James Bernoulli (1654-1705), conhecido por sua teoria das probabilidades, foi o primeiro a estabelecer um princípio de conservação para momento angular em 1686; como já vimos, Euler escreveu a 2ª Lei de Newton na forma  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  e, juntamente com John Bernoulli (1667-1748), mostrou como uma vasta gama de problemas em mecânica podem ser formulados e resolvidos utilizando o cálculo diferencial - a versão de Leibnitz para o cálculo de Newton. Após o matemático francês Jean LeRond d'Alembert (1717-1783) descobrir a equação diferencial para uma corda vibrante, Daniel Bernoulli propôs sua solução utilizando modos de vibração. Euler, d'Alembert, John e Daniel Bernoulli (pai e filho) foram os fundadores da hidrodinâmica, além de contribuírem para a teoria de elasticidade, mecânica celeste, e outras várias disciplinas, estabelecendo um sistema unificado e sistemático para todos os problemas na física, astronomia e engenharia da época.

Daniel Bernoulli (1700-1782) é de fato reconhecido como pai do primeiro modelo cinético para gases tal como concebido modernamente. Bernoulli imaginava um gás composto por uma infinidade de partículas, que se movimentariam com uma *mesma velocidade*  $v$ , teriam um mesmo diâmetro  $d$ , estariam separadas por uma distância  $D$  uma das outras e contidas em um volume  $V$ ; este volume poderia suportar um pistão graças à pressão  $P$  exercida pelos impactos das partículas. A partir deste modelo, e considerando resultados experimentais de Guillaume Amontons (1663-1705) que apontavam para  $PV \propto f(T)$ , Bernoulli demonstrou que:

- para variações de  $P$  e  $V$  a temperatura constante, a Lei de Boyle  $PV = constante$  se manteria no limite de  $d/D \rightarrow 0$ , e as correções poderiam ser calculadas em função desta razão;
- se a velocidade das partículas variasse a volume constante, a correção na pressão

seria proporcional a  $v^2$ ;

- seria possível estabelecer uma escala de temperatura usando a equação  $PV = CT$ , onde  $C$  é uma constante; nesse caso, a temperatura  $T$  seria proporcional a  $v^2$ .

É interessante notar que a única propriedade que Bernoulli deu para suas partículas foi o diâmetro  $d$ ; para ele, a massa das partículas era infinitesimal e, estranhamente, seria possível que um número infinito de partículas ocupasse um volume finito, pois a transferência de momento devido a impactos individuais não era levada em conta na equação de estado.

Depois de Bernoulli, tardou para que houvesse avanços significativos na teoria, e estes vieram do desenvolvimento da química, com os trabalhos de Dalton, Gay-Lussac e Avogadro; em meados do século XIII, especulava-se que o ar seria composto por dois gases, nitrogênio e oxigênio, que quando separados possuíam densidades diferentes, à mesma temperatura e pressão. Este último havia sido proposto por Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794) para explicar a combustão no lugar da teoria do *phlogiston* medieval. Com a proposição da estequiometria por J. B. Richter (1762-1807), capaz de quantificar as reações químicas, passou-se um período onde se desejou conhecer as propriedades dos gases e de suas misturas. John Dalton (1766-1844) estabeleceu a ‘lei das pressões parciais’ baseando-se em um modelo newtoniano para gases, porém com uma modificação: em uma mistura de gases, a força repulsiva só existiria entre moléculas de um mesmo gás, sendo inexistente para o outro tipo. Dalton foi ainda o responsável por idealizar a primeira teoria atômica, ao se concentrar na questão dos pesos moleculares dos elementos; para ele, cada elemento deveria possuir um peso característico e, ao reagirem, diferentes elementos se combinariam na proporção de suas massas. Tal raciocínio levou Dalton a escrever uma tabela para os elementos, na ordem crescente de seus pesos atômicos, e teorizar acerca da maneira pela qual os elementos se combinariam.

Joseph Louis Gay-Lussac (1778-1850) foi um químico francês responsável por três descobertas no estudo de gases: o estabelecimento da já citada lei de expansão térmica para um gás (lei de Charles); o estudo da expansão livre de um gás no vácuo, no experimento que leva seu nome; e a descoberta da “lei de combinação de volumes”, que estabelecia que, nas reações gasosas, os reagentes e produtos estavam relacionados entre si por razões entre números inteiros. Esta descoberta indicava que o volume de um gás era proporcional somente ao número de partículas nele contido, a temperatura e pressão fixas, e não da forma ou peso do gás, como propusera Dalton. Portanto, dois litros de hidrogênio poderiam ser combinados com um litro de oxigênio para a formação de dois litros de água, ou seja, cada ‘partícula’ de oxigênio se partiria em duas, uma para cada molécula de água, o que implicava que uma molécula do gás poderia conter mais de um átomo.

Mesmo antes de colocada em sua forma final, com o trabalho de Amadeo Avogadro (1776-1856) em 1811, Dalton rechaçou a idéia de que volumes idênticos de gases diferentes conteriam o mesmo número de partículas; além disso, para ele a idéia de que dois átomos

de um elemento poderiam se combinar formando uma molécula era impensável, já que átomos do mesmo tipo deveriam se repelir, segundo o modelo newtoniano . Com a hipótese de Avogadro de que todo gás possui o mesmo número de *moléculas*, se mantidos fixos a pressão, o volume e a temperatura, e a correção na teoria atômica de Dalton oriunda do trabalho de Gay-Lussac, foi possível determinar as fórmulas moleculares corretas para as substâncias bem como seus pesos moleculares, mas este sistema só foi aceito após Stanislao Cannizzaro (1826-1910) apresentá-lo em 1860 em uma forma fechada.

Outra contribuição importante para o desenvolvimento da moderna Teoria Cinética foi dada por John Herapath (1790-1868), mas sua história é um dos exemplos de como um paradigma vigente pode condenar um cientista ao ostracismo. A despeito de sua excentricidade (o que de modo algum pode ser motivo para desabonar um cientista!), Herapath pode ser enquadrado como um cientista amador que nutria desejos de publicar seus trabalhos acerca do comportamento de partículas nas proximidades do Sol, nos *Philosophical Transactions* da Real Academia Inglesa. De fato, em seu trabalho Herapath obteve uma relação correta entre pressão, volume e velocidade de um gás, escrevendo a relação:  $PV \propto \mathcal{T}^2$ , onde  $\mathcal{T} \propto mv$  era chamada de “temperatura verdadeira” por Herapath. Entretanto, Humphry Davy, um ilustre químico que havia sido recém eleito presidente da Real Academia e que defendia a idéia do calor como uma forma de movimento molecular e não como uma substância, foi decisivo para selar a sorte do manuscrito. Apesar de em seu trabalho Herapath suportar esta idéia através de um formalismo matemático preciso, Davy alegou uma relutância em aceitar que todo o calor de um gás era devido a seu movimento molecular, o que implicaria em um valor mínimo para a temperatura (zero absoluto)! Além disso, Davy demonstrava repugnância pela idéia da teoria cinética de partículas livres se movendo no espaço vazio, com nenhuma interação a não ser choques ocasionais! O artigo de Herapath foi rejeitado, o manuscrito se tornou propriedade da Real Academia e, como era norma, não foi devolvido a seu autor.

Mais tarde, apesar de ter publicado outros artigos em revistas menores e um livro de dois volumes (*Mathematical Physics*) onde retomava sua teoria cinética, o trabalho de Herapath permaneceu totalmente desconhecido da comunidade científica. Inicialmente, o único cientista conhecido que demonstrou ter lido seu livro foi James Prescott Joule, mas depois William Thomson e James Clerk Maxwell o citariam também. Apesar de estar em desacordo com a hipótese de Avogadro, o trabalho de Herapath corroborou a idéia do calor como uma forma de movimento molecular, uma discussão que ocupava lugar central em seu tempo.

## **A Natureza do Calor - a Primeira Lei da Termodinâmica**

O período 1815 a 1865 foi o crucial para a consolidação da Termodinâmica e o surgimento da Física Estatística. Durante este período houve uma drástica mudança no contexto da Física, com a entronização da Teoria Cinética dos Gases, o que representou um elo para

disciplinas até então distintas, como mecânica, eletricidade, magnetismo, luz e calor. A descoberta da lei de transformação e conservação da energia em 1840, feita independentemente por vários cientistas (Julius Robert Mayer (1814-1878), James Prescott Joule (1818-1889), Ludvig August Colding (1815-1888), Hermann von Helmholtz (1821-1894), entre outros), foi fundamental para o subsequente desenvolvimento da ciência, ao ponto de que a Física, a partir de 1850, passou a ser denominada como a “ciência que estuda as diferentes formas de energia e sua transformação”.

A generalização do conceito de energia foi fundamental para o desenvolvimento posterior da Mecânica Quântica e por isso pode ser considerada como a etapa inicial do longo processo que iria destronar o paradigma mecanicista, porém não pode ser considerada uma “revolução”; de fato, sua principal contribuição foi substituir as explicações baseadas em *substâncias* para diferentes fenômenos (como o *éter*, o *calórico*, etc.) pela postulação de diferentes *tipos de movimento*, o que teria forte influência em todas as teorias do século XIX.

Em particular, a natureza do calor ocupava um papel central nas discussões, opondo duas correntes principais: a que defendia o calor como uma substância (o calórico), e outra defendendo o calor como uma “onda”. O conceito do calor como substância era o mais aceito por volta de 1820, e ainda hoje muitas pessoas acreditam nesse conceito, devido talvez a má compreensão de termos como *calor específico* ou *calorias*, que sem dúvida derivam-se do conceito de calórico. Laplace utilizou a teoria do calórico para calcular a velocidade do som em gases; Newton já havia demonstrado a relação da velocidade com a compressibilidade utilizando a equação de Boyle, mas os resultados divergiam das medidas em cerca de 20 %. Considerando que a propagação do som ocorre adiabaticamente (*i. e.*, sem troca de calor com as vizinhanças), Laplace encontrou um fator de correção proporcional a  $\sqrt{c_p/c_v}$ , onde  $c_p$  ( $c_v$ ) é o calor específico a pressão (volume) constante, que ajustou a previsão aos valores experimentais. Outros exemplos de aplicações bem sucedidas da teoria do calórico são a teoria matemática de condução de calor, apresentada por Joseph Fourier, e a análise de Sadi Carnot para a potência motiva do calor em máquinas a vapor.

Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830) iniciou o estudo matemático da condução de calor no início do século XIX, quando havia uma grande polêmica acerca do resfriamento da Terra [25]. As duas principais contribuições de sua teoria para a história posterior da Física foram: uma metodologia para formular e solucionar problemas, usando equações diferenciais e o primeiro postulado de irreversibilidade, concepção necessária para formulação de sua teoria. O uso de equações diferenciais tornou-se padrão na Física, principalmente concatenado à utilização de séries de potências (conexão também feita por Fourier), que aumentaram enormemente a abrangência e robustez do formalismo. Matematicamente, a irreversibilidade da equação de condução de calor aparece devido a assimetria da equação em relação a inversão temporal, ( $t \rightarrow -t$ ), contrariamente as Leis de Newton invariantes em relação a estas transformações (reversíveis). Mais tarde, Sadi Carnot (1796-1832)

verificaria experimentalmente a hipótese de irreversibilidade utilizando máquinas a vapor.

Por volta de 1830, a teoria ondulatória da luz ganhava força, devido aos inúmeros experimentos de difração e interferência comuns nesse período. William Herschel (1738-1822) foi o primeiro a sugerir a transição da luz em calor radiante, estudando o espectro solar na região do infravermelho; mais tarde, experimentos demonstrariam que o calor radiante obedecia as leis de reflexão, refração e interferência, tal como a luz, de modo que a resposta para a pergunta “o que é o calor ?” implicaria também na solução do enigma “o que é a luz?”, e vice-versa. Portanto, a teoria do calor como uma *onda* ganhava cada dia mais adeptos, entre eles André Marie Ampère (1775-1836), que publicou artigos na década de 1830 onde defendia que o calor seria a *vis viva* para as vibrações do átomo, e seria propagado entre os corpos como uma onda pelo éter, e descrito por equações diferenciais. De fato, a abordagem de Ampère possibilitou uma associação do calor com a energia vibracional do átomo, o que mais tarde levaria a conclusão de que o calor (ou a temperatura) dos corpos é apenas uma medida de sua agitação molecular e o éter seria necessário somente para transportar o calor no espaço vazio.

Nesse momento, todos os elementos para se escrever uma teoria cinética para o calor estavam postos, e provavelmente Ampère iria propô-la (afinal ele já havia contribuído com uma teoria cinética para o magnetismo na década anterior), mas ele faleceu em 1836. Cabe ressaltar aqui o trabalho de James Waterston (1811-1883), que também acabou relegado ao ostracismo devido a uma recusa da Real Sociedade Britânica. Waterston submeteu um artigo a Academia em 1845, onde invocava a teoria ondulatória do calor para suportar suas observações, e apresentava uma versão do que seria conhecido depois como o “teorema da equipartição” [25], mas suas conclusões jamais foram publicadas são reconhecidas hoje graças aos historiadores da ciência.

Talvez a história da Mecânica Estatística teria sido outra caso esse artigo de Waterston tivesse sido aceito. No trabalho de 1845, “*Sobre a Física dos Meios compostos de Moléculas Livres e Perfeitamente Elásticas em um Estado de Movimento*”, Waterston apresenta três postulados que alguns anos mais tarde seriam “descobertos” por outros físicos que se tornariam famosos: inicialmente, Waterston afirmava que o calor seria um tipo de movimento das menores partes dos corpos (moléculas); as moléculas deveriam se mover muito rapidamente, e em diversas direções, o que levaria a colisões frequentes, de tal modo que as propriedades do sistema em qualquer instante podem ser obtidas fazendo-se simplesmente uma média sobre todos os estados moleculares possíveis - uma versão primária da hipótese ergódica; finalmente, como consequência dos dois primeiros postulados, na mistura de moléculas com diferentes massas em equilíbrio térmico, cada tipo de partícula tem a mesma energia cinética média - equivalente ao teorema da equipartição. O estilo axiomático de Waterston, que hoje parece atraente, lhe era bastante desfavorável na época, ao ponto do árbitro do artigo ter alegado “total falta de sentido” nas colocações de Waterston, em mais uma clara evidência de como um paradigma vigente é resistente aos novos conceitos.

Somente após a consolidação da 1ª Lei da Termodinâmica, a partir da década de 1850, é que Rudolf Clausius (1822-1888) começou a publicar a série de artigos que estabeleceu as equações básicas do que chamamos hoje de “Termodinâmica do Equilíbrio”; alguns anos depois, William Thomsom (1824-1907) (mais tarde denominado por “Lord Kelvin”) publicou independentemente uma teoria similar, onde pela primeira vez apresentava uma exposição geral do princípio da dissipação da energia e estabelecia uma escala absoluta de temperatura (escala Kelvin). Ao lado de William John Macquorn Rankine (1820-1872), Kelvin e Clausius são apontados como os fundadores da termodinâmica.

A primeira Lei da termodinâmica nada mais é do que um caso especial da Lei da conservação da energia, e estabelece que a energia  $E$  de um sistema pode ser alterada adicionando-se calor,  $q$ , ao sistema, ou fazendo com que este realize trabalho,  $w$ ; dessa forma, a primeira Lei pode ser escrita como,

$$\Delta E = q - w = q - P\Delta V ,$$

onde  $P$ ,  $V$  e  $E$  (pressão, volume e energia do sistema) são quantidades termodinâmicas que definem um *estado* termodinâmico de equilíbrio, e  $q$  e  $w$  são quantidades que acarretam em mudanças no estado do sistema.

### **A segunda Lei da Termodinâmica: Entropia**

Lucas Léonard Sadi Carnot (1796-1832) publicou em (1824) um ensaio sobre a força motriz do fogo e a eficiência de máquinas a vapor, utilizando o conceito do calórico. Neste trabalho, Carnot apresenta uma série de conclusões que, mais tarde (1850), seriam a base para Clausius estabelecer a segunda Lei da Termodinâmica. Em 1852, William Thomsom (Lord Kelvin) estabelece pela primeira vez o princípio da irreversibilidade, afirmando que haveria uma “tendência natural para a dissipação de energia”, após analisar a teoria de condução de calor de Fourier e o ensaio de Carnot. Kelvin propôs ainda a escala absoluta de temperatura, que levaria seu nome, e apenas alguns meses depois de Clausius, sugere o intercâmbio entre calor e energia.

A segunda Lei da Termodinâmica foi formulada de várias formas diferentes por vários autores, que geralmente se utilizavam de asserções negativas, tais como “é impossível ocorrer um processo onde o calor flui de um sistema mais frio para outro mais quente sem que haja a devida compensação. Em 1957, Clausius publicou um trabalho versando sobre a teoria cinética, “*O Tipo de Movimento que chamamos de Calor*”, onde ele introduz várias noções que se mantêm até hoje; Clausius considerou pela primeira vez que as moléculas de um gás poderiam ter mais de um átomo, e que tais moléculas teriam movimentos rotacionais, translacionais e vibracionais. Comparando sua teoria com os experimentos, Clausius concluiu que as moléculas deveriam ser infinitesimais, se comparadas com o volume do fluido, e as colisões entre as moléculas ocorreria apenas em uma pequena porção

do caminho percorrido por estas; desse modo, as forças de longo alcance entre moléculas poderiam ser negligenciadas e as colisões ocorreriam somente devido ao potencial repulsivo de curto alcance das moléculas. Essas conclusões eram necessárias para se garantir que o gás obedeceria a Lei de Boyle.

Apesar de limitar a teoria aos gases ideais, Clausius conjecturou quais deveriam ser as propriedades dos outros estados da matéria, e suas previsões foram bastante acertadas; segundo Clausius, no sólido as moléculas ocupariam posições de equilíbrio fixas, e o movimento das moléculas eram combinações de diversos tipos de vibrações; no estado líquido, as moléculas não ocupariam mais posições de equilíbrio, e realizando rotações e translações em torno do centro de gravidade, que também poderia mover-se; porém, as moléculas não estaria completamente livres, mas haveria um conjunto de forças as mantendo unidas a seus vizinhos de tal forma que mesmo na ausência de forças externas o volume do líquido se restringiria a um volume fixo. Já no estado gasoso, as moléculas seriam completamente livres, se deslocando em trajetórias retilíneas, eventualmente chocando-se com outras moléculas. Com este quadro qualitativo das diferentes fases, Clausius desenvolveu uma teoria para as transições de fase; em particular, Clausius considerou que a velocidade das moléculas poderiam sofrer grandes desvios em relação à velocidade média, o que poderia explicar o fenômeno da evaporação, mesmo abaixo da temperatura de ebulição. De modo análogo, Clausius explicou o fenômeno do calor latente, relacionando-o a energia necessária para que as moléculas se livrassem das forças que as mantinham agrupadas.

Clausius introduz uma quantidade que permitiria comparar a conversão de calor em energia com o fluxo deste:  $S = dQ/T$ , onde  $dQ$  é a quantidade de calor absorvida por um corpo a temperatura  $T$ . Onze anos após sua proposição, a utilidade desta quantidade para analisar os processos termodinâmicos levou Clausius a lhe dar um nome conciso, *entropia*; esta deveria ser sempre positiva ou nula em um processo termodinâmico, levando a forma mais conhecida da Segunda Lei: “a entropia em processos termodinâmicos sempre aumenta ou permanece constante (para processos reversíveis)”.

Dessa forma, o calor nada mais era que uma forma de energia cedida ao gás que serviria para aumentar a energia cinética das moléculas ou para realizar as mudanças de estado. No final de 1857, Clausius mediu as velocidades médias de vários gases, obtendo um valor de centenas de metros por segundo. Entretanto, os dados de Clausius foram contestados por um cientista holandês, C. H. D. Buys-Ballot, que utilizou um argumento simples: se a velocidade das moléculas era tão grande, porque ao abrir um vidro de perfume em um canto de um quarto demora cerca de um minuto para que o odor se espalhe? Clausius resolveu o enigma modificando sua teoria; em vez de considerar o tamanho das moléculas como infinitesimal, considerou que as moléculas teriam um diâmetro  $d$ , de tal modo que estas não poderiam se deslocar muito tempo sem colidir com outras moléculas. Clausius introduziu um novo parâmetro, o *livre caminho médio*,  $L$ , que corresponde a distância que uma molécula pode se deslocar sem uma colisão; se  $d$  fosse muito menor que  $L$ , então as

conclusões de sua teoria continuariam válidas para os gases ideais, mas agora as moléculas teriam a direção de seu movimento alteradas várias vezes a cada segundo, o que resultaria na ‘lentidão’ para a sua difusão.

A definição do livre caminho médio ( $L = kV/Nd^2$ , onde  $k \sim 1$ ), foi logo utilizada por Maxwell, que demonstrou que este poderia ser relacionado a viscosidade de um fluido. Desse modo, seria possível estimar o diâmetro de uma molécula. Em 1859, James Clerk Maxwell era um estudante brilhante, recém premiado por um ensaio sobre os anéis de Saturno, escreveu uma carta para George Gabriel Stokes, então uma sumidade no estudo da dinâmica de fluidos, onde utilizava o conceito do livre caminho médio para mostrar que a viscosidade de um fluido seria independente de sua densidade. Stokes refutou a carta, apontando para experimentos com pêndulos onde supostamente a viscosidade iria para zero em baixas densidades. Desse modo, em 1860 Maxwell publicou seu artigo sobre “Ilustrações da Teoria Dinâmica dos Gases”, onde afirmava que sua previsão para a viscosidade dos gases não era corroborada por experimentos. No artigo, pela primeira vez foi apresentado um esquema geral no qual a difusão, a viscosidade e a condução de calor eram vistos como casos especiais de processos gerais onde quantidades como a energia e o momento eram transportados pelo movimento molecular.

Maxwell então decidiu realizar experimentos cuidadosos (o que ainda não havia sido feito) para medir os efeitos da temperatura e densidade na viscosidade de um fluido, e concluiu que a viscosidade se mantinha constante para uma larga faixa de densidades. Dessa forma, Maxwell demonstrou que a interpretação dos experimentos com o pêndulo é que estava errada, pois baseava-se na lógica de que, para a densidade zero, o pêndulo ficaria oscilando indeterminadamente. Neste mesmo ano (1860), Maxwell apresentaria uma formulação bem mais robusta da teoria, na qual demonstraria que todas as propriedades do gás poderia ser obtida a partir da distribuição das velocidades no gás.

Josef Loschmidt, um cientista austríaco, utilizou o resultado obtido por Maxwell para a viscosidade ( $\mu \propto L \propto V/Nd^2$ ) para calcular o diâmetro de uma molécula de “ar”, obtendo o resultado  $d \simeq 10^{-9}$  m, apenas quatro vezes maior do que os dados atuais. Esse valor resultava em um número de  $2 \times 10^{18}$  moléculas por centímetro cúbico ( $0^\circ$  C, 1 atm), próximo do valor atual ( $2.687 \times 10^{19}$ ). A partir de então, várias estimativas para o tamanho dos átomos foram feitas utilizando-se a teoria cinética dos gases, mas a mais importante contribuição deste período foi colocar o átomo como uma entidade real passível de ser medida (muito embora não fosse visível). Essa visão seria fortemente contestada anos mais tarde por Ernst Mach e Wilhelm Ostwald, que propunham o banimento dos átomos das teorias científicas estabelecidas.

## A.2 Da Termodinâmica à Física Estatística: os Primórdios de uma Teoria Probabilística sob a Égide do Determinismo.

Na seção anterior vimos como o paradigma aristotélico foi demovido pela estrutura teórico-filosófica de Descartes e pelas soluções consistentes de problemas mecânicos e óticos apresentadas por seus sucessores - como Huyguens. A mecânica newtoniana surgiu como paradigma dominante a partir da publicação dos *Principia* em 1687, até chegar a seu clímax em 1900, quando chegou-se a acreditar que todos os problemas físicos poderiam ser resolvidos caso fossem conhecidas as forças atuando sobre o sistema considerado e suas propriedades em um dado instante, pois seu estado poderia ser determinado em qualquer instante subsequente através das equações de movimento do sistema.

Portanto, até o início do século XIX, o axioma básico da maioria dos cientistas era que os fenômenos naturais seriam rigorosamente determinados pelo conhecimento completo do estado de um sistema em um dado instante de tempo, e pelas leis da física - determinismo. Para um gás, se as posições e velocidades de cada molécula for conhecida, poder-se-ia utilizar as equações de movimento para obter o estado do sistema em qualquer instante posterior. De fato, essa informação é literalmente impossível de ser adquirida, devido ao enorme número de variáveis envolvidas, o que favorece um tratamento estatístico do problema. Apesar de Clausius ter usado argumentos estatísticos para derivar sua fórmula para o livre caminho médio, foi Maxwell quem converteu a teoria cinética em uma doutrina essencialmente estatística.

Como mostrado por Brush [25], uma revisão de Herschel sobre o trabalho de Quetelet sobre estatística (onde o autor usava extensivamente a distribuição normal, recentemente apresentada por Gauss e Adrian, que seria chamada posteriormente de *gaussiana*) exerceu grande influência sobre o jovem Maxwell, a ponto deste afirmar em uma comunicação privada que “... a verdadeira lógica para esse mundo é o *Calculo de Probabilidades*...”. O passo crucial foi utilizar a distribuição gaussiana para obter a distribuição de velocidades das moléculas em um gás; desse modo, Maxwell propôs que o número de moléculas com velocidades entre  $v$  e  $v + \Delta v$  seria proporcional a  $v^2 e^{-v^2/\alpha^2}$ , onde  $0 < v < \infty$  e  $\alpha = 2k_B T/m$ .

