

**Caminhantes aleatórios sonolentos:
Análise exata em sistemas pequenos e
simulações de Monte Carlo**

Júlio César Mansur Filho

JÚLIO CÉSAR MANSUR FILHO

**Caminhantes aleatórios sonolentos:
Análise exata em sistemas pequenos e
simulações de Monte Carlo**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Área de Concentração: FÍSICA

Orientador: Prof. Dr. Ronald Dickman (Física/UFMG)

Departamento de Física - ICEX - UFMG

BELO HORIZONTE

MINAS GERAIS - BRASIL

2012

À minha família.

AGRADECIMENTOS

A Deus por me dar saúde.

A minha família, por sempre estar ao meu lado e por fazer minha vida mais feliz.

Ao professor Ronald Dickman, pela orientação e pela amizade durante todos os anos de convivência.

Aos professores Marcelo Lobato e Sílvia Ferreira pelo incentivo a esse mundo fascinante das transições de fase.

A todos os amigos, funcionários e professores por fazerem minha história mais alegre e divertida.

A Tatiana, amor da minha vida, por compartilhar sua vida comigo.

Ao Antonio Netto (o grandão), por ser mais que um amigo.

A FAPEMIG, CAPES e ao CNPQ pelo suporte financeiro.

Sumário

1	Introdução	1
2	Transições de fase, teoria de escala e universalidade	5
3	Transições de fase fora do equilíbrio e sistemas com estados absorventes	18
3.1	Processos estocásticos.	19
3.2	Processo de Contato e estados absorventes.	23
3.3	Comportamento do sistema no estado quase-estacionário.	27
4	Modelo de caminhantes aleatórios sonolentos	35
4.1	Modelo proposto - SRW	37
4.2	Análise de campo médio	39
5	Solução exata de sistemas pequenos	43
5.1	Configurações e transições	45
5.2	Resultados	47
5.2.1	Propriedades críticas	47
6	Simulações de Monte Carlo	62
6.1	Resultados	66

6.1.1	Comportamento dos observáveis no ponto crítico.	69
6.1.2	Comportamento das funções de escala nas proximidades do ponto crítico.	76
6.1.2.1	Regime ativo	79
6.1.2.2	Regime inativo	82
6.1.3	Simulações convencionais	85
6.2	Comparação entre os resultados da Análise Exata e da Simulação de Monte Carlo.	88
7	Discussão	90
A	Relações entre expoentes críticos	94
B	Análise de campo médio para o SRW	99
C	Enumeração das configurações e taxas em uma rede de $L = 6$ sítios	103

Lista de Figuras

2.1	Densidade de magnetização obtida através de teoria de campo médio para sistemas ferromagnéticos.	7
2.2	Diagrama de fases da água em função da temperatura e pressão	9
2.3	Ilustração gráfica dos expoentes críticos β , γ e δ , obtidos através de sistemas magnéticos	11
2.4	Ilustração do comprimento de correlação ξ no limite $T \rightarrow T_c$	13
2.5	Magnetização escalada versus temperatura escalada.	15
2.6	Ilustração do modelo de Potts e n -vetor	17
3.1	Formações de padrões fora do equilíbrio.	21
3.2	Taxas de infecção e recuperação do modelo processo de contato	26
3.3	Comportamento da densidade estacionária do processo de contato através de análise de campo médio.	27
3.4	Ilustração das correlações espacial e temporal	29
4.1	Ilustração unidimensional dos modelos em rede CLG e pilha de areia.	36
4.2	Solução estacionária obtida por aproximação de aglomerados para o modelo SRW.	41

5.1	Erro ε em função do parâmetro de ajuste ω para a função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$	51
5.2	Estimativas BST em função do parâmetro de ajuste ω para a função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$	52
5.3	Estimativas BST em função do parâmetro de ajuste ω para a função $g(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2} + 2(1/L)^{3/4}$	53
5.4	Análise para expoente finito.	54
5.5	Cruzamentos das quantidades R_L , S_L e das razões m_{211} , m_{3111} e $m_{-1}m$	56
5.6	Estimativa para o expoente β	57
5.7	Estimativas para λ_c	57
5.8	Kurtosis q em função de λ	60
5.9	Variância escalada χ em função de λ	60
6.1	Esboço do algoritmo de MC para o modelo SRW.	64
6.2	Padrões espaço-temporais para o SRW.	65
6.3	Padrão espaço-temporal para o SRW usando algoritmo de simulação QS.	67
6.4	Densidade de ativos ρ_a em função do tempo de MC.	68
6.5	Estimativa do ponto crítico através dos cruzamentos de m_{211}	69
6.6	Parâmetro de ordem ρ versus o tamanho do sistema L	70
6.7	Tempo de vida QS τ_h versus o tamanho do sistema L	71
6.8	Variância reescalada χ versus o tamanho do sistema L	72
6.9	Análise de ν_{\perp} por meio de simulações de MC.	73
6.10	Distribuição de probabilidade no ponto crítico (MC).	74
6.11	Razões entre momentos no ponto crítico.	75

