

**Simulações de Sistemas com Estados Absorventes:
Método e Aplicações**

Marcelo Martins de Oliveira

Orientador: Prof. Ronald Dickman

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

Agosto de 2007

À minha família.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Ronald Dickman, pela atenção, confiança e amizade, bem como pelo seu entusiasmo pelo trabalho.

Aos professores do Departamento de Física responsáveis pela minha formação acadêmica, e também aos Profs. Gastão Braga e Bernardo N. Lima do Dep. de Matemática/UFMG.

Aos colegas do curso, em especial aos colegas do Grupo de Física Estatística.

À minha mãe, Rosa Maria, minha irmã Letícia, e meu irmão Cyrio Jr. Ao meu pai, Cyrio (*in memoriam*).

Aos meus amigos “milongueros”, em especial às minhas parceiras Mell (que virou Doutora antes de mim) e à porteñita Adri, por dividirem comigo seu “abraço” nas inúmeras sessões de “Tangoterapia”. E também a Astor Piazzolla e Carlos Gavito, por traduzirem um sentimento em som e em movimento.

Ao CNPq e à FAPEMIG pelo apoio financeiro.

Àqueles que contribuíram de alguma forma, direta ou indiretamente para a elaboração desta tese.

Conteúdo

Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	ix
RESUMO	x
ABSTRACT	xi
1 Introdução	1
1.1 Organização do Trabalho	3
2 Transições de fase para estados absorventes	5
2.1 A Equação Mestra	5
2.2 Processos em Equilíbrio	8
2.3 Processos Fora do equilíbrio	10
2.4 Universalidade	12
2.5 O Processo de Contato	16
2.5.1 Comportamento crítico	18
2.5.2 Teoria de Escala	21
2.5.3 Teoria de Campo médio	25
2.6 A classe da Percolação Dirigida (PD)	29

2.7	Outras classes de Universalidade	35
2.8	Métodos alternativos para identificar uma classe de universalidade	37
2.8.1	Razões entre momentos e cumulantes	37
2.9	Sumário	39
3	Simulando sistemas com estados absorventes	41
3.1	Introdução	41
3.2	Distribuições Quase-Estacionárias	44
3.3	O método de simulação QE	46
3.4	Implementando o método	48
3.4.1	Processo de Contato em um Grafo Completo	49
3.4.2	Processo de contato unidimensional	53
3.5	Outras estratégias simulacionais	60
3.6	Sumário	62
4	O Processo de Contato: Algumas propriedades críticas e o Regime subcrítico	63
4.1	Introdução	63
4.2	A função correlação	64
4.3	A fase subcrítica	70
4.4	Sumário	76
5	A transição de fase no Processo de Contato por Pares com Difusão	78
5.1	Introdução	78

5.2	Propriedades fenomenológicas e comportamento de escala	81
5.3	Teoria de Campo Médio	83
5.4	Estudos numéricos: uma revisão cronológica	86
5.5	PCPD: Uma nova classe de universalidade?	94
6	Razões entre momentos no Processo de Contato por Pares com Difusão	96
6.1	Modelo e método	96
6.2	Resultados	98
6.3	Discussão	106
7	Conclusões e Perspectivas	109
	Bibliografia	111
	Apêndice A – Obtenção dos momentos e cumulantes a partir da função geratriz de uma distribuição	119
	Apêndice B – Exemplo de código	121

Lista de Figuras

1	Gráfico do módulo da magnetização em função da temperatura na transição de fase de um ferromagneto, com campo externo nulo.	10
2	Processo com 4 estados onde o estado 0 é absorvente.	11
3	Dados experimentais para cinco materiais magnéticos com características estruturais bem diferentes, plotados em um diagrama <i>MHT</i> re-escalonado. Os materiais são CrBr_3 , EuO , Ni , YIG , e Pd_3Fe . Figura extraída de [24].	13
4	Taxas de transição no processo de contato unidimensional	16
5	Densidade estacionária de partículas, em função do parâmetro de ordem no PC unidimensional, obtida através de análise de séries, conforme [6].	17
6	Evolução temporal típica a partir de uma única partícula, no processo de contato unidimensional, para valores subcrítico, crítico e supercrítico de λ	19
7	Evolução temporal da densidade de sítios ativos para valores diferentes do parâmetro de controle λ	20
8	Densidade de sítios QE no Processo de Contato unidimensional. Os tamanhos de sistema são $L = 20, 50, 100, 200, 500, 1000$, de cima para baixo. Figura extraída de [6].	24
9	Gráfico reescalado da densidades de sítios QE. Figura retirada de [6].	25
10	Densidade de stios ativos para o processo de contato unidimensional, segundo a teoria de campo médio.	27
11	Modelo para uma rocha porosa bi-dimensional imersa em líquido.	30

12	Percolação direcionada, onde a direção preferencial é interpretada como uma coordenada temporal. O processo evolui de maneira síncrona. Figura extraída de [39]	31
13	Interpretação da percolação dirigida como um processo de reação-difusão. Temos em: (a) aniquilação, (b) e (c) difusão, (d) criação, e (e) coagulação. Figura extraída de [39].	31
14	(a) Esboço da fase DSM2 com as orientações observadas no cristal líquido. (b) Foto do experimento a 35.153V. As regiões tipo DSM2 estão em escuro, e a região DSM1, em claro.(c) Tratamento dos dados de (b). (d) Esquema da dinâmica do sistema (e) Regiões ativas (DSM2) para três voltagens próximas ao ponto crítico: 34.858, 34.876, e 34.900V. Os diagramas representam uma área de $1206\mu m \times 899\mu m$ e um tempo total de 6.6s. Figura extraída de [39]	34
15	Maneira “convencional” de se determinar os valores das grandezas estacionárias. .	43
16	Devido à diminuição do tamanho da amostra, as flutuações nas médias ficam cada vez maiores.	43
17	Processo original X_t , com o estado 0 absorvente, e seu processo relacionado X_t^* . .	48
18	Um grafo completo com 5 sítios.	49
19	Preenchendo a lista com os M primeiros estados.	52
20	Distribuições QE para o PCGC obtidas através das relações de recorrência (linhas sólidas) e através da simulação QE (símbolos). O grafo possui 100 sítios e $\lambda = 0.5$, 1.0 e 1.5; da esquerda para a direita.	52
21	Densidade de sítios QE, ρ , no PC unidimensional. Simulação QE: $L = 20$ (símbolos de cima) e $L = 200$ (símbolos de baixo). As linhas sólidas representam os resultados das simulações convencionais.	54
22	Razão entre os momentos, m , no PC unidimensional. Os símbolos utilizados são os mesmos da figura anterior.	55
23	Tempo de vida τ no PC unidimensional. Os símbolos são os mesmos utilizados na Figura 21.	56

24	Tempo de vida QE, τ , versus tamanho do sistema L , no PC unidimensional na criticalidade. O detalhe mostra o desvio da lei de potência pura, $\tau \propto L^{1,5818}$ (símbolos abertos), e da lei de potência com uma correção de escala do tipo $L^{-0,75}$ (símbolos negros, deslocados verticalmente para visualização).	57
25	Parâmetro de ordem QE, ρ , em função do tamanho do sistema L , no PC unidimensional na criticalidade. O detalhe mostra o desvio da lei de potência pura, $\rho \propto L^{1,5818}$ (símbolos abertos), e da lei de potência com uma correção de escala do tipo $L^{-0,75}$ (símbolos negros, deslocados verticalmente para visualização). . .	58
26	Número de vezes que o processo modificado visita o estado absorvente em uma simulação de 10^6 passos.	59
27	Comparação entre a distribuição obtida ao se substituir o estado absorvente por uma barreira refletora e a distribuição QE.	62
28	Resultados da simulação QE para a função correlação escalada $C^* = L^{\beta/\nu_{\perp}} C(r)$ no PC crítico unidimensional. Símbolos: \times : $L = 1280$; $+$: $L = 2560$. A inclinação da linha sólida é -0.252. Detalhe: gráfico semi-logaritmico de $\tilde{C} = r^{\beta/\nu_{\perp}} C(r)$ versus r em um sistema de 2560 sítios, para $\lambda = \lambda_c$ (curva superior), $0.999\lambda_c$ e $0.99\lambda_c$ (inferior).	67
29	Inclinação local $-\alpha(r)$ da função correlação em função de $1/r$. Símbolos abertos: $L = 1280$; símbolos preenchidos: $L = 2560$	67
30	Distribuição das distâncias dos "gaps" no PC crítico unidimensional. \square : $L = 640$; $+$: $L = 5120$. A inclinação da linha sólida é -1.73.	69
31	Distribuição das distâncias d no subespaço de duas partículas no PC crítico unidimensional. Símbolos abertos: $L = 640$; símbolos negros: $L = 1280$. A inclinação da linha sólida é -2.45.	70
32	Tempo de vida QE τ versus Δ , para $L = 20, 40, 80, \dots, 2560$. A inclinação da linha é -1.74.	72
33	Dados da Fig.31 plotados em termos das variáveis escaladas $\Delta^* = L^{1/\nu_{\perp}} \Delta $ e $\tau^* = L^{-z} \tau$, com $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$. A inclinação da linha é -1.734.	73

34	Tempo de vida QE τ em função de Δ , para $ \Delta = 0.3, 0.2, 0.1, 0.05, 0.02, 0.01, 0.005, 0.002, 0.001, 0.0005$, de baixo para cima ($L = 20, 40, 80, \dots, 2560$). Detalhe: estimativas para tamanho infinito do tempo de vida em função de $ \Delta $, plotadas em escalas logarítmicas.	74
35	Parâmetro de ordem QE escalado $\rho^* \equiv \Delta ^{-\beta} \rho$ versus $\Delta^* = L^{1/\nu_{\perp}} \Delta $ para $L = 320$ (quadrados abertos), $L = 1280$ (diamantes) e $L = 2560$ (quadrados preenchidos). A inclinação da linha é -1.1097	75
36	Distribuição de probabilidade QE do parâmetro de ordem no regime subcrítico, para $L = 2560$ e (da esquerda para direita) $\lambda/\lambda_c = 0.8, 0.9$ e 0.95	75
37	Gráfico re-escalado dos dados mostrados na Figura 36; $\lambda/\lambda_c = 0.8$ (quadrados), 0.9 (círculos) and 0.95 (triângulos).	76
38	Evolução temporal, a partir de uma rede completamente ocupada, do PCP e do PCPD. Figura extraída de [80]	80
39	Diagrama de fases do PCPD unidimensional, obtido através de aproximações de aglomerados ($N = 1, 2, 3$ e 4). Os círculos preenchidos corresponde aos valores de p_c obtidos por estudos de DMRG (vide seção 5.4) e os triângulos abertos aos resultados de simulações de Monte Carlo. O ponto representado pelo losango cinza marca o ponto crítico do PCP. (Figura extraída da referência [80].	86
40	(a) Gráfico de $\theta = \nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$ em função de $1/L$ para vários valores da taxa de difusão d (b) estimativas do expoente β/ν_{\perp} obtidas por DMRG).	88
41	(a) Distribuição de probabilidades do número de partículas n no ponto crítico para $D = 0.1$ e $L = 80, 160$ e 320 . Detalhe: Gráfico de $m \times \ln(L)$ para $D = 0.1, 0.5$ e 0.85 (b) Probabilidade reescalada no setor reativo. Detalhe: $m = \ln L$ no setor reativo.	89
42	(a) Técnica de extrapolação sugerida por Barkema e Carlon, assumindo um decaimento algébrico da forma (5.14). Figura extraída de [92] (b) Gráfico da densidade de sítios ativos, $\rho(t)$, multiplicada pelo expoente da lei de potência como $\delta = 0.20$. Simulações apresentadas por Hinrichsen [39] utilizando o mesmo modelo e parâmetros utilizados por Kockelkoren e Chaté [91]. A linha pontilhada representa a inclinação dada pelo expoente da classe PD. Figura extraída de [39]	91

43	Parâmetro de ordem QE em função do tamanho do sistema para $p = 0.120345$, $p = 0.120350$, $p = 0.120355$ e $p = 0.120360$, de cima para baixo. $D = 0.5$. Detalhe: $\ln L^{\beta/\nu_{\perp}} \rho$ versus $\ln L$ para os mesmos valores de p	100
44	Tempo de vida do estado QE em função do tamanho do sistema para $p = 0.120345$, $p = 0.120350$, $p = 0.120355$ e $p = 0.120360$, de cima para baixo. $D = 0.85$. Detalhe: $\ln L^{\beta/\nu_{\perp}} \rho$ versus $\ln L$ para os mesmos valores de p	101
45	Razão entre os momentos $r_{211;2}$ versus tamanho do sistema para $p = 0.12990$, $p = 0.12993$, e $p = 0.12995$, de cima para baixo $D = 0.85$	101
46	Razões entre momentos $r_{211;2}$, $r_{312;2}$, $r_{31;2}$ e $r_{42;2}$ versus $\ln L$ (de baixo para cima) no ponto crítico, para $D = 0.85$	103
47	Razões entre momentos $r_{211;2}$ (pares) e $r_{211;1}$ (partículas) versus $\ln L$ para $p = 0.120354$ e $D = 0.5$. Linha tracejada: razão entre momentos $r_{211;2}$ para o PCP crítico.	103
48	Razão entre momentos $r_{211;2}$ versus p para tamanhos $L = 1280$, $L = 2560$... $L = 20480$ e $D = 0.85$. Detalhe $\ln \partial m / \partial p$ versus $\ln L$ na criticalidade.	105
49	Histogramas escalados para o PCPD crítico com $D = 0.1$, 0.5 , e 0.85 (de cima para baixo). Detalhe: histogramas escalados para o PCPD crítico ($D = 0.5$, $L = 10240$ e 20480), PC crítico (para os mesmos tamanhos) e PCP crítico ($L = 10240$). . . .	106

Lista de Tabelas

1	Aproximação de sítios para o PC unidimensional	26
2	Valores dos pontos críticos e expoentes para o Processo de Contato. . .	29
3	Valores dos expoentes crítico para outras classes com transições de fase para estados absorventes	36
4	Valores de algumas razões universais para processos das classes PD (PC, PCP e ZGB), CP e CTPP em $d = 1$ e $d = 2$	39
5	Aproximação de pares para o PCPD unidimensional	84
6	Valores do expoentes críticos para o PCPD unidimensional, obtidos através de estudos numéricos	93
7	Valores para os expoentes críticos para o PCP, PCPD e PD. Os valores da classe PD foram retirados da Ref.[33].	102
8	Valores críticos das razões entre momentos para o PCP, PCPD e para as classes de universalidade PD, conservação por Paridade (CP), e PD-conservativa (PD-C).	104

Resumo

Os processos estocásticos com estados absorventes aparecem na modelagem de fenômenos de áreas diversas, tais como Física-Estatística, reações químicas, epidemiologia e modelos populacionais, sendo portanto bastante útil o desenvolvimento de algoritmos e estratégias simulacionais para aumentar a eficiência computacional no estudo desses processos. A existência de um estado absorvente representa um problema adicional na obtenção de suas propriedades assintóticas através de simulações computacionais, pois pode interromper a dinâmica do sistema. Para contornar esse problema, apresentamos nesta tese um novo método simulacional, baseado na noção de distribuições “quase-estacionárias” (QE). O método em seguida é aplicado ao processo de contato, considerado o “modelo de Ising” das transições de fase para estados absorventes. A eficiência de nosso método permitiu vários resultados inéditos bem como a investigação do comportamento de grandezas não estudadas através de simulações até então, como a função de correlação estática. Em especial, nosso método se mostrou o mais indicado para o estudo do regime subcrítico em tais processos.

A classificação das transições de fase para estados absorventes ainda é um problema em aberto na Mecânica Estatística. Apesar de algumas classes serem bem estabelecidas, alguns modelos ainda apresentam um comportamento crítico intrigante. Um exemplo é o Processo de Contato por Pares com Difusão (PCPD). Em outro trabalho contido nesta tese, utilizando uma variação do método simulacional QE, realizamos simulações extensivas do PCPD e apresentamos pela primeira vez, estimativas numéricas para os valores das razões entre os momentos da distribuição do parâmetro de ordem, grandezas que, de maneira análoga aos expoentes críticos, podem ser utilizadas para a caracterização de uma classe de universalidade.

Abstract

Stochastic processes with absorbing states arise frequently in fields such as statistical physics, chemical reactions, epidemiology and population models, so it is desirable to develop efficient numerical methods for studying such processes. The existence of an absorbing state represents an additional problem in obtaining the asymptotic (long time) properties from simulations, since the system will eventually become trapped in the absorbing state. In order to circumvent this problem, we present in this thesis a novel simulation method, based in the notion of quasistationary probability distributions (QS). The method is applied to the contact process (CP), considered the “Ising model” of the absorbing phase transitions. The method is very efficient and allows us to improve previous results as well to investigate some quantities which had not been studied via simulations, such as the static correlation function. In particular, our method proves the most appropriate for studying the subcritical regime in such processes.

The classification of the absorbing phase transitions still is an open problem in statistical physics. Although some classes have been established, there are models which exhibit puzzling critical behavior. An example is the pair contact process with diffusion (PCPD). In this thesis we develop a variation of the QS simulation method, and after extensive simulations of the PCPD are able to present the first numerical estimates of the order parameter moment ratios values. As with critical exponents, these ratios can be used to characterize a universality class.

1 *Introdução*

Na descrição dos modelos estocásticos, a distribuição de probabilidade de se encontrar o sistema em uma certa configuração ω no tempo t , $P_t(\omega)$, tem um papel central. Modelos da mecânica estatística de equilíbrio são geralmente definidos por um “Hamiltoniano” ou função de energia, definida no espaço das configurações ou micro-estados do sistema [1]. No equilíbrio, a distribuição de probabilidade $P_t(\omega)$ é dada pela distribuição de Boltzmann,

$$P_{eq}(\omega) \propto \exp -\mathcal{H}/k_B T, \quad (1.1)$$

onde \mathcal{H} denota o Hamiltoniano, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura.

Em princípio, esta formulação permite calcular o valor esperado de cada uma das grandezas independentes do tempo simplesmente realizando uma soma sobre todas as configurações acessíveis ao sistema. Entretanto, em geral não é uma tarefa simples realizar a soma sobre as configurações, de forma que a grande maioria dos modelos de equilíbrio não possui solução exata. Para investigar esses sistemas não integráveis, foram desenvolvidas poderosas técnicas de aproximações, como expansões em séries e métodos do grupo de renormalização [2, 3, 4]. Podemos dizer então que, no contexto da mecânica estatística de equilíbrio, temos à nossa disposição uma base teórica bem estabelecida.

Por outro lado, na natureza, o equilíbrio termodinâmico é mais uma exceção do que regra. Na maioria dos casos a evolução temporal ocorre em estados que estão bem longe do equilíbrio. A relaxação de tais sistemas em direção ao seu estado estacionário depende de propriedades dinâmicas específicas que não podem ser descritas pelos métodos da mecânica estatística de equilíbrio. Em seu lugar

devemos utilizar modelos que envolvem explicitamente a dinâmica microscópica do sistema. O método usual de caracterizar e modelar sistemas fora do equilíbrio é definindo um conjunto de regras com as probabilidades associadas de como o sistema evolui no seu espaço de fase de uma configuração para outra, as chamadas taxas de transição. Alguns parâmetros associados às taxas substituem as variáveis intensivas como temperatura e potencial químico para sistemas em equilíbrio. Devemos então resolver explicitamente a equação mestra do processo, pois somente a partir dela podemos obter a distribuição de probabilidade $P_t(\omega)$, que no equilíbrio coincide com a distribuição de Boltzmann (para $t \rightarrow \infty$).

Em comparação com a mecânica estatística do equilíbrio, o conhecimento teórico de processos fora do equilíbrio ainda está em sua fase inicial. Nesses sistemas a maioria dos conceitos fundamentais dos modelos de equilíbrio, como transições de fase, teoria de escala e universalidade, ainda se aplicam. Os ingredientes básicos que determinam a classe de universalidade também são as simetrias, leis de conservação e a dimensão espacial, como descrito pela teoria do grupo de renormalização [4]. Porém novos fatores têm sido identificados como relevantes [5].

Em particular, nesta tese trataremos de sistemas que apresentam transições de fase para estados absorventes, i.e., para configurações que podem ser atingidas pela dinâmica mas que congelam a atividade do sistema indefinidamente [6]. Estes sistemas são intrinsecamente fora do equilíbrio. Sistemas de baixa dimensionalidade são de particular interesse, pois neles os efeitos das flutuações são relevantes e a descrição tipo campo médio não fornece bons resultados [7]. Outra complicação é que os métodos de teoria de campo bosônica não podem descrever a exclusão de partículas que pode ocorrer no caso unidimensional. Além das dificuldades analíticas, a existência dos estados absorventes acrescenta um grande problema na simulação do processo, uma vez que nos sistemas finitos o processo sempre terminará aprisionado pelo estado absorvente. O estado estacionário nas simulações deve então ser visto como um estado meta-estável, o chamado estado quase-estacionário, já que o único estado de fato estacionário seria o estado absorvente. Devido em grande parte a esta série de dificuldades adicionais, atualmente ainda não existe uma classificação definitiva das transições de fase para estados absorventes [8].

1.1 Organização do Trabalho

Esta tese está organizada da seguinte maneira. No capítulo 2 apresentamos uma breve introdução a alguns conceitos e ferramentas úteis ao estudo das transições de fase para estados absorventes, e que serão utilizados no restante do texto. No Capítulo 3, com o intuito de contornar as dificuldades simulacionais no estudo de processos com estados absorventes, nós propomos um método para simular diretamente o estado quase-estacionário do sistema, que permite que tenhamos acesso às propriedades do estado QE sem que o sistema fique aprisionado no estado absorvente. O método é de fácil implementação e fornece resultados em uma fração do tempo necessário em simulações convencionais no regime crítico, que é o mais interessante no estudo das relações de escala e universalidade.

No capítulo 4, aplicamos o método desenvolvido ao processo de contato unidimensional. O processo de contato [9] é um processo que apresenta um estado absorvente, e é aparentemente o modelo mais simples que exhibe transição de fases em uma dimensão. Obtemos alguns resultados inéditos para certas propriedades de escala, em especial para a função de correlação estática, que pode ser uma ferramenta útil para caracterizar o comportamento crítico em novos modelos. Também fazemos um estudo numérico do regime subcrítico, praticamente inacessível através dos métodos simulacionais disponíveis até então.

No capítulo 5 deste texto nós fazemos uma revisão sobre a transição de fase do processo de contato por pares com difusão (PCPD). O PCPD é mais um processo que exhibe uma transição de fase fora do equilíbrio, de uma fase ativa para uma fase absorvente. Diferentemente do processo sem difusão (PCP) que sabemos pertencer à classe de universalidade da Percolação Dirigida (PD), o PCPD apresenta uma transição de fase de uma fase ativa para uma fase absorvente com um tipo de comportamento crítico que tem despertado muito interesse recentemente, e a classificação do seu comportamento crítico continua a ser um problema em aberto na mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio.

Em seguida, no capítulo 6 são apresentados os resultados de nosso estudo simulacional sobre o PCPD, em que estivemos focados na obtenção das razões entre os momentos do parâmetro de ordem. Finalmente, seguem o Capítulo 7, com as

conclusões e as perspectivas de trabalhos futuros e dois apêndices. O Apêndice A trata da obtenção de momentos e cumulantes de uma distribuição de probabilidades, enquanto a listagem de um exemplo de código computacional desenvolvido durante o trabalho completa este texto, na forma do Apêndice B.

2 *Transições de fase para estados absorventes*

Este capítulo, que não apresenta resultados inéditos, tem como objetivo ser uma introdução a algumas idéias que serão largamente utilizadas pelo resto deste texto, como a descrição de um sistema de partículas por meio de equações mestras, algumas ferramentas utilizadas para estudar os fenômenos críticos, tanto no equilíbrio, quanto fora do equilíbrio. Ênfase especial é dada aos processos contendo estados absorventes, tendo o Processo de Contato como exemplo principal.

2.1 A Equação Mestre

Em geral, um sistema estocástico de muitas partículas pode ser definido por um conjunto enumerável \mathcal{N} , das possíveis configurações de partículas $n \in \mathcal{N}$ (micro-estados). A dinâmica do processo se dá através de transições (instantâneas) $n \rightarrow n'$, que ocorrem espontaneamente a uma taxa $W_{n \rightarrow n'} \geq 0$. O conjunto de todas as configurações, as taxas de transição e o estado inicial descrevem completamente o *modelo estocástico* a ser estudado.

Seja $P_n(t)$ a probabilidade de se encontrar um sistema no estado (microscópico) n , em um determinado instante de tempo t . Suponha que as transições de um dado estado n para outro estado n' ocorram espontaneamente a uma taxa $W_{n \rightarrow n'} \geq 0$ por unidade de tempo¹. Se a evolução temporal de $P_n(t)$ é completamente determinada

¹É importante destacar que os coeficientes W são taxas e não probabilidades. Desta forma, eles

pela distribuição de probabilidade no instante t ,

$$P_{n|n'}(t + \delta t) = W_{n' \rightarrow n} P_{n'}(t) \delta t, \quad (n \neq n'), \quad (2.1)$$

o processo possui a propriedade *markoviana* [10].

O comportamento dinâmico de um sistema estocástico markoviano pode ser descrito na forma de uma *equação mestra*, formulada em termos das taxas de transição de cada micro-estado. A equação mestra desse sistema é uma equação diferencial, linear, que descreve o fluxo de probabilidade “para dentro” e “para fora” de uma certa configuração n ,

$$\frac{\partial}{\partial t} P_n(t) = \underbrace{\sum_{n'} W_{n' \rightarrow n} P_{n'}(t)}_{\text{para dentro}} - \underbrace{\sum_{n'} W_{n \rightarrow n'} P_n(t)}_{\text{para fora}}. \quad (2.2)$$

Os termos de entrada e saída se balanceiam de forma que a normalização

$$\sum_n P_n(t) = 1 \quad (2.3)$$

deve ser obedecida. A equação mestra descreve um *processo de Markov*, um processo que não possui memória intrínseca. Esta característica, em sistemas com um número finito de estados, garante a unicidade do estado estacionário².

Resolvendo o processo de Markov

Definindo uma *matriz de evolução* como:

$$\mathbb{W}_{n' \rightarrow n} = W_{n' \rightarrow n} - \delta_{nn'} \sum_{n''} W_{n \rightarrow n''}, \quad (2.4)$$

podem ser maiores que 1 e devem ser re-escalados pela mudança na escala de tempo.

²No caso em que o processo de Markov estudado evolui em tempo discreto (cadeias de Markov) isto é garantido pelo Teorema de Perron-Frobenius. No caso de um processo em tempo contínuo, pode-se discretizar o tempo através da introdução de um passo de tempo finito Δt e reduzir o processo a uma cadeia de Markov com a matriz de transições dada por $T = \exp(\mathbb{W}\Delta t)$, e aplicar o teorema de Perron-Frobenius. Novamente, devemos resaltar que a afirmação de que todas as soluções da equação mestra tendem para a solução estacionária em $t \rightarrow \infty$ não é válida, em geral, no caso de um espaço de estados contínuo. [10]

podemos reescrever a equação mestra (2.2) em uma forma vetorial, mais compacta:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(t) = \mathbb{W} \mathbf{P}(t), \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{P}(t)$ é um vetor contendo as probabilidades de encontrar o sistema em cada um de seus estados microscópicos em um dado tempo t .

A solução formal da equação (2.5) dada uma condição inicial $\mathbf{P}(0)$ é dada por:

$$\mathbf{P}(t) = \exp [t\mathbb{W}] \mathbf{P}(0), \quad (2.6)$$

onde $\exp [t\mathbb{W}]$ é a matriz definida por

$$\exp [t\mathbb{W}] = \mathbb{I} + t\mathbb{W} + \frac{t^2}{2!} \mathbb{W}^2 + \frac{t^3}{3!} \mathbb{W}^3 + \frac{t^4}{4!} \mathbb{W}^4 + \dots \quad (2.7)$$

com \mathbb{I} como a matriz identidade.

Essa expressão para $\mathbf{P}(t)$ pode ser útil em certos casos, mas não ajuda a encontrar uma forma explícita para $\mathbf{P}(t)$. O método tradicional de se resolver equações desse tipo, através dos autovalores e autovetores de \mathbb{W} , em geral não pode ser usado e métodos de aproximação são empregados para a obtenção de uma solução para a equação mestra.

Uma simplificação muito comum é a aproximação de campo médio (CM), em que as variáveis microscópicas são substituídas pelos seus valores médios (espaciais e/ou temporais). Tais modelos de CM levam a equações cinéticas, que apesar de serem, em geral, não-lineares e acopladas, são mais simples de serem tratadas numericamente. No entanto, com essas aproximações podem se perder algumas ou mesmo a maioria das propriedades interessantes do sistema.

Uma técnica mais sofisticada e que costuma fornecer melhores resultados são as expansões em séries. Tais expansões são feitas diretamente a partir da equação mestra e podem envolver uma expansão temporal [11], ou uma expansão perturbativa [12, 13].

Uma outra possibilidade é estudar o sistema por meio de simulações computacionais [14]. A distribuição de estados do processo é calculada numericamente através da escolha aleatória entre várias possíveis transições para um estado e asso-

ciando uma certa probabilidade a cada transição. Após cada transição efetuada, o tempo é incrementado, tipicamente em unidades inteiras de *passos de Monte Carlo* [15]. Após um certo número de passos³, espera-se que o sistema atinja o estado estacionário, e a sua distribuição de estados convirja para a solução estacionária da equação mestra que descreve aquele processo.

Balanco detalhado

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

$$P_{n'}(t)W_{n' \rightarrow n} = P_n(t)W_{n \rightarrow n'}, \quad (2.8)$$

para todo par de estados n e n' . Uma vez que no equilíbrio devemos ter $\frac{\partial}{\partial t}P_n(t) = 0$, conclui-se que o balanço detalhado é uma condição *suficiente* para o equilíbrio. Esta é uma diferença fundamental entre processos no equilíbrio e fora do equilíbrio, que pelo menos localmente, não cumprem esta condição. Por conseguinte, a distribuição estacionária de probabilidade fora do equilíbrio é geralmente desconhecida. A condição de balanceamento detalhado é equivalente à reversibilidade microscópica do processo.

2.2 Processos em Equilíbrio

A mecânica estatística do equilíbrio é baseada no axioma de que um sistema estocástico isolado em seu estado estacionário maximiza sua entropia. Isto significa que o sistema evolui através de todas as configurações possíveis com a mesma probabilidade, formando o chamado ensemble micro-canônico. No caso de o sistema não ser isolado, mas acoplado a um banho térmico externo, o mesmo princípio é válido para a combinação “sistema + banho térmico”, e a solução estacionária é a famosa distribuição de Boltzmann.

$$P_{eq}(n) = \frac{1}{Z} \exp(-\mathcal{H}(n)/k_B T) \quad (2.9)$$

³Em geral, ocorre uma relaxação exponencial, mas para certos valores dos parâmetros de controle observa-se uma relaxação algébrica em direção ao estado estacionário.

onde T é a temperatura do banho térmico, \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema e Z é a soma partição sobre todas as configurações acessíveis [1]. Isto significa que, no equilíbrio não precisamos de resolver a equação diferencial (2.5) uma vez que já conhecemos sua solução estacionária de antemão.

Transições de fase

O exemplo mais comum (apesar de estar longe de ser trivial) de uma transição de fase é a transformação que ocorre ao se variar a temperatura, da água na fase líquida para a água na fase sólida (gelo), ou para a água na fase gasosa (vapor). Um outro exemplo é a mudança de fase num material magnético. Um ímã, ao ser aquecido a temperaturas muito altas, perde a propriedade de atrair limalhas de ferro, isto é, ao se variar a temperatura, o ímã muda da fase magnética para a fase paramagnética.

Vejam os que ocorre no exemplo da transição em materiais ferromagnéticos: acima de uma certa temperatura, chamada temperatura crítica, T_c , o material tem seus momentos magnéticos completamente desordenados, resultando em uma magnetização nula. Abaixo de T_c , o material apresenta os momentos magnéticos ordenados segundo uma direção preferencial, resultando em uma magnetização $M \neq 0$. Neste exemplo, a magnetização funciona como um *parâmetro de ordem* do sistema, pois nos permite distinguir entre as fases do ferromagneto, uma com $M = 0$ (fase desordenada) e outra com $M \neq 0$ (fase ordenada). Já a temperatura funciona como um *parâmetro de controle*, e o valor desse parâmetro para o qual ocorre a transição (neste caso, T_c) é chamado de um *ponto crítico*⁴. O diagrama de fases de tal sistema, considerando o campo externo $H = 0$, é visto na Figura 1.

No equilíbrio, as transições de fase são caracterizadas por uma não-analiticidade dos potenciais termodinâmicos, refletida em divergências de suas derivadas que, por sua vez, estão diretamente relacionadas às respostas termodinâmicas (calor específico, susceptibilidade magnética, etc) [16]. No exemplo da solidificação da água,

⁴Em outras palavras, o parâmetro de ordem de um sistema pode ser definido como uma função que tem um valor nulo abaixo do ponto crítico e não nulo acima do ponto crítico. Segundo a classificação de Landau, em uma transição *contínua* o parâmetro de ordem varia de maneira contínua entre duas fases, enquanto em uma transição *descontínua* o parâmetro de ordem apresenta um salto no ponto crítico.

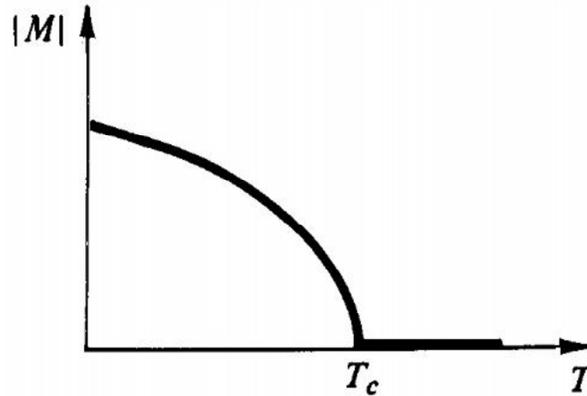


Figura 1: Gráfico do módulo da magnetização em função da temperatura na transição de fase de um ferromagneto, com campo externo nulo.

a entropia do sistema, que é uma *derivada primeira* da energia livre de Gibbs, é descontínua, caracterizando uma transição de fase de *primeira ordem*. Já no caso da transição que ocorre no ferromagneto a transição é classificada como uma transição de *segunda ordem*, pois a singularidade ocorre na *derivada segunda* da energia livre.