A importância da distribuição de Maxwell foi mostrar que as propriedades de um gás dependem da forma da distribuição (que varia com a temperatura), além da velocidade média das moléculas. A derivação de Maxwell para sua distribuição não foi muito persuasivo inicialmente, tanto que alguns anos mais tarde ele escreveria outro artigo, onde tentava demonstrar que uma vez que o sistema atingisse tal distribuição, ela não seria perturbada pelas colisões entre as partículas, uma questão não abordada no primeiro artigo.

De fato, o trabalho inicial de Maxwell sobre a teoria cinética, em particular a introdução da lei de distribuição de velocidades, parece mais derivar-se da Teoria de Probabilidades do que uma análise mecânica do movimento: cada componente de velocidade de cada molécula é considerada uma variável aleatória estatisticamente independente dos outros componentes e também das outras moléculas. Mais tarde, tentaria justificar essa presunção com o raciocínio das colisões moleculares, mas mesmo assim tinha de considerar as velocidades entre as partículas que colidem independentes entre si. Por outro lado, o determinismo era essencial na segunda parte da teoria, onde podia-se calcular quantidades macroscópicas (como a viscosidade e a condutividade térmica), e compará-las com os experimentos.

Logo após a nova formulação da Segunda Lei por Clausius em 1865, Maxwell iniciou em 1867 um debate sobre a interpretação estatística da irreversibilidade, com seu famoso “demônio”. Supondo um aparato onde dois volumes de um gás, com temperaturas diferentes, são colocados em duas câmaras conectadas por uma porta sem atrito, na qual situa-se um minúsculo demônio, que pode identificar as velocidades das moléculas que estão ao seu redor; Maxwell argumenta que se o demônio fazer com que as moléculas mais lentas do gás mais quente passe para o outro lado, e as moléculas com maior energia cinética do lado mais frio passe para o gás mais quente, haveria uma violação da Segunda Lei. Dessa forma, Maxwell conclui que a Segunda Lei não possui validade absoluta, dependeria da não existência de tal demônio, ou seja, a Lei só é válida para sistemas macroscópicos, já que representa apenas o comportamento mais provável do sistema. O demônio de Maxwell representa também um novo modelo fundamental para processos irreversíveis, pois traduz o fluxo de calor na mistura entre moléculas. Anos mais tarde, Maxwell repudiaria o determinismo no nível molecular, e no seu artigo *Átomo*, publicado em 1875 na Enciclopédia Briânica, defenderia a desordem molecular como necessária para que o sistema pudesse se comportar irreversivelmente

Porém, somente após o trabalho do físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) é que a distribuição de Maxwell foi consagrada. O objetivo dos estudos de Boltzmann era derivar a segunda lei da termodinâmica a partir das leis da mecânica, que o levou a desenvolver um tratamento geral para o estado de equilíbrio térmico. Boltzmann estende a lei de distribuição de Maxwell para o caso em que existe um campo gravitacional presente. Utilizando notação moderna, o argumento de Boltzmann foi introduzir um fator exponencial para a probabilidade relativa de se encontrar uma partícula em uma posição onde a energia potencial  $V$ :  $e^{-V/k_B T}$ ; este é o conhecido *fator de Boltzmann*. Desse modo, o fator de Boltzmann combinado a distribuição de Maxwell fornecem as probabilidades para qualquer estado da matéria (uma vez que a interação com outras partículas pode ser descrita como um potencial). De forma sintética, o *princípio básico da mecânica estatística* afirma que a probabilidade relativa de um estado molecular com energia total  $E = \sum (mv^2/2) + \sum V$  é  $e^{-E/k_B T}$ .

Boltzmann só provou este princípio em casos especiais, mas suas tentativas de justificá-lo

são bastante esclarecedoras; inicialmente Boltzmann utilizou um argumento cinético para obter a equação integro-diferencial que governa a distribuição de velocidades,  $\{$ , em um gás onde ocorrem colisões entre as partículas. Boltzmann mostrou que há uma quantidade,  $H = \int \{ \log \{$ , que sempre decresce com o tempo, a menos que  $\{$  seja a distribuição de Maxwell, para a qual  $H$  é mínimo. Este é o famoso “teorema H de Boltzmann”, e é natural fazer a identificação  $H \propto -S$ , onde  $S$  é a entropia, de tal forma que o teorema H corrobora a hipótese de que a entropia é sempre crescente para processos termodinâmicos.

Um segundo argumento introduzido por Boltzmann utiliza a hipótese de probabilidades iguais a priori, e esclarece porque um sistema em equilíbrio deve obedecer a distribuição de Maxwell para as velocidades, além de explicar o fato paradoxal de que a energia total do sistema se mantém fixa, mesmo com as velocidades podendo variar entre  $0 < v < \infty$ . Inicialmente, Divide-se o gás em  $J$  partes, cada qual possuindo um valor  $e$  de energia de modo tal que  $E = Je$ . A seguir, Boltzmann define um *microestado* do sistema como a configuração onde  $J_1$  partes da energia do sistema são atribuídas a partícula 1,  $J_2$  a partícula 2, ...,  $J_N$  a partícula  $N$ , de tal modo que  $\sum J_i = J$ . Boltzmann postula que cada microestado tem a mesma probabilidade de ocorrer, de tal forma que a probabilidade de que uma dada partícula tenha energia  $J_i e$  é proporcional ao número de microestados nos quais a partícula  $i$  tenha essa quantidade de energia (ou seja, somando-se sobre todas as maneiras de se distribuir  $J - J_i$  para  $N - 1$  partículas). No limite  $J \rightarrow \infty$ ,  $e \rightarrow 0$  e  $N \rightarrow \infty$ , com  $E/N$  fixo, a distribuição de Maxwell emerge naturalmente (os cálculos para essa demonstração são muito complicados para serem reproduzidos aqui), e pode-se verificar que, no equilíbrio, esta distribuição possui o maior número de microestados, e portanto, é a mais provável de ser encontrada.

Comparando os resultados das duas abordagens, Boltzmann concluiu que o processo de aproximação irreversível para o estado de equilíbrio, o qual é um típico processo de aumento de entropia, corresponde a transição de microestados menos prováveis para microestados mais prováveis, de tal modo que a entropia poderia ser considerada como uma medida da probabilidade. Em particular, se  $\Omega$  é a probabilidade de um macroestado (ou seja, proporcional ao número de microestados correspondendo àquele macroestado), então sua entropia é proporcional ao logaritmo de  $\Omega$  (afim de preservar a propriedade de aditividade da entropia). Em notação moderna,

$$S = K_B \log \Omega ,$$

equação reproduzida como epitáfio na campa de Boltzmann.

O fato de que podemos associar uma probabilidade a um macroestado não significa necessariamente que sua existência resulta de processos aleatórios; pelo contrário, o uso de probabilidades está em pleno acordo com a suposição de que os microestados são rigorosamente determinados pelo estado do sistema no instante anterior e pelas forças atuando sobre ele. De fato, a abordagem estatística é necessária devido ao enorme

números de microestados que usualmente possui um macroestado.

A distinção entre micro- e macro-estados foi fundamental para a teoria de Boltzmann alcançar seu reconhecimento. Graças a ela, o argumento de que cada estado (conjunto de velocidades e posições das moléculas) possuía a mesma probabilidade poderia ser conciliado com a Segunda Lei, uma vez que os macroestados (estados de equilíbrio) corresponderiam a coleções de microestados e, portanto, seriam os mais prováveis de ocorrer. Em um processo irreversível típico, o sistema evolui de um estado fora do equilíbrio (menos provável, com menor entropia) para um estado de equilíbrio (mais provável, maior entropia). Dessa forma, um processo que não obedece a Segunda Lei é possível, embora improvável.

Outra conclusão obtida por Maxwell foi que a energia do sistema deveria ser igualmente distribuída entre suas partes - o *teorema da equipartição da energia* - que, em linguagem moderna, afirma que cada grau de liberdade do sistema possui a mesma quantidade de energia. Uma justificativa para esse teorema (e para a distribuição de Maxwell-Boltzmann) seria dada pela *hipótese ergódica*, que afirmava que a distribuição de probabilidades iguais a priori poderia ser derivada a partir de argumentos cinéticos: um sistema mecânico pode eventualmente passar por todos os microestados de um sistema antes de passar pela segunda vez em um mesmo microestado; se isto for verdade, então o valor médio de qualquer propriedade do sistema, tomado sobre um período suficientemente longo de tempo, será igual a média tomada sobre todos os microestados. Maxwell e Boltzmann não se preocuparam em demonstrar a hipótese ergódica, apenas a utilizaram como argumento heurístico para justificar o teorema da equipartição.

Durante a década de 1890, Lord Kelvin e outros demonstraram que a hipótese ergódica não deveria ser válida para certos tipos de modelos, em particular para aqueles que descreviam interações entre átomos e o éter. De fato, se o éter fosse considerado um sistema mecânico ao qual o teorema da equipartição se aplicasse (cada modo de vibração teria a mesma energia média), e calculássemos a energia total do éter como a integral sobre todas as frequências possíveis, verificaríamos que a integral diverge na região de altas frequências. Esta divergência hoje é conhecida como a “catástrofe do ultravioleta”, e em muitos livros é apontada como o “motivo” para a introdução da física quântica. Realmente, Max Planck proporia anos depois que a lei de distribuição para a radiação de corpo negro teria um termo exponencial a mais, que reduziria drasticamente o integrando na região de alta frequências, e a integral convergiria. Cabe ressaltar entretanto, que a “catástrofe do ultravioleta” foi um argumento inventado *após* a teoria quântica ter sido proposta, e nem Lord Rayleigh (que supostamente teria descoberto a anomalia), nem Planck (que a resolveu) desconfiavam na época que a mecânica Newtoniana implicava previa tal divergência. Dessa maneira, vimos as principais teorias físicas elaboradas para explicar e prever as propriedades físicas dos materiais, e para isso são necessárias três fundamentos: uma teoria para a estrutura e interações dos átomos, as equações de movimento das partículas e uma técnica estatística para se estimar as propriedades de sistemas muito

grandes. Até o início do século XX, o modelo de esferas duras (ou de centros de atração e repulsão) era a principal teoria de estrutura e a mecânica newtoniana fornecia as equações de movimento; portanto, o trabalho de Maxwell e Boltzmann completou os três fundamentos.

## A Mecânica Estatística de Gibbs

Entretanto, o trabalho de colocar esses três fundamentos em um formalismo matemático independente coube a John Willard Gibbs (1839-1903), que cunhou a expressão “mecânica estatística”, e ao lado de Boltzmann e Maxwell são considerados os patronos da disciplina. A principal descoberta de Gibbs foi a regra de fases,  $f = n - r + 2$  (onde  $f$  é o número de graus de liberdade para  $n$  componentes e  $r$  fases), que clarificou enormemente a compreensão dos diagramas de fase. (Por exemplo, para um líquido puro ( $n = r = 1$ ),  $f = 2$ , e há duas variáveis independentes ( $T$  e  $P$ ); se a fase vapor está presente,  $f = 1$ , e a única variável independente é a temperatura. Se há três fases presentes, não há nenhum grau de liberdade - ponto triplo.)

Após passar a década de 1880 debruçado sobre a teoria eletromagnética de Maxwell, Gibbs voltou-se para a teoria cinética dos gases quando Boltzmann já estava prestes a lhe dar uma forma matemática abstracta (como já abordamos acima). Gibbs batizaria de *ensembles* aos microestados que Boltzmann havia chamado de *ergodo*, nome perpetuado até hoje, e os definiria como uma coleção de sistemas similares em alguns aspectos, e cujas diferenças geralmente estariam no nível microscópico e não acessíveis a observação.

Na sua obra definitiva, *Princípios Elementares em Mecânica Estatística*, Gibbs mostrou em 1902 que o *ergodo* de Boltzmann corresponderia ao ensemble microcanônico, onde número de partículas e a energia total seriam fixos, mas as velocidades e posições poderiam variar. Além desse, ele enumera outros dois *ensembles*: o canônico, onde o número de partículas continua fixo, mas a energia seria livre, e o *ensemble* grã-canônico, onde o número de partículas também é variável.

Para o ensemble canônico, o número de sistemas com energia  $\epsilon$  é proporcional a  $e^{\epsilon/\theta}$ , onde  $\theta = k_B T$  é chamado de “módulo” da distribuição. O *coeficiente de probabilidade* de Gibbs é dado por

$$P = e^{(\psi - \epsilon)/\theta},$$

onde  $\psi$  é uma constante a ser determinada tal que a integral de  $P$  sobre todos os estados seja igual a 1. Gibbs também definiu um “índice de probabilidade”,  $\eta = \log P$ , de modo tal que se comparamos estas definições com as leis termodinâmicas identificamos  $\theta$  com a temperatura, e  $\eta$  com a entropia.

A Mecânica Estatística de Gibbs era capaz de fornecer todas as propriedades do sistema a partir de uma única função, a “integral de fases”, ou integral de estados,

$$\mathcal{Z} = e^{-\phi/\theta} = \int e^{-\epsilon/\theta} ,$$

onde a letra  $\mathcal{Z}$  vem do alemão *Zustand* - estado. Por exemplo, a energia média pode ser calculada,

$$\bar{\epsilon} = \int \epsilon P ,$$

usando o fator de Boltzmann  $e^{-\epsilon/\theta}$  para a probabilidade de um estado como

$$\bar{\epsilon} = \frac{\int \epsilon e^{-\epsilon/\theta}}{\int e^{-\epsilon/\theta}} = \frac{\partial \ln z}{\partial (-1/\theta)} ,$$

desde que  $P = e^{(\phi-\epsilon)/\theta} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\epsilon/\theta}$ .

Essa abordagem foi bastante utilizada pelos físicos nas primeiras décadas do século XX, como Einstein, Planck, Ornstein e Ehrenfest entre outros, e foi muito importante para o nascimento da física quântica. Em particular, Planck em 1924 iria utilizar pela primeira vez o termo “função partição” (*Zustandssumme*) para  $\mathcal{Z} = \sum e^{-E/k_B T}$ .

## A Eclosão da Física Quântica: Planck, Einstein, Heisenberg e Schörodinger

Até o início da década de 1890, quando desenvolveu e publicou sua “teoria dos processos radiativos irreversíveis”, Max Planck (1858-1947) acreditava firmemente na princípio da irreversibilidade como uma lei absoluta da natureza, mesmo que isto custasse o abandono da teoria atômica. Entretanto, ao tentar mostrar que a teoria eletromagnética poderia prever a irreversibilidade, algo que a mecânica havia falhado em fornecer, duas circunstâncias contribuíram para que seus esforços o levassem para uma inesperada direção: a primeira delas foi a edição da obra de Gustav Kirchhoff sobre o calor, que forçaram Planck a se familiarizar com o formalismo matemático da teoria cinética, e a segunda foi a crítica de Boltzmann sobre detalhes técnicos de sua derivação de irreversibilidade a partir da teoria de radiação. Como resultado, Planck incluiu em sua teoria um postulado de desordem fundamental, e em 1899 formulou um “teorema  $H$ ” para a radiação análogo ao original para gases.

Planck esperava que o estudo da relação entre a entropia e energia em um sistema radiativo era a chave para se obter uma fórmula para a distribuição de frequências observada para um corpo negro, problema de grande interesse na época, após sua introdução por Gustav

Robert Kirchhoff (1824-1888). Em 1900, Planck apresentaria a fórmula para a distribuição de frequências para a radiação em um corpo negro, que levaria diretamente à introdução da hipótese quântica. (Já abordamos como Ehrenfest iria criar a “catástrofe do ultravioleta” para justificar esta distribuição e sepultar a distribuição clássica de Rayleigh-Jeans.)

Dessa forma, através da aplicação de métodos estatísticos no estudo do corpo negro, Planck introduz uma “nova Física”, que desencadearia nos anos seguintes uma profunda revolução filosófica e conceitual, resultando na chamada Segunda Revolução Científica. Entretanto, Planck jamais abandonaria a crença no determinismo, pois acreditava que a investigação científica só seria possível se o determinismo absoluto fosse considerado a priori. Mesmo após a introdução do princípio da incerteza de Heisenberg e da mecânica quântica de Schrödinger, Planck defenderia que a Física Quântica era sim determinista.

Por volta de 1900, a principal discussão filosófica da época era fruto da incompatibilidade entre a termodinâmica, cujas equações apontavam para a irreversibilidade, e o mecanicismo, cujas equações de movimento eram reversíveis, segundo a teoria de Newton. O tratamento definitivo do assunto foi dado pelo casal Ehrenfest (Paul e Tatiana), em um artigo de revisão em 1911, onde afirmam que os postulados do determinismo seriam válidos apenas para os estados macroscópicos (visíveis) do sistema, enquanto para os fenômenos microscópicos, o determinismo estrito não seria mais válido. Esse era o caso por exemplo do movimento browniano.

A observação do movimento errático de partículas de pólen na superfície de um líquido feita por Robert Brown (1773-1858) em 1828, fomentou por muitos anos a discussão do indeterminismo a nível molecular, pois não parecia ser possível prever o comportamento da partícula em contato com as vizinhanças do fluido sujeitas a intensa agitação térmica molecular. Entretanto, em 1905 o jovem físico judeu Albert Einstein (1879-1955) apresentaria uma teoria quantitativa do movimento browniano em sua tese de doutorado, considerada um marco na história da Física Estatística. Einstein utilizou uma abordagem atomística para tratar o problema, e mostrou que as *flutuações* causadas pelos choques das partículas do fluido produziam um efeito observável e mensurável. Alguns anos mais tarde, Jean Perrin confirmaria as previsões quantitativas de Einstein, o que se tornaria a mais forte evidência de que a matéria seria constituída realmente por átomos.

De fato, três trabalhos publicados por Einstein no ano de 1905 seriam considerados verdadeiros pilares para o desenvolvimento posterior da Física Quântica e da Mecânica Estatística, e contribuíram decisivamente para o fim do domínio do mecanicismo na ciência em geral: a já citada tese de doutorado, publicada no *Annalen der Physik*, onde utiliza o movimento browniano para derivar a constante de Avogadro de três maneiras diferentes e mostra como o diâmetro das moléculas poderia ser calculado com auxílio de um microscópio óptico, como Perrin mais tarde faria; o artigo sobre o efeito fotoelétrico, onde propõe a hipótese do *quantum* para a luz; e a teoria da relatividade.

Nos dois primeiros artigos, é evidente a intenção de Einstein em utilizar métodos esta-

tísticos para tratar os problemas, e de fato, o autor escreveria ainda mais de quarenta artigos abordando a mecânica estatística, e originalmente todas as suas contribuições para a Física Quântica eram estatísticas. Até mesmo a hipótese do *quantum* de luz foi obtida através de argumentos estatísticos [133].

Einstein foi o primeiro a tratar o movimento browniano como um processo markoviano (de Andrei Andreievich Markov, em um processo markoviano a probabilidade de um dado estado não depende da história pregressa do sistema), estabelecendo uma ligação entre o deslocamento aleatório de uma partícula e a difusão de muitas partículas.

Tal como Planck, Einstein era um fervoroso defensor do determinismo (sua frase mais famosa, “*Deus não joga dados*”, expressa bem sua crença), porém o trabalho desses autores desempenhou um papel central na derrocada final do paradigma newtoniano-cartesiano. Apesar de modernamente associarmos apenas a teoria da relatividade com o fim da hegemonia da Física Clássica, durante a década de 1930 a Física Quântica também representava um grande desafio para os físicos. De fato, por ter seus fundamentos estabelecidos primeiramente, a teoria da relatividade serviu como modelo para o desenvolvimento da Física Quântica. Prova disso é o enunciado do princípio de incerteza de Heisenberg, onde o autor compara a impossibilidade de se falar de simultaneidade entre eventos diferentes, localizados a grandes distâncias do observador, com a impossibilidade de se obter simultaneamente a posição e velocidade de uma partícula com precisão, em escalas muito pequenas de observação.

Em 1916, Einstein escreveria um outro artigo onde deriva a distribuição de Planck para a radiação de corpo negro considerando a possibilidade de emissão estimulada e *espontânea* de radiação; esse artigo é considerado como a emancipação final da Física Quântica em relação a Mecânica Clássica, e alguns anos mais tarde, Max Born afirmaria que a derivação de Einstein era um passo decisivo em direção ao indeterminismo.

Max Born, ao lado de Niels Bohr, Erwin Schorødinger e Werner Heisenberg, foram os responsáveis pela *interpretação de Copenhagem*, que propunha uma interpretação probabilística para as leis da natureza, em oposição a visão determinista defendida por Einstein e Planck. Esses autores são também os responsáveis pela fundação da Mecânica Quântica em 1926, considerada a disciplina mais bem sucedida da Física até hoje.

Esperamos ter demonstrado o papel fundamental da Física Estatística no desenvolvimento da Física Quântica, durante o período associado à Segunda Revolução científica. Entretanto, o fruto principal da Mecânica Estatística não está relacionado ao *quantum*, mas sim à teoria de transições de fase, que iremos abordar na próxima seção.

### A.3 O Apogeu da Mecânica Estatística e o Limiar da Teoria do Crescimento Fractal

Segundo Brush [25], as três principais contribuições filosóficas da Termodinâmica e da Mecânica Estatística foram: o conceito de irreversibilidade, advindo da 2ª Lei da Termodinâmica; o reducionismo, oriundo da Teoria Cinética dos Gases que foi capaz de prever o comportamento de quantidades macroscópicas de um gás reduzindo-o a um modelo teórico microscópico; e o indeterminismo, incorporado pela adoção de uma lei probabilística para a descrição da realidade, no lugar da lei determinística clássica.

Entretanto, a partir da segunda metade do século XX, uma nova fronteira surgiu dentro da disciplina - o estudo do Caos e dos Fractais - cujas implicações filosóficas podem ser ainda mais profundas do que as já citadas. A origem destas novas disciplinas pode ser associada ao desenvolvimento dos conceitos de leis de escala e universalidade, que ocorreu a partir da década de 1960, e que modificou definitivamente o curso da Mecânica Estatística.

Para podermos compreender como estas novas abordagens surgiram dentro da teoria, necessitamos retroceder até os primórdios da teoria de transições de fase, no século XIX, onde verificaremos o papel fundamental da Física Estatística para o desenvolvimento do tema. De fato, poucos trabalhos abordaram o comportamento de sistemas na região de criticalidade. O primeiro estudo formal de uma transição de fases foi apresentado por Clausius em 1850, a equação de Clausius-Clapeyron para a transição sólido-líquido,  $\frac{dp}{dt} = \mathcal{L}/T(V_L - V_S)$ , onde  $\mathcal{L}$  é o calor latente de solidificação. A primeira teoria capaz de descrever com detalhes o comportamento crítico foi a teoria de van der Waals.

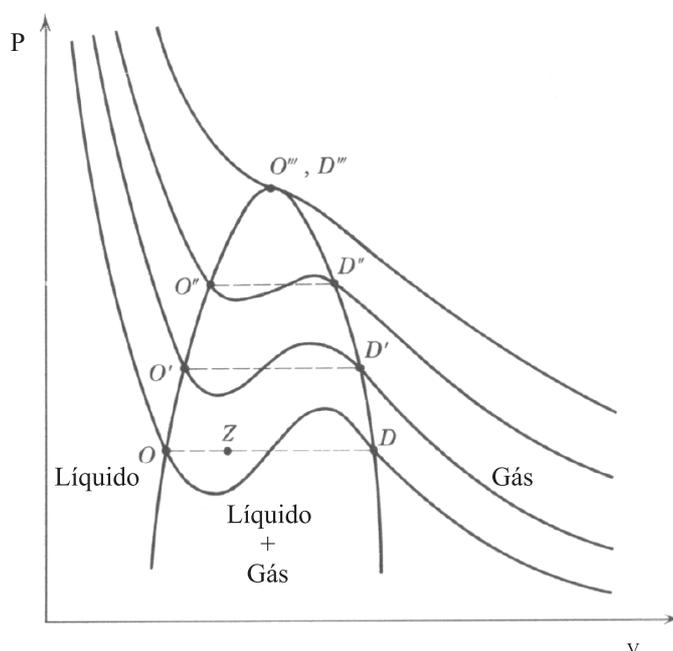
#### A Teoria de Van der Waals e o Ponto Crítico

Vimos na seção anterior que todos os resultados fornecidos pela teoria cinética se restringem a descrição de gases ideais; a primeira tentativa de se descrever o comportamento de gases reais foi feita pelo físico alemão Johannes Diderik van der Waals (1837-1923), que obteve um grande sucesso ao conseguir descrever transições de fase apenas introduzindo duas correções na lei dos gases ideais. Basicamente, as modificações propostas por van der Waals foram as seguintes: uma constante  $b$ , proporcional ao diâmetro das moléculas, que implicaria em uma redução do volume total do gás,  $(V - b)$ ; uma constante  $a$ , relacionada a queda de pressão exercida pelo gás devido a presença de forças intermoleculares atrativas de longo alcance (resultado fornecido pela experiência de Joule-Thompson), de modo que haveria uma correção na pressão aplicada,  $P + a/v^2$ . Dessa forma, podemos escrever a equação de van der Waals como,

$$\left(P + \left(\frac{a}{v^2}\right)\right) (v - b) = RT ,$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes características de cada gás.

A equação de van der Waals é capaz de descrever o comportamento de um sistema gasoso próximo à transição de fases - na criticalidade. O ponto crítico é definido como os valores de  $T$  e  $P$  para os quais a distinção entre as fases líquida e gasosa desaparecem, e foi descoberto por Cagniard de la Tour, um físico francês, em 1822. Em 1863, T. Andrews demonstrou que uma substância no estado supercrítico passa continuamente da fase líquida para gasosa, considerando-se variações apropriadas de  $T$  e  $P$ . Finalmente, em 1873 van der Waals apresenta sua teoria, desenvolvida especificamente para satisfazer as observações de Andrews.