6.12 Exemplo da análise do “melhor” expoente que determina o colapso das curvas.	77
6.13 Densidade QS em função do tempo para diferentes valores de Δ no regime ativo.	78
6.14 Análise do colapso do parâmetro de ordem.	80
6.15 Análise do colapso do parâmetro de ordem no regime ativo.	81
6.16 Análise do colapso da variância reescalada do parâmetro de ordem.	82
6.17 Colapsos das curvas de ρ , χ e τ fora do ponto crítico	84
6.18 Densidade de partículas ativas ρ_a em função do tempo t	86
6.19 Análise do colapso de $m_{211}(t)$	88
6.20 Densidade QS obtida através de simulações convencionais.	88
7.1 Comparação entre os regimes de escala dos modelos SRW e pilha de areia restrita.	92
C.1 Configurações espaciais para uma rede de $L = 6$ sítios.	104
C.2 Configurações espaciais com partículas ativas e inativas.	105
C.3 Todas as configurações enumeradas para uma rede de $L = 6$ sítios.	106
C.4 Configurações antecedentes à configuração $k = 7$ e $k = 12$	108
C.5 Transições antecedentes às configuração $k = 1 - 9$	111
C.6 Transições antecedentes às configuração $k = 10 - 18$	112

Lista de Tabelas

2.1	Definições dos expoentes críticos.	12
2.2	Expoentes críticos para o modelo n -vetor.	17
4.1	Tabela de transições para o modelo SRW.	40
5.1	Número de configurações e transições para cada tamanho de rede analisado na análise exata com o respectivo tempo de CPU gasto.	48
5.2	Estimativas BST para a função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$	50
5.3	Estimativas para o ponto crítico λ_c obtidas via análise da distribuição de probabilidade QS.	59
5.4	Estimativas das propriedades críticas obtidas via análise da distribuição de probabilidade QS usando extrapolações via BST e ajustes polinomiais.	59
6.1	Estimativas para os expoentes característicos.	72
6.2	Valores estimados para ν_{\perp} a partir da análise das derivadas de m_{211} , $\ln \rho$, $\ln \tau$	73
6.3	Razão entre momentos m_{211} , m_{3111} , q e $m_{-1}m$ obtidos via simulações de MC.	76
6.4	Expoentes característicos encontrados através do comportamento do sis- tema fora do ponto crítico.	83

6.5	Comparação das propriedades críticas do modelo SRW encontradas via análise exata de sistemas pequenos (QSA) e simulações de Monte Carlo (MC).	89
C.1	Equivalência entre configurações de ocupação em uma rede de $L = 6$ sítios.	104
C.2	Equivalência entre configurações contendo partículas ativas e inativas em uma rede de $L = 6$ sítios.	105
C.3	Fluxo de probabilidade e taxas envolvidas em uma rede de $L = 6$ sítios.	110
C.4	Síntese das transições das figuras C.5 e C.6.	113
C.5	Síntese dos dados necessários para iterar a a distribuição quase estacionária.	114

Resumo

Neste trabalho estudamos caminhantes aleatórios sonolentos, um modelo que exibe uma transição de fase para estados absorventes, pertencente à classe de universalidade da percolação direcionada conservada (CDP). Diferentemente da maioria dos modelos pertencentes a essa classe, este modelo possui um parâmetro de controle contínuo, facilitando a análise das propriedades críticas. Estudamos o modelo usando duas abordagens: através de uma análise numericamente exata da distribuição de probabilidade quase-estacionária (QS) em anéis de até 22 sítios e simulações de Monte Carlo em sistemas de até 32 000 sítios. As estimativas encontradas para os expoentes críticos β , β/ν_{\perp} , e z , e a razão entre momentos $m_{211} = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$ (ρ é a densidade de sítios ativos), baseados na análise de tamanho finito no ponto crítico, concordam com os resultados já encontrados por modelos pertencentes a classe CDP. Entretanto, encontramos que a aproximação ao estado QS é caracterizado por um expoente dinâmico z diferente daquele encontrado no estado QS.