Esse comportamento singular é causado por flutuações microscópicas que atingem escalas macroscópicas, dando origem portanto a um comportamento coletivo, que fica bem caracterizado quando se investiga a correlação entre os constituintes do sistema.

2.3 Processos Fora do equilíbrio

Um processo é considerado fora do equilíbrio se sua dinâmica microscópica não obedece ao balanço detalhado. Em geral, todos os sistemas sujeitos a uma força externa não-conservativa ou a uma fonte de energia ou partículas situam-se fora do equilíbrio. Por exemplo, uma máquina térmica trabalhando em um regime estacionário ainda precisa de um suprimento contínuo de combustível, de forma que em princípio é impossível estabelecermos uma situação que obedeça ao balanço detalhado. No entanto a máquina térmica em regime estacionário pode ser considerada como um processo *próximo ao equilíbrio*, de forma que os conceitos termodinâmicos

da física do equilíbrio ainda podem ser aplicados com sucesso.

Por outro lado, existem processos que violam o balanço detalhado de forma tão radical que os conceitos da mecânica estatística de equilíbrio não podem ser aplicados, nem mesmo de maneira aproximada. Esses processos são chamados de processos *longe do equilíbrio*.

Estados absorventes

Alguns sistemas fora do equilíbrio podem, durante sua evolução, ficar aprisionados indefinidamente em uma configuração, chamada configuração (estado) absorvente. Na modelagem estocástica, um estado absorvente é aquele que pode ser atingido a partir de outros estados, mas as transições a partir dele para outros estados são proibidas (Figura 2). Em um sistema finito com pelo menos um estado absorvente, os estados não absorventes são chamados de estados *transientes*.

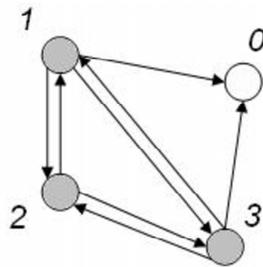


Figura 2: Processo com 4 estados onde o estado 0 é absorvente.

O simples fato de um modelo possuir um estado absorvente mostra que ele não pode obedecer à condição de balanceamento detalhado e portanto não pode ser descrito por um Hamiltoniano. Processos com estados absorventes são um tipo de processo longe do equilíbrio.

Os processos com estados absorventes aparecem na modelagem de vários fenômenos de áreas diversas, tais como Física-Estatística [7], reações químicas [17, 18], epidemiologia [9] e modelos populacionais [19].

Transições de fase fora do equilíbrio

Entre as características gerais de sistemas estacionários fora do equilíbrio podemos mencionar que eles podem sofrer uma transição de fase, significando que as variáveis macroscópicas (como por exemplo a taxa de uma reação química, ou a fração de um reagente na superfície) podem sofrer uma mudança singular quando as taxas dos processos microscópicos variam suavemente. Uma transição de primeira ordem significa uma descontinuidade, por exemplo, na fração de um dos reagentes (em analogia com as transições de equilíbrio [4, 16]). Uma transição de ordem superior implica em uma mudança contínua nas variáveis macroscópicas mas acompanhada de singularidades em funções de correlação de ordem superior, como a densidade média quadrática. Entretanto, diferentemente de sistemas em equilíbrio termodinâmico, em geral não podemos relacionar estas quantidades a derivadas da energia livre [20]. Estas transições são conhecidas por transições de não-equilíbrio ou transições de fase cinéticas [21, 22].

Um tipo de transições de fase fora do equilíbrio é a que ocorre em sistemas com estados absorventes que admitem, além do estado estacionário absorvente, um ou mais estados estacionários não-triviais (ativos). São as chamadas *transições de fase para estados absorventes*⁵ Ainda neste capítulo discutiremos o caso do processo de contato, que ilustra bem este tipo de transição.

2.4 Universalidade

Uma idéia importante no estudo das transições de fase de não-equilíbrio é, assim como no equilíbrio, o conceito de universalidade [24]. Este conceito expressa a expectativa de que o comportamento crítico de tais transições possa ser associado a um conjunto finito de possíveis classes de universalidade, cada uma correspondendo a um certo tipo de teoria de campo⁶. A ação na teoria de campo envolve certos

⁵Devemos mencionar que existem outros tipos de processo longe do equilíbrio que não possuem estados absorventes, mas também podem sofrer transições de fase como, por exemplo, o “gás de rede dirigido” [23].

⁶A noção de universalidade foi originalmente introduzida por físicos experimentais com o objetivo de descrever a observação de que vários sistemas físicos aparentemente sem relação apresen-

operadores relevantes, cuja forma é geralmente determinada pelas propriedades de simetria do processo, enquanto outros detalhes da dinâmica microscópica levam a contribuições que são irrelevantes no sentido da teoria de campo. Grosso modo, isto explica porque vários modelos diferentes podem pertencer à mesma classe de universalidade⁷ [4].

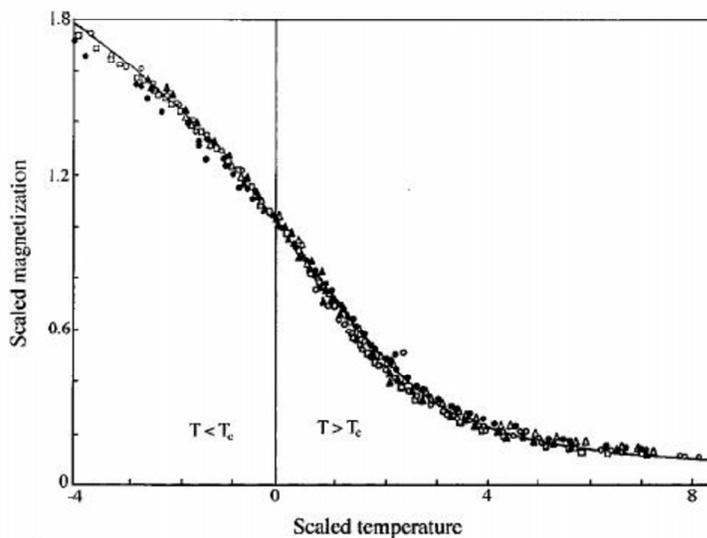


Figura 3: Dados experimentais para cinco materiais magnéticos com características estruturais bem diferentes, plotados em um diagrama MHT re-escalado. Os materiais são CrBr_3 , EuO , Ni , YIG , e Pd_3Fe . Figura extraída de [24].

As classes de universalidade podem ser caracterizadas em termos de seus expoentes críticos e funções de escala. Assim, é de suma importância uma estimativa precisa dos expoentes críticos.

tavam o mesmo tipo de comportamento singular em uma transição de fase. Observe a Figura 3, que mostra cinco materiais magnéticos totalmente diferentes estruturalmente, no entanto os dados no diagrama MHT re-escalado mostra um colapso dos dados dos cinco materiais em uma única função de escala.

⁷Devemos enfatizar que, ao contrário das transições de fase no equilíbrio, onde a teoria de grupo de renormalização fornece toda essa base teórica, ainda não existe uma classificação completa das classes de universalidade fora do equilíbrio, pois não se conhecem com certeza quais os ingredientes e simetrias relevantes neste caso.

Expoentes críticos e correlações

Na mecânica estatística de equilíbrio, as transições de fase podem ser descritas em termos de uma teoria de escala fenomenológica. Por exemplo, na ausência de um campo magnético externo H , um ferromagneto ideal exibe uma magnetização espontânea M , abaixo de um valor crítico, também chamado de temperatura de Curie, T_c . Observa-se que na fase ordenada essa magnetização espontânea vai para zero como

$$|M| \sim (T_c - T)^\beta \quad (2.10)$$

quando nos aproximamos do ponto crítico T_c (com campo $H = 0$). O expoente β associado a este decaimento da magnetização é um expoente crítico universal.

Outros expoentes foram introduzidos para descrever o comportamento de outras grandezas como calor específico C , e susceptibilidade χ , que também apresentam comportamento em forma de lei de potência na criticalidade:

$$C \propto |T_c - T|^{-\alpha}, \quad (2.11)$$

$$\chi \propto |T_c - T|^{-\gamma} \quad (2.12)$$

Variáveis físicas como a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética são propriedades macroscópicas da matéria e fazem parte da descrição termodinâmica de um sistema. No entanto, para entender melhor o comportamento de um sistema próximo a uma transição de fase, é indispensável entender o que acontece no sistema em escala microscópica.

O modelo microscópico mas simples que descreve a transição de fase em um ferromagneto é o conhecido modelo de Ising [25], cujo hamiltoniano é definido como

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.13)$$

onde J é a constante de troca, $\sigma_i = \pm 1$ é uma variável de spin que representa o momento magnético em cada sítio, e $\langle i, j \rangle$ indica que a soma deve ser feita apenas sobre sítios i e j que são primeiros vizinhos.

Neste caso é útil definirmos uma *função de correlação* estática, $c(r)$,

$$c(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle, \quad (2.14)$$

com $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

Essa função revela como o parâmetro de ordem local em uma posição está correlacionado com aquele a uma distância r do primeiro. Assim, quando $r \rightarrow \infty$, a função correlação decai a zero. Para valores longe do ponto crítico, este decaimento se dá exponencialmente, da forma

$$c(r) \propto e^{-r/\xi}, \quad (2.15)$$

onde ξ define o *comprimento de correlação* do sistema, que depende da temperatura.

Já para temperaturas próximas da temperatura crítica o sistema desenvolve correlações de longo alcance, com $\xi \rightarrow \infty$ e nessas condições, a função correlação decai da forma

$$c(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (2.16)$$

que apresenta um decaimento algébrico, onde d é a dimensão do sistema e η é o expoente crítico associado à função de correlação.

Em outras palavras, fora da criticalidade, um sistema físico de muitos corpos apresenta correlações entre seus elementos, que decaem exponencialmente com a distância, limitadas por um comprimento característico de correlação. Na criticalidade, as correlações decaem de forma muito mais lenta e sem nenhum comprimento característico⁸. A divergência do comprimento de correlação é a fonte primária de todos os fenômenos associados à criticalidade. De modo similar, o comprimento de correlação ξ diverge como $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$ para $T \rightarrow T_c$, onde ν é outro expoente universal. O ponto crítico em si é caracterizado pela inexistência de uma escala de comprimento macroscópica de forma que o sistema é invariante sob qualquer transformação de escala.

Nas transições de fase de não-equilíbrio para estados absorventes ocorre algo

⁸Observe que no caso do decaimento exponencial, ξ fornece uma medida de comprimento, pois $c(r)/c(2r)$ depende da razão r/ξ . Entretanto, um decaimento conforme uma lei de potência, em que $c(r) \sim (r_0/r)^n$, a quantidade $c(r)/c(2r)$ é *independente* de r/r_0 .

bem parecido. Entretanto, como sistemas fora do equilíbrio envolvem necessariamente o tempo, existem agora dois comprimentos de correlação diferentes, o comprimento de correlação espacial ξ_{\perp} e o comprimento de correlação temporal ξ_{\parallel} com os respectivos expoentes associados ν_{\perp} e ν_{\parallel} . A razão entre esses expoentes, $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ é chamada de expoente dinâmico por relacionar as escalas espacial e temporal na criticalidade.

2.5 O Processo de Contato

O processo de contato (PC) foi proposto por Harris [9] em 1974, como um “toy model” para uma epidemia. O processo de contato é definido em uma rede, em geral uma rede cúbica d -dimensional, onde cada sítio i representa um “organismo”. A cada instante, um sítio pode estar infectado ($\sigma_i(t) = 1$) ou são ($\sigma_i(t) = 0$).

A evolução no processo de contato acontece de forma assíncrona, da seguinte forma. Cada sítio infectado se torna são a uma taxa unitária, independente dos sítios vizinhos. A infecção ($\sigma_i(t) = 0 \rightarrow \sigma_i(t) = 1$) somente pode ocorrer se pelo menos um dos primeiros vizinhos do sítio em questão estiver infectado. Ela ocorre à taxa λm , onde m é a fração de primeiros vizinhos do sítio i que está infectada⁹ (vide Figura 4). Observe que um sítio sadio precisa de pelo menos um vizinho infectado para se tornar infectado, de forma que fica evidente que o estado $\sigma_i = 0, \forall i$ é absorvente¹⁰.

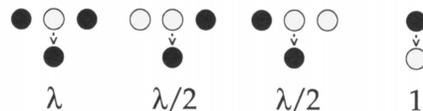


Figura 4: Taxas de transição no processo de contato unidimensional

⁹Se n é o número de primeiros vizinhos infectados e q o número de coordenação da rede, então $m = n/q$

¹⁰O processo de contato pode ser visto como um sistema de partículas interagentes residindo em sítios de uma rede e evoluindo de acordo com regras locais e markovianas. Assim, cada sítio da rede pode estar em dois estados, vazio ou ocupado. A infecção equivaleria a um processo de criação auto-catalítica de partículas e a mudança de infectado para são a um processo de aniquilação espontânea de partículas.

No PC o parâmetro de ordem, análogo à magnetização no modelo ferromagnético, é a densidade estacionária de partículas (ou sítios ativos), ρ , que se anula no estado absorvente. Quando λ aumenta além de um valor λ_c , o sistema sofre uma transição de fase contínua do estado absorvente para um estado estacionário ativo, como pode ser visto na Figura 5. Formalmente, a densidade de partículas é definida como:

$$\rho(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i(t). \quad (2.17)$$

onde N é o número de sítios da rede.

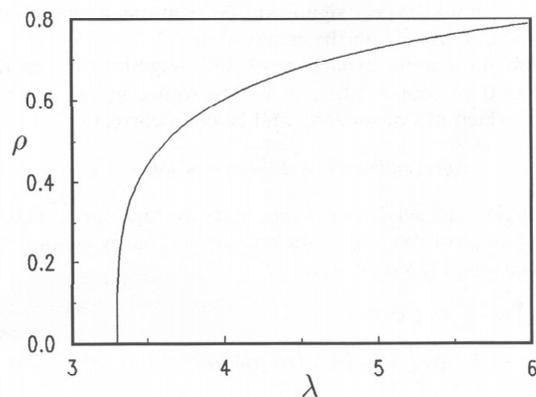


Figura 5: Densidade estacionária de partículas, em função do parâmetro de ordem no PC unidimensional, obtida através de análise de séries, conforme [6].

O processo de contato é aparentemente o modelo mais simples que exibe uma transição de fases em uma dimensão¹¹. Harris demonstrou rigorosamente que o modelo, no limite termodinâmico, apresenta um estado ativo estável além do estado absorvente [9]. Tal fato tem relevada importância, dado que em sistemas finitos, estudados em simulações numéricas, o estado absorvente sempre é atingido para tempos suficientemente longos. Ademais, isso revela uma grande diferença em

¹¹Os mecanismos de interação contidos no processo de contato constituem a base para a formulação de diversos modelos de rede que têm como objetivo a descrição de propagação de epidemias, análise de dinâmica populacional e estudo de reações químicas. Por isso, o PC é considerado o “Modelo de Ising” da Mecânica Estatística de transições de fase para um estado absorvente.

relação aos modelos em equilíbrio, nos quais uma transição de fase não ocorre em sistemas unidimensionais com interações de curto alcance [26].

2.5.1 Comportamento crítico

Como é comum nas transições de fase contínuas, próximo ao ponto crítico, no estado estacionário, observa-se que a densidade de sítios ativos segue uma lei de potência:

$$\bar{\rho} \propto \Delta^\beta \quad (2.18)$$

onde $\bar{\rho} = \rho(\infty)$, $\Delta = |\lambda - \lambda_c|$ é a distância ao ponto crítico e β é o expoente crítico associado.

No caso de estudarmos a evolução temporal do PC, a partir de uma semente ativa em uma rede vazia (Figura 6), é mais conveniente usar como parâmetro de ordem a probabilidade de sobrevivência,

$$P_s(t) = \langle 1 - \prod_i (1 - \sigma_i(t)) \rangle, \quad (2.19)$$

que representa a probabilidade de que o sistema ainda não caiu no estado absorvente. Neste caso, observamos a seguinte lei de potência no ponto crítico:

$$P_s(\infty) \propto \Delta^{\beta'}. \quad (2.20)$$

Em geral, $\beta \neq \beta'$, porém o processo de contato, como outros sistemas, possui uma simetria de reversão temporal [27], que assegura que nestes casos, $\beta = \beta'$. Isto implica que P_s se torna proporcional a ρ quando $t \rightarrow \infty$. Além disso, como o processo de contato também apresenta uma propriedade chamada de auto-dualidade, prova-se rigorosamente que a densidade de partículas é *igual* à probabilidade de sobrevivência, no estado estacionário [28].

Ainda nas vizinhanças do ponto crítico, observa-se que os comprimentos de correlação espacial e temporal se comportam como

$$\xi_\perp \propto \Delta^{-\nu_\perp}, \quad (2.21)$$

$$\xi_\parallel \propto \Delta^{-\nu_\parallel}, \quad (2.22)$$

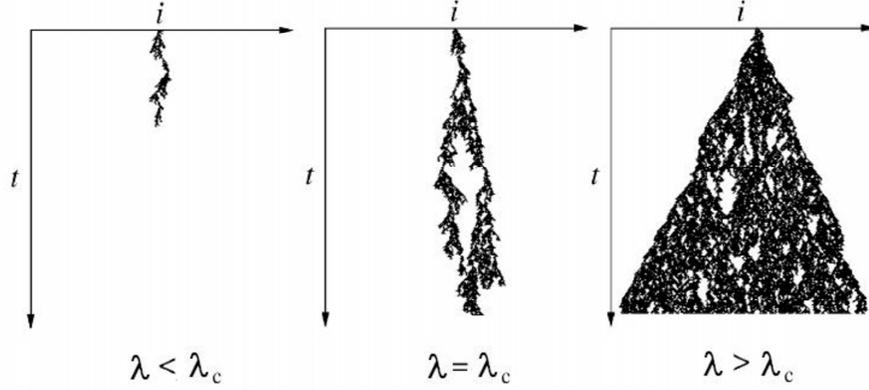


Figura 6: Evolução temporal típica a partir de uma única partícula, no processo de contato unidimensional, para valores subcrítico, crítico e supercrítico de λ .

respectivamente.

Outras quantidades que fornecem informações importantes acerca do processo são o número médio de partículas,

$$n(t) = \langle \sum_i \sigma_i(t) \rangle, \quad (2.23)$$

e a variância da densidade no estado estacionário,

$$\chi \equiv L^d (\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2), \quad (2.24)$$

onde L é a dimensão linear do sistema. Essa variância fornece uma medida das flutuações do parâmetro de ordem, e na vizinhança do ponto crítico, se comporta como

$$\chi \propto |\Delta|^{-\gamma}. \quad (2.25)$$

O comportamento do PC também apresenta uma dinâmica auto-similar no ponto crítico (vide Figuras 6 e 7). Assim, grandezas empregadas para caracterizar o comportamento dinâmico, como o espalhamento médio $R^2(t)$ de uma partícula a partir da origem,

$$R^2(t) \equiv \frac{1}{n(t)} \langle \sum_r r^2 \sigma_r \rangle, \quad (2.26)$$

além da probabilidade de sobrevivência, $P_s(t)$, e do número médio de partículas,

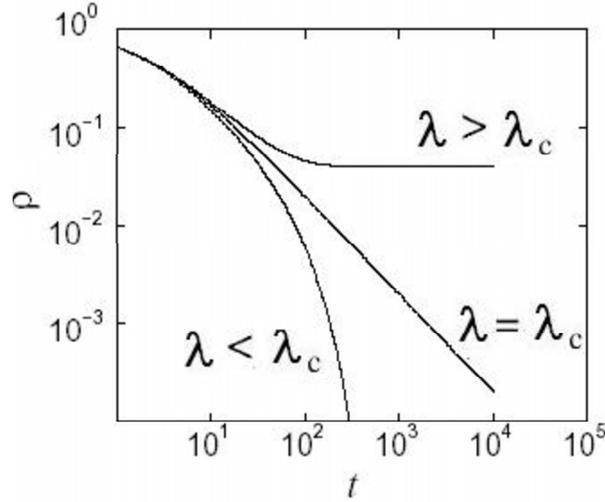


Figura 7: Evolução temporal da densidade de sítios ativos para valores diferentes do parâmetro de controle λ .

seguem leis de potência para tempos longos:

$$P_s(t) \propto t^{-\delta} \quad (2.27)$$

$$n(t) \propto t^n \quad (2.28)$$

$$R^2(t) \propto t^{2/z}. \quad (2.29)$$

Além dos expoentes citados, vários outros expoentes são utilizados no estudo das propriedades críticas do PC. No entanto, como veremos na próxima seção, esses outros expoentes não são independentes e podem ser obtidos a partir da trinca de expoentes β , ν_{\perp} e ν_{\parallel} (lembrando que $\beta = \beta'$). Desta forma, a classe de universalidade do processo de contato pode ser caracterizada por apenas três expoentes críticos. Na seção seguinte trataremos da teoria de escala, uma ferramenta bastante útil que permite encontrar as relações de escala entre grandezas diversas, e é imprescindível na análise das simulações que apresentaremos nos próximos capítulos.

2.5.2 Teoria de Escala

A teoria de escala fornece uma descrição simplificada de um sistema na vizinhança de seu ponto crítico. Em um sistema em equilíbrio, estas relações são derivadas a partir da energia livre e de sua relação com cada uma das grandezas. Fora do equilíbrio utilizaremos uma formulação fenomenológica da teoria de escala, a abordagem de Grassberger e de la Torre [27].

A idéia por trás da teoria de escala é a hipótese de que as propriedades assintóticas do sistema próximo ao ponto crítico são invariantes sob transformações do tipo

$$\begin{aligned}
 \Delta &\rightarrow a\Delta, \\
 r &\rightarrow a^{-\nu_{\perp}}r, \\
 t &\rightarrow a^{-\nu_{\parallel}}t, \\
 \rho &\rightarrow a^{\beta}\rho, \\
 P &\rightarrow a^{\beta'}P,
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

onde $a > 0$ é um fator de escala. A invariância por escala restringe fortemente a forma das funções governando o comportamento crítico, como veremos a seguir.

Vejamos por exemplo o que acontece com a probabilidade de sobrevivência, P_s , exatamente no ponto crítico. A invariância por escala neste caso exige que

$$P_s(t) = a^{\beta'} P_s(a^{-\nu_{\parallel}}t). \tag{2.31}$$

Se escolhermos um valor de a tal que $ta^{-\nu_{\parallel}} = 1$, obtemos que $P_s(t) = t^{-\beta'/\nu_{\parallel}} P_s(1)$. Desta forma, tomando $\delta = \beta'/\nu_{\parallel} = \beta'/\nu_{\parallel}$, temos que no ponto crítico

$$P_s(t) \propto t^{-\delta}. \tag{2.32}$$

E no caso de não estarmos sobre o ponto crítico, mas próximo a ele? Então temos $P_s = P_s(\Delta, t) = a^{\beta'} P_s(a\Delta, a^{-\nu_{\parallel}}t)$. Novamente, fazendo que $a = t^{1/\nu_{\parallel}}$, concluimos que, próximo ao ponto crítico, P_s escala como

$$P_s(\Delta, t) = t^{-\beta'/\nu_{\parallel}} P_s(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}, 1). \tag{2.33}$$

A expressão acima pode ser escrita como

$$P_s(t) \simeq t^{-\delta} \Phi(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (2.34)$$

onde Φ é uma função de escala, que depende apenas do argumento $\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}$. Observe que ela se reduz à forma (2.32) quando $\Delta = 0$.

Considere agora a probabilidade condicional de encontrarmos uma partícula numa posição r em um instante de tempo t , dado que no tempo inicial, $t = 0$, a rede estava ocupada por uma única partícula, localizada na origem, $\rho(r, t)$. Neste caso, no regime de escala, isto é para valores pequenos de Δ , a invariância por escala exige que

$$\rho(r, t) \simeq t^{\eta-d/z} \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \quad (2.35)$$

para sistemas grandes e tempos longos. Na expressão acima, d é a dimensão do sistema, \mathcal{F} é uma função de escala universal, e $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$. O pré-fator $t^{\eta-d/z}$ se justifica pelo fato de que, quando $\Delta = 0$, integrando sobre o espaço, devemos recuperar a relação (2.28). Isto é verificado a seguir:

$$\begin{aligned} n(t) &= \langle \sum_i \sigma_i(t) \rangle = \int d^d r \rho(r, t) \\ &= \int d^d r t^{\eta-d/z} \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \\ &= t^{\eta-d/z} \int d^d r \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Fazendo uma mudança de variáveis, $u = r/t^{1/z}$, obtemos

$$\begin{aligned} n(t) &= t^{\eta-d/z} t^{d/z} \int d^d u \mathcal{F}(u, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \\ &\sim t^{\eta} \mathcal{F}_1(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \end{aligned} \quad (2.37)$$

que no ponto crítico leva à

$$n(t) \sim t^{\eta}. \quad (2.38)$$

De maneira análoga, para que a forma de escala (2.35) seja consistente, devemos obter a expressão (2.29) quando calculamos o segundo momento, integrando

sobre todo o espaço:

$$\begin{aligned}
R^2(t) &= \langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{n(t)} \int d^d r r^2 \rho(r, t) \\
&= \frac{1}{n(t)} \int d^d r^2 t^{\eta-d/z} \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \\
&= \frac{1}{n(t)} t^{\eta-d/z} \int d^d u t^{2/z} u^2 t^{d/z} \mathcal{F}(u, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \\
&\simeq t^{2/z} \mathcal{F}_2(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}),
\end{aligned} \tag{2.39}$$

onde utilizamos a mesma substituição de variáveis do caso anterior.

Vimos que no PC, $P_{\infty} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = \bar{\rho}$. Além disso, no estado estacionário, vale a relação $\rho(r, t) \sim P_{\infty} \bar{\rho}$, o que implica que

$$\rho(r, t) \equiv \Delta^{\beta} \Delta^{\beta'} \propto \Delta^{2\beta}. \tag{2.40}$$

Por outro lado, a expressão (2.35) fornece $\rho \sim \Delta^{\nu_{\parallel} d/z - \nu_{\parallel} \eta}$. Comparando com (2.40), obtemos uma *relação de hiperescala*,

$$\frac{d}{z} - \eta = \frac{2\beta}{\nu_{\parallel}} = 2\delta \tag{2.41}$$

que relaciona os expoentes críticos e a dimensão do sistema.

Escala de Tamanho Finito

As singularidades que marcam as transições de fase e pontos críticos emergem apenas no limite para sistemas de tamanho infinito. Dessa forma, na vizinhança do ponto crítico, quando o comprimento de correlação ξ é grande, as propriedades intensivas do sistema dependem fortemente do tamanho. A teoria de escala de tamanho finito se apóia na hipótese de que, próximo ao ponto crítico, a dependência do tamanho L deva envolver apenas a razão L/ξ . Quando $L \gg \xi$ o sistema consiste de muitas regiões descorrelacionadas e suas propriedades devem ser independentes do tamanho [?].

Porém, devemos levar em conta que, em modelos com estados absorventes, o único estado estacionário em redes finitas é o próprio estado absorvente. Por

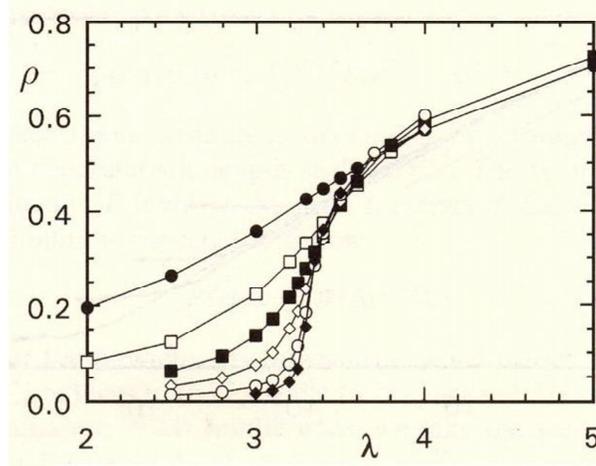


Figura 8: Densidade de sítios QE no Processo de Contato unidimensional. Os tamanhos de sistema são $L = 20, 50, 100, 200, 500, 1000$, de cima para baixo. Figura extraída de [6].

isso, para obtermos informações sobre o estado ativo através de simulações devemos estudar um estado meta-estável, o chamado estado *quase-estacionário* (QE). Em uma simulação, o sistema atinge o estado QE após um certo transiente, que depende do tamanho do sistema, da condição inicial e do valor de Δ . Os valores das médias obtidas no estado QE convergem para seus valores estacionários no limite termodinâmico, como pode ser visto na Figura 8, que mostra a densidade de partículas no estado quase-estacionário para vários tamanhos de sistemas.

Próximo ao ponto crítico, e para valores grandes de L , a densidade de sítios ativos QE, $\bar{\rho}(\Delta, L)$, pode ser escrita na forma¹²

$$\bar{\rho}(\Delta, L) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}} f(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (2.42)$$

A função de escala $f(x)$ deve ser proporcional a x^{β} para valores grandes de x ($L \gg \xi$), pois $\bar{\rho} \propto \Delta^{\beta}$. A forma de escala revela que, se fizermos um gráfico de $L^{\beta/\nu_{\perp}} \rho$ em função de $L^{1/\nu_{\perp}} \Delta$, as curvas para tamanhos diferentes devem coincidir. Isto é verificado na figura 9, onde os dados da figura 8 apresentam um perfeito colapso.

A análise de escala de tamanho finito também permite determinarmos o valor do ponto crítico pela dependência em L de $\bar{\rho}(\lambda, L)$. No ponto crítico a equação

¹²Em geral denota-se a razão L/ξ como $\Delta L^{1/\nu_{\perp}}$.

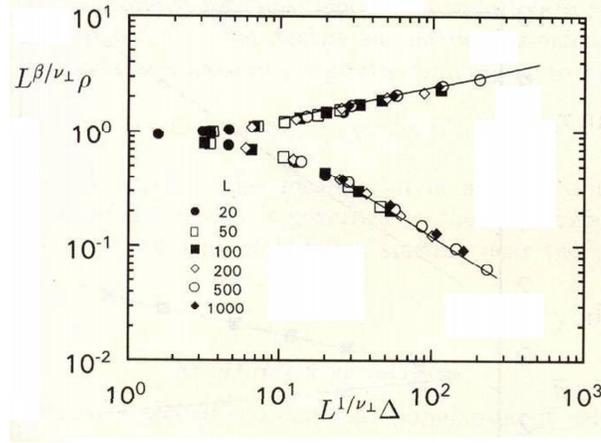


Figura 9: Gráfico reescalado da densidades de sítios QE. Figura retirada de [6].

(2.42) fornece

$$\bar{\rho}(L) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}}. \quad (2.43)$$

Se plotarmos gráficos de $\ln \bar{\rho} \times \ln L$, encontraremos uma reta cuja inclinação nos fornecerá o valor do expoente crítico. Fora do ponto crítico, não encontramos uma lei de potência, mas curvas com concavidades opostas nos regimes subcrítico e supercrítico.

2.5.3 Teoria de Campo médio

No Processo de Contato, a evolução temporal de $\rho(\mathbf{x}, t) \equiv \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 1]$ pode ser descrita pela seguinte equação de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = -\rho(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{q} \sum_{\mathbf{y}} \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0, \sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1] \quad (2.44)$$

onde \mathbf{y} são os sítios primeiros vizinhos do sítio \mathbf{x} e q é o número de coordenação da rede.

A relação anterior é exata mas requer que conheçamos a probabilidade de dois sítios, que por sua vez depende da de três sítios e assim por diante, em uma hierarquia infinita. Uma maneira de tratar esse problema é utilizarmos a aproximação de n -sítios ou aproximação em aglomerados [29]. A idéia é truncar a hierarquia em

Tabela 1: Aproximação de sítios para o PC unidimensional

Evento	Taxa	ΔN
1. $\bullet \circ \bullet \rightarrow \bullet \bullet \bullet$	$\lambda \rho^2 (1 - \rho)$	1
2. $\bullet \circ \circ \rightarrow \bullet \bullet \circ$	$\frac{\lambda}{2} \rho (1 - \rho)^2$	1
3. $\circ \circ \bullet \rightarrow \circ \bullet \bullet$	$\frac{\lambda}{2} \rho (1 - \rho)^2$	1
4. $\bullet \rightarrow \circ$	ρ	-1

algum nível de aproximação. No caso de truncarmos no nível de 1 sítio, temos a aproximação de campo médio usual, que trata a probabilidade de ocupação de cada sítio como independente dos vizinhos, i.e,

$$\text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0, \sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1] = \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0] \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1].$$

Neste nível o processo apresenta os eventos e respectivas taxas de transição listados na Tabela 1.

A contribuição de um dado evento para a evolução temporal da fração de sítios ativos é dada pelo produto entre sua taxa e a variação no número de sítios ativos, ΔN , provocada pelo evento. Desta forma, assumindo homogeneidade espacial, a equação (2.44) se torna

$$\frac{d\rho}{dt} = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2. \quad (2.45)$$

A equação (2.45) é a famosa equação de Malthus-Verhulst, e modela a evolução temporal do tamanho de uma população que apresenta seu crescimento limitado por recursos finitos do ambiente. No estado estacionário, $d\rho/dt = 0$. Para $\lambda \leq 1$ a única solução estacionária é a solução trivial, o estado absorvente $\rho = 0$. Entretanto para $\lambda > 1$ há também uma solução prevendo um estado estacionário ativo com $\rho = 1 - \lambda^{-1}$. Para $\lambda > 1$ esse estado ativo é estável, enquanto a solução absorvente é instável. Dessa forma, $\lambda = 1 \equiv \lambda_c$ marca um ponto crítico, em que o parâmetro de ordem ρ sofre uma mudança singular (vide Figura 10).