**Figura A.1:** Diagrama de fluidos na teoria de van der Waals. A construção de Maxwell também é mostrada, conectando os pontos  $O$  e  $D$ .

A transição de fases na região subcrítica (abaixo de  $T_c = 8a/27bR$ ) é acompanhada por uma variação abrupta no volume do sistema, como mostrado na Figura A.1. Entretanto, a solução da equação de van der Waals nessa região possui três raízes reais, tal como esboçado na figura, que demonstra que o sistema pode passar continuamente de uma fase a outra mesmo na região subcrítica. Nesse caso, o caminho da transição passa pelos estados *meta-estáveis* do sistema, de tal modo que podemos traçar a linha de transição  $OD$  de modo que as áreas abaixo e acima desta linha possuem áreas iguais; esta é a chamada de “construção de Maxwell”.

A teoria de van der Waals foi a primeira explicação bem sucedida para as transições de fase e demonstrou a robustez da abordagem atomística. Seu trabalho estimulou diversos

trabalhos de pesquisa na área de fenômenos críticos, mas não obteve o reconhecimento imediato de toda a classe científica, devido a forte oposição enfrentada pela teoria atomística. A principal importância dessa teoria foi demonstrar que mudanças macroscópicas qualitativas em um sistema poderiam ser previstas por mudanças quantitativas no nível microscópico, o que reforçou a utilização de teorias cinéticas para a descrição da natureza.

A teoria de van der Waals previa um comportamento singular do parâmetro de ordem no ponto crítico,  $\rho_L - \rho_G = (T_c - T)^\beta$ , onde o lado esquerdo corresponde a diferença de densidades entre as fases líquida e gasosa,  $T_c$  é a temperatura crítica e  $\beta$  é o expoente crítico associado à divergência do parâmetro de ordem. Na teoria de van der Waals,  $\beta = 1/2$ , enquanto a maioria dos experimentos apontam para  $\beta \sim 1/3$ .

### Teoria de Curie-Weiss para o Magnetismo

Apesar de ser conhecido desde a antiguidade na China e descrito por Gilbert na sua obra *De Magnete* em 1600, o fenômeno do magnetismo não era associado a nenhuma transição de fase. Foi John Hopkinson em 1859 quem primeiro sugeriu que o magnetismo dos materiais deveria desaparecer acima de uma temperatura crítica,  $T_c$ , mas o primeiro trabalho criterioso sobre o tema foi a dissertação de Pierre Curie em 1895, onde o autor diferencia três tipos de efeitos magnéticos: o *ferromagnetismo*, observado em materiais como o ferro, que permanecem magnetizados mesmo na ausência de um campo externo e possuem uma temperatura crítica (“temperatura de Curie”); os materiais que apresentam *paramagnetismo* possuem uma fraca magnetização com o campo externo, que desaparece se o campo for retirado. A susceptibilidade (para)magnética desses materiais decresce com a temperatura; no *diamagnetismo* os materiais apresentam uma magnetização fraca no sentido *oposto* ao campo aplicado, e cujo efeito é independente da temperatura. Curie propôs ainda a analogia entre sistemas magnéticos e fluídos, observando que o comportamento de campo aplicado em função da temperatura é análogo ao comportamento da densidade do fluído em função da temperatura.

A primeira abordagem analítica para o fenômeno foi a teoria do campo molecular, apresentada por Pierre Weiss a partir de um trabalho de Paul Langevin. Em 1905, Langevin utilizou a Mecânica Estatística para tratar um gás de moléculas que possuem momentos de dipolo permanentes e mostrou que, para altas temperaturas e pequenos campos aplicados, o sistema apresenta um paramagnetismo inversamente proporcional a temperatura, exatamente como os resultados experimentais de Curie apontavam. Em 1907, Weiss introduziu um campo molecular proporcional a magnetização na teoria de Langevin; dessa forma, o sistema poderia apresentar magnetização espontânea.

Na criticalidade, o modelo molecular de Curie-Weiss apresenta o mesmo comportamento de escala da teoria de van der Waals, com expoentes críticos idênticos. Em particular, o expoente associado ao parâmetro de ordem do sistema (magnetização espontânea,  $m$ ),  $m \sim (T_c - T)^\beta$  é igual a  $1/2$ , de modo que essas teorias são chamadas de aproximações

de campo médio, para a magnetização e para fluídos respectivamente.

O primeiro modelo microscópico capaz de prever corretamente o comportamento dos sistemas na criticalidade foi o modelo de Ising, mas o caminho para que ele fosse devidamente reconhecido foi tortuoso.

## O modelo de Ising

Como o próprio autor afirma em seu artigo de 1925, o modelo foi originalmente proposto por Wilhelm Lenz, então orientador de Ernst Ising na universidade de Hamburgo. Definido sobre uma rede regular com  $N$  sítios, o modelo consiste em assumir que em cada sítio há uma variável  $\sigma_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) que pode ocupar dois estados. (Originalmente o modelo foi proposto para sistemas magnéticos, então a variável em questão era o *spin* de cada molécula, e que poderia ter duas orientações: para cima,  $\sigma_i = 1$ , ou para baixo,  $\sigma_i = -1$ ). Para cada uma das  $2^N$  configurações do sistema pode-se associar uma energia, escrita na forma de um hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J\sigma_i\sigma_j + \mu H \sum_i \sigma_i ,$$

onde  $J$  é a constante de acoplamento,  $H$  o campo externo,  $\mu$  o momento orbital e a primeira soma é feita sobre todos os primeiros vizinhos do sítio  $i$ . Para materiais magnéticos, a constante de acoplamento positiva é associada a materiais ferro- e paramagnéticos, enquanto para materiais diamagnéticos  $J < 0$ .

Ising mostrou no seu artigo que em uma dimensão o modelo não apresenta transição de fase para a magnetização espontânea, e conjectura que o mesmo deveria ser válido em dimensões maiores; desapontado, ele abandona o modelo. Anos mais tarde, Heisenberg apresentaria seu modelo de magnetização, onde explorava interações mais complicadas entre os spins, já que “Ising obteve sucesso em mostrar que a hipótese de forças suficientemente fortes e direcionadas entre dois átomos vizinhos também não é suficiente para explicar o ferromagnetismo.” Dessa forma, o modelo de Heisenberg, mais complexo, foi explorado antes do modelo de Ising, mais simples.

O conceito do modelo de Ising como um objeto matemático independente foi apresentado pela primeira vez por R. H. Fowler em 1935, no contexto de transições de ordem/desordem em ligas metálicas. Em 1936, R. Peierls publicaria um artigo com o título “Sobre o Modelo de Ising para o Ferromagnetismo”, onde demonstra a equivalência entre o modelo de Ising para o magnetismo, a teoria de Hans Bethe para as transições ordem/desordem em ligas metálicas e o trabalho de Fowler e Peierls sobre isotermas de absorção. Peierls apresentou também um argumento simples mostrando que, ao contrário do argumento de Ising, o modelo deveria apresentar transições de fase em duas ou mais dimensões. O modelo de

Ising também é equivalente a um modelo de “gás de rede”, onde cada sítio pode estar ocupado ou vazio ( $\sigma_i = 1, 0$ ), ou para uma mistura binária entre duas espécies diferentes de moléculas ou átomos.

Uma verdadeira revolução, segundo Cyril Domb, aconteceria em 1942, quando Lars Onsager apresentou a solução exata do modelo de Ising em duas dimensões. Onsager demonstrou que o modelo apresentava uma transição de fase, e obteve os valores exatos para os principais expoentes críticos. A solução de Onsager representa o auge da Mecânica Estatística, pois pela primeira vez foi possível utilizar os métodos estatísticos para solucionar um modelo em um caso não trivial.

Apesar do sucesso da teoria, os argumentos de Onsager falhavam se aplicados em três dimensões, e até hoje não há uma solução exata para o modelo para  $d = 3$ . Diversas linhas de pesquisa foram propostas e executadas para se obter os valores dos expoentes críticos nesse caso, e a técnica mais usual é a aproximação em séries, apresentada por Domb em 1949 e desenvolvida mais tarde por Sykes, Michael Fisher, J. W. Essam, entre outros. De fato, os cálculos se tornaram tão sofisticados que foi possível obter numericamente as propriedades do modelo, com alto grau de precisão.

Com o desenvolvimento dos computadores a partir da segunda guerra mundial, surgiu uma nova abordagem para se estudar modelos que não possuem solução analítica: a *simulação*. Refletindo a dualidade que permeou a ciência até meados do século XX, duas abordagens foram desenvolvidas: a *dinâmica molecular*, que calcula diretamente as posições e velocidades das partículas do sistema estudado utilizando as equações clássicas (ou quânticas) de movimento, e o *método de Monte Carlo*, que utiliza métodos estatísticos para simular a distribuição de probabilidades para as transições entre estados diferentes.

Berni Adler e Thomas Wainwright introduziram a dinâmica molecular em 1957 para simular o comportamento de um sistema clássico de esferas duras que só interagem por colisões, considerando até 100 partículas. Para evitar efeitos superficiais devido ao tamanho limitado dos sistemas, os autores introduziram condições periódicas de contorno, de modo que as paredes do volume não eram mais refletoras, mas transladavam as partículas para o lado oposto do sistema. Apesar do reduzido número de partículas considerado em relação ao número usualmente encontrado em sistemas reais ( $\sim 10^{19}$  partículas por  $cm^3$ ), os autores mostraram que havia uma transição de fases análoga a transição sólido-líquido para fluídos, que passou a ser conhecida como transição de fase de “esferas duras”. Com o surpreendente avanço das memórias dos computadores modernos, o método tem sido utilizado para um número cada vez maior de partículas, chegando até  $\sim 10^{10}$  partículas nas simulações mais recentes.

## Em Direção a Universalidade

Apesar do “tour-de-force” da solução de Onsager, o modelo de Ising não despertou muito interesse até 1961, ano em que George Baker demonstrou como a técnica matemática inventada por Henri Padé em 1891 poderia ser utilizada para determinar as singularidades no ponto crítico a partir dos termos conhecidos na expansão em séries do modelo, e obteve que a magnetização espontânea no modelo de Ising em três dimensões divergia com  $m \sim (T_c - T)^\beta$ , onde  $\beta \sim 0.3$ . Mais tarde, no grupo de pesquisa de Domb no Kings College onde se concentrava o estudo de expansões em séries, Essam e Fisher propoeriam que  $\beta = 5/16$ , valor que concordava com vários experimentos. Os autores argumentaram então que as propriedades dos sistemas na criticalidade seriam universais, dependendo apenas de poucos fatores, como a dimensionalidade do sistema e a estatística das partículas, e não dos detalhes específicos de cada modelo. Esse argumento estimulou bastante o estudo do modelo de Ising, pois, a despeito de sua simplicidade, as conclusões para o comportamento do sistema na criticalidade poderia ser também estendida a todos os sistemas conexos, como o modelo de gás de rede, sistemas magnéticos e fluídos, etc.

Por volta de 1965, o modelo de Ising era visto como o tratamento mais bem sucedido para prever o comportamento de sistemas físicos no ponto crítico do que outros modelos que tentavam ser mais “verossímeis”. A facilidade computacional para se implementar modelos definidos em uma rede fez com que cada vez mais o interesse nestes modelos crescesse cada vez mais.

O trabalho de Benjamin Widom, apresentado em 1965, tentava conciliar os resultados obtidos para o modelo de Ising com a teoria de van der Waals. Widom propôs que, em um subvolume  $v = \xi^s$  ( $\xi$  é o comprimento de correlação e  $s$  é a dimensionalidade) de um fluído homogêneo em equilíbrio com sua fase conjugada. Se a energia associada a uma flutuação for proporcional a  $k_B T$ , Widom mostrou como os expoentes críticos podem ser derivados (mostramos o procedimento na seção 1.5).

As idéias de Widom foram utilizadas por Leo P. Kadanoff, em 1966, como base para “leis de escala” (*scaling laws*) universais que deveriam ser válidas na criticalidade. Considerando uma célula da rede com extensão linear  $L$ , no ponto crítico ( $T \sim T_c$ ),  $\xi \gg L$ ; logo, é razoável supor que todos os spins dentro desta célula estejam correlacionados. Kadanoff propôs então que toda a célula poderia ser substituída por um único spin, em uma rede reescalada por um fator de  $1/L$ , e assim sucessivamente. Essa “invariância por escala” do sistema na criticalidade tornou-se uma das características mais marcantes das transições de fases. Analisando os efeitos de escala produzidos por sua transformação, Kadanoff obteve relações funcionais definidas a partir das quais pôde derivar relações entre os expoentes críticos (também mostramos esta bordagem na seção 1.5)

Em 1971, Kenneth Wilson apresentou uma análise matemática das leis de escala de Kadanoff usando técnicas análogas as usadas por Gell-Mann e Low, e Stueckelberg Peter-

mann em eletrodinâmica quântica, criando o “grupo de renormalização”, que se tornou uma das técnicas mais utilizadas em Mecânica Estatística, tanto no equilíbrio como fora dele. No ano seguinte, Wilson e M. Fischer mostraram como o modelo de Ising poderia ser generalizado em  $d$  dimensões, evidenciando uma transição contínua entre o comportamento clássico (tal como previsto pela teoria de van der Waals) e não clássico (como na solução de Onsager). Os autores associaram o comportamento não-clássico à divergência do comprimento de correlação no ponto crítico, quando o sistema é dominado por correlações de longo alcance. Wilson e Fisher introduziram uma dimensionalidade contínua,  $\epsilon = 4 - \epsilon$ , e mostraram que para  $\epsilon \geq 4$  o comprimento de correlação não diverge e os expoentes clássicos são obtidos. Através de expansões perturbativas, os autores obtiveram os expoentes críticos como uma série de potências em função de  $\epsilon$ , que convergiam mesmo para  $\epsilon > 1$ , o que permitiu se obter os expoentes a partir de uma teoria geral. Para o modelo de Ising em  $d = 3$ , a “expansão  $\epsilon$ ” prevê valores para os expoentes críticos com precisão até a quarta casa decimal, o que demonstra a robustez do grupo de renormalização.

Uma última generalização do modelo foi feita pelo grupo de H. E. Stanley, considerando a dimensionalidade do spin,  $d_\sigma$ , no modelo de Ising. No modelo de Ising original  $d_\sigma = 1$ , enquanto no modelo de Heisenberg  $d_\sigma = 3$ , enquanto  $d_\sigma \rightarrow \infty$  equivale ao modelo esférico, e os expoentes clássicos são novamente obtidos.

A partir de então, um número cada vez maior de artigos científicos apresentam estudos sobre transições de fase, criticalidade e universalidade em diversos sistemas, com abordagens experimentais, analíticas (grupo de renormalização) e simulacionais (método de monte Carlo). As características marcantes no ponto crítico também estimulou estudos sobre a geometria dos sistemas na transição, o que levou Benoit Mandelbrot a uma das descobertas mais extraordinárias da história da ciência: a Geometria Fractal, na qual a invariância por escala - ou autosimilaridade - emerge de maneira natural.

## A Teoria do Crescimento Fractal

Desde a publicação da singular obra de Benoit Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* [108], um novo paradigma vem se estabelecendo na Ciência: a concepção fractal da natureza. Diametralmente oposta ao paradigma determinista newtoniano-cartesiano, cujo reducionismo alavancou o conhecimento científico nos séculos anteriores, esta concepção é intrinsecamente interdisciplinar, e suas aplicações estendem-se por quase todo espectro do conhecimento humano: matemática [51, 56, 108], física [18, 13, 36, 109, 140], química [79, 117, 157], computação [183, 185], astrofísica [34, 110, 145], geologia [147], biologia [28, 87, 176], medicina [58, 76], bioquímica [5, 30], ecologia [59, 103, 177], economia [112, 161], geografia [60], ciências sociais [65, 66], artes [24, 50, 154], etc.

Essa mudança de paradigma de fato não se dá por uma ruptura radical; paralelamente, em diferentes áreas do conhecimento surgem enfoques inovadores empregando os novos

conceitos da Teoria do Caos e da Geometria Fractal, e que, paulatinamente, contribuem para a formação de um novo arcabouço científico. Exemplo notório deste processo, e que será a principal motivação deste trabalho, é o desenvolvimento da Teoria do Crescimento Fractal.

Historicamente, podemos remontar os primórdios desta Teoria aos trabalhos de Vold [174] e Eden [47], que foram os primeiros a simular uma dinâmica de crescimento capaz de descrever superfícies observadas no cotidiano - a formação de uma colônia de células e a sedimentação em um sistema coloidal, respectivamente. Apesar da caracterização correta das superfícies obtidas - o termo "*fractal*" só surgiria cerca de duas décadas depois com a obra de Mandelbrot [107] - estes trabalhos continham em sua essência o objetivo almejado por todos os outros estudos que lhes sucederam: conhecer o mecanismo responsável pela formação de estruturas complexas, tais como as que encontramos diariamente na observação da natureza. Neste ponto vale destacar a importância crucial da invenção do computador para este ramo da Ciência, já que ambos os trabalhos utilizaram simulações para corroborar as hipóteses teóricas levantadas. Particularmente no trabalho de Eden, o computador permitiu um enriquecimento significativo do estudo devido à possibilidade de visualização das superfícies simuladas, conceito que foi incorporado definitivamente nos trabalhos posteriores. A possibilidade de se utilizar computadores para estudar problemas complexos criou uma nova ênfase na Ciência, e em particular na Física: a Simulação, que ao lado da Teoria e do Experimento, forma o tripé que sustenta a Teoria do Crescimento Fractal. Atualmente, existe uma quarta ênfase incipiente, defendida principalmente por D. P. Landau, que é a Visualização. Intrinsecamente computacional, esta ênfase é essencial no tratamento de sistemas complexos, onde a análise pura dos dados e das grandezas obtidas não é suficiente para abstrair a dinâmica dos processos, e somente através da Visualização é possível colmatar as lacunas deixadas pelas outras três ênfases.

A primeira abordagem teórica que obteve êxito no tratamento de um problema relacionado à dinâmica de crescimento aleatório de superfícies foi apresentada por Hammersley [72], que estudou a distribuição da orientação de grãos em um material policristalino. O autor foi capaz, utilizando uma formulação do problema análoga a um autômato celular estocástico, de prever corretamente os expoentes críticos associados às flutuações das alturas nos domínios. Entretanto, o formalismo matemático utilizado é consideravelmente diferente do atualmente utilizado, o que era de se esperar. Somente quinze anos depois, Edwards e Wilkinson [48] apresentaram uma formulação teórica simples capaz de descrever um problema análogo ao tratado por Hammersley. Utilizando sedimentação de materiais granulares como protótipo, os autores desenvolveram pioneiramente uma equação diferencial contínua para a dinâmica temporal de uma interface rugosa. Esta equação, conhecida como equação EW, está associada a uma classe de universalidade - classe EW - e, por ser linear, pode ser resolvida analiticamente, fornecendo os expoentes críticos em qualquer dimensão.

O sucesso de Edwards e Wilkinson na formulação de uma equação de Langevin para a descrição do crescimento de interfaces rugosas motivou uma série de estudos analíticos, tanto para a determinação de novas classes de universalidade quanto para a formulação de novos modelos teóricos. Um dos principais trabalhos nesta fase, desenvolvido independentemente do modelo EW, foi a introdução do escalonamento dinâmico feita por Family e Vicsék [53]: esta técnica se tornou a abordagem padrão tanto para a avaliação dos resultados numéricos quanto para a construção de teorias analíticas no estudo do crescimento de superfícies. No artigo, os autores tratam pela primeira vez o desenvolvimento de interfaces marginalmente estáveis, que é largamente utilizado hoje no estudo de interfaces fractais auto-afins, e introduzem dois expoentes de escala não-triviais, correspondendo respectivamente às escalas espacial e temporal do crescimento de superfícies. Além disso, propuseram uma forma de escala que incorpora o comportamento complexo das flutuações da interface em uma expressão simples entre a rugosidade da superfície, o tempo e o tamanho do sistema.

Deste modo, a combinação de uma equação de Langevin para descrever a evolução temporal das interfaces com o escalonamento dinâmico para o tratamento dos dados numéricos permitiu o rápido desenvolvimento de estudos teóricos, modelos computacionais e trabalhos experimentais que estabeleceram as bases da Teoria do Crescimento Fractal. Entre as centenas de trabalhos deste período, um merece especial destaque devido à sua forte influência nos estudos subsequentes sobre o escalonamento dinâmico de superfícies: o artigo de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ) [88] apresenta uma abordagem original que obteve êxito na construção de uma equação contínua para descrever a dinâmica de crescimento de superfícies. Através de um elegante argumento físico, KPZ introduziram um termo não-linear à equação EW, implicando em uma contribuição não-linear à velocidade da superfície. Através do grupo de renormalização, KPZ encontraram os expoentes críticos em uma dimensão; para dimensões superiores, ainda não há solução para esta equação e até hoje é controversa a existência de uma dimensão crítica para ela. A equação KPZ pertence a uma nova classe de universalidade e os expoentes críticos obtidos em  $d = 1 + 1$  apresentaram excelente concordância com os resultados numéricos. O trabalho de KPZ representa um dos raros exemplos na Física de fenômenos fora do equilíbrio onde uma equação contínua pode ser proposta e solucionada exatamente em um caso não trivial.

Seguiram-se a estes trabalhos pioneiros uma infinidade de artigos teóricos, simulacionais e experimentais, como por exemplo os abordados no livro de Family e Vicsek [54], ou no livro de Meakin [117], e se observa com muita frequência a combinação de mais de uma abordagem em um mesmo trabalho. Entre os principais temas dos trabalhos cuja motivação principal é o experimento estão: propagação de uma fronteira em meio desordenado [3, 7, 26], interfaces entre líquidos imiscíveis [84, 146, 170], crescimento de filmes finos [13], linhas de ruptura em papel [120], crescimento de bactérias [171], etc; entre os artigos teóricos, a maioria aborda principalmente variações da equação de crescimento [4, 181] e métodos do grupo de renormalização [13, 179]. Já os trabalhos simulacionais apresentam uma gama diversa de abordagens: desde modelos de crescimento fora do

equilíbrio [117, 156], passando por modelos na classe da percolação direcionada [4, 46, 155], até modelos em áreas bem mais inovadoras como modelos para solos [12], modelos de morfogênese [31], modelos para crescimento de tumores [58], fraturas [119] e modelos biologicamente motivados [20, 136].

Uma outra classe de modelos, intrinsecamente computacionais, surgiu na década de 1980 e obteve um grande sucesso em criar sistemas complexos que exibem comportamento auto-organizado: os autômatos celulares [183]. Como o nome sugere, esses modelos possuem uma dinâmica variada, dependendo das regras locais a que estão submetidos. Uma variação desta classe de modelos foi proposta por Domany e Kinzel [46] considerando a possibilidade de regras locais probabilísticas, e que deu origem aos autômatos celulares estocásticos. Esta nova classe de modelos se mostrou bastante útil na compreensão de processos fora do equilíbrio, tornando-se um modelo padrão para o estudo desses processos.

# Apêndice B

---

## Transições de Fase e Fenômenos Críticos

Neste apêndice, apresentamos o contexto termodinâmico de equilíbrio associado às transições de fase e aos fenômenos críticos. Esse apêndice está dividido em várias seções: começando pela revisão das relações matemáticas mais importantes e a conceituação precisa dos expoentes críticos, faremos um estudo das principais teorias clássicas de transições de fase, generalizadas pela teoria fenomenológica de Landau. O principal modelo da mecânica estatística do equilíbrio, o modelo de Lenz-Ising-Onsager, será abordado na sequência. Os principais resultados desse modelo motivaram o desenvolvimento da teoria de escala e do grupo de renormalização, tema da última seção, onde serão introduzidos os inovadores conceitos de invariância por escala e universalidade.

A estrutura da termodinâmica parecia estar bem fundamentada até meados do século XIX, a menos de um incômodo detalhe: a divergência de algumas propriedades dos sistemas na vizinhança de seus pontos críticos. Como veremos, o formalismo clássico previa corretamente que várias “susceptibilidades generalizadas” (capacidade térmica, compressibilidade, etc.) deveriam divergir na criticalidade. Entretanto, a forma analítica das divergências nos experimentos contrariavam a previsão clássica, e várias outras particularidades da criticalidade permaneciam inexplicadas, como por exemplo, a opalescência crítica dos fluidos. Este foi o tema do trabalho de T. Andrews em 1869, onde o autor atribuiu corretamente o efeito a enormes flutuações na densidade do fluido no ponto crítico. Mais tarde, Ornstein e Zernike previram a forma da divergência crítica das flutuações, mas ainda sem boa concordância com os experimentos, e somente com o modelo de Ising em três dimensões é que estimativas precisas ajustaram-se aos fenômenos observados.

O estudo formal das transições de fase iniciou-se com a tese de doutorado de van der Waals, em 1873, onde pela primeira vez um formalismo teórico foi capaz de descrever mudanças de fase em sistemas fluidos. Desde então, vários estudos apontaram sistemas que apresentam transições de fase, como materiais magnéticos, ligas metálicas, fluidos simples e misturas binárias, supercondutores, cristais líquidos, etc. Nesse ínterim, cabe ressaltar o trabalho de Kammerling Onnes, notável físico experimental que descobriu não

só a supercondutividade, mas também a superfluidade do  $He$  líquido abaixo de 2.2 K; esta transição, conhecida por “transição  $\lambda$  do  $He^4$ ”, seria mais tarde associada à condensação de Bose-Einstein, e pela primeira vez efeitos quânticos eram revelados por uma transição de fase macroscópica.