Abstract

In this work we study symmetric sleepy random walkers, a model exhibiting an absorbing-state phase transition in the conserved directed percolation (CDP) universality class. Unlike most examples of this class studied previously, this model possesses a continuously variable control parameter, facilitating analysis of critical properties. We study the model using two complementary approaches: analysis of the numerically exact quasistationary (QS) probability distribution on rings of up to 22 sites, and Monte Carlo simulation of systems of up to 32000 sites. The resulting estimates for critical exponents β , β/ν_{\perp} , and z , and the moment ratio $m_{211} = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$ (ρ is the activity density), based on finite-size scaling at the critical point, are in agreement with previous results for the CDP universality class. We find, however, that the approach to the QS regime is characterized by a different value of the dynamic exponent z than found in the QS regime.

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos fora do equilíbrio atraíram muito interesse nas últimas décadas. Com as mesmas características de fenômenos críticos no equilíbrio, o conceito de classe de universalidade permanece sendo a idéia chave para organizar sistematicamente a grande variedade de transições de fase fora do equilíbrio. Sistemas pertencentes a uma mesma classe de universalidade compartilham dos mesmos expoentes críticos e as funções de escala próximas ao ponto crítico tornam-se idênticas. A origem do conceito de universalidade, vindo da mecânica estatística do equilíbrio, está diretamente relacionada com as correlações de longo alcance entre as flutuações do parâmetro de ordem. Próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação torna-se muito maior que o alcance das interações moleculares, fazendo com que os detalhes microscópicos das interações deixem de ser relevantes. Em contraste com os fenômenos de equilíbrio, onde o conceito de universalidade é bem estabelecido e os sistemas podem ser estudados através da energia livre, ainda não existe um tratamento generalizado no caso dos fenômenos fora do equilíbrio, fazendo com que sistemas desse tipo devam ser estudados individualmente. Em geral, sistemas fora do equilíbrio são estudados usando-se dois tipos de abordagens: equações diferenciais par-

ciais estocásticas e modelos de rede com unidades interagentes. Se ignoramos flutuações e variações espaciais, temos uma descrição do tipo campo médio, o que pode dar uma noção preliminar do diagrama de fase do modelo. Uma vez que não é possível tratar alguns sistemas analiticamente, os modelos de rede com partículas interagentes são usados para a obtenção de resultados quantitativos através de simulações numéricas e análise por expansão em série.

Algumas classes de universalidade têm se destacado entre os modelos que exibem transições de fase para estados absorventes. Entre elas podemos citar a percolação direcionada (directed percolation - **DP**), a percolação direcionada conservada (conserved directed percolation - **CDP**) e a paridade conservada (parity conserved - **PC**). A primeira delas é considerada um paradigma para esses sistemas. Esse conceito pode ser visto na hipótese de universalidade de Janssen e Grassberger, segundo o qual modelos que exibem uma transição de fase contínua para um único estado absorvente pertencem genericamente à classe de universalidade da percolação direcionada [2,3]. Consequentemente modelos que apresentassem simetrias adicionais poderiam pertencer à uma nova classe. A classe DP é geralmente representada pelo modelo de propagação de doenças conhecido por processo de contato (contact process - CP). Já a classe de universalidade CDP difere da DP por apresentar um campo conservado, geralmente representado pela conservação de partículas no sistema. Essa classe é bem representada pelos modelos de pilhas de areia conservada (conserved Manna model). Apesar de haver estudos intensivos nos modelos de ambas as classes, o comportamento crítico de tais sistemas ainda não é bem determinado na classe CDP. De fato, existem sugestões de violações de escala, bem como pouca precisão nos expoentes críticos característicos. Por último, modelos pertencentes à classe PC são bem representados pela classe de modelos “branching and annihilating random walks”

(**BARWs**). Na linguagem de sistemas de reação-difusão, BARWs descrevem a dinâmica estocástica de uma única espécie de partículas A , sujeitas a três processos básicos: difusão a uma taxa D , reação de aniquilação $A + A \rightarrow 0$ (- ocorre quando as partículas são vizinhas ou ocupam o mesmo sítio) a uma taxa r_1 e processo de ramificação $A \rightarrow (1 + m)A$ (sendo m um número inteiro positivo e par) a uma taxa r_2 [4].