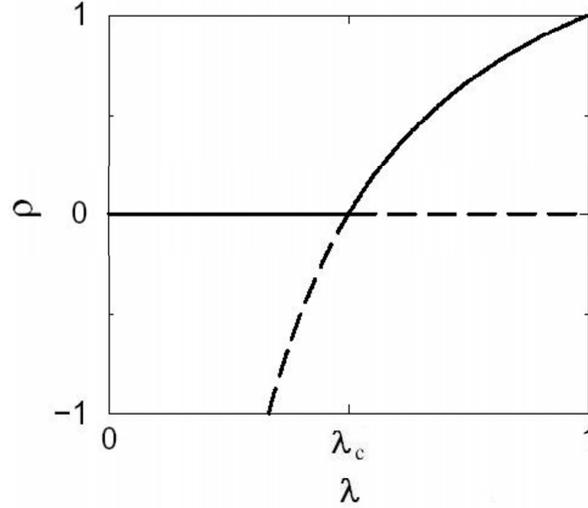


Figura 10: Densidade de sítios ativos para o processo de contato unidimensional, segundo a teoria de campo médio.

A solução geral da equação (2.45) é

$$\rho(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda - ce^{-(\lambda-1)t}}, \quad (2.46)$$

onde a constante $c = \lambda - (\lambda - 1)/\rho_0$, se tomamos $\rho(0) = \rho_0$.

Analisando agora o comportamento da solução acima na região subcrítica, em que $\lambda < 1$, vemos que ela decai para zero de forma exponencial

$$\rho = Ae^{-(1-\lambda)t}. \quad (2.47)$$

Na região supercrítica, $\lambda > 1$, o sistema relaxa para a solução estacionária ativa como

$$\rho = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}. \quad (2.48)$$

Em ambos os casos, o tempo de relaxação τ é dado por

$$\tau \sim |\lambda_c - \lambda|^{-1}. \quad (2.49)$$

Substituindo o valor do ponto crítico na equação (2.45), vemos que na criti-

calidade, a evolução temporal é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho^2, \quad (2.50)$$

indicando que em $\lambda = \lambda_c$ a densidade de sítios ativos decai em forma de *lei de potência*

$$\rho(t) \propto t^{-1}, \quad (2.51)$$

e fornecendo o expoente $\nu_{\parallel} = 1$

Definindo $\Delta \equiv \lambda - \lambda_c$, então para $\Delta > 0$, de acordo com a equação (2.45), $\rho = \Delta + \mathcal{O}(\Delta^2)$. Próximo a um ponto crítico, o parâmetro de ordem segue uma lei de potência, do tipo

$$\rho \propto \Delta^{\beta}. \quad (2.52)$$

Logo, a aproximação de campo médio para o PC fornece $\beta = 1$.

Para determinarmos o expoente relacionado à escala espacial, ν_{\perp} , podemos escrever uma versão contínua [10] da equação (2.45), onde $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ passa a representar uma densidade local de partículas. Acrescentamos a essa expressão um termo que leve em conta flutuações espaciais, através de um termo difusivo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = (\lambda - 1)\rho(\mathbf{x}, t) - \lambda \rho^2(\mathbf{x}, t) + D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t), \quad (2.53)$$

onde $D > 0$. Considerando a hipótese de escala, essa expressão deve ser invariante sob uma reescala do tipo $\rho(\mathbf{x}, t) \rightarrow a^{-\beta/\nu_{\perp}} \rho(\mathbf{x}, t)$. Aplicando esta transformação na equação (2.53), e dividindo por $a^{-\beta/\nu_{\perp}}$, obtemos

$$a^{\beta/\nu_{\perp}} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = (\lambda - 1)\rho(\mathbf{x}, t) - \lambda a^{\beta/\nu_{\perp}} \rho^2(\mathbf{x}, t) + D a^2 \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t), \quad (2.54)$$

onde devemos ter $\beta/\nu_{\perp} = 2$ para manter a invariância de escala da expressão (2.53). Assim, nessa formulação de campo médio, concluímos que $\nu_{\perp} = 1/2$.

Resumindo, os valores dos expoentes críticos fornecidos pela teoria de campo médio são

$$\beta = 1, \nu_{\parallel} = 1 \text{ e } \nu_{\perp} = 1/2. \quad (2.55)$$

Comparando estes valores com os valores obtidos por métodos mais sofisticados

Tabela 2: Valores dos pontos críticos e expoentes para o Processo de Contato.

	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$
λ_c	3.297848(20)	1.6488(1)	1.3169(1)	
$\beta = \beta'$	0.276486(8)	0.5834(30)	0.813(9)	1
γ	0.543882(16)	0.300(16)	0.126(2)	0
ν_{\parallel}	1.733847(6)	1.295(6)	1.105(5)	1
ν_{\perp}	1.096854(4)	0.734(4)	0.581(5)	1/2
η	0.313686(8)	0.2295(10)	0.114(4)	0
z	1.580745(10)	1.76(3)	1.90(1)	2
Ref.	[13, 33]	[34]	[35]	

(Tabela 2), vemos que, apesar de qualitativamente correta, a aproximação de campo médio apresenta resultados muito pobres do ponto de vista quantitativo. A falha da teoria de campo médio reside no fato dela tratar os sítios como estatisticamente independentes. Em $d = 1$ não existem resultados exatos para o valor de λ_c e dos expoentes críticos, porém resultados obtidos através de expansões em séries [13] por exemplo, indicam $\lambda_c = 3.297848(20)$. Na tabela 2 estão os valores dos pontos críticos e dos expoentes para o PC em várias dimensões. Cabe ressaltar que para $d \geq d_c = 4$ a aproximação de campo médio para o PC se torna exata, onde d_c é a *dimensão crítica*[30] do modelo. A existência da transição de fase no Processo de Contato foi provada rigorosamente [31], bem como o fato de que a transição é contínua [32].

2.6 A classe da Percolação Dirigida (PD)

Historicamente, o conceito de percolação surge do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso. Por exemplo, o petróleo através de uma rocha, ou a água em um filtro de areia. Formulado no final da década de 50 por Broadbent e Hammersley [36], o modelo de percolação concentra-se em descrever o meio poroso, que será visto como uma rede de canais aleatórios (ligações), por onde escoar um fluido determinístico.

O meio poroso é modelado como um substrato sólido em cujo interior existe um certo número de pequenos canais e poros em pontos escolhidos ao acaso. Na

modelagem usual utiliza-se uma rede regular, em que cada sítio representa um poro e as ligações entre os sítios representam os canais. Para simular a passagem do líquido através dos poros, considera-se que uma ligação aberta com probabilidade p e fechado com probabilidade $1 - p$, com $0 \leq p \leq 1$. Se o número de canais for suficientemente grande então eles estarão interligados e o meio se tornará permeável à passagem do fluido. Neste caso dizemos que houve a percolação do fluido. Prova-se que existe um valor crítico de $p = p_c$ em que existe uma transição de fases contínua entre a fase impermeável e a fase permeável ao líquido, em que o parâmetro de ordem é definido como a probabilidade de que um sítio escolhido ao acaso pertença ao aglomerado infinito [37].

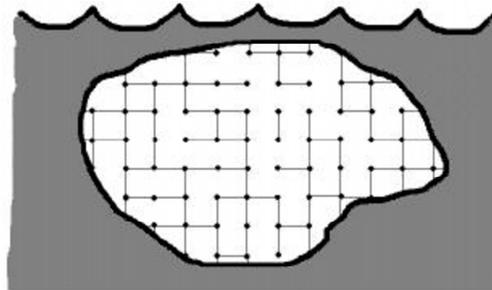


Figura 11: Modelo para uma rocha porosa bi-dimensional imersa em líquido.

No caso discutido até aqui, o fluido pode fluir em qualquer direção pelas ligações abertas (percolação isotrópica) [38]. Se considerarmos uma direção preferencial de escoamento¹³, temos a percolação direcionada. A direção preferencial pode ser interpretada como um coordenada temporal, em um modelo $d + 1$ dimensional, onde a rede quadrada foi girada a 45 graus.

Devido ao fluxo ocorrer em apenas uma direção, podemos considerar como ativos ($x_i = 1$) os sítios molhados e inativos ($x_i = 0$) os sítios secos. A atualização do processo é síncrona, ou seja, no tempo $t = t + 1$ todos os sítios são atualizados ao mesmo tempo.

¹³A direção preferencial de escoamento pode ser utilizada para modelar a força gravitacional, ou modelar uma rede de diodos aleatória.

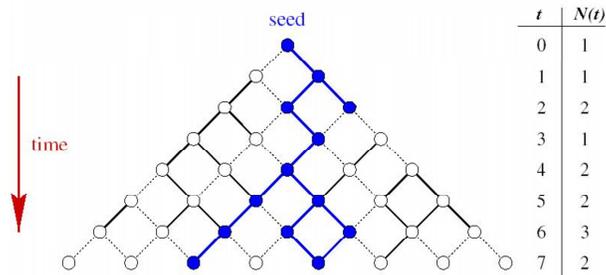


Figura 12: Percolação direcionada, onde a direção preferencial é interpretada como uma coordenada temporal. O processo evolui de maneira síncrona. Figura extraída de [39]

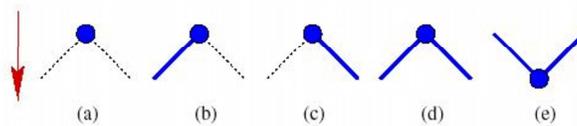
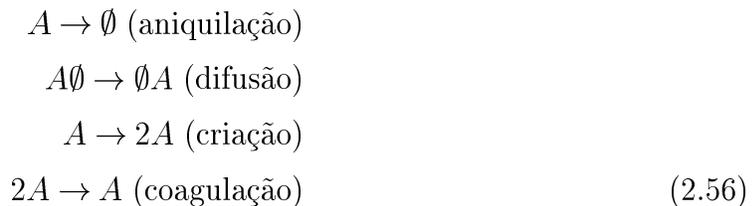


Figura 13: Interpretação da percolação dirigida como um processo de reação-difusão. Temos em: (a) aniquilação, (b) e (c) difusão, (d) criação, e (e) coagulação. Figura extraída de [39].

O modelo de percolação dirigida também pode ser interpretado como um processo de reação-difusão (vide Figura 13), onde cada sítio ativo representa uma partícula A , e com os seguintes processos envolvidos:



De onde depreende-se que a configuração em que todos os sítios estejam vazios é absorvente, estado equivalente a não haver mais ligações abertas no tempo $t + 1$.

A transição de fase para este estado absorvente apresenta os mesmos expoentes críticos encontrados no Processo de Contato, e em vários outros modelos, o que caracteriza a chamada Classe de Universalidade da Percolação Dirigida.

Conjectura de Grassberger-Janssen

Nos modelos com transições para estados absorventes, a classe da percolação dirigida (PD) tem se mostrado bastante robusta com relação às regras microscópicas. Tal fato levou Janssen e Grassberger a conjecturarem que um modelo deve pertencer à classe PD se as seguintes condições estiverem presentes:

- (i) O modelo apresenta uma transição de fase contínua de uma fase ativa para um único estado absorvente.
- (ii) A transição é caracterizada por um parâmetro de ordem escalar, positivo.
- (iii) As regras dinâmicas envolvem somente interações de curto alcance.
- (iv) O sistema não possui simetrias adicionais ou desordem congelada.

Apesar desta conjectura não ter sido provada rigorosamente, ela vem sendo reforçada por extensa evidência numérica, para diversos modelos, além do PC e da Percolação dirigida, como o modelo ZGB [18] e o autômato celular de Domany-Kinzel [40]. Porém, foram encontrados sistemas com infinitos estados absorventes [41], que também apresentam expoentes coincidentes com os da percolação direcionada. Dessa forma, devemos considerar que a conjectura de Grassberger-Janssen fornece as condições *necessárias* para um sistema pertencer à classe PD, e que a determinação das condições *suficientes* ainda é um problema em aberto.

Evidências experimentais da classe PD

Apesar de que, sob o ponto de vista teórico, os modelos da classe da percolação dirigida sejam simples de serem definidos, e serem utilizados para modelagem de fenômenos diversos, a evidência experimental da universalidade das transições de fase para estados absorventes ainda era bastante pobre, e até bem pouco tempo atrás ainda não havia nenhum experimento que confirmasse os valores dos expoentes críticos da classe PD quantitativamente [42].

Podemos identificar pelo menos três problemas principais na origem dessa dificuldade experimental. O primeiro é a impossibilidade de se obter, experimentalmente um estado realmente absorvente, livre de flutuações, que interferem na medição dos valores dos expoentes críticos com precisão. O segundo é o aparecimento de “desordem congelada” devido a inhomogeneidades espaciais e/ou temporais, que podem destruir o caráter PD da transição [6].

Outro problema é que os fenômenos que forneceram a “motivação” para a criação dos modelos que exibem uma transição da classe PD são, na verdade, muito mais complexos. Um exemplo é a transição contínua para uma fase “envenenada” por O_2 , que ocorre no modelo ZGB, que modela uma reação catalítica do tipo $CO + O_2 \rightarrow CO_2$, adsorvidas sobre um substrato (representado por uma rede quadrada) [18]. O fato é que, nos experimentos reais, existe uma desorção de O_2 , e o estado absorvente é destruído. O caso representado pelo espalhamento de epidemias, também não é modelado de maneira realista pelo processo de contato simples, uma vez que, além do mecanismo de contágio nas epidemias reais ser em geral heterogêneo, muitas vezes estão presentes termo de interação de longo alcance (como em uma epidemia cujo vetor é um inseto, por exemplo). Uma revisão sobre as diversas tentativas de verificação experimental da classe PD, bem como algumas sugestões encontra-se em [42].

Recentemente, Takeuchi e colaboradores [43] estudaram um sistema que parece não sofrer dessas limitações. Em seu trabalho, eles investigaram o comportamento crítico de uma transição de fase entre dois estados turbulentos, topologicamente diferentes que existem na convecção eletro-hidrodinâmica em certos cristais líquidos nemáticos. Em particular, estuda-se a transição entre as fases chamadas DSM1 e DSM2, que diferem quanto à orientação do cristal líquido. A dinâmica ocorre da seguinte forma: os domínios da fase DSM2 (em cinza na Figura 14) crescem estocasticamente e contaminam [c] as regiões DSM1 vizinhas (em branco) e/ou relaxam [r] para o estado DSM1, mas não surgem espontaneamente dentro de uma região DSM1. O estado DSM1 é um estado absorvente, e o estado DSM2 é ativo. Devido a essas características, espera-se que a transição entre esses dois estados seja governada pelos expoentes da classe PD.

Entre as propriedades físicas do sistema estudado, estão:

(i) Grande tamanho de sistema: 2×10^6 (o que elimina os efeitos de tamanho finito).

(ii) Parâmetro de ordem facilmente controlável (no caso, pela voltagem aplicada).

(iii) Resposta rápida dos cristais líquidos à variação do parâmetro de ordem, da ordem de 10 ms (reduz a possibilidade de efeitos tipo “desordem congelada”).

(iv) O sistema apresenta uma transição de fase entre dois estados *turbulentos* (o que destrói os efeitos de longo alcance).

Essas propriedades permitiram uma determinação dos expoentes críticos da transição com uma precisão bem superior aos experimentos anteriores. Os expoentes obtidos foram

$$\beta = 0.59(4), \nu_{\perp} = 0.77(7), \nu_{\parallel} = 1.18_{-(21)}^{+(14)},$$

que constituem um conjunto completo de expoentes críticos, e estão em concordância com os valores da classe PD em (2+1) dimensões (vide Tabela 2).

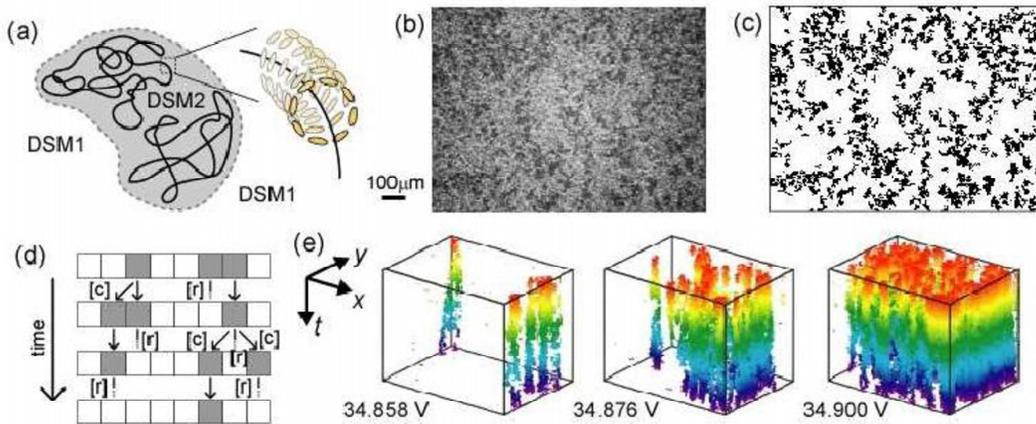


Figura 14: (a) Esboço da fase DSM2 com as orientações observadas no cristal líquido. (b) Foto do experimento a 35.153V. As regiões tipo DSM2 estão em escuro, e a região DSM1, em claro.(c) Tratamento dos dados de (b). (d) Esquema da dinâmica do sistema (e) Regiões ativas (DSM2) para três voltagens próximas ao ponto crítico: 34.858, 34.876, e 34.900V. Os diagramas representam uma área de $1206\mu m \times 899\mu m$ e um tempo total de 6.6s. Figura extraída de [39]

2.7 Outras classes de Universalidade

Neste trabalho estamos focados no estudo das classes de universalidade das transições de fase para estados absorventes, entre as quais a classe da percolação dirigida é a mais importante. Além da classe PD, poucas outras classes estão bem estabelecidas. A seguir citamos as mais importantes envolvendo interações locais.

Processos com conservação de paridade

A classe da conservação de paridade (CP) acontece em processos de reação-difusão do tipo



onde o n é um número inteiro par. Como característica essencial, esse tipo de processo conserva o número de partículas *módulo* 2. Os expoentes críticos estimados para esta classe, em $d = 1$ [44], são $\beta = \beta' = 0.92(2)$, $\nu_{\parallel} = 3.22(6)$, $\nu_{\perp} = 1.83(3)$, bem diferentes daqueles da classe PD. Outra característica que difere da classe PD é a relaxação na fase subcrítica, que apresenta um decaimento algébrico em vez de exponencial, e sua dimensão crítica que é $d_c = 2$.

Transições absorventes com um campo conservado

Um aspecto comum aos processos nesta classe, é que o número de partículas nos modelos é conservado, o que viola a conjectura de Grassberger-Janssen. Isto leva a uma classe de universalidade caracterizada por um acoplamento efetivo do processo a um campo conservativo não-difusivo [45]. Modelos nesta classe tem infinitos estados absorventes e estão relacionados a alguns modelos de criticalidade auto-organizada [46]. Um exemplo de processo nesta classe é o CTTP [47], que em $d = 1$ possui os expoentes:

$$\beta = 0.28(1); \nu_{\parallel} = 2.5(1),$$

enquanto que para $d \geq 2$ apresenta os mesmos expoentes da classe de universalidade da pilha de areia de Manna [48] ($\beta = 0.639(9)$; $\beta' = 0.624(29)$; $\nu_{\perp} = 0.799(14)$ e $\nu_{\parallel} = 1.225(29)$). A dimensão crítica para modelos desta classe é $d_c = 4$ [8].

Classe do modelo do votante

O modelo do votante clássico [31] é um processo no qual os votantes, representados pelos sítios em uma rede quadrada, adotam a opinião de um vizinho qualquer. Duas opiniões são possíveis, de forma que o modelo possui dois estados absorventes simétricos (simetria Z_2). A evolução do modelo é caracterizada pelo aparecimento de diversos domínios com cada uma das opiniões. Uma característica deste modelo é que mesmo um pequeno ruído interno leva imediatamente a um estado desordenado. Entretanto, se o ruído ocorre apenas na interface entre os domínios, observa-se uma transição de fase contínua para um valor finito da amplitude do ruído. A classe do modelo do votante envolve os modelos com simetria Z_2 que sofrem uma transição absorvente forçada por um ruído interfacial [49], e sua dimensão crítica é $d = 2$. Os expoentes da classe do votante, bem como das outras classes de universalidade discutidos nesta seção, encontram-se na Tabela a seguir (Dados retirados de [8]).

Tabela 3: Valores dos expoentes crítico para outras classes com transições de fase para estados absorventes

Classe	d	β	β'	ν_{\perp}	ν_{\parallel}
Conservação de paridade	1	0.92(2)	0.92(2)	1.83(3)	3.22(6)
	2	1	0	1/2	1
Campo conservado	1	0.28(1)	-	-	2.5
	2	0.639(9)	0.624(29)	0.799(14)	1.225(29)
	3	0.84(2)	-	-	1.12(8)
	4	1	0.624(29)	0.799(14)	1
Modelo do votante	1	0	1	1	2
	2	0	1	1/2	1

2.8 Métodos alternativos para identificar uma classe de universalidade

Dizemos que as classes de universalidade podem ser caracterizadas em termos de seus expoentes críticos e suas funções de escala. Em geral, para um dado modelo, a obtenção dos valores dos expoentes críticos é muito mais simples do que a obtenção das funções de escala. Talvez por isso, o estudo das funções de escala tenha sido ignorado na literatura por bastante tempo, apesar de fornecer informações úteis na caracterização da criticalidade, como apontado na revisão [47]. Alguns pontos especiais das funções de escala são representados por algumas razões entre momentos e cumulantes da distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem. Os valores numéricos dessas razões então podem ser utilizados como um método alternativo para identificar as classes de universalidade, como veremos a seguir.

2.8.1 Razões entre momentos e cumulantes

Dada a distribuição do parâmetro de ordem, $P(\rho, L)$, os momentos da distribuição são definidos por

$$m_n \equiv \langle \rho^n \rangle = \int_0^1 \rho^n P(\rho, L) d\rho, \quad (2.58)$$

onde ρ é o parâmetro de ordem e $\langle \cdot \rangle$ é a média efetuada no estado estacionário.

Os cumulantes K_n do parâmetro de ordem estão relacionados aos momentos definidos acima, pela seguinte expressão:

$$K_n = m_n - \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n-1}{k-1} K_k m_{n-k}. \quad (2.59)$$

No estudo de sistemas em equilíbrio, a obtenção das razões entre cumulantes do parâmetro de ordem estabeleceu-se como um método bastante útil para a identificação das classes de universalidade [50]. Em particular, é bastante comum se

calcular o chamado “quarto cumulante reduzido de Binder”, definido como

$$q_4 \equiv 1 - \frac{\langle \rho^4 \rangle}{3\langle \rho^2 \rangle^2}. \quad (2.60)$$

As curvas de $q_4 \times p$ para diferentes tamanhos L do sistema devem se cruzar sobre o ponto crítico, em um valor universal de q_4 , que varia com a classe de universalidade. Além disso, este cumulante em geral é pouco sensível aos efeitos de tamanho finito, o que permite determinar a classe de universalidade de um modelo com pouco esforço computacional [15].

Dickman e da Silva foram os primeiros a estudar as razões entre momentos para transições de fase para um estado absorvente [51]. Neste caso o argumento para a universalidade é análogo ao caso de equilíbrio. Uma diferença é que no caso das transições de fase o parâmetro de ordem é sempre positivo, o que permite estudar momentos pares e ímpares do parâmetro de ordem¹⁴.

O argumento de escala que garante o caráter universal de tais razões é o seguinte. No ponto crítico,

$$m_1 \simeq AL^{-\beta/\nu_\perp}, \quad (2.61)$$

onde β e ν_\perp são os expoentes críticos usuais definidos na seção 2.5, e A é uma constante não-universal.

A partir da teoria de escala de tamanho finito, vemos que, no ponto crítico, a densidade de probabilidade para ρ deve satisfazer

$$P(\rho, L; \lambda_c) = P(\rho/m_1) \simeq \frac{L^{\beta/\nu_\perp}}{A} \mathcal{P}(\rho L^{\beta/\nu_\perp}/A) \quad (2.62)$$

onde \mathcal{P} é uma função de escala universal. Então

$$m_n \simeq A^n L^{-n\beta/\nu_\perp} I_n, \quad (2.63)$$

onde

$$I_n = \int_0^\infty u^n \mathcal{P}(u) du \quad (2.64)$$

independe do modelo e do tamanho do sistema. Isto implica que razões da forma

¹⁴Em modelos de equilíbrio, a magnetização pode tomar valores positivos e negativos, o que faz com que os momentos ímpares sejam nulos.

Tabela 4: Valores de algumas razões universais para processos das classes PD (PC, PCP e ZGB), CP e CTPP em $d = 1$ e $d = 2$.

d	Modelo	m_4/m_2^2	$m_3/(m_1^3)$	$m_3/(m_1m_2)$	m_2/m_1^2	K_4/K_2^2	Ref.
1	PC	1.554(2)	1.526(3)	1.301(3)	1.1736(2)	-0.505(3)	[51]
	PCP	1.558(2)	1.529(3)	1.303(3)	1.1738(2)	-0.493(3)	[51]
	CP				1.3340(4)		[51]
	CTPP				1.142(8)		[52]
2	PC	2.093(8)	2.080(1)	1.569(1)	1.3257(5)	-0.088(4)	[51]
	PCP	2.07(1)	2.067(9)	1.56(1)	1.323(3)		[53]
	ZGB	1.95(9)	2.06(3)	1.55(2)	1.33(1)		[54]

$m_n/m_r^i m_s^j$ são universais para os casos em que $ir + js = n$, por exemplo as razões m_4/m_2^2 , m_3/m_1^3 , $m_3/(m_1m_2)$ e m_2/m_1^2 .

A mesma justificativa vale para algumas razões entre os cumulantes, e entre cumulantes e momentos que são universais, como K_4/K_2^2 e $K_2/m_1^2 = m_2/m_1^2 - 1$, onde

$$\begin{aligned}
 K_2 &\equiv m_2 - m_1^2 \\
 K_4 &\equiv m_4 - 4m_3m_1 - 3m_2^2 + 12m_2m_1^2 - 6m_1^4.
 \end{aligned} \tag{2.65}$$

Na Tabela 4 são apresentados os valores de algumas razões universais na criticalidade para o processo de contato, para o processo de contato por pares, e para o modelo ZGB, que são da classe PD, para um representante da classe de conservação de paridade (CP) e outro da classe CTPP (campo conservado).

2.9 Sumário

Neste capítulo procuramos introduzir algumas idéias básicas sobre a modelagem estocástica de sistemas fora do equilíbrio, em especial daqueles contendo estados absorventes, bem como sobre seu comportamento crítico. Dada a extensão desses tópicos, sugerimos as seguintes referências, que formaram a principal fonte para este capítulo. Sobre processos fora do equilíbrio, boas referências gerais são os

livros clássicos de Nicolis e Prigogine [22] e a série *Synergetics* de Haken [21]. Uma formulação moderna, porém sucinta, se encontra no texto de Reichl [1]. Sobre a equação mestra e processos de Markov, recomendamos os textos de van Kampen [10] e Gardiner [55]. Sobre transições de fase para estados absorventes, os livros de Privman [7] e de Marro e Dickman [6], além dos artigos de revisão de Hinrichsen [5] e Ódor [8]. Em português, bons textos introdutórios são [56] e o artigo [57].

3 *Simulando sistemas com estados absorventes*

Para muitos processos com um estado absorvente, as propriedades estatísticas da amostra sobrevivente atingem valores independentes do tempo no regime *quase estacionário* (QE). No trabalho discutido neste capítulo, nós propomos um método simulacional para o estudo direto das propriedades quase-estacionárias, baseado na equação de movimento que governa a distribuição QE. No ponto crítico, nosso método é cerca de uma ordem de grandeza mais eficiente que as simulações convencionais.

Publicação relacionada: M. M. de Oliveira and R. Dickman, Phys. Rev. E **71**, 016129 (2005).

3.1 Introdução

Vimos no capítulo anterior que, mesmo em processos simples como o Processo de contato, uma solução exata não está disponível. A teoria de campo médio não fornece resultados bons para $d < d_c$. Outras técnicas mais sofisticadas, como as expansões em séries podem ser bem precisas em alguns casos, mas nem sempre estão disponíveis. Esta situação torna as simulações numéricas uma ferramenta indispensável no estudo do comportamento crítico de processos como o PC e outros modelos fora do equilíbrio.

Existem basicamente dois modos de se realizar simulações computacionais de modelos em rede que exibem uma transição de fase para um estado absorvente. O primeiro é baseado no comportamento de escala dinâmico, como por exemplo no

espalhamento da atividade a partir de uma semente ativa na rede, para um valor na vizinhança do ponto crítico¹. Este método é em geral bem eficiente e os expoentes críticos podem ser determinados com boa precisão, através da aplicação da teoria de escala que discutimos na seção 2.5. Um problema relacionado a este tipo de simulação reside no fato de ele ser restrito à vizinhança do estado absorvente.

O segundo tipo de simulação é baseado no estudo do comportamento estacionário de certas grandezas de interesse, como por exemplo o parâmetro de ordem. Neste tipo de simulação, é comum utilizarmos uma rede com condições periódicas de contorno, e iniciarmos a simulação em um estado bem longe do estado absorvente, como por exemplo, a rede toda ocupada por sítios ativos. Após um certo tempo de simulação, o sistema relaxa para um estado aparentemente estacionário, que flutua em torno de um valor médio, como pode ser visto na Figura 15. Isto é feito para vários tamanhos, e o comportamento crítico é analisada através da teoria de escala de tamanho finito.

Alguns problemas surgem no caso de simulações desse tipo, pois o sistema não atinge um estado estacionário verdadeiro, mas um estado meta-estável, chamado estado *quase-estacionário* (QE). Isto devido ao fato de que como as simulações são feitas em redes finitas, em um tempo finito uma flutuação levará invariavelmente o sistema para o estado absorvente (o estado ativo, caso exista, deve emergir apenas no limite macroscópico). Além disso, devido às flutuações observadas, o “valor médio” é obtido de uma forma um tanto quanto arbitrária.

Um problema adicional surge da existência de estados absorventes no sistema. Para melhorar a estimativa das grandezas estudadas, devemos realizar um número grande de ensaios e efetuar as médias sobre esses ensaios, em função do tempo t . A média obtida relaxa, após um regime transiente, em direção aos valores QE. No entanto, como apenas alguns poucos ensaios sobrevivem até o final da simulação, (muitos ficam aprisionados no estado absorvente), a amostra diminui de tamanho, e as médias sofrem flutuações cada vez maiores com a evolução temporal do processo, como pode ser visto na Figura 16.

¹Neste exemplo, deve-se tomar especial atenção aos efeitos de tamanho finito, evitando que a atividade alcance as fronteiras da rede, que é finita. Outra possibilidade de estudarmos o comportamento dinâmico é iniciarmos com a rede toda ocupada e estudarmos a dinâmica em direção ao estado absorvente.

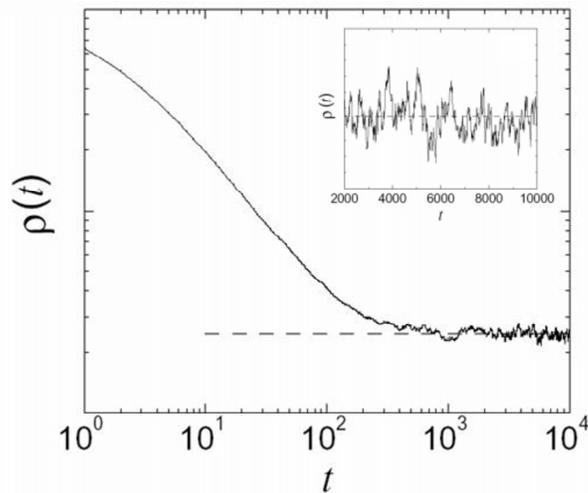


Figura 15: Maneira “convencional” de se determinar os valores das grandezas estacionárias.

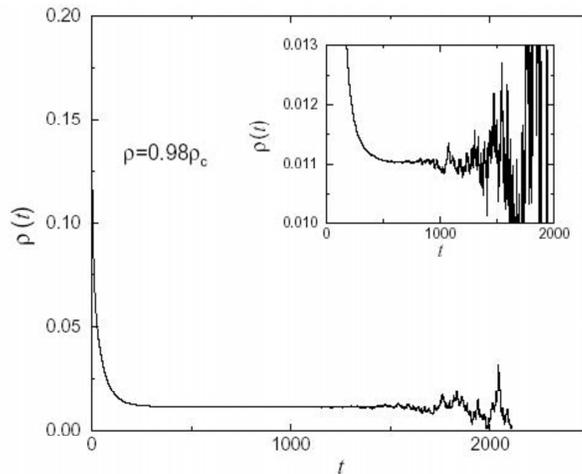


Figura 16: Devido à diminuição do tamanho da amostra, as flutuações nas médias ficam cada vez maiores.

Desta forma, é desejável o desenvolvimento de métodos numéricos mais eficientes para o estudo das grandezas estáticas em processos com estados absorventes. Em particular, seria muito útil um método simulacional que fornecesse as propriedades do estado quase-estacionário diretamente. Neste capítulo apresentamos um método para este fim, que se baseia na noção de distribuições quase-estacionárias.

3.2 Distribuições Quase-Estacionárias

Os processos estocásticos markovianos com estados absorventes em sistemas finitos podem apresentar dois comportamentos qualitativamente diferentes para um dado tempo. Dependendo dos parâmetros de controle, ou o processo está extinto após haver atingido um dos estados absorventes, ou o processo se mantém no subconjunto de estados transientes. No último caso, a distribuição de probabilidades dos estados do processo pode ser encontrada condicionando-se que o evento de absorção ainda não ocorreu. Para tempos longos, a distribuição condicional resultante é aproximada por uma distribuição condicional estacionária, a chamada distribuição *quase-estacionária*.

Em geral, um regime quase-estacionário é esperado se a descrição macroscópica do processo admite um estado estacionário ativo ², no qual suas propriedades independem do tempo, enquanto o sistema não cair no estado absorvente.