Uma característica comum a todos esses sistemas é a presença de divergências assintóticas em grandezas termodinâmicas na criticalidade, e que são caracterizadas por uma coleção de *expoentes críticos*; além disso, uma quantidade denominada como *parâmetro de ordem* do sistema, proposta por L.D. Landau, apresenta a propriedade de ser nula na região de altas temperaturas enquanto na região de baixas temperaturas é diferente de zero. Mais tarde, tanto experimentos como resultados teóricos apontaram para a existência de classes de universalidade para os expoentes críticos, as quais dependeriam apenas de pouquíssimos parâmetros, como a dimensionalidade do sistema ou do parâmetro de ordem.

Pode-se dividir as teorias das transições de fase em dois períodos: a era Clássica, emblematizada pela teoria fenomenológica de Landau, e a era Moderna. A fase Clássica iniciou-se com o trabalho de van der Waals para fluidos, e engloba, além da teoria clássica de Landau, a teoria de Curie-Weiss para sistemas magnéticos e a teoria de Ornstein-Zernike para a função correlação de pares. Apesar de alguma controvérsia [158], a era Moderna tem como marco inicial a solução de Onsager para o modelo de Ising bidimensional, em 1944, a primeira solução rigorosa da mecânica estatística para um modelo não trivial. Outro trabalho marcante deste período, mas de menor monta, foi apresentado por E. A. Guggenheim em 1945, estabelecendo a “lei dos estados correspondentes” que mostra um comportamento universal para diversos fluidos.

Porém, a maioria dos autores concorda que a consolidação da era Moderna só veio a partir da década de 1960, com o trabalho de vários pesquisadores tais como L.P. Kadanoff, M. Fisher, C. Domb, B. Widom, entre outros. Desde então, novas técnicas permitiram um estudo mais detalhado da criticalidade, estabelecendo leis de escala e classes de universalidade para os expoentes críticos, em um movimento que culminou com o grupo de renormalização, proposto por K. Wilson na década de 70 [179]. Essa nova abordagem apresentou uma justificativa para as leis de escala e para o caráter universal dos expoentes críticos, além de fornecer um esquema geral para se obter seus valores, e continua sendo aplicada extensivamente em diversos sistemas [102].

Entretanto, antes mesmo de começarmos a tratar das Teorias Clássicas, é necessário que se faça uma revisão de algumas relações termodinâmicas úteis, além de uma melhor conceituação do termo *criticalidade* e uma caracterização mais detalhada do comportamento dos sistemas dentro desta região. Esses serão os objetivos das próximas seções.

## B.1 Relações Termodinâmicas

Nesta seção revisaremos algumas relações termodinâmicas úteis para o estudo de sistemas magnéticos. *Sistemas simples* são definidos como sistemas macroscopicamente homogêneos, isotrópicos, descarregados, quimicamente inertes e suficientemente grandes. Tais sistemas, no equilíbrio, obedecem uma equação fundamental da forma

$$U = U(S, V, N_1, N_2, \dots, N_r) ,$$

onde  $U$  representa a energia livre do sistema; se chamarmos a entropia de  $X_0$ , o volume de  $X_1$ , o número de partículas  $X_2$  e assim sucessivamente, podemos reescrever a equação anterior na forma simétrica  $U = U(X_0, X_1, X_2, \dots, X_t)$ . Assim,  $X_t$  representa um parâmetro extensivo do sistema em questão, podendo inclusive representar parâmetros magnéticos, elétricos ou elásticos, estendendo o formalismo também a sistemas não tão simples.

Utilizando os postulados da termodinâmica de equilíbrio [29, 150], pode-se escrever a 1ª Lei da Termodinâmica na sua forma diferencial,

$$dU = T dS + \sum_{k=1}^t P_k dX_k = \sum_{k=0}^t P_k dX_k , \quad (\text{B.1})$$

na qual os parâmetros intensivos são definidos por

$$P_k = \frac{\partial U}{\partial X_k} . \quad (\text{B.2})$$

O termo  $TdS$  corresponde ao fluxo de calor para o sistema em consideração e  $\sum_1^t P_k dX_k$  ao trabalho exercido pelo mesmo. A relação funcional que associa os parâmetros extensivos aos intensivos é chamada de *equação de estado*. Seguem-se da propriedade de homogeneidade em primeira ordem, a equação de Euler,

$$U = \sum_0^t P_k X_k , \quad (\text{B.3})$$

e a relação de Gibbs-Duhem,

$$\sum_0^t X_k dP_k = 0 . \quad (\text{B.4})$$

Considerando agora o caso particular de um sistema magnético, onde a equação fundamental é da forma  $U = U(S, M, N)$ , a 1ª Lei da Termodinâmica se torna,

$$dU = TdS + HdM + \mu dN ,$$

e, portanto,

$$T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{M,N} ; \quad H = \left( \frac{\partial U}{\partial M} \right)_{S,N} ; \quad \mu = \left( \frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,M} , \quad (\text{B.5})$$

onde  $T$  é a temperatura absoluta,  $H$  o campo aplicado e  $\mu$  o potencial químico do sistema.

### Transformações de Legendre

Uma transformação de Legendre pode ser feita trocando-se  $(s + 1)$  variáveis extensivas  $X_0, \dots, X_s$  pelas variáveis intensivas  $P_0, \dots, P_s$  através da seguinte função,

$$U[P_0, \dots, P_s] = U - \sum_{k=0}^s P_k X_k , \quad (\text{B.6})$$

com  $s < t$ . As variáveis naturais dessa função são  $P_0, \dots, P_s$  e  $X_{s+1}, \dots, X_t$ , onde

$$\frac{\partial U[P_0, \dots, P_s]}{\partial P_k} = -X_k , \quad k = 0, 1, \dots, s , \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial U[P_0, \dots, P_s]}{\partial X_k} = P_k , \quad k = s + 1, \dots, t. \quad (\text{B.8})$$

Consequentemente,

$$dU[P_0, \dots, P_s] = \sum_0^s (-X_k) dP_k + \sum_{s+1}^t P_k dX_k . \quad (\text{B.9})$$

Através das transformações pode-se definir vários potenciais termodinâmicos; no caso de sistemas magnéticos, os de maior interesse são,

(i) a energia livre de Helmholtz,

$$A \equiv A(T, M, N) = U - TS . \quad (\text{B.10})$$

(ii) a energia livre de Gibbs,

$$G \equiv G(T, H, N) = U - TS - MH , \quad (\text{B.11})$$

Consequentemente,

$$dG = -S dT - M dH + \mu dN , \quad (\text{B.12})$$

$$dA = -S dT + H dM + \mu dN . \quad (\text{B.13})$$

e

$$-S = \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_{H,N} ; \quad -M = \left( \frac{\partial G}{\partial H} \right)_{T,N} ; \quad \mu = \left( \frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,H} ; \quad (\text{B.14})$$

$$-S = \left( \frac{\partial A}{\partial T} \right)_{M,N} ; \quad H = \left( \frac{\partial A}{\partial M} \right)_{T,N} ; \quad \mu = \left( \frac{\partial A}{\partial N} \right)_{T,M} ; \quad (\text{B.15})$$

### Relações de Maxwell

A partir da equação (B.9), podemos escrever as derivadas cruzadas do potencial  $U[P_0, \dots, P_s]$  como,

$$\frac{\partial X_j}{\partial P_k} = \frac{\partial X_k}{\partial P_j} , \quad j, k \leq s ; \quad (\text{B.16})$$

$$\frac{\partial X_j}{\partial X_k} = -\frac{\partial P_k}{\partial P_j} , \quad j \leq s, k > s ; \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{\partial P_j}{\partial X_k} = \frac{\partial P_k}{\partial X_j} , \quad j, k > s . \quad (\text{B.18})$$

Desse modo, utilizando as definições B.14 e B.15 é possível escrevermos várias relações de Maxwell (B.16) e (B.18) para sistemas magnéticos, como por exemplo,

$$\left( \frac{\partial S}{\partial H} \right)_{T,N} = \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_{H,N} , \quad (\text{B.19})$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_{T,M} = - \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{M,N} , \text{ etc.} \quad (\text{B.20})$$

## Funções Resposta

A partir das relações desenvolvidas até agora, podemos escrever algumas derivadas termodinâmicas que podem facilmente ser medidas experimentalmente, e portanto de interesse físico. Estas derivadas são conhecidas por *funções resposta*: para sistemas magnéticos, temos a capacidade térmica,  $C_x$ , que mede a variação de temperatura devido a um estímulo na forma de calor (com a grandeza  $x = H$  ou  $M$  mantida constante), e as susceptibilidades  $\chi_y$ , onde  $y = T$  ou  $S$ ), que mede a resposta do magnetização do sistema devido a estímulos externos. Essas funções resposta são definidas por,

$$C_H \equiv T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_H = -T \left( \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H ; \quad (\text{B.21})$$

$$C_M \equiv T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_M = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_M = -T \left( \frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M ; \quad (\text{B.22})$$

$$\chi_T \equiv \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left( \frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T ; \quad (\text{B.23})$$

$$\chi_S \equiv \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_S = - \left( \frac{\partial^2 E}{\partial H^2} \right)_S . \quad (\text{B.24})$$

Experimentalmente, observa-se que as funções resposta apresentam um comportamento anômalo na criticalidade. Esse comportamento singular levou Ehrenfest [158] a criar uma classificação para as transições de fase: transições de *primeira ordem* seriam aquelas onde a primeira derivada do potencial termodinâmico apropriado apresenta uma descontinuidade; nas transições de *segunda ordem*, a primeira derivada é contínua, mas a segunda derivada é descontínua ou infinita. De fato, essa classificação de Ehrenfest falha em alguns casos e há na literatura uma preferência em considerar o comportamento do sistema na região de criticalidade como o critério de classificação, uma vez que este é bastante distinto para cada um dos tipos de transição.

Enquanto nas transições de primeira ordem os dois estados termodinâmicos de equilíbrio (entre os quais a transição ocorre) situam-se em regiões separadas do espaço de configurações, nas transições de segunda ordem esses estados situam-se em regiões contíguas. Desse modo, uma transição de primeira ordem caracteriza-se pela mudança abrupta nas propriedades do sistema e pela presença de um calor latente, como na solidificação, vaporização e sublimação de fluidos, ou na transição da magnetização com o campo aplicado em sistemas magnéticos. Nessas transições também é possível observar a ocorrência de estados metaestáveis, que permitem o levantamento de curvas de histerese.

Já nas transições de segunda ordem a mudança nas propriedades do sistema são mais sutis; uma das características marcantes neste tipo de transição, é o comportamento do comprimento de correlação: fora da criticalidade, as correlações entre os elementos de um sistema de muitos corpos decaem exponencialmente com a distância entre os elementos,

sendo governadas por um pequeno comprimento de correlação (ordem de curto alcance); à medida que o sistema se aproxima da região crítica, o comprimento de correlação cresce monotonicamente até que, na criticalidade, o decaimento das correlações se torna muito mais lento (segundo uma lei de potência), sem nenhum comprimento característico (ordem de longo alcance). Esse comportamento é observado, por exemplo, na transição da magnetização espontânea em função da temperatura em sistemas magnéticos, ou na vizinhança do ponto crítico no diagrama  $PVT$  para fluidos, na transição  $\lambda$  do  $He^4$ , etc.

O estudo analítico das divergências observadas na região crítica propiciou o desenvolvimento de um formalismo utilizando *expoentes críticos* para a caracterização completa das transições de fase, e que estabelecem *classes de universalidade* para as transições. Mais tarde, esse formalismo teria papel fundamental no desenvolvimento da teoria de escala e no grupo de renormalização.

## B.2 Expoentes Críticos

Nesta seção iremos definir vários expoentes críticos associados à divergência de grandezas termodinâmicas no ponto crítico. Logo, é necessário uma definição precisa e geral para um expoente crítico. Chamando de  $T_c$  a temperatura crítica do sistema, podemos definir um parâmetro adimensional relacionado à temperatura,

$$\epsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 . \quad (\text{B.25})$$

Consideremos uma função,  $f(\epsilon)$ , positiva e contínua para valores pequenos de  $\epsilon$ , e que exista o limite,

$$\lambda \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\epsilon} . \quad (\text{B.26})$$

Nesse caso,  $\lambda$  é o *expoente crítico* associado a função  $f(\epsilon)$ .

De forma simplificada, denotaremos que  $\lambda$  é o expoente crítico associado a  $f(\epsilon)$  escrevendo,  $f(\epsilon) \sim \epsilon^\lambda$ . É importante esclarecer que a relação B.26 não implica que  $f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda$ , apesar do inverso ser verdadeiro. De fato, o comportamento no ponto crítico geralmente é mais complexo que uma relação alométrica simples; a forma mais geral compatível com a definição B.26 é  $f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda(1 + B\epsilon^v + \dots)$ , onde  $v > 0$ .

Passemos agora à definição dos expoentes críticos: o comportamento do parâmetro de ordem,  $\Psi$ , do sistema com a temperatura é regido pelo expoente  $\beta$ ,

$$\Psi \sim (-\epsilon)^\beta , \quad (\text{B.27})$$

onde  $\Psi$  é o parâmetro de ordem normalizado. Para fluidos,  $\Psi \equiv \rho_L - \rho_G$ , onde a densidade da fase líquida e gasosa são denotadas pelas letras  $L$  e  $G$ , respectivamente; em sistemas magnéticos,  $\Psi \equiv m = M_0(T)/M_0(0)$ .

A capacidade térmica, tanto no caso de sistemas magnéticos como no de fluidos, diverge com o expoente  $\alpha$ ,

$$\begin{aligned} C_H &\sim (-\epsilon)^{-\alpha'} \quad T < T_c, \\ C_H &\sim \epsilon^{-\alpha} \quad T > T_c. \end{aligned} \tag{B.28}$$

As “susceptibilidades generalizadas” ( a compressibilidade térmica,  $K_T$ , para sistemas fluidos e a susceptibilidade magnética,  $\chi_T$ , para sistemas magnéticos) divergem com o expoente  $\gamma$ ,

$$\begin{aligned} K_T, \chi_T &\sim (-\epsilon)^{-\gamma'} \quad T < T_c; \\ K_T, \chi_T &\sim \epsilon^{-\gamma} \quad T > T_c. \end{aligned} \tag{B.29}$$

O comportamento do parâmetro de ordem ao longo da isoterma crítica,  $T = T_c$ , relaciona-se com a variável intensiva correspondente através do expoente  $\delta$ ,

$$\Psi \sim Y^{\frac{1}{\delta}}, \quad T = T_c; \tag{B.30}$$

no caso de fluidos,  $Y = P - P_c$ , e para sistemas magnéticos,  $Y \equiv h = H/H_c^0$ .

Finalmente, temos os expoentes  $\nu$ ,  $\nu'$  e  $\eta$ , que se referem ao comportamento da função correlação de pares  $\mathcal{G}(r)$  na região crítica. Uma discussão mais detalhada de  $\mathcal{G}(r)$  será feita na próxima seção, de modo que nos preocuparemos por ora apenas em definir os expoentes. O comprimento de correlação,  $\xi$ , que mede o alcance da função correlação, diverge na criticalidade e é caracterizado pelos expoentes  $\nu$  e  $\nu'$ ,

$$\begin{aligned} \xi &\sim (-\epsilon)^{\nu'} \quad T < T_c; \\ \xi &\sim \epsilon^{\nu} \quad T > T_c. \end{aligned} \tag{B.31}$$

Na criticalidade, a função correlação de pares decai assintoticamente a zero obedecendo uma lei de potência em relação a distância  $r$  entre os pares considerados,

$$\mathcal{G}(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \tag{B.32}$$

onde  $d$  é a dimensionalidade do sistema.

A determinação numérica dos expoentes críticos é o principal objetivo das técnicas e aproximações que estudaremos neste capítulo. Antes de prosseguir com essa determinação, escreveremos algumas relações entre eles, que serão úteis para avaliar os resultados fornecidos pelos modelos apresentados na próxima seção. A primeira delas, a desigualdade de Rushbrooke, foi apresentada de forma inusitada pelo autor em um seminário, onde estavam sendo apresentados cálculos analíticos para os expoentes críticos [158]. Considerando o fato que  $C_M$  deve ser positiva, temos que

$$C_H \geq \frac{T \left[ \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right]^2}{\chi_T} ; \quad (\text{B.33})$$

utilizando as definições (B.28) e (B.29) para os expoentes  $\alpha$  e  $\gamma$ , respectivamente, e a relação

$$(\partial M / \partial T)_H \sim (-\epsilon)^{\beta-1}, \text{ temos que}$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 . \quad (\text{B.34})$$

Outras desigualdades de interesse, mas que não nos preocuparemos em fornecer uma derivação por ora, são as desigualdades de Griffiths,

$$\beta(1 + \delta) \geq 2 - \alpha' , \quad (\text{B.35})$$

$$\beta(\delta - 1) \leq \gamma' , \quad (\text{B.36})$$

$$\gamma(\delta + 1) \geq (2 - \alpha')(\delta - 1) , \quad (\text{B.37})$$

a desigualdade de Fisher,

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma ; \quad (\text{B.38})$$

e finalmente as desigualdades de Josephson,

$$\begin{aligned} d\nu' &\geq 2 - \alpha' , \\ d\nu &\geq 2 - \alpha . \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Na próxima seção, estudaremos as principais teorias clássicas para as transições de fase, onde veremos que a previsão destas teorias para os expoentes críticos podem ser todas englobadas pelo modelo fenomenológico de Landau. Uma característica importante a ser notada na próxima seção é o comportamento das flutuações no ponto crítico, onde

correlações de longo alcance dominam o sistema, e o tamanho das regiões correlacionadas diverge.

Essas correlações de longo alcance são o ponto chave na solução proposta pelo grupo de renormalização, já que no ponto crítico grandes regiões estão correlacionadas, e os detalhes microscópicos da estrutura do material passam a ser secundários! As correlações de longo alcance mascaram a estrutura molecular a tal ponto que uma extensa família de materiais comporta-se da mesma forma na criticalidade, derivando-se daí o conceito de classes de universalidade.

## B.3 Teorias Clássicas

Nesta subseção apresentaremos as principais teorias clássicas para os expoentes críticos, iniciando pela mais abrangente delas, a teoria fenomenológica de Landau. Essa teoria é capaz de descrever as transições de fase a partir de algumas suposições acerca do comportamento de um potencial termodinâmico adequado. Como exemplos da generalidade do tratamento de Landau, veremos na sequência duas teorias para se obter os principais expoentes críticos em diferentes contextos, mas que fornecem resultados idênticos à análise de Landau. São elas a teoria de campo médio para sistemas magnéticos, descrita pelo campo molecular de Weiss, e a teoria de Ornstein-Zernike para a função correlação de pares.

### B.3.1 Teoria Fenomenológica de Landau

O fato de começarmos pela teoria de Landau não é somente por esta ser talvez a mais simples e elegante entre todas as teorias, mas também por ela fornecer uma descrição pictórica excelente para a compreensão das transições de fase. O cerne de sua proposta é considerar a expansão do potencial termodinâmico em uma série de potências de Taylor em torno do ponto crítico, mesmo sabendo do comportamento divergente das funções resposta. Landau supôs ter contornado o problema considerando que haveriam singularidades apenas nos coeficientes de ordens superiores na expansão, de modo que, se a análise fosse restrita aos coeficientes de ordem inferior, poderiam ser feitas previsões válidas em relação à região crítica. De fato, esta é a razão da discrepância entre os expoentes previstos pela teoria clássica e os experimentos, mas apresentaremos o argumento original de Landau afim de podermos descrever fielmente sua teoria.

Inicialmente, consideremos um sistema onde a energia livre de Helmholtz  $A(T, \psi, N)$  pode ser expandida na vizinidade do ponto crítico, onde o parâmetro de ordem não normalizado,

$\psi$ , assume pequenos valores. Portanto,

$$A = A_0 + A_1\psi + A_2\psi^2 + A_3\psi^3 \dots = \sum_{j=0}^{\infty} A_j\psi^j, \quad (\text{B.40})$$

onde os coeficientes  $(A_0, A_1, \dots)$  são funções de  $T$ , e que também podem ser expandidos em torno de  $T_c$ ,

$$A_j = a_{j0} + a_{j1}(T - T_c) + a_{j2}(T - T_c)^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} a_{jk}(T - T_c)^k. \quad (\text{B.41})$$

Geralmente desprezamos os termos de ordem igual ou superior a dois nesta equação, já que, por hipótese,  $T \simeq T_c$ .

Na expansão (B.40), consideraremos que  $A_j = 0$  para  $j$  ímpar, pois o potencial deve ser simétrico em relação ao parâmetro de ordem. Desse modo, as definições (B.15) e (B.40), onde  $\psi \equiv M$ , resultam em

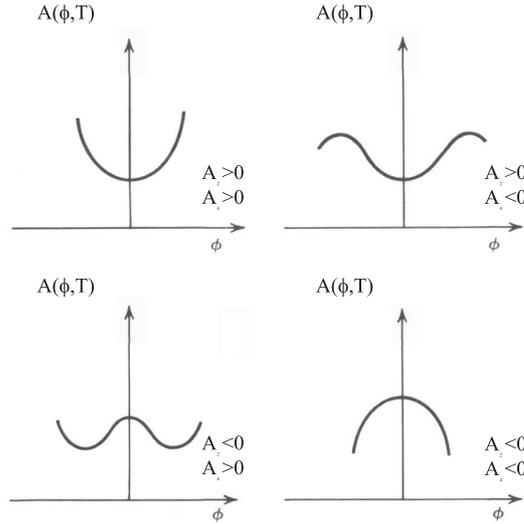
$$\frac{\partial A}{\partial \psi} = 2A_2(T)\psi + 4A_4(T)\psi^3 + \dots \quad (\text{B.42})$$

$$H(M, T) = 2[a_{20} + a_{21}(T - T_c) + \dots]\psi + 4[a_{40} + a_{41}(T - T_c) + \dots]\psi^3 + O[\psi^5] \quad (\text{B.43})$$

Portanto, na aproximação até a quarta ordem em relação ao parâmetro de ordem, a forma da função  $A(T, \psi)$  dependerá apenas dos sinais de  $A_2(T)$  e  $A_4(T)$ , que se resumem às quatro possibilidades mostradas na Figura B.1.

Desse modo, a fase desordenada na região super-crítica  $T > T_c$  é compatível somente com a combinação  $A_2, A_4 > 0$ . Nesse caso, o sistema possui um mínimo global na energia livre, e é estável; já a solução  $A_2 > 0, A_4 < 0$  é instável, pois flutuações podem retirar o sistema do mínimo local. Na região sub-crítica,  $T < T_c$ , devemos ter duas soluções estáveis e simétricas, o que é compatível somente com o caso  $A_2 < 0$  e  $A_4 > 0$ . Desse modo, pode-se concluir que a temperatura crítica é definida simplesmente como o ponto onde  $A_2 = 0$ !

A interpretação de Landau para as transições de fase é capaz de explicar várias características observadas nos diagramas de fase. Em particular, no diagrama de fases  $P \times T$  de um fluido simples, pode ser descrito como na Figura B.2. As linhas cheias no diagrama representam transições de primeira ordem, onde há dois mínimos simétricos na energia livre do sistema, enquanto a transição ao longo do ponto crítico é de segunda ordem, e os dois mínimos de energia se colapsam em um único. Desse modo, os diagramas de histerese característicos de transições de primeira ordem podem ser facilmente compreendidos, se



**Figura B.1:** Diagramas da expansão da energia livre na teoria de Landau, considerando as quatro combinações possíveis para os valores dos coeficientes. O significado de cada diagrama é explicado no texto (retirada de [29]).

considerarmos que os estados meta-estáveis na região sub-crítica resistem a pequenas flutuações.

O encontro de uma linha de primeira ordem com uma linha de segunda ordem é denominado um ponto tricrítico e geralmente é único. Na teoria de Landau, consideremos agora que os coeficientes  $A_j$  dependam também da grandeza extensiva,  $\Delta$ , associada ao parâmetro de ordem,  $A_j = A_j(T, \Delta)$ . Nesse caso,  $A_2(T, \Delta) = 0$  equivale à linha crítica no diagrama de fases, e o ponto tricrítico é obtido fazendo-se  $A_2(T, \Delta) = A_4(T, \Delta) = 0$ . (No caso de sistemas magnéticos,  $\Delta = H$ ).

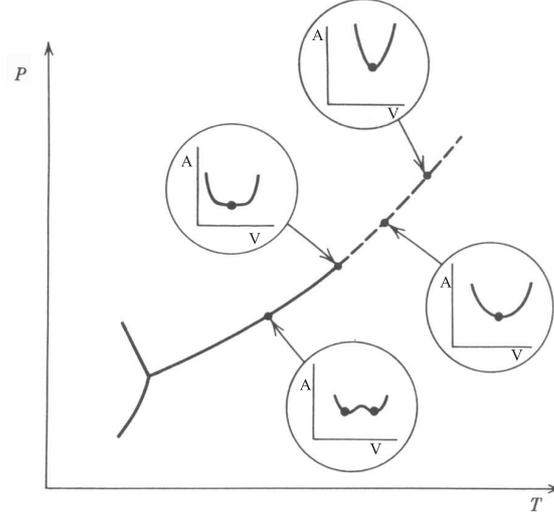
Considerando agora a equação de estado (B.42), a análise da energia livre apresentada acima permite-nos fazer as simplificações na equação (B.41),  $a_{4k} = 0$ , para  $k \geq 1$ , e  $a_{20} = a_{2k'} = 0$ , para  $k' > 2$ . Desse modo,

$$H = 2(T - T_c) a_{21}\psi + 4 a_{40}\psi^3 + \dots \quad (\text{B.44})$$

Para  $H = 0$ , essa equação possui três soluções reais:  $\psi = 0$ , para  $T > T_c$ , que corresponde a fase desordenada e, para  $T < T_c$ ,

$$\psi = \pm \left( \frac{a_{21}}{2a_{40}} \right)^{1/2} (T_c - T)^{1/2}, \quad (\text{B.45})$$

indicando que o parâmetro de ordem espontaneamente deixa de ser nulo na região sub-crítica. O comportamento crítico é governado pelo expoente  $\beta = 1/2$ , valor característico da teoria clássica.



**Figura B.2:** Diagrama de fases de um fluido na teoria de Landau. Na figura podemos observar como os mínimos no diagrama de energia livre se colapsam no ponto crítico, marcando a transição de segunda ordem. Já para as transições de primeira ordem (linhas cheias), as duas fases (mínimos) coexistem mas, se deslocamos o sistema em direção a uma das fases, o mínimo correspondente se torna mais profundo, denotando que a fase em questão se torna mais estável. (Retirada de [29]).

Os expoentes  $\gamma$  e  $\gamma'$  associados à divergência da susceptibilidade magnética são obtidos a partir da equação (B.29),

$$\chi_T^{-1} = \left( \frac{\partial H}{\partial M} \right)_T = \begin{cases} 2a_{21}(T - T_c) & \rightarrow T > T_c, \\ 4a_{21}(T_c - T) & \rightarrow T < T_c; \end{cases} \quad (\text{B.46})$$

portanto,  $\gamma = \gamma' = 1$ , na teoria de Landau.

Para obtermos o expoente  $\delta$  basta fazer  $T = T_c$  na equação (B.44),

$$H(T_c, \psi) = 4a_{40}\psi^3, \quad (\text{B.47})$$

portanto,  $\delta = 3$  na teoria clássica.

Finalmente, os expoentes da capacidade térmica,  $\alpha$  e  $\alpha'$  podem ser obtidos a partir das equações (B.46) e (B.22), respectivamente. Portanto, para  $T > T_c$  e  $H = 0$ , teremos  $M = 0$ ; desse modo,

$$C_H = C_M = -T \left( \frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M = -T(2a_{02} + 6a_{03}(T - T_c) + O[(T - T_c)^2]). \quad (\text{B.48})$$

onde consideramos termos até terceira ordem na equação (B.41). Para  $T < T_c$ ,

$$C_M = -T(2a_{02} + 6a_{03}(T - T_c) + \dots) - T \left( \frac{a_{21}^2}{2a_{40}} + \frac{6a_{22}a_{21}}{2a_{40}}(T - T_c) + \dots \right)$$

$$= -T \left( \left( 2a_{02} + \frac{a_{21}^2}{2a_{40}} \right) + O[(T - T_c)] \right)$$

resultando em

$$\begin{aligned} C_H &= -T \left( 2a_{02} + \frac{a_{21}^2}{2a_{40}} + O[(T - T_c)] \right) + T \left( \frac{18a_{21}^3}{a_{40}} (T - T_c) \right) \left( \frac{1}{4a_{21}(T - T_c)} \right) \\ &= T \left( -2a_{02} + 4\frac{a_{21}}{a_{40}} \right) + O[(T - T_c)] . \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

Logo,  $C_H$  apresenta uma descontinuidade em  $T = T_c$  de magnitude  $\Delta C_H = 4\frac{a_{21}}{a_{40}}T_c$ , e obviamente,  $\alpha = \alpha' = 0$ .

Na Tabela B.1, estão resumidas as previsões da teoria de Landau e a faixa de valores experimentais obtidos para os expoentes críticos. Note que os expoentes clássicos obedecem à desigualdade de Rushbrooke como uma identidade, apesar do fato dos valores diferirem do resultado experimental.

**Tabela B.1:** Expoentes críticos na Teoria Clássica. (Retirada de [29])

Expoente	Valor Clássico	Faixa aproximada dos valores observados
$\alpha$	0	$-0.2 < \alpha < 0.2$
$\alpha'$	0	$-0.2 < \alpha' < 0.2$
$\beta$	1/2	$0.3 < \beta < 0.4$
$\gamma$	1	$1.2 < \gamma < 1.4$
$\gamma'$	1	$1 < \gamma' < 1.2$
$\delta$	3	$4 < \delta < 5$

Veremos a seguir outras duas teorias clássicas (assim denominadas por fornecerem os mesmos valores para os expoentes críticos) que podem ser consideradas casos especiais da teoria de Landau. Inicialmente, estudaremos a teoria de campo médio para sistemas magnéticos; em seguida, introduzimos a função correlação de pares e mostramos as principais previsões da teoria de Ornstein-Zernike para os expoentes críticos associados a ela.

### B.3.2 Teoria de Campo Médio para Sistemas Magnéticos

Como apresentado no Histórico, em 1907, logo após a teoria de Langevin para o paramagnetismo, Pierre Weiss apresentou uma teoria fenomenológica para o ferromagnetismo, onde propunha que os momentos orbitais (spins) em um sistema magnético interagiriam

através de um campo molecular proporcional à magnetização média. Mais tarde, após Heisenberg propor seu modelo de interações de troca, a teoria de Weiss ficou conhecida como a teoria de campo médio para o ferromagnetismo, equivalendo-se a uma aproximação para o modelo de Heisenberg.

Considerando um sistema de  $N$  momentos magnéticos não interagentes, submetidos a um campo externo  $\mathbf{H}$ , teremos o hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -g\mu_B \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H} , \quad (\text{B.50})$$

onde  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H} = m_i H$ , ( $m_i = -s, -s + 1, \dots, 0, \dots, s - 1, s$ ),  $g$  é o fator de Landé e  $\mu_B$  é o magneton de Bohr. Chamando

$$x = \frac{g\mu_B H}{k_B T} , \quad (\text{B.51})$$

podemos escrever a função partição como uma soma sobre os  $(2s + 1)^N$  estados possíveis para o sistema

$$Z = \sum_{m_1=-s}^s \dots \sum_{m_N=-s}^s e^{x \sum_{i=1}^N m_i} . \quad (\text{B.52})$$

Supondo um sistema de dois níveis,  $s = 1/2$ , teremos

$$Z = \prod_{i=1}^N \left( \sum_{m_i=-1/2}^{1/2} e^{x m_i} \right) = 2^N \cosh^N \left( \frac{x}{2} \right) . \quad (\text{B.53})$$

A solução geral é dada por [158],

$$Z = \left[ \frac{\sinh\left((s + 1/2)x\right)}{\sinh(x/2)} \right]^N . \quad (\text{B.54})$$

A energia livre de Gibbs pode ser obtida diretamente da equação (B.54)

$$G(T, H) = k_B \ln Z = -N k_B T \ln \left[ \frac{\sinh\left((s + 1/2)x\right)}{\sinh(x/2)} \right]^N ; \quad (\text{B.55})$$

portanto, o parâmetro de ordem do sistema (a magnetização espontânea) será dada por

$$\begin{aligned} M(T, H) &= - \left( \frac{\partial G}{\partial H} \right) = N k_B \frac{\partial}{\partial H} \ln Z \\ &= M_0 B_s(sx) , \end{aligned} \tag{B.56}$$

onde  $M_0 = M(T = 0, H = 0) = N s g \mu_B$  é o valor máximo para a magnetização e

$$B_s(y) = \frac{2s+1}{2s} \coth \left( \frac{2s+1}{2s} y \right) - \frac{1}{2s} \coth \left( \frac{y}{2s} \right)$$

é a função de Brillouin. Para um sistema de dois níveis,

$$B_{1/2}(x/2) = 2 \coth(x) - \coth(x/2) = \tanh(x/2) . \tag{B.57}$$

Utilizando o resultado (B.57) na equação (B.56), pode-se deduzir que a magnetização espontânea é nula, para  $H = 0$ , no sistema de spins não interagentes de dois níveis. Essa constatação é o cerne do argumento para a introdução de um campo molecular; Weiss supôs que além do campo aplicado  $H$ , haveria um campo efetivo atuando sobre os spins, cuja contribuição seria proporcional à magnetização total média. Portanto,

$$H_{ef} = H + \lambda M(T, H) , \tag{B.58}$$

onde  $\lambda$  é denominado o parâmetro do campo molecular. A introdução de um termo proporcional ao campo médio implica que, para o sistema de dois níveis,

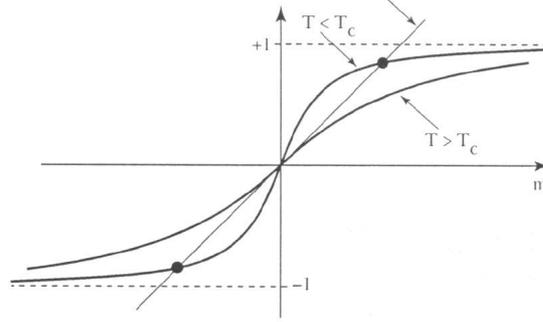
$$M = M_0 \tanh \left( \frac{g \mu_B}{2 k_B T} (H + \lambda M) \right) , \tag{B.59}$$

conhecida como equação de Curie-Weiss. Considerando a magnetização normalizada,  $m \equiv M(T, H)/M_0(0, 0)$ , teremos

$$m = \tanh \left( \frac{g \mu_B}{2} \beta_0 H + \frac{m}{\tilde{T}} \right) \tag{B.60}$$

onde  $\beta_0 = 1/k_B T$ ,  $\tilde{T} = T/T_c$ ,  $T_c = \lambda C$  e  $C = N g^2 \mu_B^2 / 4 k_B$  é a constante de Curie. Para  $H = 0$ , temos

$$m = \tanh \left( \frac{m}{\tilde{T}} \right) ;$$



**Figura B.3:** Soluções para a magnetização espontânea na teoria molecular de Weiss. Verificamos que, para  $T > T_c$ , a única solução possível é  $m = 0$ ; já para  $T < T_c$ , além da solução trivial há duas outras soluções simétricas, que correspondem aos dois estados de magnetização possíveis.

a solução desta equação pode ser obtida numericamente, tal como mostrado na Figura B.3. Para  $T > T_c$  somente existe a solução  $m = 0$ ; para  $T < T_c$ , além da solução trivial há ainda duas outras soluções simétricas.

Os expoentes críticos na teoria de campo médio para sistemas magnéticos são obtidos a partir da expansão em séries para a tangente hiperbólica, válida para pequenos valores de  $m$ ,

$$\beta_0(H + \lambda m) = \tanh^{-1} m = m + \frac{m^3}{3} + \frac{m^5}{5} \dots, \quad (\text{B.61})$$

onde consideramos  $g\mu_B = 2$ . Dessa forma, considerando a definição  $m = -(\partial A/\partial T)_H$  e comparando a relação acima com a equação (B.40), pode-se deduzir que a forma funcional da energia livre na teoria de campo médio é a mesma considerada pela teoria de Landau. A teoria de campo médio para sistemas magnéticos pode ser obtida também como uma aproximação do modelo de Heisenberg para sistemas magnéticos, onde é apresentado um argumento microscópico para a introdução do campo molecular, ou como o limite para um potencial de alcance infinito (vide [158]).

### B.3.3 A Função Correlação de Pares e a Teoria de Ornstein-Zernike

Nesta seção iremos discutir a função correlação de pares, que desempenha papel importante na maioria das discussões de fenômenos críticos. Veremos o argumento de Ornstein-Zernike para obter os expoentes críticos associados à divergência do comprimento de correlação na criticalidade e a suposição de Fisher para encontrar a forma exata da divergência da função correlação, relações definidas pelas equações (B.31) e (B.32), respectivamente. Inicialmente, iremos definir a função correlação no contexto de sistemas fluidos, considerando um fluido contido em um volume  $V$ . A densidade de probabilidade

para o sistema com  $N$  partículas em uma dada configuração  $\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\}$  de suas posições e momentos no ensemble grã-canônico é dada por

$$P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \frac{e^{-\beta_0 U_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) + \beta_0 \mu N}}{N! h^{3N} \mathcal{Z}}, \quad (\text{B.62})$$

onde  $h$  é a constante de Planck,  $\mu$  é o potencial químico,  $U_N$  a energia livre do sistema e

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta_0 \mu N}}{N! h^{3N}} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N \times e^{-\beta_0 U_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)}, \quad (\text{B.63})$$

é a função de grã-partição. A densidade,  $n(\mathbf{r})$ , em um ponto  $\mathbf{r}$  do fluido pode ser calculada,

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (\text{B.64})$$

onde  $\mathbf{r}_i$  é a coordenada espacial da  $i$ -ésima partícula. O valor médio da densidade se torna,

$$\langle n(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} n(\mathbf{r}) \exp(-\beta_0 U_N + \beta_0 \mu N), \quad (\text{B.65})$$

onde adotamos as notações simplificadas

$$U_N \equiv U_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N), \quad e d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} = d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N.$$

Para um sistema uniforme,  $\langle n(\mathbf{r}) \rangle = \langle N/V \rangle \equiv n$ , onde  $n$  é constante. Desse modo, a quantidade que melhor reflete as propriedades microscópicas do sistema é a densidade de pares,

$$\langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \exp(-\beta_0 U_N + \beta_0 \mu N), \quad (\text{B.66})$$

que indica a probabilidade condicional de encontrarmos uma partícula em  $\mathbf{r}'$  dado que existe uma partícula em  $\mathbf{r}$ . Desse modo, podemos definir agora a função correlação  $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , que mede as flutuações da densidade em torno do seu valor médio,

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \left\langle \left( n(\mathbf{r}) - \langle n(\mathbf{r}) \rangle \right) \left( n(\mathbf{r}') - \langle n(\mathbf{r}') \rangle \right) \right\rangle. \quad (\text{B.67})$$

Considerando sistemas uniformes, invariantes em relação a translações, podemos escrever (B.67) como

$$\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle - n^2 . \quad (\text{B.68})$$

Portanto, se  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ , a densidade de pares pode ser fatorada

$$\langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle = \langle n(\mathbf{r}) \rangle \langle n(\mathbf{r}') \rangle = n^2 ;$$

isso implica que  $\mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rightarrow 0$  nesse limite.

A seguir, iremos escrever uma relação entre a densidade das flutuações, a compressibilidade isotérmica e a função correlação, buscando compreender o papel desempenhado pela função correlação na criticalidade. Consideremos inicialmente a seguinte igualdade,

$$\begin{aligned} \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle &= \left\langle \left( \int d\mathbf{r} (n(\mathbf{r}) - \langle n(\mathbf{r}) \rangle) \right) \left( \int d\mathbf{r}' (n(\mathbf{r}') - \langle n(\mathbf{r}') \rangle) \right) \right\rangle , \\ &= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \\ &= V \int d\mathbf{r}'' \mathcal{G}(\mathbf{r}'') . \end{aligned} \quad (\text{B.69})$$

Entretanto, utilizando a igualdade,  $\mathcal{Z} = PV/RT$ , demonstrada por Huang em 1953 [158], podemos escrever  $\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle$  na forma,

$$\begin{aligned} \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle &= \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = (k_B T)^2 \left( \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} , \\ &= (k_B T)^2 \left( - \frac{\partial^2 (PV/RT)}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} , \\ &= k_B T V \left( \frac{\partial^2 P}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} . \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

Porém, como  $(\partial P / \partial \mu)_{T,V} = \langle N \rangle / V = n$ , teremos

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = - \frac{\langle N \rangle}{V^2} k_B T V \left( \frac{\partial V}{\partial \mu} \right)_{T,N} . \quad (\text{B.71})$$

A compressibilidade isotérmica é dada por,

$$K_T = -V^{-1} (\partial V / \partial P)_{T,N} = -\langle N \rangle^{-1} (\partial V / \partial \mu)_{T,N} ;$$

portanto, aplicando este resultado na equação (B.71) teremos,

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \frac{\langle N \rangle^2 k_B T}{V} K_T = \langle N \rangle n k_B T K_T . \quad (\text{B.72})$$

Finalmente, para um gás ideal,  $K_T^0 = 1/nk_B T$ , e a igualdade B.69 se torna,

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \frac{1}{n} \int d\mathbf{r} \mathcal{G}(\mathbf{r}) . \quad (\text{B.73})$$

Desse modo, verificamos que a divergência da compressibilidade térmica no ponto crítico é equivalente a um aumento no alcance da função correlação de pares. Suficientemente próximo a  $T_c$ ,  $\mathcal{G}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  se torna suficientemente grande para que as flutuações da densidade no fluido provoquem um forte espalhamento da luz, explicando o fenômeno da opalescência crítica.

O argumento de Ornstein e Zernike para obter o comportamento crítico da função correlação baseia-se na relação desta com o fator de estrutura associado ao espalhamento da luz por um fluido na criticalidade. Usando as transformações de Fourier e expansões em séries de potências, pode-se demonstrar que [158]

$$\nu' = \frac{\gamma'}{2} \quad (\text{B.74})$$

$$\nu = \frac{\gamma}{2} , \quad (\text{B.75})$$

na teoria de Ornstein-Zernike, o que equivale dizer que  $\nu = \nu' = 1/2$  no limite clássico.

Para uma separação  $r$  entre pares fixa e  $T \rightarrow T_c^+$  ( $\xi \rightarrow \infty$ ), pode-se demonstrar que [158]

$$\mathcal{G}(r) \propto \begin{cases} \ln r e^{-r/\xi} (1 + O(\ln^{-1} r/\xi)) & d = 2 \\ \frac{e^{-r/\xi}}{r} & d = 3 \\ \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}} (1 + O(r/\xi)) & d > 3 . \end{cases} \quad (\text{B.76})$$

Para  $r \rightarrow \infty$ , a função correlação se comporta como

$$\mathcal{G}(r) |_{T=T_c} \propto \begin{cases} \ln r & d = 2 \\ r^{-(d-2)} & d \geq 3 . \end{cases} \quad (\text{B.77})$$

Os resultados experimentais para o gráfico da intensidade relativa de luz espalhada em função da frequência apresentam um desvio do comportamento linear próximo à criticalidade, tornando-se levemente côncavos. Notando essa característica, Fisher propôs uma correção na forma de decaimento da função correlação,

$$\mathcal{G}(r) |_{T=T_c} \sim r^{-(d-2)+\eta} , \quad (\text{B.78})$$

no lugar da relação (B.77). Desse modo, o limite clássico é compatível com o valor  $\eta = 0$ , completando a previsão para os principais expoentes críticos na Teoria Clássica.

## B.4 Modelo de Ising

Nesta subseção iremos estudar o principal modelo da Mecânica Estatística de Equilíbrio, o modelo de Ising. Como descrito no Histórico, este modelo foi de fato introduzido por Wilhelm Lenz, na tentativa de explicar as transições de fase em sistemas magnéticos. Curiosamente, após Ernst Ising resolver o modelo em uma dimensão e verificar que ele não apresentava transição de fase para  $T > 0$ , ele erroneamente conjecturou que o mesmo seria válido para dimensões superiores, abandonando o modelo em seguida. Em 1944, em um verdadeiro *tour-de-force* matemático, Lars Onsager resolveu exatamente o modelo para  $d = 2$ , considerando apenas interações entre primeiros vizinhos. Esta foi a primeira vez que a solução exata de um modelo microscópico em um caso não trivial descreveu um comportamento não analítico dentro da Mecânica Estatística de Equilíbrio. Para  $d = 3$ , o problema ainda está em aberto, não havendo solução exata para o modelo, embora exista um argumento apresentado por Peierls demonstrando a existência da magnetização espontânea para  $d \geq 2$  (vide [25]). Entretanto, diversas técnicas de aproximação (expansão em séries e o grupo de renormalização) fornecem valores extremamente precisos para os expoentes críticos, que são confirmados tanto por simulações quanto por experimentos em sistemas físicos supostamente em três dimensões (vide Tabela B.2).

Além de sua importância para o magnetismo, o modelo de Ising possui um caráter universal - corroborado pela analogia deste com o modelo de um gás na rede, ligas binárias, etc. - que o torna de interesse crucial para a Física Estatística. Desse modo, apresentaremos nesta seção os principais resultados do modelo, para  $d = 1, 2$  e  $3$ , afim de comparar a previsão clássica para os expoentes críticos com a classe de universalidade do modelo de Ising. A solução de Onsager em duas dimensões motivou ainda o desenvolvimento de hipóteses de escala e do grupo de renormalização, tópicos a serem abordados na próxima seção.

De um modo geral, a principal dificuldade enfrentada pelos métodos de soluções aproximadas, para  $d = 2$  ou  $d = 3$ , é a não analiticidade da energia livre no ponto crítico, o que torna discutível qualquer truncamento em expansões do tipo série de potências. As aproximações do tipo campo médio conduzem inexoravelmente a expressões para a energia livre que se encaixam na hipótese de Landau, e os expoentes clássicos são obtidos nestes casos. A não analiticidade da energia livre foi explicada em termos gerais pela teoria de Lee-Yang para as transições de fase [101], onde o limite termodinâmico dos zeros da função partição é estudado.

O hamiltoniano do modelo é escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i , \quad (\text{B.79})$$

onde a soma no primeiro termo do lado direito é feita sobre os pares de primeiros vizinhos,  $\sigma$  representa o valor do spin na rede  $d$  dimensional,  $J$  é a constante de acoplamento e  $H$  é o campo aplicado; se  $J > 0$ , o sistema é ferromagnético, e a configuração de menor energia ocorre quando os spins estão alinhados entre si. Já para  $J < 0$ , o sistema é antiferromagnético, e a configuração de menor energia ocorre para um alinhamento alternado, onde sítios vizinhos são ocupado por spins com valores opostos.

Solucionar o modelo de Ising em determinada dimensão consiste em escrever uma equação para a função partição canônica,

$$Z_N = Z(T, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta_0 \mathcal{H}} , \quad (\text{B.80})$$

e obter a energia livre por sítio,

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( -\frac{1}{\beta_0 N} \ln Z_N \right) . \quad (\text{B.81})$$

Pode-se utilizar o método da matriz transferência [141] para demonstrar que o modelo de Ising em  $d = 1$  não apresenta transição de fase para  $T_c > 0$ .

Para  $d = 2$ , a solução de Onsager prevê uma temperatura crítica positiva, em contraposição ao caso  $d = 1$ . Além disso, Onsager demonstrou a divergência logarítmica do calor específico na criticalidade; este resultado é compatível com o valor  $\alpha = 0$ , e permite concluir que a energia livre não é analítica em  $T_c$ , em contraste direto com a hipótese de Landau. Essas conclusões foram obtidas por Onsager para o modelo de Ising em duas dimensões na rede quadrada, considerando apenas interações entre primeiros vizinhos e campo externo nulo.

Uma análise completa da solução do modelo de Ising em duas dimensões escapa do escopo deste trabalho, e nos preocuparemos apenas em apresentar seus principais resultados. Um formalismo mais acessível para se obter as relações reproduzidas aqui é o introduzido por Schultz *et al.* [152], que também pode ser encontrado em vários textos modernos em Mecânica Estatística [141, 150]. Nesse formalismo, o cálculo dos autovalores da matriz transferência é reduzido à diagonalização do hamiltoniano de um sistema de férmions interagentes. (A matriz transferência é escrita na forma de matrizes de Pauli, nas quais se aplicam as transformações de Jordan-Wigner para se obter o sistema de férmions.)

Os valores dos expoentes críticos são mostrados na Tabela B.2, onde mostramos também a faixa dos resultados experimentais e as previsões para os expoentes em  $d = 3$ . Em três dimensões, há vários métodos numéricos para se obter uma estimativa precisa dos expoentes, que concordam tanto com os valores obtidos experimentalmente quanto com os resultados simulacionais. Os métodos de aproximações sucessivas são os mais utilizados, entre os quais as expansões em séries de potências e o grupo de renormalizações são os mais frequentes.

**Tabela B.2:** Expoentes críticos do Modelo de Ising (retirada de [150])

Expoente	Ising $d = 2$	Ising $d = 3$	Experimental
$\alpha$	$0(\log)$	$\simeq 1/8$	$\simeq 0$
$\beta$	$1/8$	$\simeq 5/16$	$0.3 < \beta < 0.35$
$\gamma$	$7/4$	$\simeq 5/4$	$1.2 < \gamma < 1.4$
$\delta$	$15$	$\simeq 5$	$4.2 < \delta < 4.8$

No modelo de Ising generalizado, os spins  $\sigma$  possuem uma dimensão  $d_\sigma$ ; desse modo, a dimensionalidade dos spins no modelo de Ising é  $d_\sigma = 1$ ; para  $d_\sigma = 2$ , temos o modelo XY, e para  $d_\sigma = 3$ , o hamiltoniano se torna (para  $H = 0$ ),

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_{ix}\sigma_{jx} + \sigma_{iy}\sigma_{jy} + \sigma_{iz}\sigma_{jz}).$$

que define o modelo de Heisenberg clássico. Se  $d_\sigma \rightarrow \infty$ , então obtemos o modelo esférico, que possui solução exata para  $d \leq 3$  [158]. Na Tabela B.3 mostramos os valores previstos para os expoentes críticos nestes outros modelos.

**Tabela B.3:** Modelo de Ising generalizado, na rede cúbica em  $d = 3$  (retirada de [158]).

$d_\sigma$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$
1	$\simeq 1/8$	$\simeq 5/16$	$\simeq 7/4$	$\sim 0.643$
2	$\sim 0.2$	$\sim 1/3$	$\sim 4/3$	$\sim 0.675$
3	$\sim -0.07$	$\sim 11/32$	$\sim 11/8$	$\sim 0.70$
$\vdots$				
$\infty$	-1	$1/2$	2	1

O modelo de Ising generalizado permite-nos ainda verificar a robustez das classes de universalidade para os expoentes críticos. De fato, pouquíssimos fatores são relevantes na determinação destes expoentes, entre eles:

$i$  - a dimensionalidade do sistema;

- ii* - a dimensionalidade do parâmetro de ordem;
- iii* - o alcance das interações microscópicas.