A idéia de distribuições quase estacionárias (QE) surgiu em 1947, com o trabalho do matemático russo Yaglom [59]. Em seu artigo, Yaglom mostrava que a distribuição da população, condicionada a um valor limite, na n -ésima geração do processo de Galton-Watson³ sempre existia no regime subcrítico. Um dos primeiros usos do termo quase-estacionariedade (*quasi-stationarity*)⁴ foi nos trabalhos do matemático britânico Bartlett [19]. Nos anos 60 surgiram diversos trabalhos, como o de Darroch e Seneta [60], que visavam formular uma teoria geral para as condições de quase-estacionariedade em processos Markovianos finitos.

Desde então, as distribuições quase-estacionárias extrapolaram o domínio da

²Nem todo processo com um estado absorvente admite uma distribuição QE. Como exemplo, citamos o processo de decaimento exponencial, que possui as taxas de transição $W_{m \rightarrow n} = m\delta_{n,m-1}$. Em geral, um regime quase-estacionário é esperado se a descrição macroscópica do processo admite um estado estacionário ativo. As condições rigorosas para a determinação da existência da distribuição QE para um processo Markoviano são discutidas em [58], entre outros.

³O processo de ramificação ou de Galton-Watson representa o tamanho das gerações sucessivas de uma população que evolui por replicações aleatórias independentes e identicamente distribuídas dos indivíduos-pais. Um único indivíduo forma a geração zero. Cada indivíduo tem probabilidade p_k , $k = 0, 1, 2, \dots$ de gerar exatamente k novos indivíduos; os descendentes diretos da $n - 1$ -ésima geração constituem a n -ésima geração. O processo continua para sempre, ou até que alguma geração se torne extinta.

⁴Na literatura matemática também encontramos com freqüência o termo “limites de Yaglom” se referindo às distribuições QE.

matemática pura e encontraram aplicação em diversos contextos⁵, como, por exemplo, genética [61], epidemiologia [62], ecologia [63], telecomunicações [64] e cinética química [65].

A obtenção da distribuição quase-estacionária, no entanto, não é uma tarefa trivial. Somente para alguns poucos processos simples, sem estrutura espacial, ela pode ser calculada explicitamente [66]. Mais recentemente, Dickman e Vidi-gal [66] desenvolveram métodos tipo campo médio para estudar o estado quase-estacionário de sistemas finitos com um estado absorvente. Em seu trabalho, eles utilizam tais métodos para construir as distribuições QE para vários processos de Markov em tempo contínuo, como o processo de contato (PC) e o processo de Malthus-Verhulst⁶ (MVP). Posteriormente, Atman e Dickman [67] estudaram as distribuições QE para um processo de Markov em tempo discreto, o autômato celular estocástico de Domany-Kinzel⁷ (DKCA), e de Oliveira e Dickman modelos de catálise em rede [68]. No entanto, nem sempre as aproximações de n -sítios oferecem resultados satisfatórios. Isso ocorre devido ao crescimento do comprimento de correlação dos sistemas, e sua divergência no ponto crítico. Assim, para alguns sistemas a aproximação de n -sítios pode fornecer um diagrama de fases incorreto, ou pode ser necessária a utilização de um aglomerado de tamanho tal que os cálculos das probabilidades dos eventos relacionados se tornem inviáveis.

Definição da distribuição QE

Considere um processo de Markov em tempo contínuo X_t que toma valores $n = 0, 1, 2, \dots, S$, com o estado $n=0$ sendo absorvente. Utilizaremos $p_n(t)$ para denotar a probabilidade de que $X_t = n$, dado algum estado inicial X_0 . A probabilidade de sobrevivência, definida como

$$P_s(t) = \sum_{n \geq 1} p_n(t) \quad (3.1)$$

⁵Uma extensa bibliografia contendo mais de três centenas de artigos e livros sobre distribuições QE foi organizada por Pollett, e está disponível *online* em: <http://www.maths.uq.edu.au/~pkp/papers/qds.html>.

⁶O processo MVP descreve uma população com nascimento, morte e saturação devido à competitividade por recursos limitados.

⁷Grosso modo, o DKCA pode ser visto como uma versão do processo de contato em tempo discreto.

é a probabilidade de que o processo não tenha ficado preso no estado absorvente até o tempo t .

Nós supomos que, quando $t \rightarrow \infty$ os p_n , normalizados pela probabilidade de sobrevivência $P_s(t)$, atinjam uma forma independente do tempo (condição de *quase-estacionariedade*). A distribuição quase-estacionária \bar{p}_n é então definida por

$$\bar{p}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{p_n(t)}{P_s(t)}, \quad (n \geq 1), \quad (3.2)$$

com $\bar{p}_0 \equiv 0$. A distribuição QE é normalizada, ou seja,

$$\sum_{n \geq 1} \bar{p}_n = 1. \quad (3.3)$$

Podemos ainda definir a vida de um estado quase-estacionário⁸ como:

$$\tau = 1/A_0, \quad (3.4)$$

onde $A_0 = \sum_n W_{n \rightarrow 0} \bar{p}_n$ representa o fluxo de probabilidade em direção ao estado absorvente. Sendo o destino final do processo o estado absorvente, a vida do estado quase-estacionário (QE) é finita, podendo ser bem longa em um sistema grande.

3.3 O método de simulação QE

A distribuição QE é a solução estacionária da seguinte equação de movimento [66] (para $n > 0$)

$$\frac{dq_n}{dt} = -w_n q_n + r_n + r_0 q_n, \quad (3.5)$$

onde $w_n = \sum_m w_{m,n}$ é a taxa total de transições para fora do estado n , e $r_n = \sum_m w_{n,m} q_m$ é o fluxo de probabilidade para esses estados.

Para verificar isto, considere a equação mestra (Eq. (3.5) sem o último termo)

⁸Que pode ser visto como uma medida de por quanto tempo a distribuição QE reflete a distribuição de estados do processo.

no regime QE. Substituindo $q_n(t) = P_s(t)\bar{p}_n$, e notando que no regime QE

$$dP_s/dt = -\bar{r}_0 = -P_s \sum_m w_{0,m} \bar{p}_m, \quad (3.6)$$

nós vemos que o segundo membro da Eq. (3.5) é zero se $q_n = \bar{p}_n$ para $n \geq 1$. O último termo na Eq. (3.5) representa uma *redistribuição* da probabilidade r_0 (transferida para o estado absorvente na equação mestra original), para o subespaço não-absorvente. Nessa redistribuição, cada estado não-absorvente recebe uma parcela igual à sua probabilidade.

Apesar da Eq. (3.5) não ser uma equação mestra, pois é não-linear nas probabilidades q_n , ela sugere um esquema simulacional baseado em um método tipo Monte Carlo⁹ para a amostragem da distribuição QE, já que em uma simulação de Monte Carlo é gerado um conjunto de realizações de um processo estocástico.

A partir de agora, chamaremos uma simulação do processo original X_t (aquele que possui um estado absorvente) uma simulação *convencional*. Nosso objetivo será então definir um processo relacionado, X_t^* , cuja distribuição de probabilidade *estacionária* seja a distribuição *quase-estacionária* de X_t .¹⁰

A distribuição de probabilidade de X_t^* é governada pela Eq. (3.5), o que implica que para $n > 0$ (i.e., fora do estado absorvente), a evolução de X_t^* é idêntica àquela de X_t . Uma vez que a Eq. (3.5) é válida para $n > 0$, o processo X_t^* deve iniciar em um estado não-absorvente. Por outro lado, quando X_t entra no estado absorvente, X_t^* ao contrário, pula para um estado não-absorvente, e então continua sua evolução “usual” (com as mesmas probabilidades de transição de X_t), até o momento em que uma nova visita ao estado absorvente seja iminente (vide Figura 17).

Um aspecto sutil da Eq. (3.5) é que a distribuição q_n é usada para determinar

⁹Sob uma interpretação dinâmica, o método de Monte Carlo fornece uma solução numérica para a equação mestra. A solução da equação mestra é calculada computacionalmente através da escolha aleatória entre várias possíveis transições para um estado e associando uma certa probabilidade a cada transição. Após cada transição efetuada, o tempo é incrementado, tipicamente em unidades inteiras de *passos de Monte Carlo*. Após um certo número de passos, espera-se que o sistema atinja o estado estacionário.

¹⁰Note que para obtermos uma distribuição estacionária não-trivial, X_t^* não pode possuir um estado absorvente.

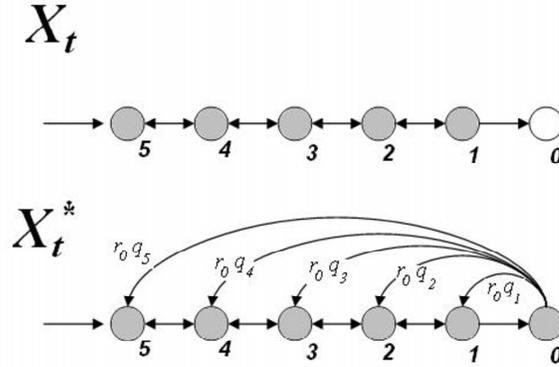


Figura 17: Processo original X_t , com o estado 0 absorvente, e seu processo relacionado X_t^* .

o valor de X_t^* quando X_t visita o estado absorvente. Apesar de não conhecermos *a priori* q_n (ou seu limite para tempos longos, a distribuição QE \bar{p}_n), podemos, em uma simulação, utilizar a história X_s^* ($0 < s \leq t$) até o tempo t , para *estimar* os q_n . Isto pode ser feito salvando, e periodicamente atualizando, uma amostra n_1, n_2, \dots, n_M dos estados visitados. Se o espaço de estados é caracterizado por um pequeno conjunto de variáveis, podemos em vez disso acumular um histograma $H(n)$ do tempo gasto no estado n . Com a evolução do processo, X_s^* visitará os estados de acordo com a distribuição QE. Nós então atualizamos a amostra $\{n_1, n_2, \dots, n_M\}$, periodicamente substituindo uma dessas configurações pela atual. Dessa forma, a distribuição para o processo X_t^* convergirá para a distribuição QE, isto é, para a solução estacionária da Eq. (3.5).

Resumindo, o processo simulado X_t^* tem a mesma dinâmica que X_t , exceto que quando uma transição para o estado absorvente é iminente, X_t^* é levado para um estado não-absorvente, selecionado ao acaso a partir de uma amostra obtida da história daquela realização. Sob esta ótica, o termo não-linear na Eq. (3.5) representa uma *memória* na simulação.

3.4 Implementando o método

Para explicar como nosso método funciona na prática, nós detalharemos sua aplicação ao processo de contato, estudado no capítulo anterior. No PC, cada sítio

i de uma rede está ou ocupado ($\sigma_i(t) = 1$), ou vazio ($\sigma_i(t) = 0$). Transições de $\sigma_i = 1$ para $\sigma_i = 0$ ocorrem a uma taxa unitária, independente dos sítios vizinhos. A transição reversa somente pode ocorrer se pelo menos um vizinho está ocupado: a transição de $\sigma_i = 0$ para $\sigma_i = 1$ ocorre a uma taxa λm , onde m é a fração de primeiros vizinhos do sítio i que estão ocupados. Fica evidente que o estado $\sigma_i = 0 \forall i$, é absorvente, e que no modelo, λ é um parâmetro de controle governando a taxa de espalhamento da atividade. O parâmetro de ordem, ρ , é a fração de sítios ocupados.

3.4.1 Processo de Contato em um Grafo Completo

Inicialmente, estudamos o processo de contato em um *grafo completo*¹¹ (PCGC), no qual a taxa para um sítio vago se tornar ocupado é λ vezes a fração de *todos* os sítios que estão ocupados, em vez da fração de primeiros vizinhos. O valor crítico neste caso é $\lambda_c = 1$; o valor estacionário de ρ é zero para $\lambda < \lambda_c$. O estado do processo pode ser completamente especificado pelo número de sítios ocupados, o qual chamaremos de n . Para cada n , a matriz de evolução para este processo possui apenas duas taxas de transição não nulas:

$$W_{n \rightarrow n-1} = n \quad (3.7)$$

$$W_{n \rightarrow n+1} = \lambda \frac{n}{N} (N - n) \quad (3.8)$$

em um grafo de N sítios.

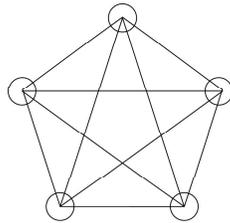


Figura 18: Um grafo completo com 5 sítios.

¹¹Um grafo completo é uma rede em que todos os sítios estão conectados entre si (vide Figura 18).

Solução exata para o PCGC

Seguiremos a solução apresentada em [66], onde a distribuição QE exata para o PCGC é obtida através de um conjunto de relações de recorrência. Primeiro devemos observar que a evolução do PC em um grafo completo é dada em termos da seguinte equação mestra (ME):

$$\dot{p}_n = (n+1)p_{n+1} + (n-1)\frac{\lambda}{N}(N-n+1)p_{n-1} - \left[1 + \frac{\lambda}{N}(N-n)\right]np_n \quad (3.9)$$

Da definição de probabilidade de sobrevivência, eq. (3.1), vem que $\dot{P}_s(t) = \sum_{n \geq 1} \dot{p}_n(t)$, que para o processo de contato gera uma soma telescópica, com resultado $\dot{P}_s(t) = -p_1(t)$. Logo, aplicando a hipótese de quase-estacionariedade, $p_1(t) = P_s(t)q_1$, temos:

$$\frac{\dot{P}_s(t)}{P_s(t)} = -q_1. \quad (3.10)$$

Substituindo a expressão (3.10) na equação mestra e dividindo por $P_s(t)$, obtemos, para $n \geq 1$:

$$\frac{\lambda}{N}(n-1)(N-n+1)q_{n-1} + (n+1)q_{n+1} - \left[\frac{\lambda}{N}(N-n)+1\right]nq_n + q_1q_n = 0 \quad (3.11)$$

Desse modo, para um dado n , a equação acima fornece uma relação para q_{n+1} em termos de q_n e q_{n-1} . Fazendo $u_n = n \left[\frac{\lambda}{N}(N-n)+1\right]$, obtemos

$$q_2 = \frac{1}{2}q_1(u_1 - q_1) \quad (3.12)$$

e

$$q_n = \frac{1}{n} \left[(u_{n-1} - q_1)q_{n-1} - (n-2)(N-n+2)\frac{\lambda}{N}q_{n-2} \right] \quad (3.13)$$

para $n = 2, \dots, N$. Vemos que a distribuição QE é completamente determinada uma vez que q_1 é conhecida, e após aplicarmos a condição de normalização, dada pela eq. (3.3).

Como em geral não conhecemos q_1 de antemão, podemos iterar a relação (3.13) da seguinte forma: Começamos com um “chute” para q_1 e calculamos os q_n correspondentes e o valor de $S = \sum_{n=1}^N q_n$. Repetimos este procedimento, agora com $q'_1 = q_1/S$. Após um número pequeno de passos, $S \rightarrow 1$, ponto em que os q_n representam a distribuição QE, com a precisão desejada.

Resultados simulacionais

No PCGC, vemos que a partir das taxas de transição dadas pelas Eqs. (3.7) e (3.8), a taxa para sair do estado n é dada por

$$W_n = W_{n \rightarrow n-1} + W_{n \rightarrow n+1} = n \left[1 + \frac{\lambda}{N}(N-n), \right] \quad (3.14)$$

o que leva a:

$$\begin{aligned} P(n+1|n) &= \frac{W_{n \rightarrow n+1}}{W_n} = \frac{\lambda(N-n)}{N + \lambda(N-n)} \\ P(n-1|n) &= \frac{W_{n \rightarrow n-1}}{W_n} = \frac{N}{N + \lambda(N-n)}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde $P(n'|n)$ representa a probabilidade do próximo estado ser n' , dado que o atual é n .

Implementamos a simulação da seguinte forma: Definimos o tamanho da lista como $M = 10^4$ estados. A partir de uma configuração inicial n_0 , alteramos seu estado utilizando as probabilidades de transição dadas pelas expressões (3.15). No começo do processo, temos apenas o estado inicial na lista, n_0 . Na fase inicial da evolução, acrescentamos à lista cada nova configuração gerada, até preencher os M lugares. Assim, a lista consiste, no momento que colocamos o M -ésimo elemento, de uma seqüência cronológica dos estados gerados, n_0, n_1, \dots, n_{M-1} .

A partir desse momento, com toda a lista preenchida, sempre que um estado é visitado, passamos a atualizar a lista com uma probabilidade $\gamma \Delta t$ onde $\Delta t = 1/w_n$ é a duração média daquele estado¹². No entanto, quando ocorreria uma transição

¹²Ou seja, com uma probabilidade $\gamma \Delta t$, escolhemos (aleatoriamente) um lugar $j, j = 1, 2, \dots, M$, e colocamos n nesta posição. Com probabilidade $1 - \gamma \Delta t$ a lista continua sem modificação neste passo. Agindo assim, um estado permanece na lista um intervalo médio de M/γ .

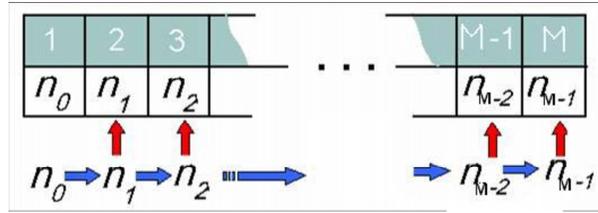


Figura 19: Preenchendo a lista com os M primeiros estados.

para o estado absorvente ($n = 0$), nós selecionamos um estado qualquer a partir da lista, e continuamos a simulação.

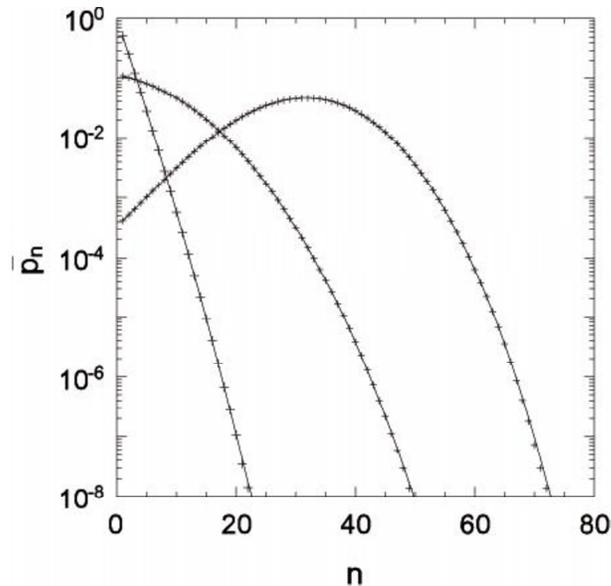


Figura 20: Distribuições QE para o PCGC obtidas através das relações de recorrência (linhas sólidas) e através da simulação QE (símbolos). O grafo possui 100 sítios e $\lambda = 0.5, 1.0$ e 1.5 ; da esquerda para a direita.

Para implementar a simulação, devemos lembrar que como a probabilidade de atualização da lista é $\gamma\Delta t$, devemos ter para o PC no grafo completo $\gamma < 1 + \lambda$, de forma a garantir $\gamma\Delta t < 1$. Realizamos a simulação com o valor do parâmetro $\gamma = 0.5$, para os seguintes valores do parâmetro de controle: $\lambda = 0.5, 1.0$ e 1.5 . O

tamanho da lista foi $M = 10^4$ e o número de passos de Monte Carlo 10^6 .

Os resultados simulacionais para um sistema de 100 sítios, estão representados na Figura 20, mostrando excelente concordância com a distribuição QE exata obtida a partir da iteração das relações (3.12) e (3.13) (observe que a escala é logarítmica). A simulação QE fornece ótima concordância com o resultado exato mesmo para $\lambda = 0.1$, bem nas profundezas do regime subcrítico, no qual o tempo de vida do processo original é bastante pequeno.

3.4.2 Processo de contato unidimensional

Agora que o método de simulação QE se mostrou uma ferramenta precisa para a amostragem da distribuição QE no PCGC, uma questão importante que surge é se a nossa abordagem continua válida em processos com um número grande de configurações, muitas vezes maior que o tamanho da lista. Isto, é, será que com uma lista com cerca de $10^3 - 10^5$ configurações conseguimos uma amostragem boa dos estados representativos do sistema, de forma a garantir a convergência para o estado QE?

Para isso nós estudamos o processo de contato unidimensional, em um anel de L sítios, que apresenta 2^L configurações. Apesar de neste caso não existirem resultados exatos disponíveis, o modelo já foi estudado através de expansões em série e simulações de Monte Carlo. Nas simulações quase-estacionárias utilizamos uma lista de tamanho $M = 2 \times 10^3 - 10^4$, dependendo do tamanho da rede.

O processo foi simulado por 10^8 ou mais passos de Monte Carlo. Na simulação, os eventos de aniquilação são escolhidos com probabilidade $1/(1 + \lambda)$ e os de criação com probabilidade $\lambda/(1 + \lambda)$. Um sítio é escolhido a partir de uma lista dos sítios ocupados naquele momento¹³. O sítio escolhido, no caso da aniquilação, se torna vazio, enquanto para eventos de criação, um de seus primeiros-vizinhos é selecionado ao acaso e, se estiver vazio, se torna ocupado. O incremento de tempo associado com cada evento¹⁴ é $\Delta t = 1/N_{occ}$, onde N_{occ} é o número de sítios ocupados no momento

¹³Esta estratégia aumenta bastante a eficiência do algoritmo, uma vez que não perdemos tempo sorteando sítios vazios.

¹⁴Esta implementação atualiza os sítios em passos de tempo discretos. Para simularmos o pro-

da tentativa da transição [6].

Na fase inicial da evolução do sistema, a lista das configurações é preenchida sempre que o tempo t aumenta de uma unidade, até que uma lista de M configurações seja acumulada. A partir daí, nós atualizamos a lista (substituindo uma entrada aleatoriamente escolhida pela configuração atual), com uma certa probabilidade p_{rep} ¹⁵, sempre que t aumenta por uma unidade. Logo, uma dada configuração se mantém na lista por um tempo médio de M/p_{rep} .

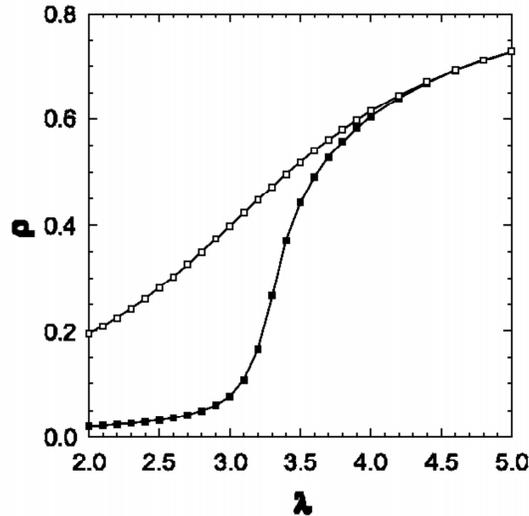


Figura 21: Densidade de sítios QE, ρ , no PC unidimensional. Simulação QE: $L = 20$ (símbolos de cima) e $L = 200$ (símbolos de baixo). As linhas sólidas representam os resultados das simulações convencionais.

A Figura 21 mostra que nosso método reproduz o valor do parâmetro de ordem ρ obtido por meio de simulações convencionais. Na Figura 22 os resultados QE e

cesso em tempo contínuo deveríamos substituir o intervalo fixo Δt por um tempo de espera com distribuição exponencial. Apesar de diferirem para tempos curtos, as formulações com tempo discreto e contínuo possuem as mesmas propriedades estacionárias e dinâmica para tempos longos [6]

¹⁵Valores de p_{rep} entre $10^{-3} - 10^{-2}$ foram utilizados; os resultados parecem ser insensíveis à uma escolha precisa.

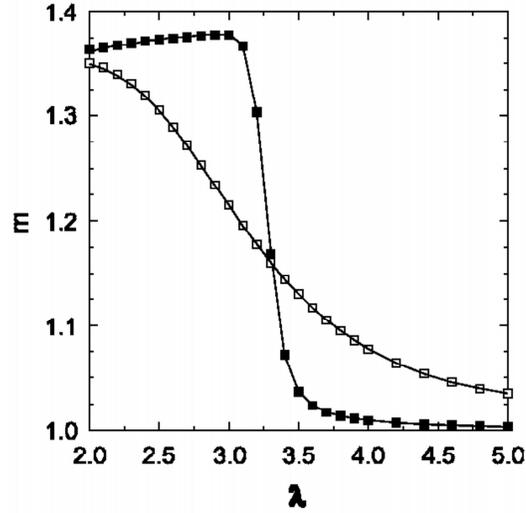


Figura 22: Razão entre os momentos, m , no PC unidimensional. Os símbolos utilizados são os mesmos da figura anterior.

convencionais para a razão entre os momentos da distribuição QE, $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$ são comparados.

No processo de contato unidimensional, o tempo de vida do estado QE é dado por

$$\tau = 1/\bar{p}_1. \quad (3.16)$$

O tempo de vida obtido nas simulações QE também concorda com o tempo de vida obtido por simulações convencionais (usando $P_s \sim \exp(-t/\tau)$), como revela a Figura 23.

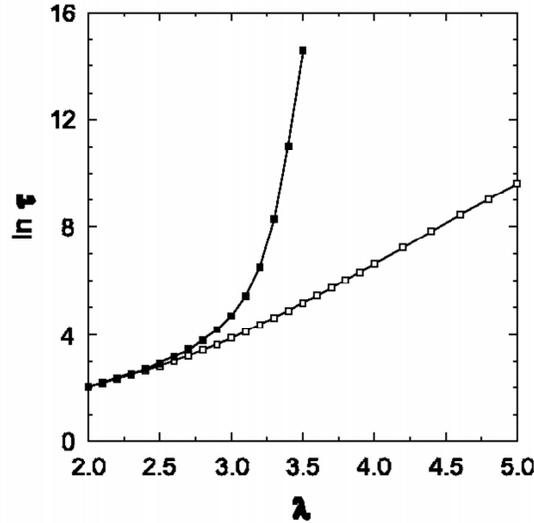


Figura 23: Tempo de vida τ no PC unidimensional. Os símbolos são os mesmos utilizados na Figura 21.

Resultados no Ponto Crítico

Para mais um teste do nosso método, nós estudamos o PC unidimensional crítico ($\lambda_c = 3.297848$) em anéis de 80, 160, ..., 1280 sítios, agora variando os parâmetros M , e p_{rep} . Nós realizamos entre 5 e 30 simulações, cada uma se estendendo até 5×10^8 passos de tempo. Os resultados dos primeiros 10^7 passos de tempo (2×10^7 para $L = 1280$) são descartados no cálculo das médias devido à relaxação do sistema (porém, observamos que a convergência para o estado QE acontece em uma escala de tempo consideravelmente menor).

Neste caso, nossos resultados nos permitiram refinar a estimativa para a razão entre os momentos $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$. Esta quantidade é análoga ao quarto cumulante reduzido de Binder [50] em um ponto crítico de equilíbrio: as curvas $m(\lambda, L)$ para vários L se cruzam próximo a λ_c (esses cruzamentos se aproximam de λ_c quando L cresce), de forma que m assume um valor universal m_c no ponto crítico. Na Ref. [51] a estimativa $m_c = 1.1736(2)$ para o PC crítico em uma dimensão foi obtida a partir de simulações de sistemas de até 320 sítios.

Utilizando nosso método nós fomos capazes de reproduzir e refinar os resulta-

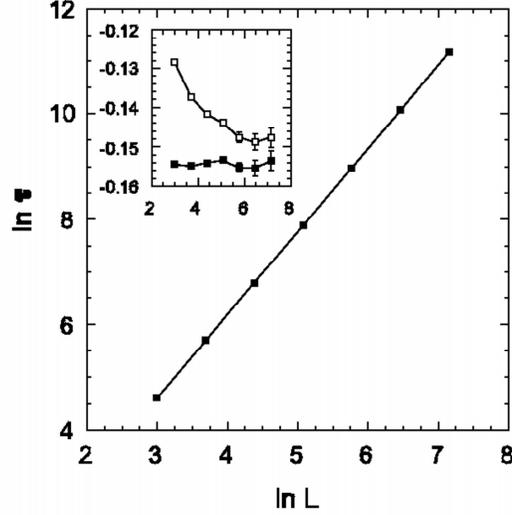


Figura 24: Tempo de vida QE, τ , versus tamanho do sistema L , no PC unidimensional na criticalidade. O detalhe mostra o desvio da lei de potência pura, $\tau \propto L^{1,5818}$ (símbolos abertos), e da lei de potência com uma correção de escala do tipo $L^{-0,75}$ (símbolos negros, deslocados verticalmente para visualização).

dos de [51]. Baseados nos nossos dados para $L \leq 640$ nós estimamos $m_c = 1.17370(2)$.

Nossas estimativas para o tempo de vida (Figura 24) seguem $\tau(\lambda_c, L) \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ com boa precisão; uma regressão linear para os dados obtidos com $L = 320, 640$ e 1280 fornece $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1.5815(10)$. Para tamanhos menores, observamos correções sistemáticas a esta lei de potência pura, como pode ser visto no detalhe da Figura 24. Notamos que a magnitude da correção decai de modo proporcional a $L^{-0.75}$, e então ajustamos, por meio de um processo de mínimos quadrados, a seguinte expressão aos dados para $L = 20$ a 1280 :

$$\ln \tau = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}} \ln L + \frac{A}{L^{0.75}} + \text{const.} \quad (3.17)$$

A razão entre os expoentes, bem como a constante A são tratados como parâmetros ajustáveis, resultando em $A = 0.198$ e confirmando o valor indicado acima para $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$. Este último é consistente com o valor encontrado na literatura, de $1.5807(1)$ [33] dentro de uma incerteza estatística de 0.06% .

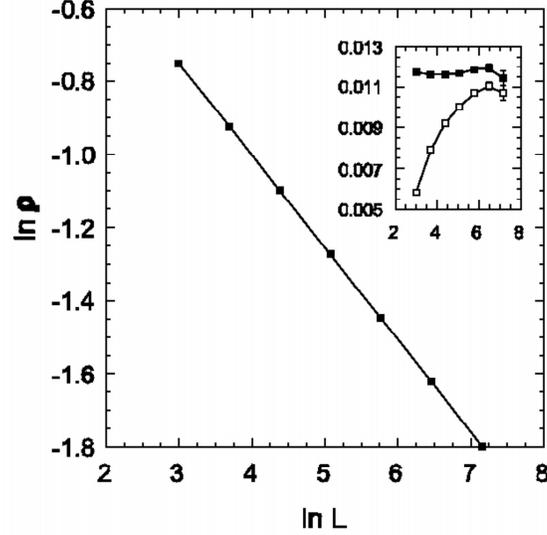


Figura 25: Parâmetro de ordem QE, ρ , em função do tamanho do sistema L , no PC unidimensional na criticalidade. O detalhe mostra o desvio da lei de potência pura, $\rho \propto L^{1,5818}$ (símbolos abertos), e da lei de potência com uma correção de escala do tipo $L^{-0,75}$ (símbolos negros, deslocados verticalmente para visualização).

De maneira similar, verificamos que os dados da simulação QE para o parâmetro de ordem $\rho(\lambda_c, L)$ seguem uma lei de potência do tipo $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ com boa precisão (Figura 25). A partir dos dados dos três tamanhos maiores obtemos $\beta/\nu_\perp = 0.2528(3)$. Novamente encontramos correções sistemáticas no comportamento de escala para os menores tamanhos de sistemas. Utilizando um termo de correção de escala proporcional a $L^{-0.75}$ como feito anteriormente, o melhor ajuste é dado por

$$\ln \rho = -0.2528 \ln L + \frac{0.051}{L^{0.75}} + const. \quad (3.18)$$

Comparado com o valor encontrado na literatura $\beta/\nu_\perp = 0.25208(5)$ [33], nosso resultado superestima a razão entre os expoentes por 0.3(1)%. (Um ajuste por uma lei de potência simples para os dados de $L = 20$ a 1280 fornece $\beta/\nu_\perp = 0.2517(2)$.)

Eficiência do método

Vimos que uma comparação detalhada de várias grandezas mostra que não há diferenças significativas entre os resultados obtidos por nosso método e os obtidos da maneira convencional. E quanto à eficiência na obtenção destes resultados? Nos casos em que $\lambda < 3$, as simulações convencionais estão sujeitas a incertezas relativamente grandes, uma vez que quase todas as realizações são capturadas pelo estado absorvente antes que o regime quase-estacionário seja atingido (vide Figura 26). No ponto crítico ($\lambda_c = 3.297848$), as simulações quase-estacionárias requerem cerca de uma ordem de magnitude menos tempo de processamento que as simulações convencionais, para fornecer resultados de mesma precisão. Abaixo de λ_c a eficiência é ainda maior; bem acima de λ_c os dois métodos se equivalem pois as visitas ao estado absorvente se tornam extremamente raras.

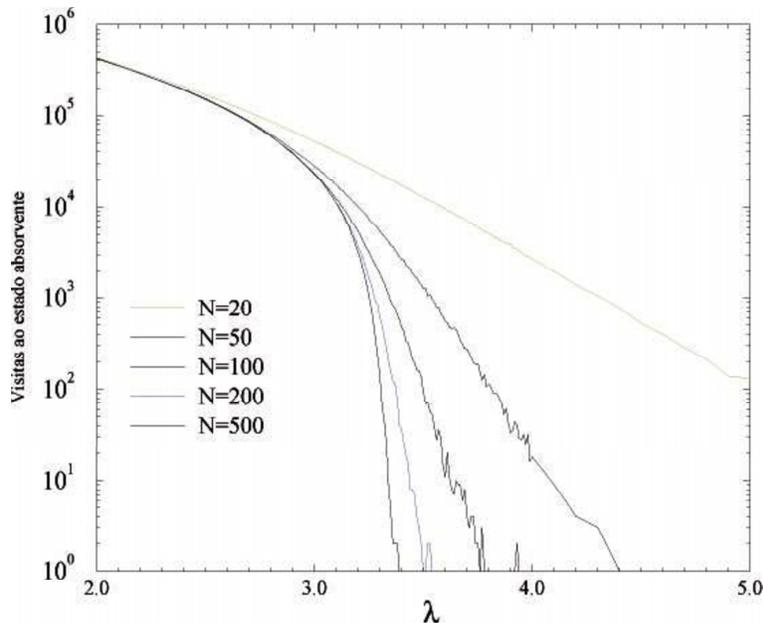


Figura 26: Número de vezes que o processo modificado visita o estado absorvente em uma simulação de 10^6 passos.

Sobre os parâmetros do método

Variando o tamanho da lista, M , e a probabilidade de atualização, p_{rep} , nós obtemos resultados consistentes com as simulações convencionais para $M = 1000$ ou maior, e $p_{rep} \leq 10^{-2}$. Os estudos que fizemos empregaram uma lista de tamanho $M = 2000$ e probabilidade de atualização $p_{rep} = 0.001$. Nos estudos do PC crítico em uma rede de 320 sítios, nós não encontramos alterações significativas nos resultados quando variamos p_{rep} entre 0.01 e 0.001, ou quando variamos M entre 100 e 2000. Uma pequena, mas significativa, redução (0.2%) no valor do parâmetro de ordem, foi verificada quando reduzimos M para apenas 20.

Tamanhos de lista menores e/ou valores maiores de p_{rep} fornecem resultados ligeiramente, mas significativamente, diferentes dos valores conhecidos na literatura. Por outro lado, parece não fazer muita diferença se usamos uma lista com um tamanho muito maior que o número de reinicializações. Na prática consideramos ideal utilizar $M = 10^3$ pelo menos, e realizar simulações com diversos valores de p_{rep} , a fim de verificar que os resultados não mostram dependência significativa em relação a tal parâmetro.

3.5 Outras estratégias simulacionais

Nos últimos anos, uma série de estratégias para lidar com as dificuldades associadas com a simulação de modelos possuindo estados absorventes tem sido criada. Em uma abordagem, a atividade no modelo é mantida fixa em um valor diferente de zero, o que pode ser feito com um tipo de simulação conhecido como simulação de “cobertura constante” [69], ou através de uma versão “conservativa” do modelo [70]. Na simulação de uma versão conservativa o parâmetro de ordem tem valor fixo, enquanto o parâmetro de controle flutua. Espera-se que, assim como acontece no equilíbrio, que os valores dos pontos críticos e dos expoente críticos, sejam iguais nos dois “ensembles”, o que de fato foi verificado na simulação do Processo de Contato Conservativo [70], seguido de uma demonstração formal dessa equivalência [71]. No entanto a formulação de um modelo conservativo a partir do modelo original pode não ser direta, e o estudo da fase subcrítica pode ser afetado

porque seria necessária uma rede infinita para estudar tal regime.

Grassberger [72] sugeriu um algoritmo para compensar a perda na estatística devido à diminuição da amostra, que ele chamou de *Go with the winners*¹⁶. A estratégia se baseia em “clonar” as realizações sobreviventes do processo, aumentando o conjunto de realizações para manter o tamanho da amostra acima de um valor mínimo enquanto a probabilidade de sobrevivência decai.

Outra tentativa envolvia a substituição do estado absorvente por um estado com uma fronteira *refletora* no espaço das configurações [73]. Podemos comparar a distribuição QE com a distribuição obtida usando uma barreira refletora em $n = 0$, como foi usado em [73]. No caso do processo de contato em um grafo completo, a distribuição estacionária com uma barreira refletora (BR) foi obtida em [66], onde ela foi chamada de distribuição “pseudo-estacionária”. Nós notamos que na fase ativa (λ bem acima de λ_c) as distribuições QE e BR são essencialmente as mesmas, mas próximo (e abaixo) do ponto crítico, a distribuição BR fornece uma probabilidade muito maior para estados próximos a $n = 1$ do que a distribuição QE. A barreira refletora é equivalente a um processo modificado X_t^* o qual, quando uma visita para o estado absorvente iminente, o processo é sempre reiniciado na configuração anterior. Em geral, esperamos que as distribuições QE e BR sejam indistinguíveis quando o tempo de vida do processo é suficientemente longo, uma vez que isso implica em uma pequena probabilidade QE na vizinhança do estado absorvente.

Uma outra abordagem encontrada na literatura acrescenta ao modelo original uma fonte externa de atividade (fraca), h , de forma que o estado sem atividade não seja mais absorvente, mas seja possível obter informações sobre o comportamento crítico por meio da análise das propriedades de escala quando $h \rightarrow 0$ [74].

Apesar de todas essas abordagens terem se mostrado úteis, nenhuma delas fornece diretamente uma amostragem sem tendência do estado QE do processo original. O método simulacional que apresentaremos neste capítulo não sofre dessa limitação. Ele fornece uma amostragem da distribuição QE do mesmo modo que uma simulação de Monte Carlo fornece para uma distribuição de equilíbrio.

¹⁶”Siga os vencedores”.

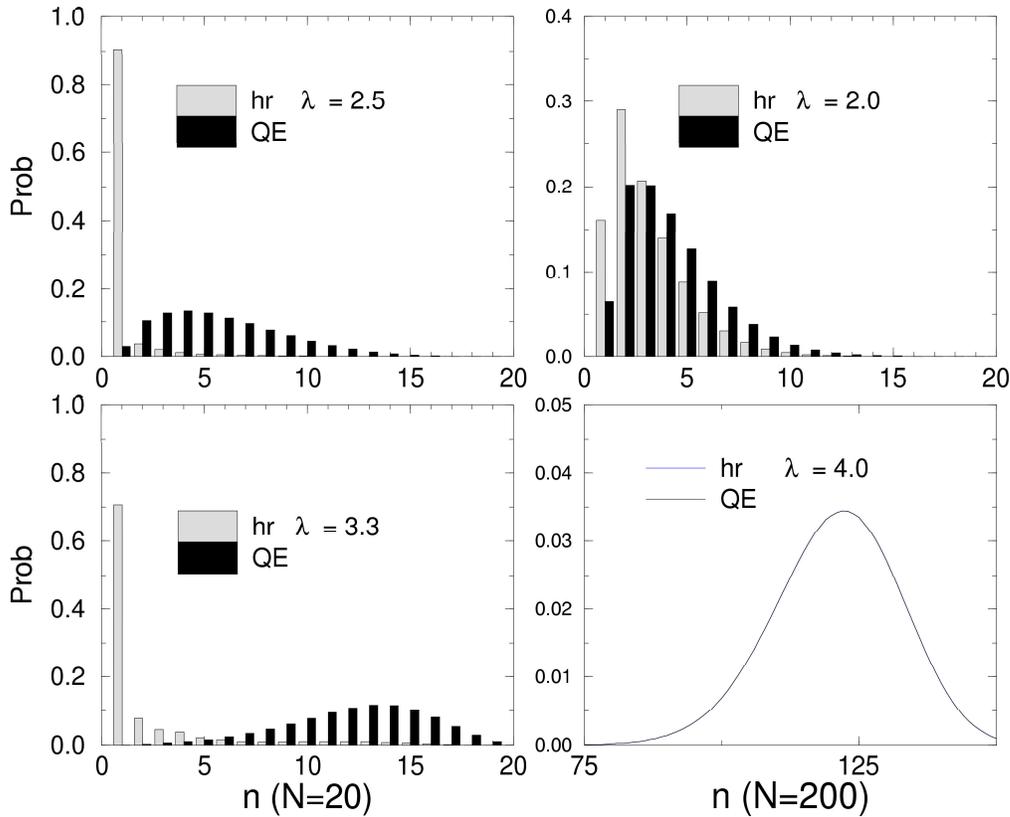


Figura 27: Comparação entre a distribuição obtida ao se substituir o estado absorvente por uma barreira refletora e a distribuição QE.

3.6 Sumário

Em resumo, nós desenvolvemos e testamos um método simulacional para obter as propriedades quase-estacionárias de modelos com um estado absorvente. O método é de fácil implementação, e fornece resultados satisfatórios em uma fração do tempo requerido por simulações convencionais no regime crítico, de grande interesse no contexto de teorias de escala e universalidade. Ele também abre a possibilidade de investigação das propriedades QE no regime subcrítico, que é essencialmente inacessível para simulações convencionais.

4 *O Processo de Contato: Algumas propriedades críticas e o Regime subcrítico*

Neste trabalho, utilizamos o método apresentado no capítulo anterior a fim de determinar a função de correlação estática e a distribuição de comprimento dos *gaps* entre partículas no processo de contato unidimensional, na criticalidade. Nós também encontramos evidências de um decaimento em lei de potência da distribuição das distâncias entre partículas no subespaço de duas partículas. Em outro estudo, calculamos o tempo de vida e o parâmetro de ordem do processo de contato na fase *subcrítica*. Essa fase não é acessível por outros métodos porque virtualmente todas as realizações do processo caem no estado absorvente *antes* do sistema chegar ao regime quase-estacionário. Com simulações relativamente modestas, obtemos uma estimativa do expoente crítico $\nu_{||}$ com uma precisão de 0.5%.

Publicações relacionadas: R. Dickman and M.M. de Oliveira, *Physica A* **357**, 134(2005);

M.M. de Oliveira and R. Dickman, *Braz. J. Phys* **2B**, (2006).

4.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos dois trabalhos que foram resultado da aplicação do método de simulação QE ao processo de contato. Uma vez que as principais propriedades de escala do PC já foram revisadas no capítulo 2 desta tese, nós vamos aqui apenas citá-las brevemente. Quando nos aproximamos do ponto crítico, o

comprimento de correlação ξ e o tempo de correlação τ divergem, segundo $\xi \propto |\Delta|^{-\nu_{\perp}}$ e $\tau \propto |\Delta|^{-\nu_{\parallel}}$, onde $\Delta = \lambda - \lambda_c$ é a distância do ponto crítico. O parâmetro de ordem escala como $\rho \propto \Delta^{\beta}$ para $\Delta > 0$. No ponto crítico o valor quase-estacionário do parâmetro de ordem escala como: $\rho \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}}$.

4.2 A função correlação

Na seção 2.4 desta tese, vimos que o estudo do comportamento da função correlação é essencial no entendimento dos fenômenos críticos, tanto do equilíbrio quanto fora do equilíbrio. Um aspecto do PC que não havia sido ainda estudado em simulações é a função de correlação estática, talvez em função das dificuldades intrínsecas à obtenção das grandezas estáticas *via* simulações.

Uma questão interesse de ser estudada é como correlações decaem no ponto crítico. A função correlação é definida por

$$C(|i-j|) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (4.1)$$

onde a média é sobre a distribuição estacionária do processo.

Baseados na experiência com fenômenos críticos no equilíbrio, nós esperamos que $C(r)$ decaia como uma lei de potência no ponto crítico. O expoente de decaimento pode ser determinado através de um argumento de escala, que apresentaremos a seguir.

Começemos por normalizar $C(r)$ por seu valor em $r = 0$:

$$c(r) \equiv \frac{C(r)}{C(0)} = \frac{C(r)}{\rho(1-\rho)}. \quad (4.2)$$

Agora considere a variância escalada

$$\chi = L^d (\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2), \quad (4.3)$$

onde L denota o tamanho da rede. Próximo ao ponto crítico, a teoria de escala de

tamanho finito, aplicada à variância de ρ , fornece

$$\chi(\Delta, L) \propto L^{\gamma/\nu_{\perp}} g(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (4.4)$$

onde a função de escala $g(x) \propto x^{-\gamma}$ para x grande, e $\chi(0, L) \propto L^{\gamma/\nu_{\perp}}$. O expoente γ se relaciona com os outros expoentes pela seguinte relação de hiperescala¹:

$$\gamma = d\nu_{\perp} - 2\beta. \quad (4.5)$$

Voltando à expressão (4.3), temos que

$$\chi = L^{-d} \sum_{i,j} C(|i-j|) = \rho(1-\rho) \sum_{|\mathbf{x}| \leq L/2} c(|\mathbf{x}|) \quad (4.6)$$

onde no último passo nós usamos a invariância translacional, e assumimos uma rede hipercúbica de L^d sítios.

Agora suponha $c(r) \sim r^{-\alpha}$ para r grande. Aproximando a soma por uma integral, e percebendo que $\rho \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}}$ no ponto crítico, nós encontramos

$$\chi \sim L^{d-2\beta/\nu_{\perp}} \sim L^{d-\alpha-\beta/\nu_{\perp}} \quad (4.7)$$

implicando que $\alpha = \beta/\nu_{\perp}$ e

$$C(r) \simeq \rho c(r) \propto (rL)^{-\beta/\nu_{\perp}} \quad (4.8)$$

no estado estacionário crítico.

A relação $\alpha = \beta/\nu_{\perp}$ foi demonstrada certo tempo atrás por Grassberger e de la Torre, que mostraram que $C(r) \sim r^{-2\delta/z}$ no ponto crítico [27]. (Tal resultado é

¹Esta relação de escala pode ser obtida da seguinte forma. O n -ésimo momento da densidade é dado por

$$\langle \rho^n \rangle = \int_0^1 \rho^n P(\rho, L) d\rho \equiv I_n L^{-n\beta/\nu_{\perp}},$$

onde a fraca dependência da integral em L foi desprezada no limite de $L \rightarrow \infty$. Por outro lado, usando que $P(\rho, L) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}}$ na criticalidade, e os valores dos momentos para $n = 1, 2$ temos

$$\chi(0, L) = L^d (\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2) \propto L^{(d\nu_{\perp} - 2\beta)/\nu_{\perp}},$$

a qual, combinada com $\chi(0, L) \propto L^{\gamma/\nu_{\perp}}$ resulta na relação de hiperescala (4.5).

equivalente ao nosso quando usamos as relações de escala $z = 2\nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$ e $\delta = \beta/\nu_{\parallel}$.)

Resultados simulacionais

Primeiramente, nós usamos o método de simulação QE para determinar a função correlação. O processo foi simulado em cinco realizações independentes de 2×10^8 passos de tempo. Como sempre, eventos de aniquilação são escolhidos com probabilidade $1/(1 + \lambda)$, enquanto eventos de criação são escolhidos com probabilidade $\lambda/(1 + \lambda)$.

Um sítio é escolhido a partir de uma lista de sítios ativos e se o evento for de aniquilação, o sítio torna-se vago. No caso de criação, um sítio primeiro vizinho é escolhido ao acaso e caso esteja vago, se torna ocupado. O incremento de tempo associado a cada evento é $\Delta t = 1/N_{occ}$, onde N_{occ} é o número de sítios ocupados no momento anterior à tentativa de transição.

Na Figura 28 nós plotamos $C^*(r) = L^{\beta/\nu_{\perp}}C(r)$ para $L = 1280$ e 2560 , usando as melhores estimativas, obtidas a partir de análises por séries, $\beta/\nu_{\perp} = 0.252072(8)$ [33]. O colapso dos dados para os dois tamanhos de rede é praticamente perfeito. Para $r \ll L$ a função correlação de fato segue uma lei de potência $C^* \sim r^{-\beta/\nu_{\perp}}$, enquanto para $r = L/2$ ela atinge um mínimo, como esperado devido às condições periódicas de fronteira.

A fim de determinar o expoente do decaimento nós analisamos a inclinação local $\alpha(r)$ (vide Figura 29), obtida a partir de um ajuste linear dos dados para $\ln C^*$ versus $\ln r$, usando pontos igualmente espaçados em $\ln r$, em intervalos finitos $[r_0, 3r_0]$. Para $r_0 \ll L$ a inclinação local é aproximadamente constante, mas, é claro, se curva para cima quando r_0 se aproxima de $L/2$. Nós então efetuamos uma extrapolação (para $r \rightarrow \infty$) da inclinação local versus $1/r$, usando somente os resultados onde os dados para os dois tamanhos de rede concordam, para eliminar efeitos de tamanho finito. O resultado dessa extrapolação é $\beta/\nu_{\perp} = 0.252(1)$, consistente com as melhores estimativas disponíveis.

Para $\lambda < \lambda_c$, a função correlação decai exponencialmente, $C(r) \sim e^{-r/\xi_{\perp}}$, onde ξ_{\perp} é o comprimento de correlação espacial do sistema. Isto é evidente no detalhe

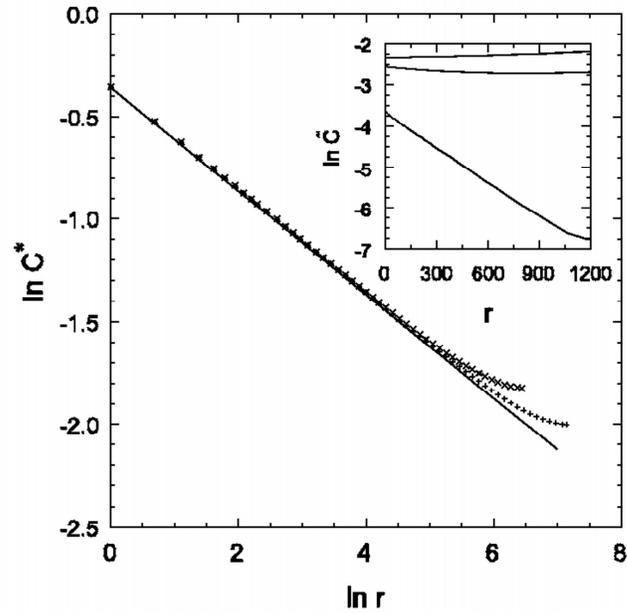


Figura 28: Resultados da simulação QE para a função correlação escalada $C^* = L^{\beta/\nu_\perp} C(r)$ no PC crítico unidimensional. Símbolos: \times : $L = 1280$; $+$: $L = 2560$. A inclinação da linha sólida é -0.252 . Detalhe: gráfico semi-logaritmico de $\tilde{C} = r^{\beta/\nu_\perp} C(r)$ versus r em um sistema de 2560 sítios, para $\lambda = \lambda_c$ (curva superior), $0.999\lambda_c$ e $0.99\lambda_c$ (inferior).

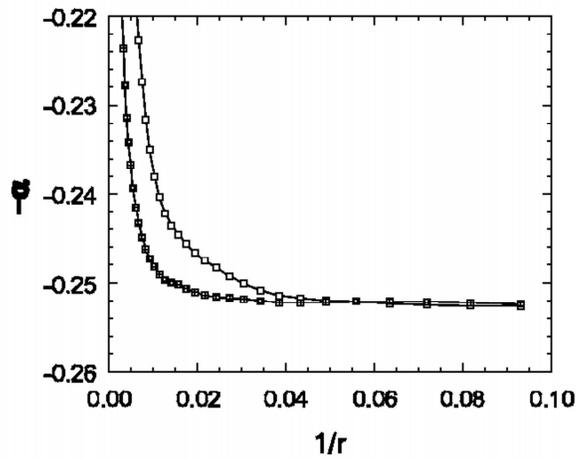


Figura 29: Inclinação local $-\alpha(r)$ da função correlação em função de $1/r$. Símbolos abertos: $L = 1280$; símbolos preenchidos: $L = 2560$.

da Figura 28, onde plotamos $\tilde{C} = r^{\beta/\nu_{\perp}}C(r)$. O decaimento exponencial é claro para $\lambda = 0.99\lambda_c$; a regressão linear fornece neste caso $\xi_{\perp} \simeq 356$, bem abaixo do tamanho do sistema ($L = 2560$) neste estudo. Curiosamente, o decaimento de \tilde{C} também é perceptível para $\lambda = 0.999\lambda_c$, apesar de parcialmente mascarado pelo tamanho finito do sistema. Em geral o decaimento das correlações deve ser evidente para $L > \xi_{\perp}$, onde ξ_{\perp} é o comprimento de correlação no limite de tamanho infinito. Como $\xi_{\perp} \sim |\Delta|^{-\nu_{\perp}}$, desvios da criticalidade da ordem de $|\Delta| \sim L^{-1/\nu_{\perp}}$ (ou maiores) deveriam ser detectáveis na função correlação para um sistema de tamanho L .

Distribuição de “gaps”

No estado crítico estacionário, a distribuição das partículas é invariante por escala, como refletido no decaimento em lei de potência de $C(r)$. A distribuição de *gaps*, ou cadeias de sítios vazios entre sítios sucessivos ocupados também segue uma lei de potência. Nós determinamos a distribuição dos tamanhos dos gaps² $P(g)$ (normalizada pelo número de gaps na configuração). Como pode ser visto na Figura 30, $P(g)$ exhibe um decaimento em lei de potência, $P \sim g^{-\tau}$, com $\tau \simeq 1.70$, sobre um intervalo intermediário que parece crescer com o tamanho do sistema. A análise da inclinação local fornece $\tau = 1.73(1)$.

Nós podemos relacionar o expoente τ aos outros expoentes críticos através de um argumento de escala simples. Uma vez que existe apenas um gap por partícula, o tamanho médio do gap $\langle g \rangle$ é simplesmente o recíproco da densidade de partículas. Assim, em um sistema de tamanho L no ponto crítico, $\langle g \rangle \sim L^{\beta/\nu_{\perp}}$. Assumindo $P(g) \sim g^{-\tau}$ para $g \geq 1$, nós temos

$$\langle g \rangle \sim \int_1^L g^{1-\tau} dg \sim L^{2-\tau} \sim L^{\beta/\nu_{\perp}} \quad (4.9)$$

implicando $\tau = 2 - \beta/\nu_{\perp} \simeq 1.748$. Nosso resultado simulacional é cerca de 1% menor que o valor previsto pelo argumento de escala. Essa pequena discrepância é provavelmente causada por correções de tamanho finito que limitam o regime de lei de potência de $P(g)$.

²Um gap de tamanho g corresponde aos sítios i e $i + g + 1$ ocupados e todos os sítios entre eles vazios.

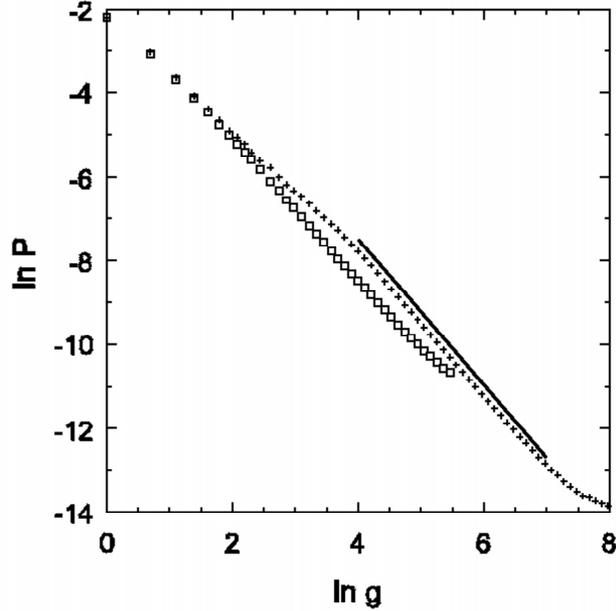


Figura 30: Distribuição das distâncias dos "gaps" no PC crítico unidimensional. \square : $L = 640$; $+$: $L = 5120$. A inclinação da linha sólida é -1.73.

Algumas propriedades configuracionais

Por último, nós apresentamos resultados preliminares sobre o comportamento exibido pela distância entre partículas no subespaço de duas partículas. Seja d a separação entre dois sítios ocupados, dado que exatamente dois sítios estejam ocupados³. Uma vez que as partículas se encontram bastante nucleadas no PC crítico, nós devemos esperar que a distribuição de distâncias entre as duas partículas, $P_2(d)$, decaia com a separação. Nossos resultados (vide Figura 31) a partir das simulações QE no ponto crítico sugerem um decaimento tipo lei de potência,

$$P_2(d) \sim d^{-\kappa}, \quad (4.10)$$

com $\kappa \simeq 2.45$.

Nós não encontramos um meio de relacionar este expoente aos outros con-

³Nós tomamos a distância mínima sob condições periódicas, de forma que $d \leq L/2$.

hecidos expoentes críticos. De fato, a questão se $P_2(d)$ segue realmente uma lei de potência deve ser confirmada em simulações em escalas maiores. Porém isto fica fora do alcance computacional, pois, quando o tamanho do sistema cresce, a probabilidade de existirem exatamente duas partículas se torna ainda menor.

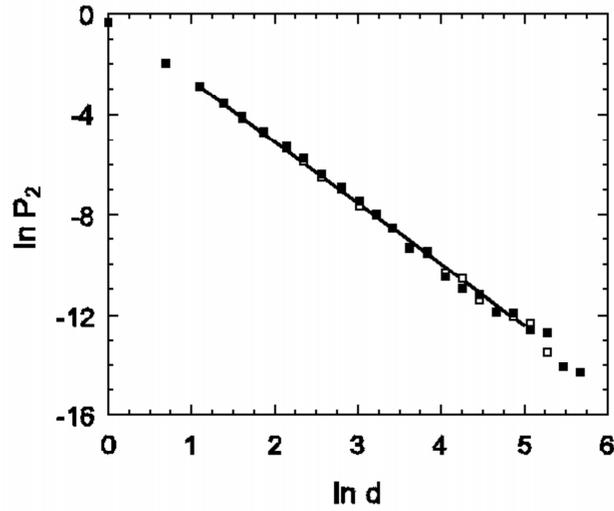


Figura 31: Distribuição das distâncias d no subespaço de duas partículas no PC crítico unidimensional. Símbolos abertos: $L = 640$; símbolos negros: $L = 1280$. A inclinação da linha sólida é -2.45 .

4.3 A fase subcrítica

Dois tempos característicos, τ_C e τ_L , podem ser identificados no processo de contato. O primeiro é um tempo de relaxação que governa o decaimento das correlações temporais no estado QE:

$$C(t) \equiv \langle \rho(t_0)\rho(t_0 + t) \rangle - \rho^2 \sim e^{-t/\tau_c}. \quad (4.11)$$

O segundo é um tempo de vida, determinando o decaimento assintótico da probabilidade de sobrevivência (a partir de uma configuração inicial espacialmente ho-

mogênea) da forma

$$P(t) \sim e^{-t/\tau_L}. \quad (4.12)$$

Os dois tempos característicos exibem as mesmas propriedades de escala na região crítica. Na fase supercrítica ou ativa ($\Delta > 0$), o tempo de vida cresce exponencialmente com o tamanho do sistema e λ , enquanto τ_C se mantém finita. Nosso interesse aqui é o tempo de vida do estado QE, denotado simplesmente como τ . Na distribuição QE há um fluxo de probabilidade não nulo para o estado absorvente,

$$r_0 = w_{01}\bar{p}_1 \quad (4.13)$$

onde \bar{p}_1 é a probabilidade QE da configuração com exatamente um sítio ativo e $w_{01} = 1$ é a taxa de transição desta configuração para o estado absorvente. O tempo de vida QE é dado por⁴

$$\tau = 1/r_0. \quad (4.14)$$

Um ponto importante na interpretação dos nossos resultados simulacionais reside no comportamento de escala de tamanho finito de τ . De acordo com a hipótese de escala usual [27], correções de escala em tamanhos finitos nas propriedades críticas devem ser funções da razão L/ξ , ou, equivalentemente, da quantidade $\Delta L^{1/\nu_\perp}$. Na fase subcrítica, em que $\Delta < 0$, o tempo de vida então deve seguir

$$\tau(\Delta, L) = |\Delta|^{-\nu_\parallel} \mathcal{F}(|\Delta|L^{1/\nu_\perp}) \quad (4.15)$$

onde a função de escala $\mathcal{F}(x) \propto x^{\nu_\parallel}$ para x pequeno, de forma que τ não diverge em um sistema finito. No limite oposto $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}_0$, uma constante. A hipótese de escala leva à relação conhecida, $\tau(0, L) \sim L^{\nu_\parallel/\nu_\perp}$ no ponto crítico, e sugere que nós tentemos colapsar os dados para diversos tamanhos de sistema plotando $\Delta^{\nu_\parallel}/\tau$ versus $\Delta^* \equiv \Delta L^{1/\nu_\perp}$. Para o parâmetro de ordem a escala de tamanho finito fornece [6],

⁴Nas simulações QE nós tomamos τ como o tempo médio entre tentativas sucessivas de visita ao estado absorvente.

$$\rho(\Delta, L) = |\Delta|^\beta \mathcal{R}(L^{1/\nu_\perp} \Delta). \quad (4.16)$$

No regime subcrítico, o parâmetro de ordem deve decair a zero $\propto L^{-1}$ como $L \rightarrow \infty$, para qualquer $\Delta < 0$, de forma que $\mathcal{R}(x) \sim |x|^{-\nu_\perp}$ como $x \rightarrow -\infty$. Por outro lado, para $\Delta = 0$ e L finito, ρ deve ser não nula e não singular, implicando $\mathcal{R}(x) \sim x^{-\beta}$ para $x \rightarrow 0$. Logo $\rho \sim |\Delta|^{\beta-\nu_\perp}$ para Δ^* grande.

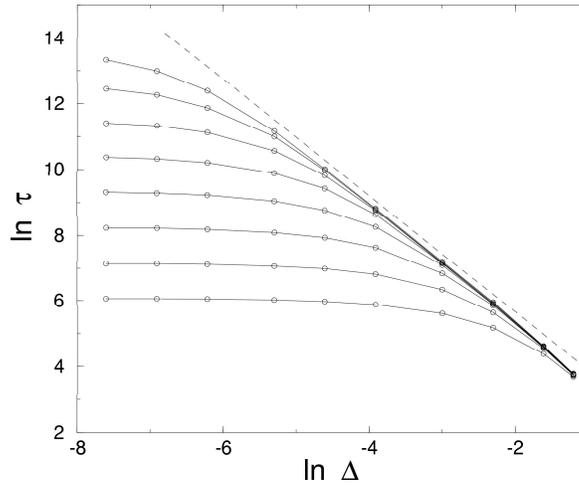


Figura 32: Tempo de vida QE τ versus Δ , para $L = 20, 40, 80, \dots, 2560$. A inclinação da linha é -1.74.

A Figura 32 mostra o tempo de vida QE, τ , em função de Δ , para tamanhos de rede $L = 20, 40, 80, \dots, 2560$. Para os tamanhos maiores a dependência em lei de potência de Δ é evidente, antes que o tempo de vida sature (para os valores bem pequenos de $|\Delta|$), devido a efeitos de tamanho finito. Na Figura 33 esses dados são colapsados usando os valores conhecidos para os expoentes da classe PD [33], $\nu_\perp = 1.09684(6)$ e $\nu_\parallel = 1.73383(3)$. O colapso dos dados é muito bom para os tamanhos maiores. Um ajuste pelo método de mínimos quadrados para os dados na porção linear do gráfico ($|\Delta| \geq 0.02$) fornece uma inclinação de -1.738(12), em boa concordância com o valor de ν_\parallel . Um método alternativo para analisar os dados

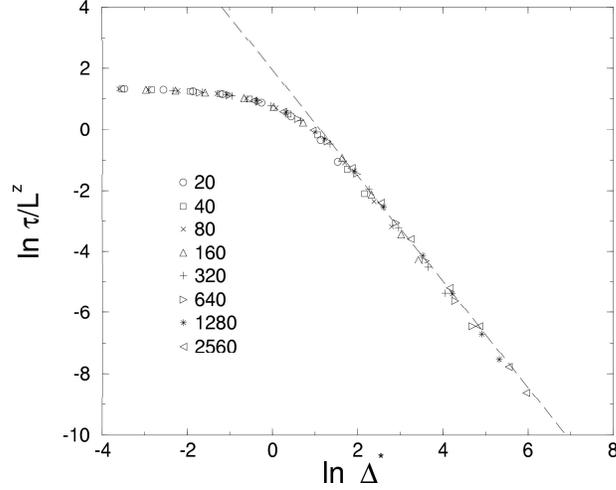


Figura 33: Dados da Fig.31 plotados em termos das variáveis escaladas $\Delta^* = L^{1/\nu_\perp} |\Delta|$ e $\tau^* = L^{-z} \tau$, com $z = \nu_\parallel / \nu_\perp$. A inclinação da linha é -1.734.

é estimar, para cada valor de Δ , o valor no limite de tamanho infinito do tempo de vida, plotando $\tau(\Delta, L)$ versus $1/L$ (vide Figura 34). Plotando as estimativas resultantes em escalas logarítmicas, nós encontramos uma inclinação de -1.735(9), novamente em boa concordância com o valor padrão para o expoente ν_\parallel .

Nós verificamos que a distribuição p_T para o tempo de vida é *exponencial*:

$$p_T(t) = \frac{e^{-t/\tau}}{\tau} \quad (4.17)$$

Isto é esperado, pois no estado quase-estacionário, a taxa de transição para o estado absorvente é independente do tempo.

Voltando ao parâmetro de ordem, vemos da Eq. (4.16) que um gráfico de $\rho^* \equiv |\Delta|^{-\beta} \rho$ em função de Δ^* deveria exibir um colapso dos dados. O comportamento assintótico da função de escala \mathcal{R} implica que $\rho^* \propto (\Delta^*)^{-\nu_\perp}$ para Δ^* grande. Essas propriedades de escala são verificadas⁵ na Figura 35.

⁵Nós usamos o valor aceito de $\beta = 0.2765$. Enquanto a escala do parâmetro de ordem no regime subcrítico é de fato verificada em Ref [6], aqui nós fomos capazes de estender o intervalo de Δ^* por uma ordem de magnitude, usando a técnica de simulação QE.

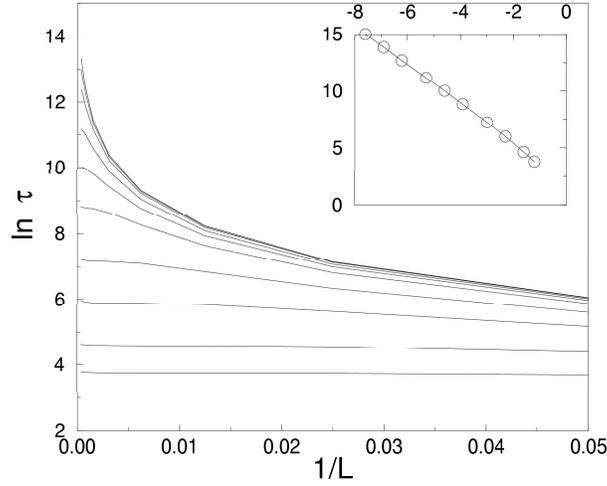


Figura 34: Tempo de vida QE τ em função de Δ , para $|\Delta| = 0.3, 0.2, 0.1, 0.05, 0.02, 0.01, 0.005, 0.002, 0.001, 0.0005$, de baixo para cima ($L = 20, 40, 80, \dots, 2560$). Detalhe: estimativas para tamanho infinito do tempo de vida em função de $|\Delta|$, plotadas em escalas logarítmicas.