Cabe destacar também que, pela primeira vez na história da ciência, a simulação computacional ocupou um papel central na compreensão de fenômenos e na quantificação de parâmetros físicos. Desde então, a Simulação passou a constituir uma das três ênfases fundamentais da Física, ao lado da Teoria e do Experimento.

## B.5 Escala, Universalidade e o Grupo de Renormalização

Como vimos, a hipótese de se escrever uma expansão em séries de potências para energia livre na criticalidade é forte demais, e a solução de Onsager indica que não é possível escrever uma expansão onde os coeficientes sejam funções analíticas em relação à temperatura. Durante a década de 1960, surgiram várias hipóteses de escala, bem mais fracas em relação às formas dos potenciais termodinâmicos, e que não se preocupavam em quantificar os expoentes críticos. Essas hipóteses de escala não forneciam nenhuma descrição microscópica, mas apontavam caminhos para se ultrapassar a previsão errônea das teorias clássicas. O embasamento microscópico para essa nova teoria só foi possível após a introdução do grupo de renormalização, que forneceu também um esquema geral para a determinação dos expoentes críticos.

Apesar da abordagem apresentada a seguir, conhecida como hipótese de escala estática, possuir alguns argumentos heurísticos, até o momento nenhuma prova rigorosa foi apresentada para justificá-la. Entretanto, o princípio da renormalização está no âmago de questões essenciais, e das quais não pode ser dissociado [102]:

- a noção de um comportamento coletivo nos graus de liberdade microscópicos, revelado pelo estudo das flutuações e correlações estatísticas;
- a noção de que fenômenos críticos resultantes dessa organização coletiva, perceptível em todas as escalas, causam a divergência crítica de quantidades termodinâmicas macroscópicas, descrita por leis de escala e pelos expoentes críticos;
- as noções de limite termodinâmico (para problemas espaciais) e de limite assintótico (para problemas temporais), nas quais a presença de singularidades indicam a presença de fenômenos críticos;
- as noções de auto-similaridade e invariância por escala;
- a noção de que existem propriedades universais e de classes de universalidade.

### B.5.1 Hipótese de Escala para os Potenciais Termodinâmicos

A primeira exposição matemática clara e coerente de uma hipótese de escala é devida a Widom [178], como visto no histórico. Apresentaremos aqui uma versão mais geral para a hipótese de escala, considerando sistemas magnéticos. Inicialmente, supomos que as duas variáveis relevantes sejam  $\epsilon \equiv (T - T_c)/T_c$  e  $H$ . Escreveremos a energia livre como a soma de duas partes, uma regular e outra singular,

$$G(T, H) = G_0(T, H) + G_s(\epsilon, H) , \quad (\text{B.82})$$

onde todas as anomalias do sistema são descritas pela parte singular,  $G_s$ .

A hipótese de escala (ou de homogeneidade) consiste em supor que a energia livre seja uma função homogênea em relação às variáveis relevantes,

$$G(\epsilon, H) = \lambda G(\lambda^s \epsilon, \lambda^r H) , \quad (\text{B.83})$$

onde  $\lambda$  é um parâmetro positivo arbitrário e  $(r, s)$  são expoentes bem definidos.

A partir desta hipótese, os expoentes críticos podem ser facilmente obtidos. A magnetização espontânea,

$$m = - \left( - \frac{\partial G}{\partial H} \right)_{\epsilon} = -\lambda^{r+1} \frac{\partial G(\lambda^s \epsilon, \lambda^r H)}{\partial H} , \quad (\text{B.84})$$

pode ser escrita como,

$$m(\epsilon, H) = \lambda^{r+1} m(\lambda^s \epsilon, \lambda^r H) . \quad (\text{B.85})$$

Escolhendo,  $\lambda^s |\epsilon| = 1$  e  $H = 0$ , teremos

$$m = \epsilon^{-\frac{r+1}{s}} m(\text{sign}(\epsilon), 0) , \quad (\text{B.86})$$

onde  $\text{sign}(\epsilon) = \epsilon / |\epsilon|$ . Desde que para  $H = 0$ ,  $m_+ = 0$ , se  $\epsilon > 0$  isso implica em,

$$m(\epsilon, 0) \sim \begin{cases} 0 & \epsilon > 0 \\ (-\epsilon)^{-\frac{r+1}{s}} & \epsilon < 0 \end{cases} . \quad (\text{B.87})$$

Portanto,  $\beta = -(r + 1)/s$ .

Da mesma forma, podemos obter a susceptibilidade magnética,

$$\chi(\epsilon, 0) = |\epsilon|^{-\frac{2r+1}{s}} \chi(\pm 1, 0), \quad (\text{B.88})$$

que resulta em  $\gamma = (2r + 1)/s$ . A capacidade térmica,

$$C_H(\epsilon, 0) = |\epsilon|^{-\frac{2s+1}{s}} C_H(\pm 1, 0), \quad (\text{B.89})$$

fornece  $\alpha = 2 + 1/s$ .

Por outro lado, se que agora escolhemos  $\lambda = |H|^{-1/r}$ , para  $\epsilon = 0$ , teremos

$$m(0, H) = |H|^{-\frac{r+1}{r}} m(0, \pm 1); \quad (\text{B.90})$$

logo,  $\delta = -r/(r + 1)$ . Desse modo, se utilizarmos as expressões acima para os expoentes críticos é fácil mostrar que

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2,$$

e que

$$\beta(\delta - 1) = \gamma,$$

que correspondem aos casos particulares das desigualdades de Rushbrooke e de Griffiths apresentadas na seção B.1.

No contexto fenomenológico, podemos escrever a magnetização como

$$\begin{aligned} m(\epsilon, H) &= \lambda^{r+1} m(\lambda^s \epsilon, \lambda^r H) \\ &= |\epsilon|^\beta m\left(\pm 1, \frac{H}{|\epsilon|^{\beta+\gamma}}\right) \\ &= |\epsilon|^\beta m_\pm\left(\frac{H}{|\epsilon|^{\beta+\gamma}}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.91})$$

Essa expressão aponta o caráter universal da relação

$$\frac{m}{\epsilon^\beta} \propto \frac{H}{\epsilon^{\beta+\gamma}}.$$

## B.5.2 Hipótese de Escala para a Função Correlação

Iremos agora discutir a hipótese de escala para a função correlação de pares; vimos na teoria de Ornstein-Zernike que, para  $H = 0$  e  $T = T_c$ , a função correlação de pares apresenta um comportamento do tipo lei de potência,

$$\mathcal{G}(r) \sim r^{-(d+2-\eta)} , \quad (\text{B.92})$$

onde  $\eta = 0$  no limite clássico, e  $\eta = 1/4$  para o modelo de Ising em  $d = 2$ . Se  $T > T_c$ , as correlações decaem exponencialmente com a distância,

$$\mathcal{G} \sim e^{-r/\xi} , \quad (\text{B.93})$$

onde o comprimento de correlação,  $\xi$ , diverge na criticalidade,

$$\xi \sim \begin{cases} \epsilon^{-\nu} & T \rightarrow T_c^+ \\ (-\epsilon)^{-\nu} & T \rightarrow T_c^- \end{cases} . \quad (\text{B.94})$$

Para o modelo de Ising em  $d = 2$ ,  $\nu = 1$ ; em  $d = 3$ ,  $\nu = 0.643(1)$ , enquanto a teoria clássica fornece  $\nu = 1/2$ .

Iremos supor agora que a função correlação seja homogênea,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(r, \epsilon, H) &= \lambda \mathcal{G}(\lambda^p r, \lambda^r \epsilon, \lambda^s H) , \\ &= \epsilon^{-1/r} \mathcal{G}\left(\frac{r}{\epsilon^{p/r}}, \frac{H}{\epsilon^{s/r}}\right) , \end{aligned} \quad (\text{B.95})$$

onde escolhemos  $\lambda = \epsilon^{-1/r}$ . Utilizando o hamiltoniano do modelo de Ising, relação (B.79), é fácil mostrar que

$$\chi_N(\epsilon, H) = \left( \frac{\partial m_N}{\partial H} \right)_T = \frac{\beta_0}{N} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j \right\rangle_N - \frac{\beta_0}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \left\langle \sum_{j=1}^N \sigma_j \right\rangle . \quad (\text{B.96})$$

Portanto,

$$\chi_N(T, H) = \frac{\beta_0}{N} \sum_{i,j=1}^N \mathcal{G}_N(i, j) = \beta_0 \sum_{j=1}^N \mathcal{G}_N(1, j) .$$

Para  $N \rightarrow \infty$ ,

$$\chi(T, H) = \beta_0 \sum_{\mathbf{r}}^N \mathcal{G}(\mathbf{r}) . \quad (\text{B.97})$$

a relação (B.97) é conhecida como a forma estática do teorema flutuação-dissipação, mostrando que a susceptibilidade magnética se relaciona com as flutuações na magnetização.

Portanto, para obtermos o expoente  $\gamma$  basta calcularmos a integral (B.97) no limite assintótico,

$$t^{-\gamma} \sim \int d^d r \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-\frac{r}{t^\eta}} , \quad (\text{B.98})$$

portanto, obtemos  $\gamma = \nu(2 - \eta)$ , a já apresentada relação de Fisher. Finalmente, para obtermos a relação de hiper-escala,  $2 - \alpha = d\nu$ , antecipada pelas relações de Josephson, será necessário que façamos um pouco mais de considerações acerca do comportamento dos sistemas na criticalidade.

### B.5.3 A Construção de Kadanoff

A busca de uma justificativa para as formas de escala e a necessidade de um método de se quantificar os expoentes críticos é o objetivo central do grupo de renormalização. Embora os métodos de renormalização tenham surgido no contexto da teoria quântica de campos (vide histórico), rapidamente eles se estenderam para a Física da Matéria Condensada. Em 1966, Kadanoff descobriu a importância do conceito de invariância de escala subjacente a todos os métodos de renormalização e introduziu o conceito de “blocos de spin” para estudar analiticamente as transições em sistemas magnéticos.

Consideremos inicialmente o hamiltoniano de Ising, em  $d = 1$ ,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i , \quad (\text{B.99})$$

definido sobre uma rede regular onde cada spin está separado por uma distância  $a_0$ . A divergência do comprimento de correlação na criticalidade,  $\xi \gg a_0$ , permite-nos definir blocos de spin, de comprimento  $L \cdot a_0$ , e contendo  $L^d$  spins, nos quais a magnetização é uniforme. O novo hamiltoniano para o sistema de blocos é idêntico ao hamiltoniano original, porém com novos parâmetros  $\tilde{J}$  e  $\tilde{H}$  para os spins do bloco,  $\sigma_B = \pm 1$ . Desse modo, o problema se torna descobrir as relações entre os novos parâmetros e os anteriores.

O parâmetro  $J$  está relacionado diretamente com a temperatura crítica do modelo de Ising; portanto, precisamos obter relações entre os parâmetros que definem o sistema reescalado por um fator  $b$ ,  $(\tilde{\epsilon}, \tilde{H})$ , e os parâmetros do sistema original,  $(\epsilon, H)$ , que obedecem as simetrias exigidas,

$$\tilde{H}(\epsilon, -H, b) = -\tilde{H}(\epsilon, H, b)$$

$$\tilde{\epsilon}(\epsilon, -H, b) = \tilde{\epsilon}(\epsilon, H, b) ,$$

bem como a condição,  $\tilde{\epsilon} = \tilde{H} = 0$ , para  $\epsilon = H = 0$ . A forma mais simples consistente com essas simetrias é

$$\tilde{H} = b^x H , \tag{B.100}$$

$$\tilde{\epsilon} = b^y \epsilon . \tag{B.101}$$

As únicas condições sobre  $x$  e  $y$  é que sejam positivos, o que faz com que o sistema do blocos está sempre mais afastado da criticalidade que o original.

Desse modo, podemos escrever a energia livre para o sistema de blocos,

$$g(\tilde{\epsilon}, \tilde{H}) = \frac{G(\tilde{\epsilon}, \tilde{H})}{N/L^d} ,$$

onde o denominador no lado esquerdo denota o número de blocos. A forma de escala da parte singular da energia livre por bloco pode ser escrita como

$$g(\epsilon, H) = b^{-d} g(b^y \epsilon, b^x H) . \tag{B.102}$$

O comprimento de correlação se torna

$$\xi(\epsilon, H) = b \xi(b^y \epsilon, b^x H) . \tag{B.103}$$

Supondo  $b = |\epsilon|^{1/y}$  e  $H = 0$ , teremos

$$g(\epsilon, 0) = |\epsilon|^{d/y} g(\pm 1, 0) \tag{B.104}$$

$$\xi(\epsilon, 0) = |\epsilon|^{-1/y} \xi(\pm 1, 0) . \tag{B.105}$$

Logo,  $y = 1/\nu$ .

O calor específico pode ser escrito como,

$$c_H = \frac{\partial^2 g}{\partial \epsilon^2} \sim |\epsilon|^{\frac{d}{y}-2} , \quad (\text{B.106})$$

que implica em  $\alpha = 2 - d/y$ ; desse modo, finalmente obtemos a relação de hiperescala,  $\alpha = 2 - d\nu$ , válida para  $d < d_c$ , onde  $d_c$  é a dimensão crítica do modelo.

A renormalização de um sistema físico consiste na aplicação das idéias de Kadanoff sobre o sistema em questão. Como no ponto crítico esperamos que  $\xi \rightarrow \infty$ , é razoável supor que, após a dizimação causada pelos blocos de spin, o comprimento de correlação normalizado continue divergindo, o que caracteriza o ponto crítico de modo único.

A solução do grupo de renormalização para o modelo de Ising em três dimensões foi apresentada por Wilson e Kogut [180], e é conhecida como *modelo gaussiano*, ou *expansão*  $\epsilon$ , onde  $\epsilon = 4 - d$  é um parâmetro considerado pequeno. Através de expansões diagramáticas, pode-se obter as seguintes relações para os expoentes críticos:

$$\nu \sim \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12} + O(\epsilon^2) \quad (\text{B.107})$$

$$\beta \sim \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{6} + O(\epsilon^2) \quad (\text{B.108})$$

$$\alpha \sim \frac{\epsilon}{6} + O(\epsilon^2) \quad (\text{B.109})$$

$$\delta \sim 1 + \frac{\epsilon}{6} + O(\epsilon^2) . \quad (\text{B.110})$$

Se observarmos a Tabela B.2, estas relações fornecem valores próximos aos obtidos por simulação para  $d = 3$ .

# Apêndice C

---

## Fractais

A Geometria Fractal é um dos conceitos mais fascinantes elaborados pela imaginação humana e suas implicações causaram um profundo impacto sobre todo o pensamento científico na segunda metade do século XX. Ao lado da Teoria do Caos, essas disciplinas tornaram-se uma nova fronteira da ciência, e cujas aplicações se estendem pelos mais diferentes ramos do conhecimento: física [36, 140, 109, 18], matemática [51, 56, 107], química [79], computação [185], artes e filosofia [50, 24, 154], biologia [87, 171, 176, 165, 58], ecologia [177], geografia [60], geologia [147], economia [161, 112], etc... De fato, a surpreendente aceitação popular destes novos conceitos e a velocidade de sua disseminação entre os mais diversos ramos do conhecimento, corroboram a visão daqueles cientistas que apontam para uma verdadeira revolução científica [135].

Neste trabalho abordaremos apenas subsidiariamente a Teoria do Caos, no contexto de transições de fase com espalhamento de danos, de modo que nos absteremos de fazer um estudo criterioso do tema, o que estaria fora do escopo desta Tese. No histórico, fazemos um breve relato dos principais trabalhos associados ao surgimento desta disciplina. Mesmo nos restringindo à discussão da Geometria Fractal, a variedade das aplicações e enorme abrangência de suas aplicações impedem-nos de realizar uma apresentação detalhada, como o leitor interessado poderá encontrar em outros trabalhos [135, 56, 13, 170].

Neste trabalho, restringimos a discussão destes tópicos afim de apresentar apenas os conceitos relevantes para o estudo de propriedades fractais em superfícies rugosas e do regime caótico em autômatos celulares, dois temas centrais deste trabalho que serão abordados detalhadamente nas aplicações ( II<sup>a</sup> parte ). Desse modo, trataremos da geometria fractal neste capítulo, apresentando uma definição para a dimensão fractal, os conceitos de autosimilaridade e autoafinidade, e a definição do expoente de Hurst - um conceito bastante útil para analisar superfícies rugosas auto-afins.

## C.1 Geometria Fractal

*“Clouds are not spheres, mountains are not cones, coastlines are not circles, bark is not smooth, nor does lightning travel in a straight line.”*  
Benoit Mandelbrot

O profícuo trabalho de Mandelbrot [107, 108] incorporou definitivamente o termo *fractal* no vocabulário científico; a surpreendente velocidade do crescimento no número de fenômenos onde a Geometria Fractal desempenha papel essencial para sua descrição ou compreensão denota a importância deste conceito para o avanço de nosso conhecimento da natureza. Um dos aspectos centrais do trabalho de Mandelbrot foi *domar* vários “monstros matemáticos” que assombraram a carreira de muitos cientistas e celebrizaram nomes como os de George Cantor, pelo conjunto que leva seu nome; Karl Weierstraß, pela descrição de uma função contínua em todo domínio, mas que não é derivável em nenhum ponto; Giuseppe Peano, David Hilbert e Helge von Koch pelas curvas que descreveram; Waclaw Sierpinski, criador da gaxeta de Sierpinski; Gaston Julia, pelos fantásticos conjuntos de Julia, que ao lado do conjunto de Mandelbrot formam duas das estruturas matemáticas mais complexas já descritas; entre outros [135, 28].

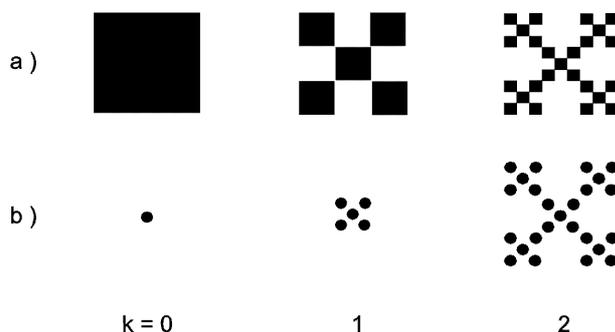
A etimologia vem do latim, *fractus* - fragmento, fração - e alude ao fato de que uma estrutura fractal possui em geral uma dimensão não inteira. Comumente verificamos que objetos naturais possuem um aspecto fragmentado, como nuvens, cordilheiras, rios, costas litorâneas e relâmpagos [56], ou apresentam uma estrutura hierárquica complexa, como os sistemas circulatório, nervoso e respiratório humano [135, 28], árvores, turbulência [64], bacias hidrográficas, distribuição de galáxias [110, 145], etc. Todos estes exemplos possuem uma dimensão fractal bem definida, e podem ser simulados utilizando-se conceitos fractais que são capazes de reproduzir sua complexidade com um nível surpreendente de verossimilhança [28, 76, 27, 108].

Devido à capacidade da Geometria Fractal em reproduzir com alto grau de fidelidade estruturas complexas observadas na natureza, acreditamos ser esta uma geometria fundamental da natureza, sendo a que melhor descreve os seres vivos e o próprio universo como um todo.

Mas, para lidar com estruturas tão complexas como os seres vivos, antes é necessário dominar os conceitos fundamentais desta Geometria e aplicá-los em problemas bem mais simples. Essa é uma das motivações principais deste trabalho, onde veremos como podemos utilizar conceitos fractais para estudar sistemas fora do equilíbrio que apresentam um grau considerável de complexidade.

Uma das principais características de um fractal é sua semelhança através de várias escalas de observação, sendo esta uma chave para seu reconhecimento. Como veremos adiante,

uma estrutura possui características fractais se sua dimensão é um número menor (ou igual) à sua dimensão de imersão e que o caracteriza de maneira única [27].



**Figura C.1:** *Fractal de Vicsek.* Em a) temos o processo conhecido por *dizimação* e em b) o processo de *crescimento*. Note que em a) a extensão linear  $L$  ( a largura do objeto ) é fixa, enquanto em b) ela é crescente.

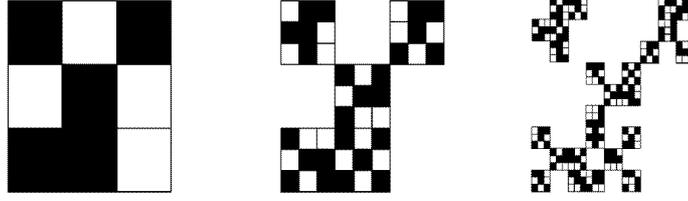
Há pelo menos dois critérios para se diferenciar as estruturas fractais. O primeiro deles diz respeito à origem da estrutura, se matemática ou natural: enquanto as do primeiro tipo são obtidas a partir de relações matemáticas, frequentemente construídas recursivamente, as do segundo tipo correspondem às formas encontradas na natureza. A principal diferenciação entre estes dois tipos de estruturas é que, no caso das geradas naturalmente, existem escalas de corte inferior e superior, ou seja, as propriedades fractais só são observadas dentro de uma faixa limitada de escalas. Já nos fractais matemáticos, a recursividade permite construir estruturas com infinitas hierarquias, como podemos observar explorando as maravilhosas pinturas do conjunto de Mandelbrot [64, 135]. Nesse tipo de estrutura, existe apenas uma escala de corte, superior ou inferior, dependendo do tipo de recursividade utilizada para se gerar o fractal. Na Figura C.1 mostramos os dois principais métodos utilizados para se construir fractais matemáticos recursivamente.

O segundo critério de classificação para estruturas fractais considera sua natureza, se determinística ou aleatória. Fractais matemáticos podem ser determinísticos ou aleatórios, como mostrado nas Figuras C.1 e C.2, porém fractais naturais são necessariamente aleatórios. Exemplos de fractais belíssimos, de todos os tipos, são facilmente encontrados na rede mundial de computadores (*internet*)<sup>1</sup>, e também podem ser encontrados em textos básicos [28, 108, 117, 135, 163, 170].

### C.1.1 Dimensão Fractal

*Dimensão* é um dos conceitos matemáticos mais controversos, e sua compreensão pode ser difícil em alguns casos. Desde o início do século XX, determinar o que é dimensão e

<sup>1</sup><http://www.fisica.ufmg.br/atman/cool.html>



**Figura C.2:** *Fractal Aleatório.* Construído por dizimação este exemplo mostra um crescimento aleatório; a cada passo sorteiam-se cinco sítios para serem ocupados aleatoriamente, resultando em uma forma auto-afim.

suas propriedades tem sido um dos principais problemas em matemática. Prova disso que podemos facilmente enumerar mais de dez diferentes dimensões (Euclidiana, de Hausdorff, fractal, topológica, de contagem de caixas, de imersão, de informação, etc.), mas todas estão relacionadas de alguma forma. Ainda não há uma definição rigorosa de dimensão fractal, mas existe um certo consenso em considerar a definição de Mandelbrot, baseada na dimensão de Hausdorff-Besicovitch apresentada em meados dos anos 30 por Felix Hausdorff e no conceito matemático de medida. Entretanto, a dimensão fractal também está relacionada ao método de contagens de caixas (*box counting*), com a dimensão de divisores ( dimensão de compassos) e a dimensão de autosimilaridade [135].

Mostraremos aqui uma versão simplificada da dimensão de Hausdorff- Besicovitch utilizando o método de contagem de caixas [135]. Inicialmente, precisamos definir a dimensão topológica,  $d_t$ , como a soma de uma unidade à dimensão do menor conjunto que, subtraído de outro conjunto conexo, deixa-o desconexo. Por definição, a  $d_t$  de um ponto é igual a 0; desse modo, ao retirarmos um ponto de uma reta obteremos duas semi-retas, logo, a  $d_t$  de uma reta é igual a 1,  $d_t = 2$  para um plano, etc. A dimensão euclidiana,  $d$ , é a que aproxima-se mais de nossa noção intuitiva e corresponde à dimensão de imersão:  $d = 0$  para um ponto,  $d = 1$  para uma reta,  $d = 2$  para um plano, etc. Para esclarecer a diferença entre a dimensão euclidiana e topológica, imagine o leitor uma armação de um óculos feita de objetos matemáticos (semi-retas, círculos, etc.); claramente,  $d_t = 1$ , enquanto a dimensão de imersão obviamente é  $d = 3$ !

De um modo geral, a medida  $M$  de um objeto qualquer pode ser feita através do método de contagem de caixas (*box counting*)

$$M_d = N(\rho)\rho^d , \tag{C.1}$$

onde  $N(\rho)$  é o menor número de caixas  $d$ -dimensionais, com extensão linear  $\rho$ , necessário para recobrir todo o objeto. Para objetos triviais, quando  $\rho$  tende a zero,  $N(\rho) \sim \rho^{-d}$ , de modo que a medida é sempre finita nesse limite. Para objetos fractais,  $N(\rho) \sim \rho^D$ , para  $\rho \rightarrow 0$ , de tal modo que,

$$N(\rho) \cdot \rho^d \longrightarrow \begin{cases} \infty , & \text{se } d < D ; \\ 0 , & \text{se } d > D . \end{cases}$$

A dimensão de Hausdorff,  $d_f \in \mathbb{R}$ , corresponde a dimensão *contínua* na qual ocorre o salto no valor da medida, de tal forma que se o recobrimento for feito com “caixas” com dimensão  $d_f = D$  a medida é finita. Podemos obter numericamente o valor da dimensão fractal de um objeto através da expressão,

$$D = \lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{\ln N(\rho)}{\ln(1/\rho)}, \quad (\text{C.2})$$

quando esse limite existir. Na maioria absoluta dos casos,  $d_f = D$  (casos em que  $d_f \neq D$  são discutidos por Falconer [51]).