Na Figura 36 nós mostramos que a distribuição de probabilidade $p(\rho)$ do parâmetro de ordem em um sistema grande ($L = 2560$) para três valores de Δ . Com esperado, a distribuição se alarga e se desloca na direção de valores maiores de ρ quando λ se aproxima do valor crítico. A distribuição de probabilidade segue, em boa aproximação, a forma de escala

$$p(\rho) = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \mathcal{P}(\rho/\langle \rho \rangle) \quad (4.18)$$

onde $\langle \rho \rangle \equiv \rho(\Delta, L)$ é o valor médio e \mathcal{P} é uma função de escala. Isto é verificado (Figura 37) plotando $p^* = \langle \rho \rangle p(\rho)$ versus $\rho/\langle \rho \rangle$. Nós vemos que a função de escala \mathcal{P} atinge seu máximo próximo a $\rho^* = 0.6$, e que ela cai rapidamente quando $\rho^* \rightarrow 0$. No outro lado do máximo ela exibe uma cauda aproximadamente exponencial.

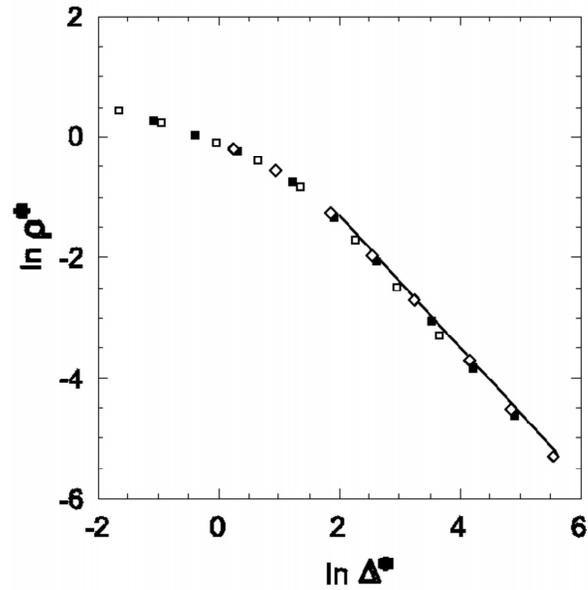


Figura 35: Parâmetro de ordem QE escalado $\rho^* \equiv |\Delta|^{-\beta} \rho$ versus $\Delta^* = L^{1/\nu_\perp} |\Delta|$ para $L = 320$ (quadrados abertos), $L = 1280$ (diamantes) e $L = 2560$ (quadrados preenchidos). A inclinação da linha é -1.1097.

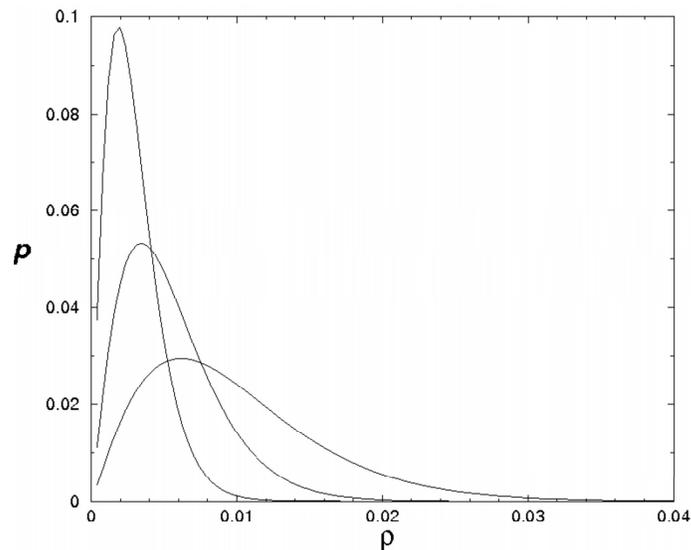


Figura 36: Distribuição de probabilidade QE do parâmetro de ordem no regime subcrítico, para $L = 2560$ e (da esquerda para direita) $\lambda/\lambda_c = 0.8, 0.9$ e 0.95 .

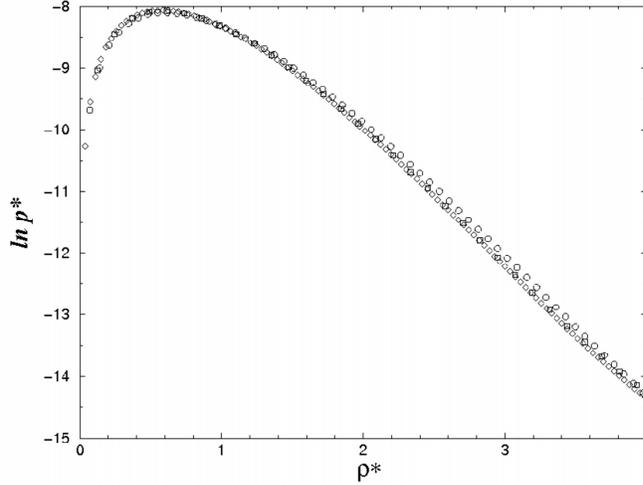


Figura 37: Gráfico re-escalado dos dados mostrados na Figura 36; $\lambda/\lambda_c = 0.8$ (quadrados), 0.9 (círculos) and 0.95 (triângulos).

4.4 Sumário

Nós utilizamos o método simulacional QE a fim de determinar a função de correlação estática $C(r)$ do processo de contato crítico em uma dimensão. Nossos resultados confirmam o comportamento $C(r) \sim 1/(rL)^{\beta/\nu_{\perp}}$ antecipado por argumentos de escala. Nós também estudamos a distribuição dos tamanhos de gaps, que mostra evidências de um decaimento em lei de potência, $P(g) \sim g^{-\tau}$, com $\tau \simeq 2 - \beta/\nu_{\perp}$, o valor previsto pela teoria de escala. Finalmente nós notamos uma aparente invariância por escala na distribuição das distâncias entre partículas $P_2(d)$ no subespaço de duas partículas[75]. Estudos da função de correlação e da distribuição de tamanhos de gaps podem ser úteis em caracterizar o comportamento de escala em novos modelos, e podem também ser úteis na localização precisa do ponto crítico.

Na segunda seção deste capítulo, estudamos o tempo de vida e o parâmetro de ordem do processo de contato unidimensional na fase subcrítica. Nossos resulta-

dos confirmam as propriedades de escala esperadas para o tempo de vida do estado quase-estacionário, e para o parâmetro de ordem [76]. Simultaneamente, essas propriedades do regime subcrítico também foram verificadas em um trabalho de de Oliveira e Tomé, através de um outro método simulacional [77].

5 *A transição de fase no Processo de Contato por Pares com Difusão*

Neste capítulo nós apresentamos uma revisão dos estudos sobre o Processo de Contato por Pares com Difusão (PCPD). Diferentemente do processo não difusivo (PCP), que sabemos pertencer à classe de universalidade da Percolação Dirigida (PD), o PCPD apresenta uma transição de fase de uma fase ativa para uma fase absorvente com um tipo de comportamento crítico que tem despertado muito interesse recentemente, e a classificação do seu comportamento crítico continua a ser um problema em aberto na mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio.

5.1 Introdução

O processo de contato por pares (PCP), introduzido por Jensen [41], é um modelo estocástico fora do equilíbrio, derivado do processo de contato (PC), no qual a atividade depende de *pares* de partículas ocupando sítios primeiros vizinhos. No PCP um par¹ se aniquila com uma probabilidade p , ou então, com probabilidade $1 - p$, o par cria uma nova partícula em um dos sítios primeiros vizinhos do par, escolhido de maneira aleatória. Na linguagem dos processos de reação-difusão [5],

¹A partir de agora, sempre que mencionarmos um *par* de partículas, estará implícito que estamos falando de partículas que ocupam sítios primeiros-vizinhos.

isto equivale às seguintes regras:

$$\begin{aligned} 2A &\rightarrow 3A(\text{com probabilidade } 1 - p) \\ 2A &\rightarrow \emptyset(\text{com probabilidade } p), \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde $2A$ representa um par de partículas.

Uma vez que tanto criação quanto aniquilação requerem um par de partículas ocupando sítios primeiros-vizinhos e as partículas não podem se difundir, qualquer configuração formada apenas por partículas isoladas é um estado absorvente. Isto significa que, no limite termodinâmico, o sistema possui infinitos estados absorventes².

Simulações numéricas do PCP revelaram a existência de uma transição de fase contínua de uma fase ativa para um desses estados absorventes³, para um valor crítico p_c do parâmetro de controle⁴. As simulações também revelaram que, tanto no caso unidimensional [41], quanto para $d = 2$ [53], essa transição de fase pertence à classe de universalidade PD, conclusão que foi posteriormente reforçada por estudos numéricos de suas funções de escala universais [79]. Esse resultado é bastante relevante, pois o PCP não obedece a uma das hipóteses da conjectura de Grassberger-Jansenn, devido a sua transição não ocorrer para um estado absorvente único⁵.

Se permitimos que as partículas no PCP se movimentem pela rede, isto é, se além das reações (5.1) acrescentamos a difusão de partículas (a uma taxa D), obtemos o chamado “processo de contato por pares com difusão” (PCPD). No PCPD existem somente dois estados absorventes: o vácuo, e o subespaço das configurações com somente uma partícula. Ao contrário do que acontece com o processo de con-

²No caso de uma rede unidimensional com L sítios, e condições periódicas de contorno, prova-se que o modelo possui $N_{abs}(L) \simeq g_+^L$ estados absorventes, onde $g_+ = (1 + \sqrt{5})/2 \simeq 1.618$ é a razão áurea [78].

³Observe que o parâmetro de ordem no PCP é a densidade de *pares*, uma vez que todo estado absorvente no modelo é um estado em que não existe nenhum par.

⁴Note que, pela definição do modelo, o estado *subcrítico* ocorre se $p_c > p$.

⁵Cabe aqui uma ressalva, de que, apesar dos expoentes críticos relacionados às grandezas estacionárias no PCP serem os mesmos da classe PD, seu comportamento dinâmico escala de maneira diferente, e a dinâmica de espalhamento de atividade a partir de uma semente ativa depende das condições iniciais do sistema [13].

tato, no qual a difusão de partículas não altera seu comportamento crítico, no PCPD a inclusão da difusão gera uma perturbação singular, uma vez que ela altera a estrutura da fase absorvente. A própria dinâmica do processo apresenta uma mudança qualitativa, como pode ser notado na Figura 38.

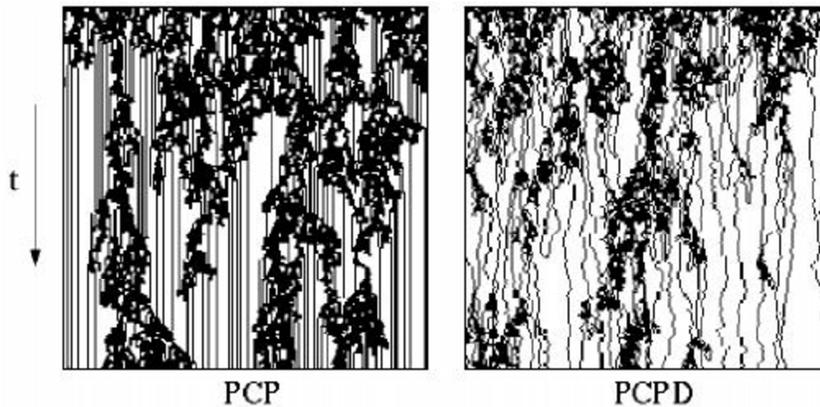


Figura 38: Evolução temporal, a partir de uma rede completamente ocupada, do PCP e do PCPD. Figura extraída de [80]

Assim como o PCP, o PCPD exibe uma transição de fase para um estado absorvente, causada pela competição entre as reações de criação e aniquilação de partículas. Na fase ativa o processo de criação prevalece, e o sistema se mantém em um estado estacionário de não-equilíbrio, enquanto na fase subcrítica a densidade de partículas decai de maneira contínua até o sistema atingir um dos estados absorventes. Apesar de suas regras bastante simples, o PCPD apresenta um comportamento crítico bastante intrigante, que tem atraído muita atenção nos últimos anos. Tanto a caracterização desse comportamento, bem como a classificação dessa transição de fase continuam como problemas em aberto na mecânica-estatística de sistemas fora do equilíbrio. Nas seções seguintes apresentaremos os principais resultados existentes sobre o PCPD até então, e que nos motivaram ao nosso estudo que será detalhado no Capítulo 6.

5.2 Propriedades fenomenológicas e comportamento de escala

Começaremos revisando as propriedades fenomenológicas de modelos “tipo PCPD”, bem como o tipo comportamento de escala que esperamos que ocorra na criticalidade.

Propriedades Fenomenológicas

De forma análoga ao que é observado na classe PD, em que observamos que diferentes modelos (e.g processo de contato, autômato celular de Domany-Kinzel, modelo ZGB, etc), porém contendo as mesmas propriedades fenomenológicas (aquelas expressas na conjectura de Grassberger-Jannsen) apresentam o mesmo comportamento crítico, espera-se que o comportamento crítico do PCPD seja compartilhado por modelos que contenham as seguintes propriedades fenomenológicas básicas:

- Partículas isoladas difundindo-se localmente, a uma taxa finita, no espaço d -dimensional;
- apresente uma transição de fase devida às reações de criação e aniquilação de partículas, onde ambas as reações somente ocorrem na presença de *pares* de partículas vizinhas;
- a existência de um número *finito* de estados absorventes, dos quais pelo menos um seja acessível pelo sistema;
- ausência de desordem congelada ou simetrias adicionais.

Dessa forma, espera-se que o comportamento observado no PCPD seja compartilhado por diversos outros modelos, como, por exemplo, processos de reação-difusão do tipo



ou



Isto é bastante útil, no sentido de que podemos estudar um processo com regras ligeiramente diferentes do modelo PCPD original, que sejam mais fáceis de tratar sob o ponto de vista teórico ou computacional, mas que mantenham as propriedades fenomenológicas listadas acima.

Leis de Escala

Nos estudos do PCPD, assume-se que o comportamento crítico da transição pode ser descrito em termos das mesmas leis de escala observadas em outras transições de fase para estados absorventes, porém provavelmente com um conjunto diferente de expoentes críticos e funções de escala. Por exemplo, esperamos que a evolução temporal da densidade de partículas, a partir de uma rede totalmente ocupada, assintoticamente obedeça a

$$\rho(t, L, \Delta) = t^{-\delta} \mathcal{F}_1(t^{1/z}/L, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (5.2)$$

onde L é a dimensão linear do sistema, $\Delta = p - p_c$, como usual, e \mathcal{F}_1 é uma função de escala. O expoente $\delta = \beta/\nu_{\parallel}$ descreve o decaimento crítico em lei de potência e $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ é o expoente crítico dinâmico. Por sua vez, no estado estacionário teríamos

$$\bar{\rho}(L, \Delta) = L^{-\beta/\nu_{\perp}} \mathcal{F}_2(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (5.3)$$

O mesmo seria válido, para as outras expressões derivadas pela teoria de escala (vide seção 2.5.2) como para a probabilidade de sobrevivência⁶, P_s ,

$$P_s(t, L, \Delta) = t^{-\delta'} \Phi(t^{1/z}/L, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (5.4)$$

onde $\delta = \delta'$. No entanto, enquanto na classe PD, $\beta = \beta'$, no caso do PCPD, os resultados simulacionais disponíveis [80] apontam $\beta \neq \beta'$.

⁶A definição da probabilidade de sobrevivência no PCPD é um pouco sutil. A definição mais natural é a de considerar o processo como ativo enquanto existam pelo menos duas partículas no sistema. Porém, em alguns trabalhos [81, 82] utiliza-se a condição de que o processo está ativo enquanto ainda existir pelo menos um par de partículas no sistema. (Utilizaremos esta última definição no trabalho que apresentaremos no próximo capítulo desta tese).

5.3 Teoria de Campo Médio

Devido à sua simplicidade, as aproximações tipo campo médio são a primeira tentativa de se obter informações acerca da transição de fase, e costumam fornecer uma visão *qualitativa* correta do diagrama de fases. Dentre as aproximações de campo médio de n -sítios, a mais simples que permite o tratamento explícito da difusão é a teoria de pares.

Chamaremos de P_{\bullet} a probabilidade de um sítio ocupado, P_{\circ} a probabilidade de um sítio vazio, $P_{\bullet\circ}$ a probabilidade de um par formado por um sítio ocupado e um vazio, e assim por diante. Assumiremos que o sistema é espacialmente homogêneo e que $P_{\circ\bullet} = P_{\bullet\circ}$. Na aproximação de pares para o PCPD, temos somente duas variáveis independentes: a densidade de partículas, $\rho(t) = P_{\bullet}(t)$ e a densidade de pares, $u(t) = P_{\bullet\bullet}(t)$, uma vez que temos os seguintes vínculos, $P_{\bullet} = P_{\bullet\circ} + P_{\bullet\bullet}$ e $P_{\bullet\bullet} + 2P_{\bullet\circ} + P_{\circ\circ} = 1$. Utilizaremos também as variáveis auxiliares v , com $v = P_{\bullet\circ} = \rho - u$, e w , onde $w = P_{\circ\circ} = 1 - 2\rho + u$.

O primeiro passo consiste em enumerarmos todas os possíveis eventos neste nível de aproximação e identificarmos as taxas de transição associadas a cada um deles. Na Tabela 5 estão relacionados todos esses eventos. A título de ilustração, vejamos o que ocorre no evento 2: Primeiro, temos que aproximar $P_{\circ\bullet\bullet}$, que pode ser aproximada como a probabilidade de “vazio, ocupado, vazio” multiplicada pela probabilidade de que o último sítio à direita está ocupado, dado que o seu vizinho à esquerda é vazio:

$$P_{\circ\bullet\bullet} \approx P_{\circ\bullet} P_{\bullet|\circ}$$

Usando a aproximação de pares, obtemos:

$$P_{\circ\bullet} P_{\bullet|\circ} \approx \left(\frac{P_{\circ\bullet} P_{\bullet\circ}}{P_{\bullet}} \right) \frac{P_{\bullet\circ}}{P_{\circ}} = \frac{v^3}{\rho(1-\rho)}.$$

Agora que já temos uma aproximação para a probabilidade da configuração inicial, devemos multiplicar pela taxa de difusão. Devido à simetria, temos ainda um fator 2 multiplicando a taxa. Esse fator aparece sempre que a configuração permite difusão para a direita ou para a esquerda.

Para encontrar a equação de movimento para a densidade de sítios e de pares,

Tabela 5: Aproximação de pares para o PCPD unidimensional

Evento	Taxa	ΔN_{\bullet}	$\Delta N_{\bullet\bullet}$	
1. $\bullet\bullet\circ\circ \rightarrow \bullet\circ\bullet\bullet$	$Duvw/\rho(1-\rho)$	0	-1	$\times 2$
2. $\circ\bullet\bullet\bullet \rightarrow \circ\circ\bullet\bullet$	$Dv^3/\rho(1-\rho)$	0	1	$\times 2$
3. $\bullet\bullet\bullet\bullet \rightarrow \bullet\circ\bullet\bullet$	$p(1-D)u^3/\rho^2$	-2	-3	
4. $\bullet\bullet\bullet\circ \rightarrow \bullet\circ\bullet\bullet$	$p(1-D)u^2v/\rho^2$	-2	-2	$\times 2$
5. $\circ\bullet\bullet\bullet \rightarrow \circ\circ\bullet\bullet$	$p(1-D)uv^2/\rho^2$	-2	-1	
6. $\bullet\bullet\circ\bullet \rightarrow \bullet\bullet\bullet\bullet$	$\frac{1}{2}(1-p)(1-D)uv^2/\rho(1-\rho)$	1	2	$\times 2$
7. $\bullet\bullet\circ\circ \rightarrow \bullet\bullet\bullet\bullet$	$\frac{1}{2}(1-p)(1-D)uvw/\rho(1-\rho)$	1	1	$\times 2$

devemos então adicionar todas as contribuições dos eventos da Tabela 5, levando em conta a variação no número de partículas e pares decorrentes de cada evento, ΔN_{\bullet} e $\Delta N_{\bullet\bullet}$, respectivamente:

$$\frac{d\rho}{dt} = -2(1-D)pu + (1-D)(1-p)(\rho-u)\frac{u}{\rho} \quad (5.5)$$

e

$$\frac{du}{dt} = -(1-D)pu\frac{2u+\rho}{\rho} - 2D\frac{(\rho-u)(u-\rho^2)}{\rho(1-\rho)} + (1-D)(1-p)\frac{(\rho-u)(1-u)u}{\rho(1-\rho)} \quad (5.6)$$

No limite de $D \rightarrow 1$, $u(t) \rightarrow \rho(t)^2$ e nós recuperamos a aproximação de sítios⁷:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = (1-p)\rho^2(1-\rho) - 2p\rho^2, \quad (5.7)$$

onde reescalamos o tempo como $t \rightarrow t/(1-D)$.

A equação (5.7) apresenta uma transição de fase em $p_c = 1/3$, e tem como soluções [78]:

$$\rho(t) \simeq \begin{cases} \rho_{\infty} + a \exp(-t/\tau) & \text{se } p < 1/3 \\ \sqrt{3/4t}^{-1/2} & \text{se } p = 1/3 \\ \frac{1}{3p-1}t^{-1} & \text{se } p > 1/3 \end{cases} \quad (5.8)$$

onde $\rho_{\infty} = (1-3p)/(1-p)$, $\tau = (1-p)/(1-3p)^2$ e a é uma constante que depende

⁷Intuitivamente, isto significa que a difusão rápida destrói qualquer correlação, levando ao comportamento do campo médio simples.

das condições iniciais.

A partir da solução dada por (5.8), podemos concluir que, na aproximação de campo médio, o expoente crítico $\nu_{\parallel} = 2$, uma vez que ρ decai como $t^{-1/2}$. Além disso, a expansão de $\rho(t)$ na região subcrítica fornece o expoente $\beta = 1$.

Uma versão contínua para a teoria de campo médio, em que a densidade pode flutuar no espaço, $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$, pode ser obtida a partir da equação (5.7), onde agrupamos os termos do segundo membro da equação e acrescentamos um termo difusivo, $D\nabla^2\rho(\mathbf{x}, t)$, obtendo

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{x}, t) = (1 - 2p)\rho^2(\mathbf{x}, t) - (1 - p)\rho^3(\mathbf{x}, t) + D\nabla^2\rho(\mathbf{x}, t). \quad (5.9)$$

Aplicando a transformação $\rho(\mathbf{x}, t) \rightarrow a^{-\beta/\nu_{\perp}}\rho(a\mathbf{x}, a^z t)$, e dividindo por $a^{-\beta/\nu_{\perp}}$, obtemos

$$a^z \frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{x}, t) = (1 - 3p)a^{-\beta/\nu_{\perp}}\rho^2(a\mathbf{x}, t) - a^{-2\beta/\nu_{\perp}}(1 - p)\rho^3(\mathbf{x}, t) + Da^2\nabla^2\rho(\mathbf{x}, t). \quad (5.10)$$

Para garantir a invariância por escala no ponto crítico ($p = 1/3$), devemos impor que $z - 2\beta/\nu_{\perp} = 0$ e $z - 2 = 0$. Assim, concluímos que a análise dimensional da equação (5.9) fornece os seguintes expoentes críticos:

$$\beta = 1, \nu_{\perp} = 1, \nu_{\parallel} = 2. \quad (5.11)$$

Porém, esses expoentes só são válidos para $d \geq 2$, que é a dimensão crítica do processo [83].

Já no caso em que $D < 1$, temos, no estado estacionário, as densidades dos pares e das partículas estão relacionadas por

$$u(\infty) = \frac{1 - 3p}{1 - p}\rho(\infty), \quad (5.12)$$

fornecendo os pontos críticos

$$p_c(D) = \begin{cases} \frac{1+3D}{5(1-D)} & \text{se } 0 \leq D < 1/7, \\ \frac{1}{3} & \text{se } 1/7 < D \leq 1. \end{cases} \quad (5.13)$$

Este resultado parece sugerir a existência de duas classes de universalidade ao longo da linha crítica, mas dadas as limitações da teoria em capturar os efeitos das flutuações, tal resultado deve ser interpretado com reservas. Aproximações de ordem superior, até a aproximação de 4 sítios, voltam a apontar uma transição única, a partir de $N = 3$, como pode ser visto na Figura 39, reproduzindo de maneira qualitativa os resultados simulacionais. Assim, a aparente presença de duas classes de universalidade para $D > 0$ é atualmente interpretada como um *artefato* da aproximação de pares.

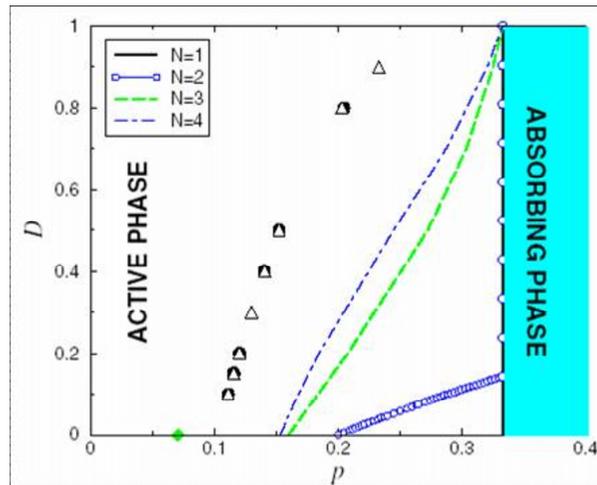


Figura 39: Diagrama de fases do PCPD unidimensional, obtido através de aproximações de aglomerados ($N = 1, 2, 3$ e 4). Os círculos preenchidos correspondem aos valores de p_c obtidos por estudos de DMRG (vide seção 5.4) e os triângulos abertos aos resultados de simulações de Monte Carlo. O ponto representado pelo losango cinza marca o ponto crítico do PCP. (Figura extraída da referência [80]).

5.4 Estudos numéricos: uma revisão cronológica

Apesar de uma versão do processo de contato por pares com difusão ter sido proposta por Grassberger em 1982 [84], o interesse atual no problema surgiu após a sua “redescoberta” por Howard e Täuber [85] que questionaram a possibilidade

de uma descrição tipo Langevin para o modelo. Devido à dificuldade na obtenção de uma teoria de campo para o processo⁸, e à inexatidão dos resultados fornecidos pelas aproximações de aglomerados, o maior progresso no estudo do comportamento crítico do PCPD vem dos estudos numéricos.

Os primeiros estudos numéricos do comportamento crítico do PCPD foram feitos por Carlon e Henkel [78], usando um método tipo DMRG (density matrix renormalization group)⁹. Seus resultados sugeriram que os expoentes críticos do PCPD seriam os mesmos da classe de “Conservação de Paridade” (CP), o que seria espantoso, uma vez que não há nenhum tipo de simetria separando os dois estados absorventes. A Figura 40 mostra alguns resultados do trabalho de Carlon e Henkel. Note que, apesar do expoente β/ν_{\perp} apresentar valores compatíveis com a classe CP, aparentemente os tamanhos utilizados não permitiam uma extrapolação confiável (Na Figura, PC = *parity-conserving* - conservação de paridade e DP = *direct percolation* - percolação dirigida).

Porém a hipótese da classe CP foi logo depois descartada por simulações de Monte Carlo [89, 90], que apesar de confirmarem os resultados de DMRG para tamanhos pequenos e tempos curtos¹⁰, mostraram um comportamento bem diferente com o aumento do tempo computacional e o tamanho do sistema, revelando que o comportamento crítico do modelo é influenciado por enormes correções de escala.

Com a hipótese da classe CP descartada, surgiram novos trabalhos, com novas interpretações para o comportamento crítico do PCPD. Um estudo simulacional de Dickman e de Menezes [81] encontrou expoentes que variavam com o valor da taxa de difusão D , o que fez com que eles sugerissem que a transição de fase no PCPD era não-universal. A variação dos expoentes com a taxa de difusão também foi verificada em trabalhos posteriores [82]. Um resultado intrigante reportado em [81]

⁸Apesar de alguns progressos em direção a uma teoria para o PCPD irrestrito, i.e, o processo em que são permitidas mais de uma partícula por sítio [86], o caso restrito ainda continua totalmente em aberto.

⁹O método de DMRG é um método que foi apresentado por White [87] em 1992 no contexto da mecânica estatística de equilíbrio, e fornece um meio eficiente para a diagonalização numérica do operador de evolução que atua no processo. Em comparação com as simulações de Monte Carlo, estudos de DMRG fornecem rapidamente o estado estacionário com alta precisão numérica, no entanto o número de sítios que pode ser tratado é relativamente restrito. Para mais detalhes sobre o método DMRG, vide a revisão [88]

¹⁰No caso do DMRG, Carlon e Henkel utilizaram tamanhos $L \leq 48$ sítios.

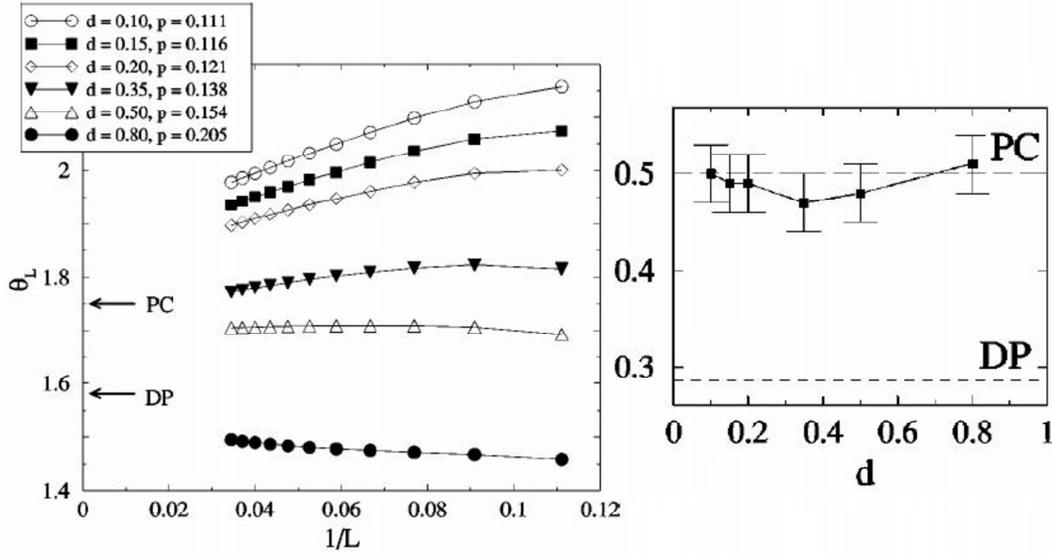


Figura 40: (a) Gráfico de $\theta = \nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$ em função de $1/L$ para vários valores da taxa de difusão d (b) estimativas do expoente β/ν_{\perp} obtidas por DMRG).

é que razões entre momentos do parâmetro de ordem, $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$ que deveriam se estabilizar em um valor independente do tamanho L no ponto crítico, apresentavam um comportamento anômalo, divergindo segundo $\ln L$, revelando que o PCPD talvez violasse as hipóteses de escala. (Vide Figura 41.a) Dickman e de Menezes então identificaram as flutuações devidas à fase inativa como uma possível fonte de tal anomalia, e fizeram uma análise das médias do parâmetro de ordem restritas ao que eles chamaram de *setor reativo*, isto é às configurações com pelo menos um par de partículas. Essa análise forneceu um melhor colapso das distribuições de probabilidade do parâmetro de ordem, mas não melhorou muito o resultado para as razões entre os momentos, que continuaram crescendo com $\ln(L)$ (mas a uma taxa bem menor que antes dessa análise - vide Figura 41.b).

Na mesma época, Barkema e Carlon apresentaram a hipótese de que a transição de fase no PCPD de fato pertenceria à classe PD, baseados em um método de extrapolação dos dados que obtiveram através de simulações de Monte Carlo. No entanto, não era uma resposta definitiva, visto que tal extrapolação só funcionava

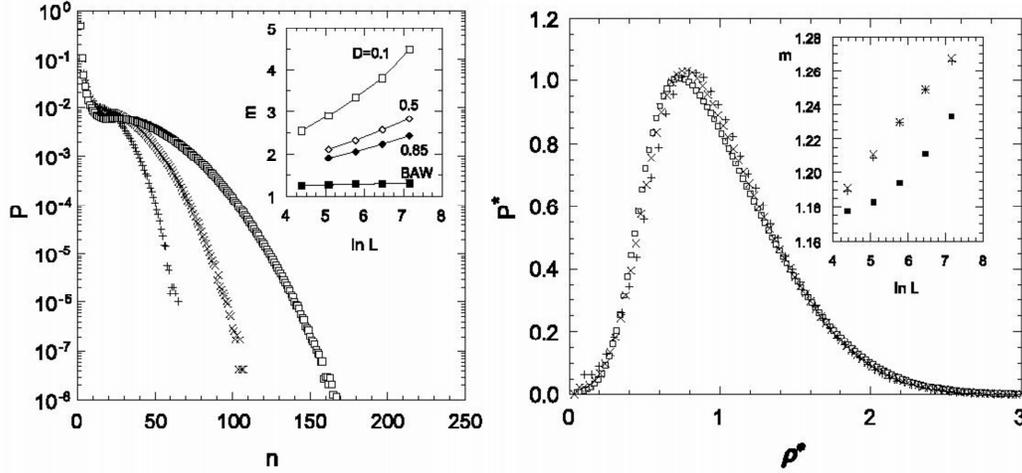


Figura 41: (a) Distribuição de probabilidades do número de partículas n no ponto crítico para $D = 0.1$ e $L = 80, 160$ e 320 . Detalhe: Gráfico de $m \times \ln(L)$ para $D = 0.1, 0.5$ e 0.85 (b) Probabilidade reescalada no setor reativo. Detalhe: $m = \ln L$ no setor reativo.

se postulássemos uma correção de escala bem específica, da forma

$$\rho(t) = (1 + at^{-\gamma})t^{-\delta}, \quad (5.14)$$

onde a é um parâmetro de ajuste e $\gamma = \delta = \beta/\nu_{\perp}$. Na Figura 42.a estão reproduzidos os resultados da extrapolação.

Nesse ínterim, Kockelkoren e Chaté [91] apresentaram um variação do PCPD, chamado "PCPD with soft constraint" que permitia um número de partículas $n \leq N$ por sítio, e em que as reações ocorreriam apenas entre as n partículas de um mesmo sítio, tornando o algoritmo eficiente e de fácil implementação para computação em paralelo. Como resultado, após rodarem o processo em uma rede de 2^{22} sítios durante 10^7 passos de Monte Carlo, Kockelkoren e Chaté obtiveram leis de potência claras, com expoentes diferentes da classe PD. Isso os motivou a criar uma nova classificação geral das transições de fase para estados absorventes, em especial das reações do tipo



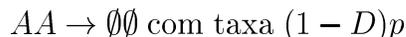
caracterizando-as de acordo com os valores m e n de criação e remoção, enquanto

k e l representariam simetrias adicionais. Neste esquema, o PCPD aparecia com os expoentes $\delta = \beta/\nu_{\parallel} = 0.200(5)$, $z = \nu_{\perp}/\nu_{\parallel} = 1.70(5)$ e $\beta = 0.37(2)$.

No entanto, o trabalho de Kockelkoren e Chaté, apesar de aparentemente mostrar uma lei de potência clara, não estava totalmente livre das gigantescas correções de escala que permanecem no processo, mesmo após tempos da ordem de 10^6 passos. Isso foi apontado por Hinrichsen, que utilizando o mesmo modelo, com o mesmo tamanho de rede, mas em uma simulação que se estendeu até 10^8 passos, mostrou que o valor crítico utilizado por Kockelkoren e Chaté era na verdade subcrítico, e as leis de potência vistas por eles se curvavam após 10^7 passos. Ou seja, na tentativa de encontrarem uma lei de potência, eles haviam *subestimado* o ponto crítico, e por consequência, os valores dos expoentes críticos. O resultado de Hinrichsen, utilizando o modelo proposto por Kockelkoren e Chaté é reproduzido na Figura 42.b. Mais ainda, Hinrichsen advoga que os valores dos expoentes críticos obtidos pelas simulações até então devem ser considerados como *cotas superiores* para os valores reais, e que estariam se aproximando dos valores da classe PD. Resumindo, o PCPD sofreria um crossover para a classe PD, após um tempo astronômico. No entanto, o próprio Hinrichsen admite que ainda não é claro se o PCPD pertence ou não à classe PD, pois aparentemente os métodos computacionais teriam atingido seu limite e técnicas mais sofisticadas seriam necessárias para responder à esta questão [39].

Enquanto uma parte dos estudos parecia caminhar em direção à hipótese de que o PCPD seria mais um representante da classe PD, uma série de estudos apresentados pelo grupo de Park, indica o contrário. Os principais resultados encontrados por eles são revisados a seguir.

Noh e Park [82], argumentam que a aparente não-universalidade do PCPD seria devido a uma termo de memória, que persistiria em tempos longos. Esse termo seria gerado pelo efeito difusivo das partículas e funcionaria como uma perturbação marginal da teoria de campo para o modelo. Para justificar tal hipótese, eles introduzem uma versão generalizada do PCPD, chamado de GPCPD, em que estão presentes os seguintes processos:



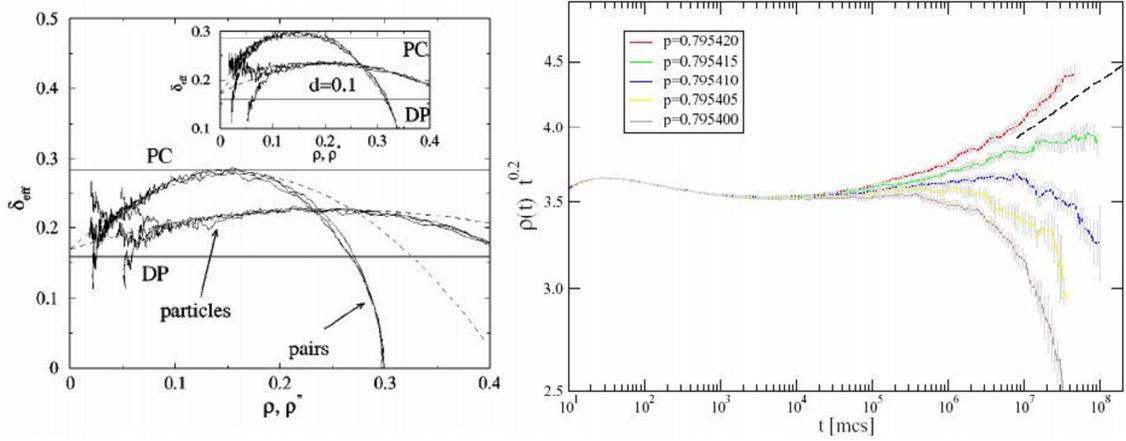
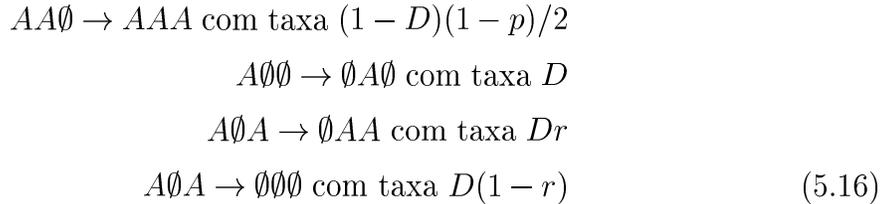


Figura 42: (a) Técnica de extrapolação sugerida por Barkema e Carlon, assumindo um decaimento algébrico da forma (5.14). Figura extraída de [92] (b) Gráfico da densidade de sítios ativos, $\rho(t)$, multiplicada pelo expoente da lei de potência como $\delta = 0.20$. Simulações apresentadas por Hinrichsen [39] utilizando o mesmo modelo e parâmetros utilizados por Kockelkoren e Chaté [91]. A linha pontilhada representa a inclinação dada pelo expoente da classe PD. Figura extraída de [39]

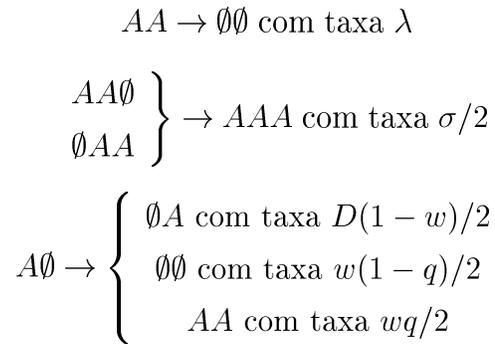


O parâmetro r permite a interpolação entre o ponto crítico da classe PD ($r = 0$) e o comportamento crítico do PCPD ($r = 1$). Como o ponto $r = 1$ não apresenta nenhuma singularidade nesta generalização, Noh e Park estudaram o modelo para $0 < r < 1$ e estenderam o resultado para $r \rightarrow 1$. Variando o valor de D , Noh e Park encontraram uma variação suave nos expoentes, levando-os a concluir que a transição para o PCPD corresponderia a uma *linha* de pontos fixos com expoentes variando continuamente.

Park e Park [93] introduziram no modelo uma “difusão com tendência”, ou seja, a partícula passa a ter uma probabilidade diferente de difundir para a esquerda ou para a direita. Nas classes de universalidade PD e mesmo na CP, a invariância de Galileu garante que tal variação é *irrelevante*, não alterando portanto, o comporta-

mento crítico¹¹. No entanto, as simulações de Park e Park revelaram que no caso do PCPD a difusão com tendência é um fator relevante, mudando seu comportamento crítico. A rigor, esses resultados teriam duas implicações importantes: (i) a classe de universalidade do PCPD seria diferente das classes PD e CP, e (ii) o PCPD seria genericamente um modelo de duas espécies, e somente poderia ser descrito por uma teoria de campo de duas espécies (ou seja, a teoria deveria tratar os pares como partículas “*A*” e as partículas isoladas como partículas “*B*”).

Mais recentemente, Park e Park estudaram o hipotético *crossover* do PCPD para a classe PD [95], criando um modelo generalizado em que estão presentes tanto a aniquilação espontânea de partículas ($A\emptyset \rightarrow \emptyset\emptyset$), quanto a criação de partículas por partículas isoladas ($A\emptyset \rightarrow AA$), duas características do processo de contato simples. Dessa forma, o decaimento da densidade na fase absorvente deveria ser exponencial, o que anularia os efeitos dos termos de memória gerados pelas partículas isoladas, tornando visível o comportamento de escala do tipo PD. As taxas do modelo são:



onde o caso em que $w = 0$, $D = 1$, $\lambda = p$, e $\sigma = 1 - p$ correspondem ao PCPD. Estudando o limite em que $w \rightarrow 0$, seria possível estimar o expoente de *crossover*, que descreve o comportamento de escala do possível crossover do comportamento PCPD para PD. Park e Park encontraram que o crossover de PCPD para PD é não-trivial, e um comportamento de escala anômalo para a amplitude crítica, o que, segundo eles, indica fortemente que o comportamento de escala do PCPD não pode tender para o comportamento tipo PD.

Encerramos esta seção, apresentando uma atualização da tabela que consta

¹¹Grosso modo, isso decorre da descrição bosônica da teoria de campo para sistemas com uma única espécie reativa [94].

Tabela 6: Valores do expoentes críticos para o PCPD unidimensional, obtidos através de estudos numéricos

Referência	D	δ	$z = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}}$	β	β/ν_{\perp}	δ'	η
Carlon et al [78]	0.1	-	1.87(3)	-	0.50(3)	-	-
	0.15	-	1.84(3)	-	0.49(3)	-	-
	0.2	-	1.83(3)	-	0.49(3)	-	-
	0.35	-	1.72(3)	-	0.47(3)	-	-
	0.5	-	1.70(3)	-	0.48(3)	-	-
	0.8	-	1.60(5)	-	0.51(3)	-	-
Hinrichsen [89]	0.1	0.25(2)	1.83(5)	< 0.67	0.50(3)	0.13(2)	0.13(2)
Ódor [90]	0.05	0.273(2)	-	0.57(2)	-	0.004(6)	0.10(2)
	0.1	0.275(4)	-	0.58(1)	-	-	-
	0.2	0.268(2)	-	0.58(1)	-	0.004(6)	0.14(1)
	0.5	0.21(1)	-	0.40(2)	-	0.008(9)	0.23(2)
	0.9	0.20(1)	-	0.39(2)	-	0.01(1)	0.48(1)
Ódor [96]	0.2	0.263(9)	-	0.57(1)	-	-	-
	0.4	0.268(8)	-	0.58(1)	-	-	-
	0.7	0.275(8)	-	0.57(1)	-	-	-
Dickman e Menezes [81]	0.1	0.249(5)	2.04(4)	0.546(6)	0.503(6)	-	-
	0.5	0.236(3)	1.86(2)	0.468(2)	0.430(2)	-	-
	0.85	0.130	1.77(2)	0.454(2)	0.412(2)	-	-
Barkema e Carlon [92]	0.1	0.17	-	-	-	-	-
	0.2	0.17	1.70(3)	-	0.28(4)	-	-
	0.5	0.17(1)	-	-	0.27(4)	-	-
	0.9	0.17	1.61(3)	-	-	-	-
Kockelkoren e Chaté [91]	*	0.200(5)	1.70(5)	0.37(2)	-	-	-
Hinrichsen [97]		< 0.185	< 1.65	< 0.34			
Noh e Park [82]	0.1	0.27(4)	1.8(2)	0.65(12)	0.50(5)	0.09(2)	0.18(5)
Odor [98]	0.05	0.216(9)	2.0(2)	0.411(10)	0.53(7)	-	-
	0.1	0.206(7)	1.95(1)	0.407(7)	0.49(2)	-	-
	0.2	0.217(8)	1.95(1)	0.402(8)	0.46(3)	-	-
	0.5	0.206(7)	1.84(1)	0.414(16)	0.41(2)	-	-
	0.7	0.214(5)	1.75(1)	0.39(1)	0.38(2)	-	-
Park e Kim [99]	*	0.241(5)	1.80(10)	0.519(24)	-	0.11(3)	0.15(3)
Park e Park [93, 95]	0.5	0.20(1)	1.85(1)				
PD		0.1595	1.5807	0.2765	0.2521	0.1595	0.3137
CP		0.286(2)	1.74(1)	0.922(5)	0.497(5)	0.286(2)	

na revisão [80], em que estão colecionados os valores das estimativas disponíveis até então para os expoentes críticos do PCPD.

5.5 PCPD: Uma nova classe de universalidade?

Vimos na seção anterior que os estudos numéricos ainda não foram capazes de esclarecer o comportamento crítico apresentado pelo PCPD, a despeito dos diversos progressos efetuados. Assim, atualmente, após mais de cinco anos dos primeiros estudos numéricos, restam duas principais correntes de pensamento: em uma, o PCPD pertence a uma nova classe de universalidade distinta da classe PD, com um conjunto único de expoentes críticos, ou possivelmente, expoentes que variam continuamente devido a uma perturbação marginal [82, 81, 95]. Adeptos da corrente oposta afirmam que o PCPD deve ser atraído para um ponto fixo tipo PD após um tempo de *crossover* astronômico [100, 97].

A hipótese do comportamento tipo PD, apesar de ser a esperada se levarmos em conta a conjectura de Grassberger-Jansen, apresenta um problema conceitual. Como foi mencionado no Capítulo 2, modelos da classe PD apresentam um decaimento *exponencial* da densidade de partículas, $\rho(t)$, no regime subcrítico. Diferentemente, nos modelos com a fenomenologia do PCPD, observa-se que na fase inativa a densidade das partículas decai *algebricamente* [101], da forma

$$\rho(t) \propto \begin{cases} t^{-d/2} & \text{para } d < 2 \\ t^{-1} \ln t & \text{para } d = 2 \\ t^{-1} & \text{para } d > 2 \end{cases} . \quad (5.17)$$

Outra diferença observada em relação à classe PD é que a dimensão crítica do PCPD é $d_c = 2$ [83].

A favor da hipótese PD, podemos enumerar a inexistência no PCPD de fatores que violem a conjectura de Grassberger-Jansen, já que não há nenhuma quebra de ergodicidade aparente, e apesar da existência de mais de um estado absorvente, não há nenhuma simetria evidente entre esses estados. Da mesma, verifica-se que, no processo de contato simples, a difusão não é capaz de mudar sua classe de univer-

salidade [6].

Assim, a questão principal no estudo do PCPD ainda é um problema em aberto, isto é, ainda não se sabe se o processo pertence a uma das classes de universalidade conhecidas ou se ele é representante de uma nova classe com um novo conjunto de expoentes críticos.

Sobre este assunto, Hinrichsen, um dos adeptos da hipótese PD, afirmava [97], no final de 2005:

“Atualmente ainda não está claro se o PCPD pertence ou não à classe de universalidade PD. Aparentemente os métodos computacionais atingiram o seu limite e técnicas mais sofisticadas são necessárias para abordar esta questão.”

Dada a inexistência de uma resposta definitiva sobre a questão, e tendo em vista que tínhamos em mãos uma nova e eficiente ferramenta computacional para o estudo de modelos com estados absorventes (o método de simulação QE), que em princípio não sofre de correções devido ao tempo finito da simulação, resolvemos abordar o problema utilizando uma variação do método QE. Além disso, tendo em vista a grande sensibilidade e variação verificada nos valores encontrados para os expoentes críticos, resolvemos focar o estudo em outras grandezas universais, as distribuições e razões entre momentos do parâmetro de ordem, que talvez fossem menos sensíveis às grandes correções de escala do PCPD. Isso também nos permitiria verificar se as conclusões do trabalho [81] continuariam válidas, ou seja, se o comportamento de escala do PCPD continuaria anômalo, com as razões entre momentos crescendo de forma $\propto \ln L$. No caso de uma convergência das razões para um valor universal, poderíamos comparar os valores obtidos com aqueles das classes de universalidade conhecidas. Os detalhes desse trabalho, bem como os resultados e conclusões serão apresentados no próximo capítulo.

6 *Razões entre momentos no Processo de Contato por Pares com Difusão*

Neste capítulo nós apresentamos nosso trabalho sobre a transição de fase contínua para um estado absorvente que ocorre no processo de contato por pares com difusão (PCPD). Em estudos anteriores, as razões entre os momentos do parâmetro de ordem na criticalidade apresentaram um comportamento anômalo, crescendo com o tamanho do sistema, ao invés de tomarem valores universais, como esperado. Utilizando o método de simulação quase-estacionária nós determinamos os momentos do parâmetro de ordem até a quarta ordem no ponto crítico. Devido a fortes efeitos de tamanho finito, essas razões convergem somente para sistemas com um tamanho bem grande. Os valores obtidos são comparados com aqueles da percolação dirigida.

Publicação relacionada: M.M. de Oliveira and R. Dickman, Phys. Rev. E **74**, 052608(2006).

6.1 Modelo e método

Vimos no capítulo anterior que o processo de contato por pares com difusão (PCPD) exibe uma transição de fase contínua para um estado absorvente, em uma certa taxa de aniquilação crítica $p_c(D)$. Uma vez que diversas variações do modelo, que diferem em como cada processo (criação, aniquilação ou difusão) é selecionado,

têm sido estudados na literatura¹ [80], devemos em primeiro lugar, especificar quais são os detalhes da variação que estudaremos.

Neste trabalho, usaremos a implementação da Ref. [81], que detalharemos a seguir. O modelo é definido em um anel de L sítios. Em cada passo da evolução nós primeiro escolhemos entre difusão, com probabilidade D , e reação, com probabilidade $1 - D$ ($0 < D < 1$). Em um passo de reação, nós selecionamos um par ao acaso², e escolhemos entre criação e aniquilação com probabilidades p e $1 - p$, respectivamente. Se escolhemos difusão, uma partícula é selecionada aleatoriamente e ela tenta pular para um de seus primeiros-vizinhos, se ele estiver vazio. O incremento de tempo associado com cada passo³ é $\Delta t = 1/(N_{pair} + DN_{part})$, onde N_{pair} e N_{part} são o número de pares e partículas na rede no tempo t .

Os dois eventos que caracterizam a dinâmica do modelo PCPD são a difusão de partículas e as reações envolvendo um par. Isto nos motivou a ignorar o subespaço puramente difusivo, isto é, não levamos em conta as configurações em que existem apenas partículas isoladas difundindo pela rede. Em outras palavras, isto significa que nós modificamos ligeiramente a dinâmica do modelo, *restringindo-a ao subespaço com pelo menos um par*, que nós chamamos de subespaço *reativo*.

As motivações para o estudo desse processo modificado são as seguintes:

(i) Em [81], a exclusão do subespaço sem pares resultou em razões entre momentos melhor comportadas;

(ii) eliminando a grande fração de tempo gasta nos intervalos sem reações acarreta um enorme ganho na eficiência do algoritmo.

Nós podemos ainda justificar nossa escolha notando que qualquer propriedade de escala envolve reações, ou seja, a existência de pares. Isto também nos permite usar como parâmetro de ordem no PCPD a *densidade de pares* ρ_2 , ou seja, o número de pares por sítio. Uma vez que criação (e destruição) de partículas requerem pares,

¹Essas variações geram certa dificuldade na comparação entre os trabalhos pois modificam as características não-universais, como por exemplo o valor de p_c . Porém as características universais devem se manter inalteradas.

²Para maior eficiência, nós guardamos uma lista contendo a posição dos pares na rede, e fazemos o mesmo para as partículas.

³O incremento de passo escolhido implica que cada sítio na rede é efetivamente visitado uma vez por unidade de tempo, em média.

esperamos que a densidade de partículas ρ_1 escale de um maneira similar.

No algoritmo simulacional, tal restrição é implementada da seguinte maneira. A configuração inicial (todos os sítios ocupados) tem um grande número de pares. Aplicando o método simulacional QE, nós acumulamos uma lista de configurações durante a evolução do processo. Então, quando uma visita a uma configuração (absorvente ou não) sem pares é iminente, o sistema é levado para uma configuração selecionada ao acaso a partir da lista. Em outras palavras, o método QE, usado anteriormente apenas para amostrar as propriedades quase-estacionárias, aqui é usado também para *restringir* a dinâmica ao subespaço de interesse. Uma sutil diferença entre as duas aplicações do método é que, enquanto nas simulações QE usuais [102] o método fornece somente uma amostragem das propriedades condicionadas à sobrevivência, neste estudo nós eliminamos certas configurações não-absorventes, bem como as histórias envolvendo-as. Pelas razões discutidas anteriormente, nós esperamos que este procedimento não afete nossos resultados para sistemas com tamanhos grandes.

6.2 Resultados

Características das simulações

Nós realizamos simulações do PCPD em anéis de $L = 1280, 2560, \dots, 40960$ sítios, usando o método QE restrito ao subespaço reativo. Cada realização do processo teve como configuração inicial todos os sítios ocupados, e rodou por 10^9 passos de tempo. As médias foram realizadas no regime QE, após descartarmos um transiente inicial, que depende do tamanho do sistema.

Na prática nós acumulamos histogramas para o tempo durante o qual o sistema tem exatamente $1, 2, \dots, n, \dots$ pares, e de maneira análoga para partículas. Esses histogramas são utilizados para calcular os momentos. Como agora temos histogramas para a distribuição de pares e partículas, denotaremos por $m_{j,1}$ o j -th momento da distribuição de probabilidades do número de partículas e por $m_{j,2}$ o momento da distribuição de probabilidades do número de pares correspondente. Com esta notação, o parâmetro de ordem ρ_2 poderia ser denotado como $m_{1,2}$, por exemplo.

O tempo de vida QE, τ , é tomado como o tempo médio entre duas tentativas do sistema deixar o subespaço reativo.

Nós estudamos três coeficientes de difusão diferentes, $D = 0.1, 0.5$ e 0.85 , como foi feito em [81]. Para comparação, nós também estudamos o PCP, cujas propriedades de escala pertencem à classe da percolação dirigida. Os resultados QE para o caso $D = 0$ confirmam o comportamento da classe PD no PCP, como pode ser verificado pelos valores dos expoentes e razões entre momentos listados nas Tabelas 7 e 8. Além disso, nós melhoramos a estimativa para o ponto crítico do PCP, obtendo $p_c = 0.077092(1)$. Esta estimativa é consistente com a melhor estimativa anterior, $p_c = 0.077090(5)$, da Ref. [51].

Valores do ponto crítico e dos expoentes críticos

No capítulo anterior, vimos como uma avaliação incorreta do valor do ponto crítico pode invalidar todas as conclusões de um trabalho [39]. Por isso o primeiro passo na análise de nossos resultados é determinar, com o máximo de precisão possível, para cada valor de D estudado, a probabilidade de aniquilação crítica $p(D)$. Em vez de procurar apenas por uma lei de potência no gráfico $\rho \times L$, nós usamos os seguintes critérios para criticalidade:

- (i) Dependência em lei de potência de ρ_1 e ρ_2 com o tamanho do sistema, L ;
- (ii) dependência em lei de potência de τ com o tamanho do sistema, L ;
- (iii) constância da razão entre momentos $r_{211;2} \equiv m_{2;2}/m_{1;2}^2$ com o tamanho do sistema.

Os critérios (i) e (ii) equivalem a procura pelas relações de escala de tamanho finito usuais $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ e $\tau \sim L^z$ na criticalidade. Os três critérios foram mutuamente consistentes (dentro de suas respectivas margens de erro).

Na Figura 43 vemos os dados de ρ_2 para $D = 0.5$; o parâmetro de ordem QE para vários valores de p próximos ao ponto crítico p_c é plotado, *versus* L em escalas logarítmicas. Os dados para os quatro tamanhos maiores são bem ajustados por uma linha com inclinação $-\beta/\nu_\perp = -0.385$. Ao plotarmos $\ln L^{\beta/\nu_\perp} \rho_2$ *versus* $\ln L$ (vide detalhe), conseguimos eliminar os valores p fora da criticalidade, para os

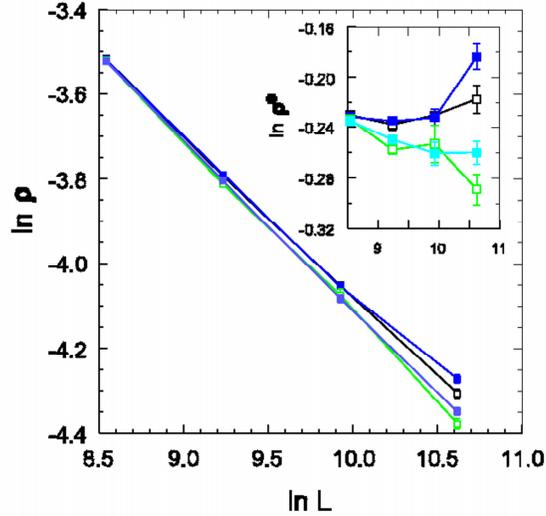


Figura 43: Parâmetro de ordem QE em função do tamanho do sistema para $p = 0.120345$, $p = 0.120350$, $p = 0.120355$ e $p = 0.120360$, de cima para baixo. $D = 0.5$. Detalhe: $\ln L^{\beta/\nu_{\perp}} \rho$ versus $\ln L$ para os mesmos valores de p .

quais os gráficos apresentam uma curvatura significativa. Isto nos leva a estimar $p_c = 0.120353(2)$.

Uma análise similar da densidade de partículas ρ_1 fornece $p_c = 0.120357(5)$ enquanto que a análise do tempo de vida τ fornece $0.120352(3)$, (vide Figura 44), levando a estimativa total de $p_c = 0.120354(3)$ para $D = 0.5$.

A análise da razão entre os momentos também se mostrou útil na localização de limites para p_c : Como pode ser visto na Figura 45, esta quantidade parece crescer com o tamanho do sistema para $p < p_c$, e vice-versa.

As estimativas finais dos valores críticos para cada um dos valores de D , utilizando todos os critérios acima, encontram-se na Tabela 7. Nossas estimativas atuais para p_c são ligeiramente inferiores às reportadas em [81], uma diferença de menos que 0.1%. Essas diferenças refletem as fortes correções de tamanho finito que afetam o PCPD⁴. Isto também indica que talvez os resultados anômalos para a

⁴no trabalho [81] os tamanhos do sistema iam de 80 a 1280, tais diferenças são observadas em outros problemas com estados absorventes, como nos modelos de pilha de areia restritos [52].

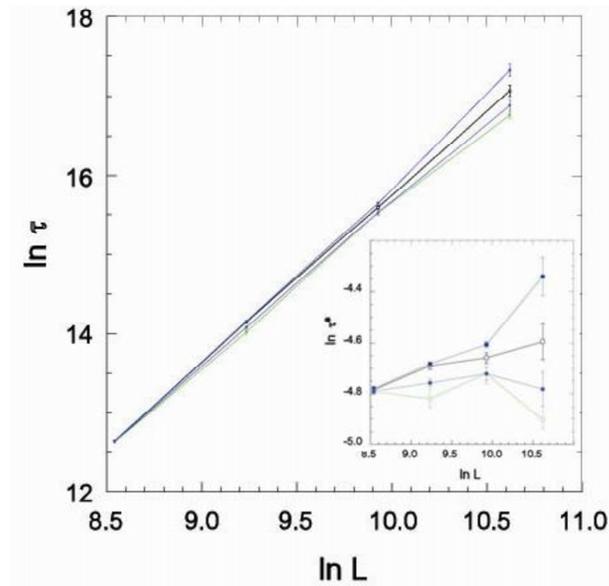


Figura 44: Tempo de vida do estado QE em função do tamanho do sistema para $p = 0.120345$, $p = 0.120350$, $p = 0.120355$ e $p = 0.120360$, de cima para baixo. $D = 0.85$. Detalhe: $\ln L^{\beta/\nu_{\perp}\rho}$ versus $\ln L$ para os mesmos valores de p .

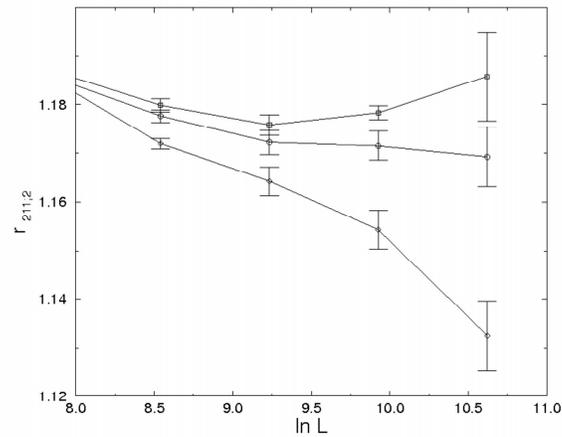


Figura 45: Razão entre os momentos $r_{211;2}$ versus tamanho do sistema para $p = 0.12990$, $p = 0.12993$, e $p = 0.12995$, de cima para baixo $D = 0.85$.

variação dos momentos com L fossem decorrência de eles terem estudados valores de p_c que se situavam ainda na fase *subcrítica*.

Tabela 7: Valores para os expoentes críticos para o PCP, PCPD e PD. Os valores da classe PD foram retirados da Ref.[33].

D	p_c	β/ν_\perp	z
0 (PCP)	0.077092(1)	0.2519(3)	1.584(7)
0.1	0.106405(15)	0.505(10)	2.08(15)
0.5	0.120354(3)	0.385(11)	2.04(5)
0.85	0.129925(8)	0.386(5)	1.88(12)
PD	-	0.25208(5)	1.5807(1)

Usando nossos resultados para os três maiores tamanhos ($L = 10240, 20480$ and 40960) nós também obtemos estimativas para as razões entre os expoentes críticos β/ν_\perp e $z = \nu_\parallel/\nu_\perp$. Esses valores também estão listados na Tabela 7. A maior contribuição para as incertezas nos expoentes vem da incerteza no valor de p_c .

Razões entre momentos

Neste trabalho nós analisamos, além da razão $r_{211;2}$ já mencionada (e que foi chamada de m no trabalho [81]), as razões

$$r_{312;2} \equiv \frac{m_{3;2}}{m_{2;2}m_{1;2}} \quad (6.1)$$

e

$$r_{42;2} \equiv \frac{m_{4;2}}{m_{2;2}^2} \quad (6.2)$$

bem como as correspondentes razões para as partículas. Argumentos de escala implicam que essas razões devem assumir valores universais no ponto crítico (vide seção 2.8). A análise dessas razões é de particular interesse no contexto do PCPD, haja visto o resultado inesperado observado na Ref. [81], onde foi verificado um aparentemente *crescimento ilimitado* de $r_{211;2}$ quando aumentamos o tamanho do sistema, sugerindo que o PCPD não seguiria o comportamento de escala usual observado nas transições de fase para estados absorventes. As simulações que realizamos revelam que as razões entre os momentos no PCPD de fato exibem o comportamento esperado, porém a convergência para os valores universais só é observada para tamanho de sistema bastante grandes, como pode ser visto na Figura 46.

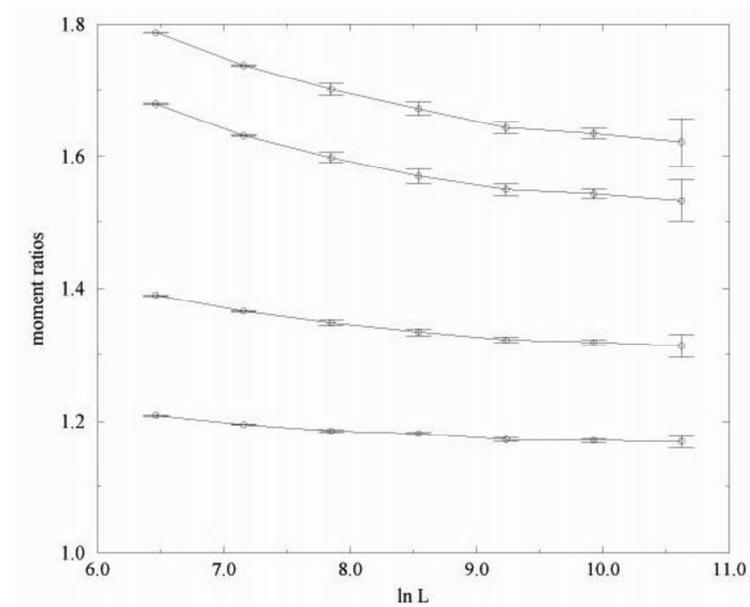


Figura 46: Razões entre momentos $r_{211;2}$, $r_{312;2}$, $r_{31;2}$ e $r_{42;2}$ versus $\ln L$ (de baixo para cima) no ponto crítico, para $D = 0.85$.

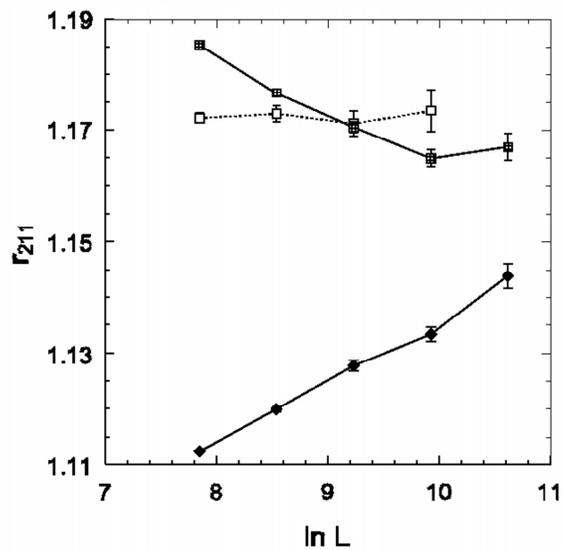


Figura 47: Razões entre momentos $r_{211;2}$ (pares) e $r_{211;1}$ (partículas) versus $\ln L$ para $p = 0.120354$ e $D = 0.5$. Linha tracejada: razão entre momentos $r_{211;2}$ para o PCP crítico.