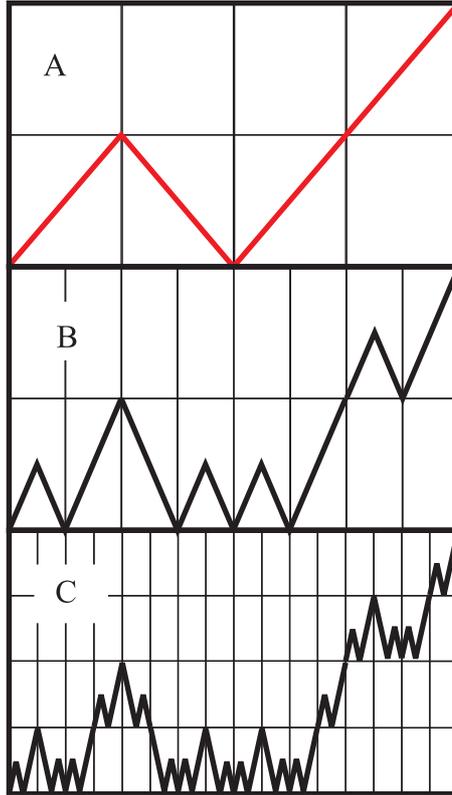
Em resumo, para objetos triviais a dimensão de Hausdorff corresponde a dimensão de imersão,  $D = d$ ; para objetos não triviais - fractais - temos,  $d_t < D \leq d$ , onde geralmente  $D$  é um número não inteiro. A dimensão fractal caracteriza um objeto de modo único, e é uma das características marcantes destas estruturas, ao lado da autosimilaridade ou autoafinidade, conceitos a serem abordados na próxima subseção.

## C.1.2 Autosimilaridade e Autoafinidade

Um objeto autosimilar é formado de partes similares ao todo. Autosimilaridade é uma propriedade de simetria do sistema, indicando invariância sob uma transformação isotrópica. Seja um conjunto  $S$  com de coordenadas  $R = (x_1, x_2, x_3, \dots)$ ; uma dilatação (ou transformação de similaridade) com fator de redução  $b$ , transforma as coordenadas de  $S$  para  $bR = (bx_1, bx_2, bx_3, \dots)$ . O conjunto  $S$  de coordenadas  $R$  é autosimilar se for invariante sob esta transformação, ou seja, o conjunto reescalado  $bS$  é idêntico a uma parte do sistema original  $S$ . Logo, um objeto autosimilar possui transformação de escala isotrópica. Já um objeto auto-afim possui transformação de escala anisotrópica, ou seja, para manter a invariância de escala precisamos dilatar o objeto com fatores de redução diferentes para cada direção espacial:  $b \cdot R = (b_1x_1, b_2x_2, b_3x_3, \dots)$ . Cabe destacar que essa propriedade restringe a autoafinidade a funções unívocas, como mostrado na figura C.3, já que por razões de simetria, é impossível fazer a dilatação com fatores de escala diferentes em outro tipo de função. Ressalte-se que fractais aleatórios só apresentam similaridade em um sentido estatístico; desse modo, é melhor aplicar o termo ‘invariância por escala’ a estas estruturas ao invés de autosimilaridade.

No estudo de superfícies, frequentemente estaremos lidando com uma subclasse de fractais anisotrópicos, descritos por funções unívocas que apresentam auto-afinidade. De um modo geral, para uma função auto-afim  $h(x)$ , temos

$$h(x) \sim b^{-H} h(bx) \quad , \quad (\text{C.3})$$



**Figura C.3:** Função autoafim. Mostramos três iterações da função, que é construída de maneira análoga ao processo de dizimação. Note que a cada iteração a estrutura é reescalada por fatores diferentes em cada direção ( $1/4$  na horizontal e  $1/2$  na vertical).

onde  $H$  é o expoente de Hurst, ou expoente auto-afim, que fornece uma medida qualitativa da rugosidade da função  $h(x)$ . Esta equação é obtida diretamente da definição de função auto-afim, onde reescalamos a direção  $x$  por  $bx$  e a direção de  $h$  por  $b^H h$ . Uma consequência importante desta definição é que o fator de escala da diferença de alturas,

$$\Delta(\ell) \equiv |h(x_1) - h(x_2)| ,$$

entre dois pontos separados pela distância  $\ell \equiv |x_1 - x_2|$ , para uma função auto afim será

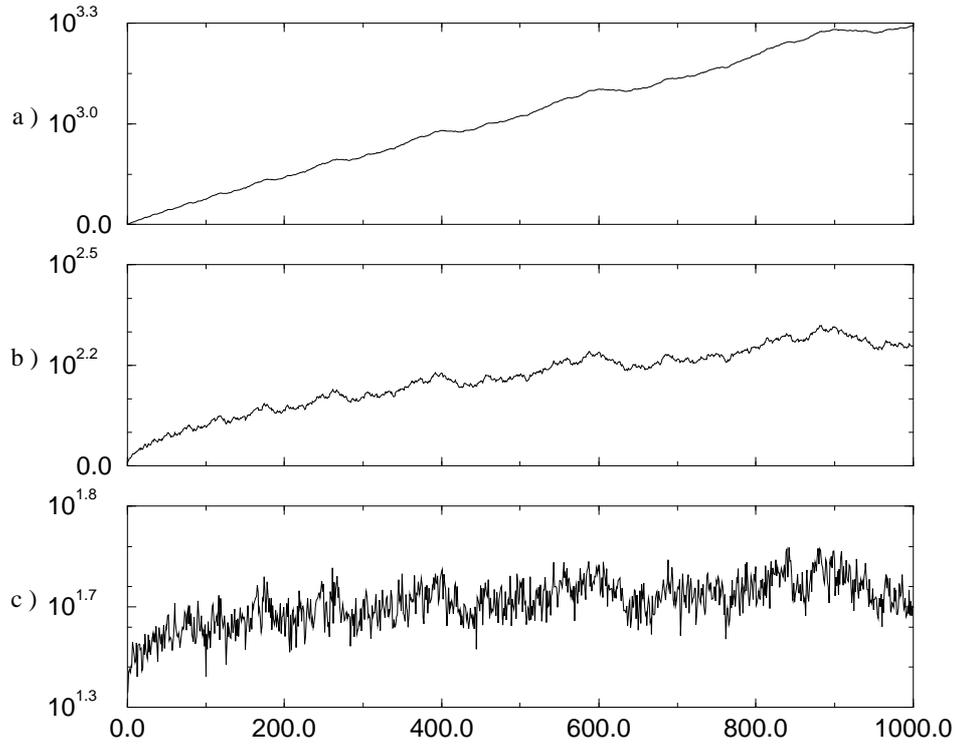
$$\Delta(\ell) \sim \ell^H . \tag{C.4}$$

Pode-se demonstrar que (vide Moreira *et al.* [121]),

$$D = d - H . \tag{C.5}$$

Logo, devido à definição da dimensão de Hausdorff-Besicovitch,  $0 \leq H < d - d_t$ .

Antes de prosseguirmos, veremos dois exemplos clássicos de estruturas fractais que serão úteis para a assimilação dos conceitos apresentados: a função de Weierstraß e a gaxeta de Sierpinski.



**Figura C.4:** *Função de Weierstrass: Observamos nesta figura a função de Weierstrass para  $b = 3/2$ , com  $H = 0.1$  em a),  $H = 0.5$  em b) e  $H = 0.9$  em c). Nota-se claramente que quanto menor o valor de  $H$ , maior a dimensão da curva, explicitando os comportamentos persistente e antipersistente.*

## Função de Weierstraß

Primeiramente, consideremos a função de Weierstraß, uma função contínua em toda parte e sem derivada em nenhum ponto; este “monstro” matemático ilustra bem as propriedades de auto-afinidade que aludimos anteriormente. A função de Weierstrass é dada pela série de Fourier

$$c(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos(b^n t)}{b^{(2-d_f)n}} \quad , \quad (C.6)$$

onde  $1 < d_f < 2$  ,  $b > 1$ . É fácil verificar que a função  $c(t)$  é contínua em todo ponto, porém sua derivada sempre diverge ! Podemos demonstrar a auto-afinidade desta função utilizando as frequências  $b^n$ , que variam de 0 a  $\infty$  em progressão aritmética ( nesse sentido a função de Weierstraß não possui escala!). Suponha que façamos a transformação  $n \rightarrow n + 1$ ; logo

$$c(t) = b^{-(2-d_f)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos(b^{n+1}t)}{b^{(2-d_f)n}} \quad .$$

Desse modo,

$$c(t) = b^{-(2-d_f)} c(bt) \quad , \quad (C.7)$$

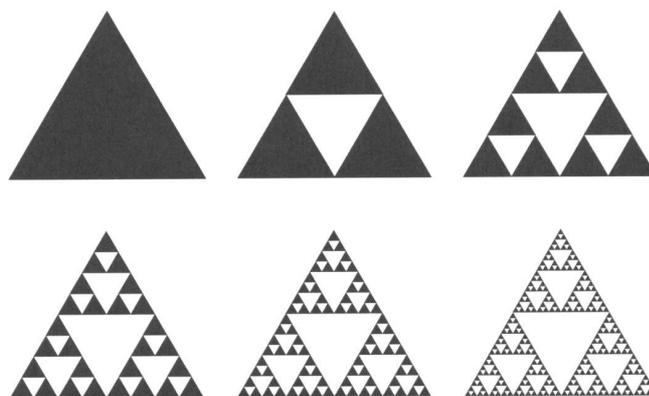
e, em analogia com a equação (C.3) teremos, em  $d = 2$ ,

$$H = 2 - d_f \quad . \quad (C.8)$$

Na Figura C.4 mostramos o gráfico da função de Weirtraß considerando diferentes valores de  $H$ , explicitando a relação de  $H$  com a rugosidade de uma superfície.

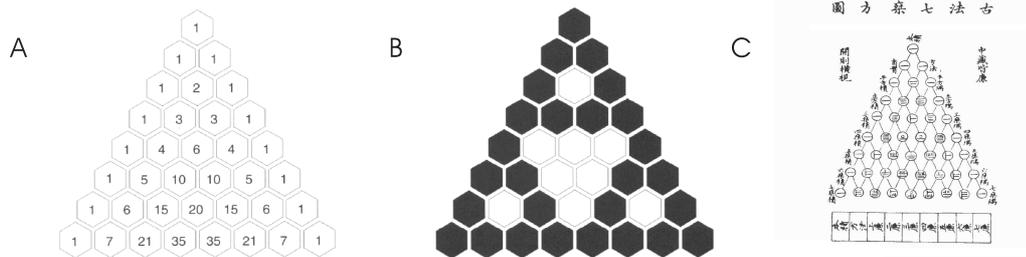
### Gaxeta de Sierpinski

Proposta pelo matemático polônes Waclaw Sierpinski em 1916, esta estrutura fractal pode ser entendida como a extensão do conjunto de Cantor para  $d > 1$ : em  $d = 2$  temos os tapetes de Sierpinski, e para  $d = 3$ , as esponjas cuja representante mais famosa é a esponja de Merger [135]. Desse modo, pode-se utilizar a idéia proposta por Cantor e estendida por Sierpinski para construir uma infinidade de estruturas, com dimensões entre  $0 < D < 3$ , como exemplificado na Figura C.5. Essas estruturas exibem claramente uma das características marcantes de objetos fractais: a presença de lacunas (vazios) em todas as escalas de observação!



**Figura C.5:** *Triângulo de Sierpinski. Mostramos seis iterações utilizando o processo de dizimação. É fácil perceber que, no limite do número de iterações indo para infinito, haverá “vazios” de todos os tamanhos na estrutura. Retirada de [135]*

Antes mesmo da proposta original de Sierpinski, a estrutura do “triângulo de Sierpinski” já estava presente no inconsciente humano, fato revelado pelos afrescos de igrejas medievais [135], e pela estrutura oculta do triângulo de Pascal ( mostrada na Figura C.6 ), se consideramos apenas a posição dos coeficientes ímpares.



**Figura C.6:** Em *A* mostramos o triângulo de Pascal, com os valores dos coeficientes; em *B* colorimos os coeficientes ímpares de preto e os pares de branco, revelando a estrutura do triângulo de Sierpinski. Em *C* reproduzimos o mais antigo triângulo de Pascal, datado de 1303. Retirada de [135].

### C.1.3 A Geometria de Superfícies Rugosas Auto-afins

O estudo de superfícies rugosas é de importância crucial para a compreensão de vários fenômenos em diferentes áreas da ciência e da tecnologia. Nos últimos anos, tem sido feito um considerável esforço para se desenvolver meios de classificar e descrever tais superfícies em termos quantitativos [117]. No capítulo 2, verificamos como os conceitos fractais desempenham um importante papel na caracterização no contexto de crescimento de superfícies.

De um modo geral, estaremos interessados em estudar o comportamento das propriedades das interfaces geradas durante um processo de deposição. Desse modo, definiremos a seguir os principais parâmetros utilizados para caracterizar uma interface autoafim:

- a altura média da interface no tempo  $t$ ,  $\bar{h}(t)$ ,

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t) , \quad (\text{C.9})$$

onde  $h_i(t)$  corresponde ao número de partículas depositadas no sítio  $i$  até o tempo  $t$ ;

- o  $n$ -ésimo momento,  $W_n$ , associado à distribuição de alturas  $\{h_i(t)\}$ , dado por

$$W_n(L, t) \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^n ; \quad (\text{C.10})$$

- a rugosidade do perfil,  $w$ , uma medida da dispersão das alturas em torno da altura média, que está diretamente relacionado com o segundo momento do perfil,

$$w(L, t) \equiv \sqrt{W_2(L, t)} = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [\bar{h}(t) - h_i(t)]^2} . \quad (\text{C.11})$$

A rugosidade é o principal parâmetro utilizado para avaliar o comportamento temporal das correlações espaciais dentro do sistema.

Para calcularmos a dimensão fractal de uma interface utilizaremos o método apresentado por Moreira *et al* [122], que determina o expoente de Hurst de um perfil a partir de sua rugosidade. Basicamente, o método consiste em medir a rugosidade da interface em torno da melhor reta que passa por um conjunto de pontos, exatamente como no método de *análise sem tendência de flutuações* [121]. A rugosidade  $w(L, \epsilon, t)$  na escala  $\epsilon$  é dada por

$$w(L, \epsilon, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w_i(\epsilon, t) , \quad (\text{C.12})$$

onde a rugosidade local  $w_i(\epsilon, t)$  é dada por

$$w_i^2(\epsilon, t) = \frac{1}{2\epsilon + 1} \sum_{j=i-\epsilon}^{i+\epsilon} \{h_j(t) - [a_i(\epsilon)x_j + b_i(\epsilon)]\}^2 , \quad (\text{C.13})$$

onde  $a_i(\epsilon)$  e  $b_i(\epsilon)$  são os coeficientes lineares de ajuste para o intervalo  $[i - \epsilon, i + \epsilon]$ , centrado em  $i$ . Utilizando a relação (C.4), teremos que

$$w(\epsilon) \sim \epsilon^H . \quad (\text{C.14})$$

Esta relação é utilizada para se determinar o expoente de Hurst dos perfis gerados no crescimento de superfícies.

O valor do expoente de Hurst fornece informações a respeito da morfologia do perfil: para  $H = 1/2$ , a interface não apresenta nenhuma tendência e pode ser mapeada exatamente em uma caminhada aleatória (*random walk*); para  $H < 1/2$ , temos um comportamento anti-persistente da interface, ou seja, à medida que nos deslocamos no eixo  $x$ , a altura  $h(x)$  flutua rapidamente para cima e para baixo, sem tendência evidente (Figura C.4 A); já para  $H > 1/2$ , temos um comportamento persistente, indicando tendências bem definidas na interface, que se aproxima de uma linha ( $d=1$ ), como pode ser observado na Figura C.4 - C. Existem provas rigorosas para se mostrar esses comportamentos do perfil em função de  $H$  [7, 56].

O comportamento auto-afim nas superfícies geralmente é observado apenas dentro de uma faixa de valores,  $\xi_{\parallel}^- < \delta x < \xi_{\parallel}^+$  e  $\xi_{\perp}^- < \delta h < \xi_{\perp}^+$ , onde  $\xi_{\parallel}^-$  e  $\xi_{\perp}^+$  denotam as escalas de corte inferior e superior, respectivamente, na direção paralela ou perpendicular à superfície. Para estruturas auto-afins, esses comprimentos se relacionam-se do seguinte modo [117],

$$\left( \frac{\xi_{\perp}^+}{\xi_{\perp}^-} \right) = \left( \frac{\xi_{\parallel}^+}{\xi_{\parallel}^-} \right)^H .$$

Nos processos de crescimento de superfícies, a relação acima pode ser escrita como,

$$\xi_{\perp}(t) = \xi_{\perp}^+ = \left( \frac{\xi_{\perp}^-}{\xi_{\parallel}^-} \right) \left( \xi_{\parallel}^+ \right)^H = A(t) \xi_{\parallel}^H, \quad (\text{C.15})$$

onde  $A(t)$  é uma função temporal.

Entretanto, na maioria dos experimentos e simulações,  $\xi_{\parallel}^- = \xi_{\perp}^- = \varepsilon$ , onde  $\varepsilon$  é o tamanho das partículas, ou corresponde a um sítio da rede. No caso de  $A(t)$  ser uma constante, podemos associar  $\xi_{\perp}$  à rugosidade do perfil, e  $\xi_{\parallel}$  à extensão linear das correlações do sistema no estado estacionário (no caso de uma rede finita,  $\xi_{\parallel} = L$ , o tamanho do sistema). Como mostrado no capítulo 2, a rugosidade de saturação apresenta um comportamento do tipo lei de potência em relação a extensão linear do sistema,  $w_{sat} \sim L^{\alpha}$ , onde  $\alpha$  é o expoente de rugosidade. Portanto, no caso de sistemas onde  $A(t) = \text{constante}$ , podemos escrever,

$$\xi_{\perp} \sim \xi_{\parallel}^{\alpha},$$

e  $\alpha = H$ . Note que, no caso geral,  $\alpha \neq H$ . Durante a década de 1990, havia uma grande confusão entre o expoente de Hurst e o expoente de rugosidade, pois ambos eram denotados pela letra  $\alpha$  e caracterizavam a rugosidade de um perfil. Nos últimos anos houve uma homogeneização do vocabulário, mas frequentemente ainda se encontram trabalhos onde esses expoentes são considerados iguais *a priori*.

# Apêndice D

---

## Apêndice D

Neste apêndice mostramos como calcular  $\Gamma(N, Z; L)$ , o número de configurações possíveis para que exatamente  $N$  sítios e  $Z$  pares de primeiros vizinhos estejam ativos em um anel com  $L$  sítios. Observando que a função geratriz associada,

$$\zeta(x, y; L) = \sum_{N, Z} \Gamma(N, Z; L) x^Z y^N ,$$

pode ser escrita como a função partição de um gás de rede unidimensional,

$$\zeta(x, y; L) = \sum_{\sigma_1=0}^1 \cdots \sum_{\sigma_L=0}^1 x^{i \sigma_i \sigma_{i+1}} y^{i \sigma_i} , \quad (\text{D.1})$$

com  $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$ , obtemos  $x = e^{\beta_0 J}$  e  $y = e^{\beta_0 \mu}$  para o gás de rede com interação  $J$  entre primeiros vizinhos, potencial químico  $\mu$  e o inverso da temperatura dado por  $\beta_0$ . A função partição pode ser obtida usando a matriz transferência  $T(\sigma, \sigma') = x^{\sigma \sigma'} y^{(\sigma + \sigma')/2}$ :

$$\zeta(x, y; L) = \text{Tr } T^L \quad (\text{D.2})$$

$$= \lambda_1^L + \lambda_2^L , \quad (\text{D.3})$$

onde  $\lambda_{1,2}$  são os autovalores de  $T$ :

$$\lambda_{1,2} = 1/2 \left( 1 + xy \pm \sqrt{(1 - xy)^2 + 4y} \right) . \quad (\text{D.4})$$

Para  $L$  par, teremos:

$$(a + b)^L + (a - b)^L = 2 \sum_{n=0}^{L/2} \binom{L}{2n} a^{2n} b^{L-2n} , \quad (\text{D.5})$$

de modo que

$$\lambda_1^L + \lambda_2^L = 2 \sum_{n=0}^{L/2} \binom{L}{2n} \left( \frac{1+xy}{2} \right)^{2n} \left( \frac{(1-xy)^2 + 4y}{4} \right)^{L/2-n}, \quad (\text{D.6})$$

levando a

$$\lambda_1^L + \lambda_2^L = 2y^{L/2} \sum_{n=0}^{L/2} \sum_{m=0}^{2n} \sum_{p=0}^{L/2-n} \sum_{q=0}^{2p} \binom{L}{2n} \binom{2n}{m} \binom{\frac{L}{2}-n}{p} \binom{2p}{q} \frac{(-1)^q (xy)^{m+q}}{(4y)^{n+p}}. \quad (\text{D.7})$$

O coeficiente de  $x^Z y^N$  é:

$$\Gamma(N, Z; L) = \frac{2}{4^{\frac{L}{2}+Z-N}} \sum_{n=0}^{L/2} \sum_{m=0}^{2n} \binom{L}{2n} \binom{2n}{m} \binom{\frac{L}{2}-n}{\frac{L}{2}-n+Z-N}. \quad (\text{D.8})$$

$$\cdot \binom{L+2(Z-N-n)}{Z-m} (-1)^{Z-m}. \quad (\text{D.9})$$

A expressão acima é calculada numericamente.

# Referências Bibliográficas

---

- [1] S. Alexeer, R. Orbach, *Density of states on fractals - fractons*, J PHYS LETT **43** (17), L625-L631 (1982).
- [2] D. Giménez, R.R. Allmaras, D.R. Huggins, E.A. Nater, *Mass, surface, and fragmentation fractal dimensions of soil fragments produced by tillage*, GEODERMA **86**, 261-278 (1998).
- [3] L.A.N. Amaral, A.-L. Barabási, S.V. Buldyrev, S. Havlin, H.E. Stanley, *New exponent characterizing the effect of evaporation on imbibition experiments*, PHYS REV LETT **72**: 641-644 (1994).
- [4] L.A.N. Amaral, A.-L. Barabási, S.V. Buldyrev, S.T. Harrington, S. Havlin, R. Sadr-Lahijany e H.E. Stanley, *Avalanches and the directed percolation depinning model: experiments, simulations and theory*, PHYS REV E **51**: 4087-4103 (1995).
- [5] M.A. Aon MA, S. Cortassa, D. Lloyd, *Chaotic dynamics and fractal space in biochemistry: Simplicity underlies complexity* CELL BIOL INT **24**: (8) 581-587 (2000).
- [6] Aristotle, *The Works of Aristotle*, (Enciclopædia Britannica Inc., Chicago, 1952).
- [7] A.P.F. Atman, *Crescimento de Interfaces em Meio Poroso*, (Dissertação de Mestrado, UFMG, 1998).
- [8] A.P.F. Atman e J.G. Moreira, *Growth exponent method in the Domany-Kinzel cellular automaton*, EUR PHYS J B **16**: (3) 501 (2000).
- [9] A.P.F. Atman, Ronald Dickman, J.G. Moreira, *Scaling exponents of rough surfaces generated by Domany-Kinzel stochastic cellular automaton*, PHYS REV E **66**, 016113 (2002).
- [10] A.P.F. Atman, Ronald Dickman, *Quasi-stationary distributions for the Domany-Kinzel cellular automaton*, aceito para publicação na PHYS REV E **6?**,(2002).
- [11] A.P.F. Atman, Ronald Dickman, J.G. Moreira, *Phase diagram of a probabilistic cellular automaton with three-site interactions*, submetido ao PHYS REV E (2002).

- [12] A.P.F. Atman, J.G. Vivas Mirea, A.P. Gonzalez, J.G. Moreira, *Lattice model for approximate self-affine soil profiles*, PHYSICA A **295**: 64-70 (2001).
- [13] A.-L. Barabási e H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, ( Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1995).
- [14] F. Bagnoli, *On damage spreading transitions*, J STAT PHYS **85**, 151 (1996).
- [15] F. Bagnoli, N. Boccara, R. Rechtman, *Nature of phase transitions in a probabilistic cellular automaton with two absorbing states*, PHYS REV E **63**: 046116, (2001).
- [16] F. Bagnoli, R. Bulajich, R. Livi, A. Maritan, *Phenomenological renormalization group for cellular automata*, J PHYS A **25**, L1071 (1992).
- [17] F. Bagnoli, R. Rechtman, e S. Ruffo, *Some facts of life*, PHYSICA A **171**, 249 (1991).
- [18] P. Bak, K. Chen, *The Physics of Fractals*, PHYSICA D **38**: (1-3) 5-12 (1989).
- [19] P. Bak, K. Chen, C. Tang, *A forest-fire model and some thoughts on turbulence*, PHYS LETT A **147** (5-6): 297-300 (1990).
- [20] A.T. Bernardes, J.G. Moreira, A. Castro-e-Silva, *Simulation of chaotic behaviour in population dynamics*, EUR PHYS J B **1**: (3) 393-396 (1998).
- [21] P. Bhattacharyya, *Growth of surfaces generated by a probabilistic cellular Automaton*, INT J MOD PHYS C **10**, 165 (1999).
- [22] P. Bhattacharyya, *Dynamical critical properties of a one-dimensional probabilistic cellular automaton*, EUR PHYS J B **3**, 247-252 (1998).
- [23] N. Boccara, E. Goles, S. Martinez e P. Picco, editors, *Cellular Automata and Cooperative Phenomena*, (Les Houches Workshop, Kluwer, 1993).
- [24] A. Borthwick, *Fractals in music: Introductory mathematics for musical analysis*, MUSIC LETT **81**: (4) 661-662 (2000).
- [25] S.G. Brush, *Statistical Physics and the Atomic Theory of Matter From Boyle and Newton to Landau and Onsager*, (Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1983).
- [26] S.V. Buldyrev, A.-L. Barabási, F. Caserta, S. Havlin, H.E. Stanley e T.Vicsék, *Anomalous interface roughening in porous media: experiment and model*, PHYS REV A **45**, R8313-R8316 (1992).
- [27] A. Bunde, S. Havlin, eds., *Fractals and Disordered Systems*, (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [28] A. Bunde, S. Havlin, eds., *Fractals in Science*, (Springer-Verlag, Berlin, 1994).