Tabela 8: Valores críticos das razões entre momentos para o PCP, PCPD e para as classes de universalidade PD, conservação por Paridade (CP), e PD-conservativa (PD-C).

D	$r_{211;2}$	$r_{312;2}$	$r_{422;2}$	K_4/K_2^2	Referência
0 (PCP)	1.1738(2)	1.303(3)	1.558(2)	-0.493(3)	[51]
0.1	1.140(15)	1.27(2)	1.55(3)	0.1(2)	[103]
0.5	1.166(8)	1.310(15)	1.61(2)	0.0(1)	[103]
0.85	1.170(6)	1.31(1)	1.61(4)	-0.1(1)	[103]
PD	1.1736(2)	1.301(3)	1.554(2)	-0.505(3)	[51]
PC	1.3340(4)				[81]
C-DP	1.142(8)				[52]

A Figura 47 mostra as razões entre os momentos para pares e partículas no PCPD crítico, com $D = 0.5$ e para o PCP. Baseados nestes dados nós estimamos $\lim_{L \rightarrow \infty} r_{211;2} = 1.166(8)$ para o PCPD com $D = 0.5$. Enquanto os resultados para $r_{211;2}$ parecem convergir para os tamanhos de sistema utilizados, os dados para a razão entre os momentos das partículas, $r_{211;1}$ continuam a crescer com o tamanho do sistema e não podem ser extrapolados para o limite de tamanho infinito⁵. A Tabela 8 apresenta as estimativas dos valores limites ($L \rightarrow \infty$) das razões entre os momentos para o PCPD e algumas outras classes de universalidades conhecidas. As razões para $D \geq 0.5$ são bem próximas àquelas da classe da percolação dirigida. A razão entre os cumulantes K_4/K_2^2 (onde K_j denota o j -ésimo cumulante da distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem) não está de acordo com o valor da classe PD, apesar das estimativas para o PCPD serem mais imprecisas.

No caso de $D = 0.85$, nós acumulamos dados para vários valores da taxa de aniquilação p na vizinhança de p_c . Isto nos permite estimar o expoente do comprimento de correlação ν_\perp , usando a relação de escala para tamanho finito

$$m(\Delta, L) \propto \mathcal{F}_m(L^{1/\nu_\perp} \Delta), \quad (6.3)$$

⁵Nós notamos que os valores para partículas e pares sugerem que as razões se tornam iguais para um sistema com tamanho da ordem de 5×10^5 , para $D = 0.5$. Uma vez que universalidade implica em uma escala similar de partículas e pares no ponto crítico, nós podemos tomar isto como uma estimativa da ordem de magnitude para o tamanho do sistema para o qual as correções de escala finalmente se tornam irrelevantes. Os dados para as razões entre os momentos para $D = 0.85$ são consistentes com esta estimativa, enquanto para $D = 0.1$ a convergência parece ocorrer somente para tamanhos ainda maiores, da ordem de $L \sim 10^7$.

onde $\Delta = p - p_c$ e \mathcal{F}_m é uma função de escala. Isto leva a

$$\left| \frac{\partial m}{\partial p} \right|_{p_c} \propto L^{1/\nu_\perp}. \quad (6.4)$$

Os dados na Figura 48 fornecem uma estimativa de $\nu_\perp = 1.09(1)$, confirmando os resultados de [81].

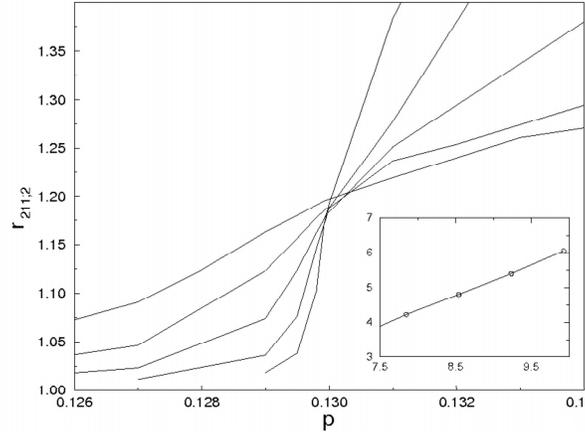


Figura 48: Razão entre momentos $r_{211;2}$ versus p para tamanhos $L = 1280, L = 2560 \dots L = 20480$ e $D = 0.85$. Detalhe $\ln \partial m / \partial p$ versus $\ln L$ na criticalidade.

Histograma do parâmetro de ordem

Uma outra quantidade útil para determinarmos a classe de universalidade é o histograma do parâmetro de ordem escalado, definido como

$$p^*(n^*) = \bar{n}p(n), \quad (6.5)$$

onde n denota o número de pares e \bar{n} seu valor médio. (Aqui $n^* \equiv n/\bar{n}$.) A figura 49 compara os histogramas escalados para o PCPD com $D = 0.1, 0.5$ e 0.85 . Os últimos dois são bem similares, enquanto a curva para taxa de difusão baixa tem um pico mais estreito. No detalhe da Figura 49 nós comparamos o histograma escalado para o PCPD com $D = 0.5$ ao histograma do processo de contato. Notamos que mesmo

para os maiores tamanhos estudados os histogramas ainda se mantêm diferentes.

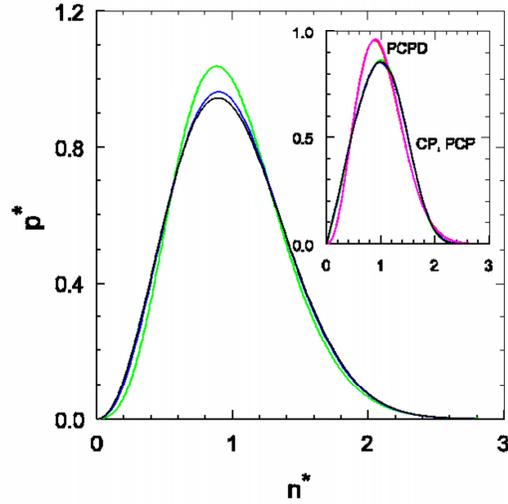


Figura 49: Histogramas escalados para o PCPD crítico com $D = 0.1, 0.5,$ e 0.85 (de cima para baixo). Detalhe: histogramas escalados para o PCPD crítico ($D = 0.5, L = 10240$ e 20480), PC crítico (para os mesmos tamanhos) e PCP crítico ($L = 10240$).

6.3 Discussão

Nós realizamos simulações de grande escala do processo de contato por pares com difusão, e encontramos que as razões de vários momentos do parâmetro de ordem são limitadas por valores finitos, o que nos permitiu fazer as primeiras estimativas numéricas dessas razões para o PCPD. Isto resolve a aparente anomalia encontrada em [81], onde uma razão entre os momentos crescia sem limite.

Duas questões importantes nas discussões recentes sobre o PCPD são:

- (i) O modelo exhibe expoentes críticos que variam continuamente, ou um conjunto único, independente da taxa de difusão D ?
- (ii) No último caso, os expoentes do modelo são os mesmos da percolação

direcionada?

Apesar do grande esforço computacional, nós somos incapazes de responder a essas questões de maneira definitiva. Por outro lado, nossos resultados fornecem algumas pistas. Com respeito à primeira questão, os resultados reportados nas Tabelas 7 e 8 mostram uma boa concordância para as duas maiores taxas de difusão estudadas ($D = 0.5$ e 0.85), mas os resultados para $D = 0.1$ são bem diferentes. Nossos valores para os expoentes críticos são consistentes com alguns resultados anteriores ([81, 82] para valores de D pequenos e [81, 98] para valores altos de D).

Para $D = 0.1$ as correções de escala se mostram ainda mais fortes, e/ou uma menor taxa de convergência com o aumento de L , como notado acima na análise das razões entre os momentos. Nossos resultados para $z = 2.08(15)$ e $\beta/\nu = 0.505(10)$ são consistentes com resultados anteriores para taxas de difusão pequenas [81, 82]. Enquanto isto favorece a idéia de um comportamento não-universal, Ódor [98] afirma que, ao incluir uma correção logarítmica, encontrou o mesmo valor de β/ν_{\parallel} tanto para taxas de difusão altas e baixas.

Estudos anteriores do PCPD sugerem que os valores aparentes dos expoentes críticos variam quando aumentamos o tempo simulacional e o tamanho do sistema, refletindo as grandes correções de escala. Foi sugerido que os resultados simulacionais para os expoentes críticos deveriam ser interpretados como limites superiores dos valores reais [97]. Na nossa opinião, ainda não está claro se as diferenças observadas nos expoentes e razões entre momentos para $D = 0.1$, quando comparadas com taxas de difusão maiores, são devidas a correções de escala. Tais correções deveriam ser excepcionalmente grandes para dar conta das diferenças observadas, e teriam de exibir um comportamento irregular, dada a boa concordância nos resultados para $D = 0.5$ e 0.85 . Uma interpretação talvez mais natural é a de que os expoentes críticos e razões entre momentos de fato dependem de D .

Se mesmo assim aceitarmos que as propriedades críticas do PCPD independem de D (com grandes correções de escala para taxas de difusão pequenas), ainda não é óbvio que essas propriedades são equivalentes àquelas da classe de universalidade PD. Os valores para β/ν_{\perp} e z estão bem longe dos valores de PD, mesmo para as taxas de difusão maiores, onde as correções de escala parecem ser menos severas.

É fato que nossas estimativas para ν_{\perp} (para $D = 0.85$), e para as razões entre os momentos (para ambos $D = 0.5$ e 0.85) são próximas aos valores da classe PD, mas as formas qualitativamente diferentes dos histogramas do parâmetro de ordem novamente não nos permite uma clara identificação do PCPD como um representante da classe de universalidade PD, mesmo para taxas de difusão maiores.

Em resumo, nós aplicamos o método de simulação QE ao processo de contato por pares com difusão, restrito ao subespaço com pelo menos um par. Nossos resultados indicam que o comportamento anômalo das razões entre os momentos do parâmetro de ordem não persiste para sistemas grandes. Restringindo a dinâmica ao setor reativo, essas razões parecem convergir para valores finitos, como esperado. Nossos resultados revelam uma variação das propriedades de escala com a taxa de difusão, mas a interpretação contrária também é possível se considerarmos fortes correções de escala para valores pequenos de D . Independente do expoentes críticos variarem ou não com D , parece prematuro concluir que o PCPD irá sofrer um *crossover* para a classe da percolação dirigida.

7 *Conclusões e Perspectivas*

Podemos dizer que esta tese teve dois enfoques principais dentro do contexto da mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio, em particular dos sistemas com estados absorventes. O primeiro baseia-se no desenvolvimento de novas e eficientes ferramentas simulacionais para o estudo das transições de fase nesses sistemas. Para isso desenvolvemos um novo método para contornar as dificuldades simulacionais que são inerentes ao estudo de sistemas com estados absorventes. Nosso método, descrito no Capítulo 3, e publicado em [102], se mostrou bastante eficiente e foi bem aceito pela comunidade. Diversos trabalhos baseados em nossa abordagem têm sido publicados desde então [52,75,76,102-106]. Como aplicação do método, conseguimos investigar numericamente as propriedades de escala desses sistemas, obtendo resultados com maior precisão e com muito menos custo computacional, e até mesmo em regiões do espaço de fase que até então não eram acessíveis através dos métodos disponíveis (Capítulo 4).

Seguindo nesse enfoque, uma possibilidade que surge é o estudo da meta-estabilidade nos modelos com transição de fase para sistemas absorventes [108, 109, 110] através da formulação quase-estacionária. Nos sistemas finitos, o estado ativo na verdade é um estado meta-estável, que invariavelmente decairá para o estado congelado. Um exemplo interessante e de grande aplicação prática é o fenômeno de catálise heterogênea [18, 68]. Neste caso estudaríamos um aglomerado de sítios e aplicaríamos as condições de quase-estacionariedade a fim de melhor entender o fenômeno de nucleação nesses sistemas finitos.

O outro enfoque dessa tese foi relacionado com o problema da universalidade e da classificação das transições de fase em sistemas com estados absorventes. Neste caso, estudamos um modelo que tem gerado bastante discussões nos últimos anos,

devido ao seu comportamento crítico incomum: o processo de contato por pares com difusão (PCPD) (capítulo 5). Mostramos que a hipótese de transição tipo Percolação Dirigida defendida por alguns trabalhos recentes parece ser precipitada, sugerindo a existência no PCPD de mais algum elemento responsável pelo comportamento crítico do modelo. Também mostramos que o PCPD apresenta um comportamento de escala usual, porém tal comportamento é mascarado por enormes correções de tamanho finito (capítulo 6).

O PCPD apresenta algumas características que parecem ser comuns nos modelos difusivos. Novas direções de investigação incluem variações do “Processo de Epidemia Difusiva”, estudado recentemente por Maia e Dickman [106]. Uma interpretação interessante para um dos casos limites desse modelo é como um modelo para a evolução das doenças priônicas.

Bibliografia

- [1] REICHL, L. E. *A Modern Course in Statistical Physics*. New York: Wiley Interscience, 1998.
- [2] PLISCHKE, M.; BERGESEN, B. *Equilibrium Statistical Physics*. Singapore: World Scientific, 1994.
- [3] BINNEY, J. J. et al. *The Theory of Critical Phenomena - An Introduction to the renormalization group*. Oxford: Oxford University Press, 1992.
- [4] GOLDENFELD, N. *Frontiers in Physics: Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Massachusetts: Addison-Wesley, 1992.
- [5] HINRICHSSEN, H. Nonequilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. *Adv. Phys.*, v. 49, n. 7, p. 815–958, 2000.
- [6] MARRO, J.; DICKMAN, R. *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [7] PRIVMAN (ed.), V. *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [8] ÓDOR, G. Universality classes in nonequilibrium lattice systems. *Rev. Mod. Phys.*, v. 76, n. 3, p. 663–724, 2004.
- [9] HARRIS, T. E. Contact interactions on a lattice. *Ann. Probab.*, v. 2, n. 6, p. 969–988, 1974.
- [10] VAN KAMPEN, N. G. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Amsterdam: North-Holland, 1992.
- [11] STILCK, J.; DICKMAN, R.; VIDIGAL, R. Series expansion for a stochastic sandpile. *J. Phys. A*, v. 37, n. 4, p. 1145–1157, 2004.
- [12] DICKMAN, R.; JENSEN, I. Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 67, n. 17, p. 2391–2394, 1991.
- [13] JENSEN, I.; DICKMAN, R. Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models. *J. Stat. Phys.*, v. 71, n. 1-2, p. 89–127, 1993.

-
- [14] PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes*. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- [15] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [16] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, 2a. ed.* New York: John Wiley and sons, 1985.
- [17] SCHLÖGL, F. Chemical reaction models for nonequilibrium phase-transitions. *Z. Phys.*, v. 334, n. 2, p. 147–, 1972.
- [18] ZIFF, R. M.; GULARI, E.; BARSHAD, Y. Kinetic phase transitions in an irreversible surface-reaction model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 56, n. 24, p. 2553–2556, 1986.
- [19] BARTLETT, M. S. *Stochastic Population Models in Ecology and Epidemiology*. London: Methuen, 1960.
- [20] LEBOWITZ, J.; DERRIDA, B.; SPEER, E. R. Free energy functional for nonequilibrium systems: An exactly solvable case. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, n. 15, p. 150601, 2001.
- [21] HAKEN, H. *Synergetics*. New York: Springer-Verlag, 1983.
- [22] NICOLIS, G.; PRIGOGINE, I. *Self-Organization in Nonequilibrium systems*. New York: Wiley Interscience, 1977.
- [23] SCHMITTIMANN, B.; ZIA, R. K. P. *Statistical Mechanics of Driven diffusive Systems*. London: Academic Press, 1995.
- [24] STANLEY, H. E. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, v. 71, n. 2, p. S358–S366, 1999.
- [25] BRUSH, S. G. History of lenz-ising model. *Rev. Mod. Phys.*, v. 39, n. 4, p. 883, 1967.
- [26] LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical Mechanics*. : Pergamon Press, 1977.
- [27] GRASSBERGER, P.; DE LA TORRE, A. Reggeon field-theory (schlogl 1st model) on a lattice - monte-carlo calculations of critical behavior. *Ann. Phys.*, v. 122, n. 2, p. 373–396, 1979.
- [28] DURRETT, R. *Lecture Notes on Particle Systems and Percolation*. Pacific Grove: Wadsworth Brooks, 1998.

-
- [29] BEN-AVRAHAM, D.; KÖHLER, J. Mean-field (n, m) -cluster approximation for lattice models. *Phys. Rev. A*, v. 45, n. 12, p. 8358–8370, 1992.
- [30] BRONZAN, J. B.; DASH, J. W. Higher-order epsilon-terms in renormalization group approach to reggeon field-theory. *Phys. Lett. B*, v. 51, n. 5, p. 496–498, 1974.
- [31] LIGGETT, T. *Interacting Particle Systems*. Berlin: Springer-Verlag, 1985.
- [32] BEZUIDENHOUT, C.; GRIMMETT, G. The critical contact process dies out. *Ann. Probab.*, v. 18, n. 4, p. 1462–1482, 1990.
- [33] JENSEN, I. Low-density series expansions for directed percolation: I. a new efficient algorithm with applications to the square lattice. *J. Phys. A*, v. 32, n. 28, p. 5233–5249, 1999.
- [34] VOIGT, C. A.; ZIFF, R. M. Epidemic analysis of the second-order transition in the ziff-gulari-barshad surface-reaction model. *Phys. Rev. E*, v. 56, n. 1, p. R6241, 1997.
- [35] JENSEN, I. Critical behavior of the three-dimensional contact process. *Phys. Rev. A*, v. 45, n. 1, p. R563, 1992.
- [36] BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes i. crystals and mazes. *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, v. 53, n. 1, p. 629–641, 1957.
- [37] GRIMMETT, G. *Percolation*. New York: Springer Verlag, 1989.
- [38] STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to Percolation Theory*. London: Taylor & Francis, 1992.
- [39] HINRICHSSEN, H. Non-equilibrium phase transitions. *Physica A*, v. 369, n. 2, p. 1–28, 2006.
- [40] DOMANY, E.; KINZEL, W. Equivalence of cellular automata to ising models and directed percolation. *Phys. Rev. Lett.*, v. 53, n. 4, p. 311–314, 1984.
- [41] JENSEN, I. Critical-behavior of the pair contact process. *Phys. Rev. Lett.*, v. 70, n. 10, p. 1465–1468, 1993.
- [42] HINRICHSSEN, H. On possible experimental realizations of directed percolation. *Braz. J. Phys.*, v. 30, n. 1, p. 69–82, 2000.
- [43] TAKEUCHI, K. A. et al. Directed percolation criticality in turbulent liquid crystals. *arXiv:0706.4151*, ., n. ., p. ., 2007.

-
- [44] ZHONG, D.; AVRAHAM, D. ben. Universality class of two-spring branching annihilation random walks. *Phys. Lett. A*, v. 209, n. 5-6, p. 333–337, 1995.
- [45] ROSSI, M.; PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. Universality class of absorbing phase transitions with a conserved field. *Phys. Rev. Lett.*, v. 85, n. 9, p. 1803–1806, 2000.
- [46] DICKMAN, R. et al. Paths to self-organized criticality. *Braz. J. Phys.*, v. 30, n. 1, p. 27–41, 2000.
- [47] LÜBECK, S. Universal scaling behavior of non-equilibrium phase transitions. *Int. J. Mod. Phys. B*, v. 18, n. 31-32, p. 3977–4118, 2004.
- [48] MANNA, S. Two-state model of self-organized criticality. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 24, n. 1, p. L363, 1991.
- [49] DORNIC, I. et al. Critical coarsening without surface tension: the voter universality class. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, n. 4, p. 5701–5704, 2001.
- [50] BINDER, K. Finite size scaling analysis of Ising-model block distribution-functions. *Z. Phys. B Con. Mat.*, v. 43, n. 2, p. 119–140, 1981.
- [51] DICKMAN, R.; DA SILVA, J. K. L. Moment ratios for absorbing-state phase transitions. *Phys. Rev. E*, v. 58, n. 4, p. 4266–4270, 1998.
- [52] DICKMAN, R. Critical exponents for the restricted sandpile. *Phys. Rev. E*, v. 73, n. 3, p. 036131, 2006.
- [53] DA SILVA, J. K. L.; DICKMAN, R. Pair contact process in two dimensions. *Phys. Rev. E*, v. 60, n. 5, p. 5126–5129, 1999.
- [54] LEITE, V. S.; HOENICKE, G. L.; FIGUEIREDO, W. Higher-order moments at the critical point of the ziff-gulari-barshad model. *Phys. Rev. E*, v. 64, n. 3, p. 036104, 2001.
- [55] GARDINER, C. W. *Handbook of Stochastic Methods*. Berlin: Springer, 1990.
- [56] TOMÉ, T.; DE OLIVEIRA, M. J. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. São Paulo: EdUSP, 2001.
- [57] DICKMAN, A. G.; DICKMAN, R.; BARBOSA, F. A. Transições de fase sem termodinâmica. *Rev. Bras. Ens. Física*, v. 28, n. 1, p. 23–33, 2006.
- [58] FERRARI, P. A.; KESTEN, H.; MARTÍNEZ, A. Existence of quasi-stationary distributions - a renewal dynamical approach. *Ann. Prob.*, v. 23, n. 2, p. 501–521, 1995.

-
- [59] YAGLOM, A. M. Certain limit theorems of the theory of branching processes. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, v. 56, n. 1, p. 795–798, 1947.
- [60] DARROCH, J. N.; SENETA, E. On quasi-stationary distributions in absorbing continuous-time finite Markov chains. *J. Appl. Probab.*, v. 4, n. 1, p. 192–, 1967.
- [61] SENETA, E. Quasi-stationary distributions and time-reversion in genetics. *J. Roy. Stat. Soc., SerB*, v. 28, n. 2, p. 253–277, 1966.
- [62] NÅSELL, I. Extinction and quasi-stationarity in the Verhulst logistic model. *J. Theor. Biol.*, v. 211, n. 11, p. 11–27, 2001.
- [63] POLLETT, P. K. Modelling quasi-stationary behaviour in metapopulations. *Math. Comput. Simulat.*, v. 48, n. 46, p. 393–405, 1999.
- [64] ZIEDINS, I. B. Quasi-stationary distributions and one-dimensional circuit-switched networks. *J. Appl. Probab.*, v. 24, n. 4, p. 965–977, 1987.
- [65] POLLETT, P. K. On the problem of evaluating quasistationary distributions for open reaction schemes. *J. Stat. Phys.*, v. 53, n. 5-6, p. 1207–1215, 1987.
- [66] DICKMAN, R.; VIDIGAL, R. Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 35, n. 5, p. 1145–1164, 2002.
- [67] ATMAN, A. F. P.; DICKMAN, R. Quasi-stationary distributions for the Domany-Kinzel stochastic cellular automaton. *Phys. Rev. E*, v. 66, n. 4, p. 046135, 2002.
- [68] DE OLIVEIRA, M. M.; DICKMAN, R. Quasi-stationary distributions for models of heteroneous catalysis. *Physica A*, v. 343, n. 1, p. 525–542, 2004.
- [69] ZIFF, R. M.; BROSILOW, B. J. Investigation of first-order phase transition in the $A - B_2$ reaction model using a constant-coverage kinetic ensemble. *Phys. Rev. A*, v. 46, n. 8, p. 4630–4633, 1992.
- [70] TOMÉ, T.; DE OLIVEIRA, M. J. Nonequilibrium model for the contact process in an ensemble of constant particle number. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, n. 25, p. 5643–5646, 2001.
- [71] DE OLIVEIRA, M. J. Equivalence of ensembles in creation-annihilation nonequilibrium models. *Phys. Rev. E*, v. 67, n. 2, p. 027104, 2003.
- [72] GRASSBERGER, P. Go with the winners: a general monte carlo strategy. *Comp. Phys. Comm.*, v. 147, n. 1, p. 64–70, 2002.

- [73] DICKMAN, R.; TOMÉ, T.; DE OLIVEIRA, M. J. Sandpiles with height restrictions. *Phys. Rev. E*, v. 66, n. 1, p. 016111, 2002.
- [74] LÜBECK, S.; HEGER, P. C. Universal finite-size scaling behavior and universal dynamical scaling behavior of absorbing phase transitions with a conserved field. *Phys. Rev. E*, v. 68, n. 5, p. 056102, 2003.
- [75] DICKMAN, R.; DE OLIVEIRA, M. M. Quasi-stationary simulation of the contact process. *Physica A*, v. 357, n. 1, p. 134–141, 2005.
- [76] DE OLIVEIRA, M. M.; DICKMAN, R. Quasi-stationary simulation: the subcritical contact process. *Braz. J. Phys.*, v. 3A, n. 36, p. 685–689, 2006.
- [77] TOMÉ, T.; DE OLIVEIRA, M. J. Stationary distribution of finite-size systems with absorbing states. *Phys. Rev. E*, v. 72, n. 2, p. 026130, 2005.
- [78] E. CARLON, M. H.; SCHOLLWOCK, U. Critical properties of the reaction-diffusion model $2A \rightarrow 3A$, $2A \rightarrow 0$. *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 2, p. 036101, 2001.
- [79] LÜBECK, S.; WILLMANN, R. D. Universal scaling behaviour of directed percolation and the pair-contact process in an external field. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 35, n. 48, p. 10205–10217, 2002.
- [80] HENKEL, M.; HINRICHSSEN, H. The non-equilibrium phase transition of the pair-contact process with diffusion. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 37, n. 28, p. R117–R159, 2004.
- [81] DICKMAN, R.; DE MENEZES, M. A. F. Nonuniversality in the pair contact process with diffusion. *Phys. Rev. E*, v. 66, n. 4, p. 045101(R), 2002.
- [82] NOH, J.; PARK, H. Universality class of absorbing transitions with continuously varying critical exponents. *Phys. Rev. E*, v. 69, n. 1, p. 016122, 2004.
- [83] ÓDOR, G.; MARQUES, M. C.; SANTOS, M. A. Phase transition of a two-dimensional binary spreading model. *Phys. Rev. E*, v. 65, n. 5, p. 056113, 2002.
- [84] GRASSBERGER, P. On phase-transitions in schlogl 2nd model. *Z. Phys. B*, v. 47, n. 4, p. 365–374, 1982.
- [85] HOWARD, M. J.; TAUBER, U. C. Real versus imaginary noise in diffusion-limited reactions. *J. Phys. A*, v. 30, n. 22, p. 7721–7731, 1997.
- [86] PAESSENS, M.; SCHUTZ, G. M. Phase transitions and correlations in the bosonic pair-contact process with diffusion: exact results. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 37, n. 17, p. 4709–4722, 2004.

- [87] WHITE, S. R. Density-matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, n. 19, p. 2863–2866, 1992.
- [88] SCHOLLWOCK, U. Density-matrix renormalization group. *Rev. Mod. Phys.*, v. 77, n. 1, p. 259–315, 2005.
- [89] HINRICHSSEN, H. Pair contact process with diffusion: A new type of nonequilibrium critical behavior? *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 3, p. 036102, 2001.
- [90] ÓDOR, G. Critical behavior of the one-dimensional annihilation-fission process $2A \rightarrow O$, $2A \rightarrow 3A$. *Phys. Rev. E*, v. 62, n. 3, p. R3027–R3030, 2000.
- [91] KOCKELKOREN, J.; CHATÉ, H. Absorbing phase transitions of branching-annihilating random walks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, n. 12, p. 125701, 2003.
- [92] BARKEMA, G. T.; CARLON, E. Universality in the pair-contact process with diffusion. *Phys. Rev. E*, v. 68, n. 3, p. 036113, 2003.
- [93] PARK, S. C.; PARK, H. Driven pair contact process with diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, n. 6, p. 065701, 2005.
- [94] SCHUTZ, G. M. Phase transitions and critical phenomena. In: _____. london: Academic Press, 2000. cap. 19, p. 1.
- [95] PARK, S. C.; PARK, H. Crossover from the pair contact process with diffusion to directed percolation. *Phys. Rev. E*, v. 73, n. 2, p. 025105(R), 2006.
- [96] ÓDOR, G. Phase transition of the one-dimensional coagulationproduction process. *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 6, p. 067104, 2001.
- [97] HINRICHSSEN, H. The phase transition of the diffusive pair contact process revisited. *Physica A*, v. 361, n. 2, p. 457–462, 2006.
- [98] ÓDOR, G. Critical behavior of the one-dimensional diffusive pair contact process. *Phys. Rev. E*, v. 67, n. 1, p. 016111, 2003.
- [99] PARK, K.; KIM, I. M. Well-defined set of exponents for a pair-contact process with diffusion. *Phys. Rev. E*, v. 66, n. 2, p. 027106, 2002.
- [100] HINRICHSSEN, H. Stochastic cellular automaton for the coagulation-fission process $2A \rightarrow 3A$, $2A \rightarrow A$. *Physica A*, v. 320, n. 1, p. 249–260, 2003.
- [101] TOUSSAINT, D.; WILCSEK, F. Particle-antiparticle annihilation in diffusive motion. *J. Chem. Phys.*, v. 78, n. 5, p. 2642–2647, 1983.

-
- [102] DE OLIVEIRA, M. M.; DICKMAN, R. How to simulate the quasistationary state. *Phys. Rev. E*, v. 71, n. 2, p. 016129, 2005.
- [103] DE OLIVEIRA, M. M.; DICKMAN, R. Moment ratios for the pair-contact process with diffusion. *Phys. Rev. E*, v. 74, n. 2, p. 052608, 2006.
- [104] DANTAS, W. G.; STILCK, J. F. Generalized manna sandpile model with height restrictions. *Braz. J. Phys.*, v. 36, n. 3A, p. 750–754, 2006.
- [105] GINELLI, F. et al. Contact processes with long-range interactions. *J. Stat. Mech.*, ., n. ., p. P08008, 2006.
- [106] MAIA, D. S.; DICKMAN, R. Diffusive epidemic process: theory and simulation. *J. Phys: Cond. Matt.*, v. 19, n. 6, p. 065143, 2007.
- [107] PRUESSNER, G. Unconventional finite size scaling in the directed percolation universality class. *arXiv:0706.1144*, ., n. ., p. ., 2007.
- [108] SCHONMANN, R. H. Metastability for the contact process. *J. Stat. Phys.*, v. 3-4, n. 41, p. 445–464, 1985.
- [109] AIZENMAN, M.; LEBOWITZ, J. Metastability effects in bootstrap percolation. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 21, n. 19, p. 3801–3813, 1988.
- [110] DEROUILLERS, C.; MONASSON, R. Field-theoretic approach to metastability in the contact process. *Phys. Rev. E*, v. 69, n. 1, p. 016126, 2004.

APÊNDICE A – Obtenção dos momentos e cumulantes a partir da função geratriz de uma distribuição

Uma distribuição de probabilidades pode ser caracterizada pelo conjunto de seus momentos. Dada a densidade de probabilidades $p(x)$ de uma variável aleatória contínua x , os momentos de ordem n da distribuição são definidos por

$$m_n \equiv \langle \rho^n \rangle = \int_{\Omega} x^n p(x) dx, \quad (\text{A.1})$$

onde Ω representa o espaço amostral da distribuição. Da definição acima observa-se que o primeiro momento m_1 é simplesmente a média da variável x .

A função geradora dos momentos, ou função geratriz $g(k)$ é definida através da transformada de Fourier da densidade de probabilidades:

$$g(k) = \int_{\Omega} p(x) e^{ikx} dx = \langle e^{ikx} \rangle. \quad (\text{A.2})$$

A expansão da expressão acima em séries de Taylor, fornece

$$g(k) = \int_{\Omega} p(x) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} x^m dx$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \int_{\Omega} p(x)x^m dx \\
 &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} m^m.
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Observe que os coeficientes da expansão de Taylor nos fornecem os momentos.

A função geradora $g(k)$ também é utilizada para gerar os cumulantes K_n da distribuição, definidos a partir de

$$\ln g(k) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} K_m. \tag{A.4}$$

Tomando o logaritmo da expressão (A.3) e igualando com (A.4), obtemos

$$\ln \left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} m^m \right) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} K_m. \tag{A.5}$$

Desenvolvendo as somas em séries de Taylor, e chamando $ik = t$, temos:

$$\begin{aligned}
 &\frac{tm_1}{1!} + \frac{t^2m_2}{2!} + \frac{t^3m_3}{3!} + \frac{t^4m_4}{4!} + \dots - \frac{1}{2} \left(\frac{tm_1}{1!} + \frac{t^2m_2}{2!} + \frac{t^3m_3}{3!} + \dots \right)^2 \\
 &+ \frac{1}{3} \left(\frac{tm_1}{1!} + \frac{t^2m_2}{2!} + \dots \right)^3 - \frac{1}{4} \left(\frac{tm_1}{1!} + \dots \right)^4 = \frac{tm_1}{1!} + \frac{t^2m_2}{2!} + \frac{t^3m_3}{3!} + \frac{t^4m_4}{4!} + \dots.
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Comparando os dois lados da igualdade, obtemos as relações entre os cumulantes e os momentos:

$$K_1 = m_1, \tag{A.7}$$

$$K_2 = m_2 - m_1^2, \tag{A.8}$$

$$K_3 = m_3 - 3m_2m_1 + 2m_1^3, \tag{A.9}$$

$$K_4 = m_4 - 4m_3m_1 - 3m_2^2 + 12m_2m_1^2 - 6m_1^4, \tag{A.10}$$

e em geral, os cumulantes estão relacionados aos momentos pela seguinte expressão:

$$K_n = m_n - \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n-1}{k-1} K_k m_{n-k}. \tag{A.11}$$

APÊNDICE B – Exemplo de código

Neste apêndice apresentamos um exemplo da aplicação do método de simulação QE ao processo de contato. Esta versão do código está em linguagem FORTRAN, e foi testado em PCs rodando Linux (compilador g77) e estações DEC-Alpha (compiladores f77 e f90).

O exemplo está em uma forma enxuta, gerando apenas a distribuição QE propriamente dita, de forma a facilitar a compreensão. Alterações simples podem, por exemplo, fornecer o diagrama de fases ou os momentos. O algoritmo é explicado detalhadamente no Capítulo 3 da tese.

.

.

.

.

.

.