- [29] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, (John Wiley & Sons, New York, 1985.)
- [30] J.T Carstensen, M. Franchini, *The use of fractal geometry in pharmaceutical systems*, DRUG DEV IND PHARM **19**: (1-2) 85-100 (1993).
- [31] A. Castro-e-Silva, *Estudos Sobre Complexidade em Dinâmica Populacional e Embriogênese*, Tese de Doutorado, UFMG, 2001.
- [32] J. Chadoeuf, M Goulard e L. Garcia-Sanchez, *Modeling soil surface roughness by Boolean random functions*, MICROSC MICROANAL MICROSTRUCT **7**, 557-563 (1996).
- [33] R. Chandler, J. Koplik, K. Lerman, J. Willemsen, *Capillary displacement and percolation in porous media*, J FLUID MECH **119**, 249 (1982).
- [34] P.H. Coleman, *Fractals and the Universe*, FRACTALS **3**: (3) 567-579 (1995).
- [35] V. Comegna, P. Damiani, A. Sommella, *Use of a fractal model for determining soil water retention curves*, GEODERMA **85**, 307-323 (1998).
- [36] A. Coniglio, L. Dearcangelis, H.J. Herrmann *Fractals and Multifractals - Applications in Physics*, PHYSICA A **157**: (1) 21-30 (1989).
- [37] J. Conway, cap. 25 em *Winning Ways, v. 2, What is Life?* E. Berlejangp, J, Conway e R. Guy, eds., (Academic Press, New York, 1982).
- [38] N.H.D.T. Cremers, P.M. Van Dijk, A.P.J. de Roo, M.A. Verzevoort, *Spatial and temporal variability of soil surface roughness and the application in hydrological and soil erosion modelling*, HYDROL PROCESS **10**, 1035-1047 (1996).
- [39] R. Dickman, *Numerical integration of master equation*, PHYS REV E **65**, 047701 (2002).
- [40] R. Dickman e J. Kamphorst Leal da Silva, *Moment ratios for absorbing-state phase transitions*, PHYS REV E **58**, 4266 (1998).
- [41] R. Dickman e M. A. Muñoz, *Interface scaling in the contact process*, PHYS REV E **62**, 7632 (2000).
- [42] R. Dickman, M. A. Muñoz, A. Vespignani e S. Zapperi, *Paths to self-organized criticality*, BRAZ J PHYS **30**, 27 (2000).
- [43] R. Dickman e A. Y. Tretyakov, *Hyperscaling in the Domany-Kinzel cellular automaton*, PHYS REV E **52**, 3218 (1995).
- [44] R. Dickman e R. Vidigal, *Quasi stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*, J PHYS A **35**, 1147 (2002).

- [45] G. Dietler e Yi.-Ch. Zhang, *Fractal aspects of the swiss lescage*, PHYSICA A **191**, 213 (1992).
- [46] E. Domany e W. Kinzel, *Equivalence of cellular automata to ising-models and directed percolation*, PHYS REV LETT **53**: 447 (1984).
- [47] M. Eden, *A two dimensional growth process*, in *PROC IV BERK S MATH STAT PROB* editado por J. Neyman, (Univ. of California Press, Berkeley, 223-239, 1961).
- [48] S. F. Edwards e D. R. Wilkinson, *The surface statistics of a granular aggregate*, PROC R SOC LOND **A381**, 17-31 (1982).
- [49] J.W. Essam, *Direct compact percolation: cluster size and hyperscaling*, J PHYS A **22**, 4927 (1989).
- [50] B. Evans, *Fractal arts - combining music, math and art*, FUTURIST **22**: (3) 29-32 (1988).
- [51] K.J. Falconer *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*, (John Wiley & Sons, 1990).
- [52] F. Family, *Scaling of rough surfaces - effects of surface-diffusion*, J PHYS A **19**: L441 (1986).
- [53] F. Family e T. Vicsek, *Scaling of active zone in the Eden process on percolation networks and ballistic deposition*, J PHYS A **18**, L75-L81 (1985).
- [54] F. Family e T. Vicsek eds., *Dynamics of Fractal Surfaces*, (World Scientific, Singapore, 1991).
- [55] D. Farmer, T. Toffoli e S. Wolfram, editores, *Cellular Automata*, (North Holle, Amsterdam, 1984).
- [56] J. Feder, *Fractals*, (Plenum Press, New York, 1988).
- [57] P.A. Ferrari, H. Kesten, A. Martínez e P. Picco, *Existence of quasi-stationary ditriburions - a renewal dynamical approach*,
- [58] S.C. Ferreira ,M.L. Martins ,M.J. Vilela, *A growth model for primary cancer*, PHYSICA A **261**: (3-4) 569-580 (1998).
- [59] S. Frontier, *Species-diversity as a fractal property of biomass*, IFIP TRANS **41**: 119-127 (1994).
- [60] J. Gao, Z.G. Xia, *Fractals in physical geography*, PROG PHYS GEOG **20**: (2) 178-191 (1996).
- [61] A. Georges e P. Le Doussal, *From equilibrium spin models to probabilistic cellular automata*, J STAT PHYS **54**, 1011 (1989).

- [62] E. P. Gheuvoghlianian e T. Tomé, *Joint evolution of two Domany-Kinzel cellular automata*, INT J MOD PHYS B **10**, 1245 (1997).
- [63] D. Giménez, E. Perfect, W.J. Rawls, Ya. Pachepsky, *Fractal models for predicting soil hydraulic properties: a review*, ENGINEERING GEOL **48**, 161-183 (1997).
- [64] J. Gleick, *Caos: a Criação de uma Nova Ciência*, (Campus, Rio de Janeiro,1990).
- [65] M.A.F. Gomes, G.L. Vasconcelos, I.J. Tsang, *et al.*, *Scaling relations for diversity of languages*, PHYSICA A **271**: (3-4) 489-495 (1999).
- [66] T.J. Gordon, D. Greenspan, *Chaos and Fractals - new tools for technological and social-forecasting*, TECHNOL FORECAST SOC **34**: (1) 1-25 (1988).
- [67] P. Grassberger, *On phase transitions in Schlogl 2nd model*, Z. Phys. B **47**, 365 (1982);  
H. K. Janssen, *On the non-equilibrium phase transition in reaction-diffusion system with an absorbing stationary state*, Z. Phys. B **42**, 151 (1981).
- [68] P. Grassberger, *Are damage spreading transitions generically on the directed percolation universality class?* J STAT PHYS **79**, 13 (1995).
- [69] H. Gutowitz, editor, *Cellular Automata: Theory and Experiments*, (North-Holle, Amsterdam, 1990).
- [70] H. A. Gutowitz, J. D. Victor, B. W. Knight *Local-structure theory for cellular automata*, PHYSICA D **28**, 18 (1987).
- [71] H. Haken, *Information and Self-Organization - A macroscopic approach to complex systems*, (Springer-Verlag, Berlim, 1988).
- [72] J. M. Hammersley, *Harnesses*, in *PROC V BERK S MATH STAT PROB*, pp. 89-117, editado por L. Le Cam e J. Neyman, (Univ. of California Press, Berkeley, (1967).
- [73] H. J. Herrmann, *Damage spreading*, PHYSICA A **168** 516 (1990).
- [74] H. J. Herrmann, D. P. Landau, D. Stauffer, *Computer simulation of a model for irreversible gelation*, PHYS REV LETT **49** 412 (1982).
- [75] H. J. Herrmann, S.Roux, ed.s *Statistical Models for Fracture in Disordered Media* (North-Holle, Amsterdã, 1990).
- [76] S. Havlin , S.V. Buldyrev, A.L. Goldberger, R. N. Mantegna, S.M. Ossadinik, C.K. Peng, M. Simon, H.E. Stanley, *Fractals in Biology and Medicine*, CHAOS, SOL & FRACTALS **6**: 171-201 (1995).
- [77] T. Harris, *Contact interactions on a lattice*, ANN PROBAB **2**, 969 (1974).

- [78] S. He, G. L. M. K. S. Kahanda e P.-Z. Wong, *Roughness of wetting fluid invasion fronts in porous media*, PHYS REV LETT, **69**, 3731 (1992).
- [79] D.B Hibbert, *Fractal in Chemistry*, CHEMOMETR INTELL LAB. **11**: (1) 1-11 (1991).
- [80] H. Hinrichsen, *Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states*, ADV PHYS **49**, 815 (2000).
- [81] H. Hinrichsen, *On possible experimental realizations of directed percolation*, BRAZ J PHYS **30**:(1), 69-82 (2000).
- [82] H. Hinrichsen, *First-order transitions in fluctuating 1+1-dimensional nonequilibrium systems*, cond-mat/0006212 (2000).
- [83] H. Hinrichsen, J. S. Weitz, E. Domany, *An algorithm-independent definition of damage spreading - application to directed percolation*, J STAT PHYS **88**, 617 (1997).
- [84] V.K. Horváth, F. Family, T. Viksek, *Dynamic scaling of the interface in two-phase viscous flows in porous media*, J PHYS A **24**: L25-L29, (1991).
- [85] I. Jensen, *Low-density series expansions for directed percolation on square e triangular lattices*, J PHYS A-MATH GEN **29**: (22) 7013-7040 (1996).
- [86] L. P. Kadanoff, *From Order to Chaos - Essays: Critical Chaotic and Otherwise*, (World Scientific, Singapore, 1993).
- [87] J.A. Kaeorp, S. Rice, *Fractal Modelling - Growth and Form in Biology*, SCIENCE **266**: (5185) 664-665 OCT 28 (1995).
- [88] M. Kardar, G. Parisi e Y.-C. Zhang, *Dynamic scaling of growing interfaces*, PHYS REV LETT **56**:(9) 889-892 (1986).
- [89] A. Kemper, A. Schadschneider e J. Zittarz, *Transfer-matrix density-matrix renormalization group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems*, J PHYS A **34**, 7769 (2001).
- [90] J. Kertész e D.E. Wolf, *Anomalous roughening in growth models*, PHYS REV LETT **62**, 2571 (1989).
- [91] L. B. Kier, C. K. Cheng, P. G. Seybold, *Cellular automata models of chemical systems*, SAR QSAR ENVIRON RES **11** (2): 79-102 (2000).
- [92] J. M. Kim e J. M. Kosterlitz, *Growth in a restricted solid-on-solid model*, PHYS REV LETT **72**, 2903-2292, (1989).
- [93] W. Kinzel, *Phase transitions on cellular automata*, Z PHYS B **58**, 229 (1985).

- [94] G. A. Kohring e M. Schreckenberg, *The Domany-Kinzel cellular automaton revisited*, J PHYSIQUE I **2**, 2033 (1992).
- [95] R. Kubo, *Statistical Mechanics*, ( North-Holland, Amsterdã, 1967).
- [96] T. S. Kuhn, *The Structure of Scientific Revolutions*, (Univ. Chicago Press, Chicago, 1974.)
- [97] S. Kwon, W. Hwang, H. Park, *Dynamic behavior of driven interfaces in models with two absorbing states*, PHYS REV E **59**:(5), 4949-4952 (1999).
- [98] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, (Pergamon Press, London, 1958.)
- [99] D.P. Lara, J.A. Plascak, *The critical behavior of the general spin Blume-Capel model*, INT J MOD PHYS B **12**: (20) 2045-2061 (1998).
- [100] K. B. Lauritsen e M. Alava, *Quenched noise and over-active sites in sandpile dynamics*, EUROPHYS LETT**53**:(5), 563 (2001).
- [101] T. D. Lee, C. Yang, *Statistical theory of equations of state phase transitions. II Lattice gas and Ising Model*, PHYS REV, ser. 2, **87**:284-285 (1952).
- [102] A. Lesne, *Renormalization Methods - Critical Phenomena, Chaos and Fractal Structures*, (John Wiley & Sons, Chichester, 1998.)
- [103] B.L. Li, *Fractal geometry applications in description and analysis of patch patterns and patch dynamics*, ECOL MODEL **132**: (1-2) 33-50 (2000).
- [104] J. M. López, *Scaling approach to calculate critical exponents in anomalous surface roughening*, PHYS REV LETT **83**, 4594 (1999).
- [105] M. Lyra, ed. *Proceedings of IUPAP International Conference on Fractal Aspects of Complex Systems*, PHYSICA A **295** (2001).
- [106] S. K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, (North Holland, Amsterdam, 1976).
- [107] B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance and Dimension*, (W. H. Freeman & Co., San Francisco, 1977).
- [108] B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, (W. H. Freeman & Co., San Francisco, 1982).
- [109] B.B. Mandelbrot, *Fractals in Physics - squig clusters, diffusions, fractal measures, and the unicity of fractal dimensionality*, J STAT PHYS **34**: (5-6) 895-930 (1984).
- [110] B.B. Mandelbrot, *Galaxy distributions and fractals*, ASTROPHYS LETT COMM **36**: (1-6) 1-5 (1997)

- [111] P. Manneville, N. Boccara, G. Vichniac e R. Bidaux, editors, *Cellular Automata and Modeling of Complex Physical Systems*, (Springer, Heidelberg, 1989).
- [112] R.N Mantegna, H.E. Stanley, B. LeBaron, *An introduction to econophysics*, NATURE **408**: (6810) 290-291 (2000).
- [113] J. Marro e R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [114] M.A. Martin, F. J. Taguas, *Fractal modelling, characterization and simulation of particle-size distributions in soil*, PROC R SOC LOND A **454**, 1457-1468 (1998).
- [115] M. L. Martins, H. F. Verona de Resende, C. Tsallis e A. C. N. de Magalhães, *Evidence for a new phase in the Domany-Kinzel Cellular automaton*, PHYS REV LETT **66**: 2045 (1991).
- [116] M. Matsushita e Sh. Ouchi, *On the self-affinity of various curves*, PHYSICA D **38**, 246 (1989).
- [117] P. Meakin, *Fractals, Scaling and Growth far from Equilibrium*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, U.K., 1998).
- [118] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Seer e R. C. Ball, *Ballistic deposition on surfaces*, PHYS REV A, **34**, 5091 (1986).
- [119] I.L. Menezes Sobrinho, *Expoente da rugosidade e dimensão fractal do perfil de papel rasgado*, Dissertação de Mestrado, UFMG (1994).
- [120] I.L. Menezes-Sobrinho, A.T. Bernardes, J.G. Moreira, *Failure regimes in (1+1) dimensions in fibrous materials*, PHYS REV E **6302**: (2) 5104-+ Part 2 (2001).
- [121] J.G. Moreira, J. Kamphorst Leal da Silva e S. Oliffson Kamphorst, *On the fractal dimension of self-affine profiles*, J PHYS A **27**: 8079 (1994).
- [122] A. C. E. Silva, J.G. Moreira, *Roughness exponents to calculate multi-affine fractal exponents*, PHYSICA A **235** : (3 e 4), 327-333 (1997).
- [123] J. Molofsky, *Population-dynamics and pattern-formation in theoretical populations ecology*, ECOLOGY **75** (1): 30-39 (1994).
- [124] T. F. Nagy, S. D. Mahanti, C. Tsallis, *Correlations functions study on the Domany-Kinzel cellular automaton*, PHYSICA A **250**, 345 (1998).
- [125] O. Narayan, D.S. Fisher, *Threshold critical dynamics of driven interfaces in random media*, PHYS REV B **48**:7030 (1993).
- [126] I. Nasell, *On the quasi-stationary distribution of the Ross malaria model*, MATH BIOSCI **107** 187 (1991).

- [127] T. Nattermann e L.-H. Tang, *Kinetic surface roughening. I. The Kardar-Parisi-Zhang equation in the weak-coupling regime*, PHYS REV A **45**: 7156 (1992).
- [128] T. Natterman, Stepanow S., Tang L.H., Leschhorn H., *Dynamics of interface depinning in a disordered medium*, J PHYSIQUE II:**2** 1483-1488 (1992).
- [129] A. Nemes, J.H.M. Wösten, A. Lilly, J.H. Oude Voshaar, *Evaluation of different procedures to interpolate particle-size distributions to achieve compatibility within soil databases*, GEODERMA **90**, 187-202 (1999).
- [130] L. Niemeyer, L. Pietronero, H. J. Wiesman, *Fractal Dimension of Dielectric Breakdown*, PHYS REV LETT **52**, 1033 (1984).
- [131] M.J. de Oliveira, J.E. Satulovsky, *Renormalization group of probabilistic cellular automata with one absorbing state* PHYS REV E **55**:(6), 6377-6383 (1997).
- [132] L. Onsager, *Crystal statistics.I.A two dimensional model with an order-disorder transition*, PHYS REV **65**: 117-49 (1944).
- [133] A. Pais, *Sutil é o Senhor - A ciência e a vida de Albert Einstein*, (Nova Fronteira, Rio de Janeiro, 1995.)
- [134] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, Nova Yorque, 1972).
- [135] H. O. Peitgen, H. Jurguens, D. Saupe, *Chaos and Fractals: new frontiers of science* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [136] T.J.P. Penna, D. Stauffer, *Bit-string ageing model and German population*, Z PHYS B CON MAT **101**: (3) 469-470 (1996).
- [137] R. Penrose, *A mente nova do Rei - Computadores, mentes e as leis da Física*, (Campus, Rio de Janeiro, 1993).
- [138] E. Perfect, B.D. Kay, *Applications of fractals in soil and tillage research: A review*, SOIL & TILL RES **36**, 1-20 (1996).
- [139] E. Perrier, N. Bird, M. Rieu, *Generalizing the fractal model of soil structure: the pore-solid fractal approach* GEODERMA **88**, 137-164 (1999).
- [140] L. Pietronero, *Fractals in Physics - Applications and Theoretical Developments*, PHYSICA A **191**:(1-4) 85-94 (1992).
- [141] M. Plischke, B. Bergensen, *Equilibrium Statistical Physics*, World Scientific, Singapore, 1994).
- [142] J. A. Redinz e M. L. Martins, *Roughness exponent in two-dimensional percolation, Potts and clock models*, PHYS REV E **63**, 66133 (2001).
- [143] Reif, *Statistical Physics*, in *Berkely Physics Course*, (McGraw-Hill, Berkeley, 1965).

- [144] F.J. Resende, *Simulação de modelos de spins - Geradores de números aleatórios*, (Dissertação de Mestrado, UFMG, 1998).
- [145] M.B. Ribeiro, A.Y. Miguelote, *Fractals and the distribution of galaxies*, BRAZ J PHYS **28**:(2) 132-160 (1998).
- [146] M.A. Rubio, C.A. Edwards, A. Dougherty, J.P. Gollub, *Self-Affine Fractal Interfaces from Immiscible Displacement in Porous Media*, PHYS REV LETT **63**: 1685-1688 (1989).
- [147] M. Sahimi, *Flow phenomena in rocks - from continuum models, percolation, cellular-automata, and simulated annealing*, REV MOD PHYS **65**:(4) 1393-1534 (1993).
- [148] J. A. de Sales, M. L. Martins e J. G. Moreira, *One-dimensional cellular automata characterization by the roughness exponent*, PHYSICA A **245**, 461 (1997).
- [149] J. A. de Sales, M. L. Martins e J. G. Moreira, *Roughness Exponent in the Domany-Kinzel cellular automaton*, J PHYS A **32**, 885 (1999).
- [150] S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (Edusp, São Paulo, 1997).
- [151] F. Schögl, *Chemical reaction models for nonequilibrium phase transitions*, Z PHYS **253**, 147 (1972).
- [152] T. D. Schultz, D. C. Mathis, E. H. Lieb, *2-Dimensional Ising model soluble problem of many fermions*, REV MOD PHYS **36**, 856 (1964).
- [153] P. G. Seybold, L. B. Kier, C. K. Cheng, *Modeling dynamic chemical systems using cellular automata*, ABSTR PAP AM CHEM S **217**: 073-COMP (1999 ).
- [154] R.R Shearer, *Chaos theory and Fractal geometry - their potential impact on the future of art*, LEONARDO **25**: (2) 143-152 (1992).
- [155] J.K.L. da Silva, R. Dickman, *Pair contact process in two dimensions*, PHYS REV E **60**: (5) 5126-5129 Part A (1999).
- [156] T.J. da Silva, J.G. Moreira, *Kinetic roughening model with opposite Kardar-Parisi-Zhang nonlinearities*, PHYS REV E **6304**: (4) 1601-+ Part 1 (2001).
- [157] H. Spindler, G. Vojta, *Fractals in Physical-Chemistry*, Z CHEM **28**: (12) 421-427 (1988).
- [158] H.E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, (Oxford Univ. Press, Oxford, 1971).
- [159] D. Stauffer, *Monte Carlo methods in Statistical Physics*, in *Computer Simulation and Computer Algebra*, D. Stauffer, F. H. Hehl, N. Ito, V. Winkelmann e J. G. Zabolitzky eds., (Springer-Verlag, Berlin, 1993).

- [160] D. Stauffer, *Ising model as test for simple random number generators*, INT J MOD PHYS C **10**: (5) 807-808 (1999).
- [161] D. Stauffer, *Econophysics - A new area for computational statistical physics?*, INT J MOD PHYS C **11**: (6) 1081-1087 (2000).
- [162] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to percolation theory*, (Taylor & Francis, London, 1992).
- [163] D. Stauffer, H. E. Stanley, *From Newton to Mandelbrot - A Primer in Theoretical Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [164] T. Tomé, *Spreading of damage in the Domany-Kinzel cellular automaton: a mean-field approach*, PHYSICA A **212**, 99, (1994).
- [165] T. Tomé, J.R. Drugowich de Felício, *Probabilistic cellular automaton describing a biological immune system*, PHYS REV E **53**: 3976 (1996).
- [166] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Renormalization group for the Domany-Kinzel cellular automaton*, PHYS REV E **55**, 4000 (1997).
- [167] T. Tomé e M.J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, (Edusp, São Paulo, 2001).
- [168] S.W. Tyler e S.W. Wheatcraft, *Fractal Scaling of soil particle-size distributions - analysis and limitations*, SOIL SCI SOC AM J **53**, 362-369 (1992).
- [169] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (North-Holle, Amsterdã, 1992).
- [170] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, (World Scientific, Singapore, 1992).
- [171] T. Vicsek, M. Cserző, V.K. Horváth, *Self-affine growth of bacterial collonies*, PHYSICA A **167**: 315-321 (1990).
- [172] J.G. Vivas Miranda, *Analysis Fractal del Microrelieve del Suelo* (Tesis de Doctorado, Univ. da Coruña, 2000).
- [173] J.G. Vivas Miranda, A. Paz González, CAD LAB XEOL LAXE **23**, 121-136 (1998).
- [174] M. J. Vold, *A numerical approach to the problem of sediment volume*, J COLL SCI **14**, 168-174 (1959).
- [175] J. von Neumann, *Theory of Self-Reproducing Automata*, editado e completado por A. Burks, (Champaign, University of Illinois Press, 1966).
- [176] G.B. West, J.H. Brown, B.J. Enquist, *The fourth dimension of life: Fractal geometry and allometric scaling of organisms*, SCIENCE **284**: (5420) 1677-1679 (1999).

- [177] R.J. Whittaker, *Ecology - Scaling, energetics and diversity*, NATURE **401**: (6756) 865-866 (1999).
- [178] B. Widom, *Surface tension and molecular correlations near the critical point, Equations of state in the neighborhood of the critical points*, J CHEM PHYS **43** 3892-97, 3898-3905, (1965).
- [179] K. G. Wilson, *The renormalization-group and critical phenomena I: renormalization and the Kadanoff scaling picture*, PHYS REV B **4**: 3174-3184 (1971).
- [180] K. G. Wilson, K. J. Kogut, *The renormalization group and the  $\epsilon$  expansion*, PHYS REP PHYS LETT **C12**, 75-200 (1974).
- [181] D.E. Wolf, J. Villain, *Growth with surface diffusion*, EUROPHYS LETT **13**: 389-394 (1990).
- [182] S. Wolfram, *Statistical mechanics of cellular automata*, REV MOD PHYS **55** (3) 601-644 (1983).
- [183] S. Wolfram, *Theory and Applications of Cellular Automata*, (World Scientific, Singapore, 1986).
- [184] S. Wolfram, editor, *Proceedings of an interdisciplinary workshop, Los Alamos, New-Mexico, USA*, PHYSICA D**10**: (1-2) 1-228 (1984).
- [185] K. Wood, *Chaos, Fractals and Computers*, ELECTRON WIRELESS W **95**: (1644) 957 (1989).
- [186] A. M. Yaglom, DOKL AKAD NAUK SSSR **56** 797 (1947).
- [187] O.I. Yordanov, A. Guissard, *Approximate self-affine model for cultivated soil roughness*, PHYSICA A **238**, 49-65 (1997).
- [188] G. F. Zebende e T. J. P. Penna, *The Domany-Kinzel cellular automaton phase diagram*, J STAT PHYS **74**, 1273 (1994).
- [189] J. Zhang, Y.-C. Zhang, P. Alstrøm e M. T. Levinsen, *Modeling forest-fire by a paper-burning experiment, a realization of the interface growth-mechanism*, PHYSICA A, **189**, 383 (1992).
- [190] R. M. Z. dos Santos, S. Coutinho, *Dynamics of HIV infection: A cellular automata approach*. PHYS REV LETT **87** (16): art. no. 168102 (2001).