É importante dizer que ainda não existe uma classificação completa para as classes de universalidade. Além disso, várias formas de se classificar um sistema são discutidos na literatura e as hipóteses de universalidade são checadas modelo por modelo. Apesar de muitos trabalhos focarem somente na determinação dos expoentes críticos, as funções de escala devem ser testadas, uma vez que podem variar mais significativamente de uma classe para a outra. Como veremos, essas funções podem ser definidas em termos do estado estacionário, da dinâmica do modelo, assim como em função do tamanho do sistema. O último tipo de análise é mais conhecido como análise de tamanho finito (Finite Size Scaling - FSS).

Nesta tese vamos definir e estudar extensivamente uma variação do modelo de caminhantes aleatórios ativados (Activated Random Walkers - **ARW**) cujo nome será caminhantes aleatórios sonolentos (sleepy random walkers - **SRW**). Recentemente proposto por Dickman e coautores [5], o ARW mostrou-se pertencer à classe de universalidade CDP e tem como vantagem, quando comparado aos modelos da mesma classe, a existência de um parâmetro de controle contínuo ¹. A diferença entre o modelo original e o modelo proposto é que no ARW múltipla ocupação por sítio é permitida, enquanto que no SRW não.

¹Até então, o parâmetro de controle dos modelos pertencentes à classe CDP dependiam do tamanho L da rede, podendo variar apenas em incrementos de $1/L$.

Este texto segue a seguinte ordem: no capítulo II, vamos apresentar uma idéia clara de universalidade e teoria de escala, baseado nas idéias básicas de fenômenos de equilíbrio; apresentar o conceito de expoentes críticos, funções homogêneas generalizadas e formas de escala.

No capítulo III, vamos introduzir a definição de fenômenos fora do equilíbrio e apresentar uma classe particular desses sistemas, chamada de transições de fase para estados absorventes, bem como o comportamento dinâmico e estático das quantidades de interesse, levando ao leitor uma idéia qualitativa sobre esse tipo de transição.

No capítulo IV, faremos uma breve introdução do modelo de caminhantes aleatórios ativados e em seguida definiremos o modelo de caminhantes aleatórios sonolentos. De forma a analisar qualitativamente o comportamento do SRW, um breve estudo de campo médio será feito, abordando qualitativamente como ocorre a transição de fase, bem como a existência de um ponto crítico.

No capítulo V, apresentaremos a recente abordagem de análise exata envolvendo sistemas de tamanhos pequenos, capaz de reproduzir expoentes muito próximos dos obtidos por meio de simulações do estado quase estacionário para modelos pertencentes à classe DP. Neste capítulo, estudaremos como o modelo SRW se comporta a esse tipo de análise, apresentando uma discussão detalhada do algoritmo para a obtenção dos resultados. No capítulo VI simulações de Monte Carlo do estado QS para sistemas de tamanho até $L = 32000$ serão apresentadas. No capítulo VII apresentamos uma discussão e conclusão sobre os métodos utilizados. Para as análises desta tese, considere as seguintes notações matemáticas:

$$\begin{aligned} \text{Proporcional:} & \quad f(x) \propto g(x) \iff \frac{f(x)}{g(x)} = c \quad \forall x \\ \text{Assintoticamente proporcional:} & \quad f(x) \sim g(x) \iff \lim_{x \rightarrow x_b} \frac{f(x)}{g(x)} = c \end{aligned}$$

Capítulo 2

Transições de fase, teoria de escala e universalidade

Para introduzir o significado de fenômenos de crítico, vamos consirar o caso de um imã com magnetização M . A medida que o aquecemos, M diminui até ser nulo em uma certa temperatura crítica T_c . Essa aproximação de M para zero em T_c ocorre de forma bastante acentuada, possuindo inclinação infinita. Tal comportamento singular exibido por M é um exemplo de fenômeno crítico. Outras quantidades também podem caracterizar um fenômeno crítico, como por exemplo, o calor específico e a susceptibilidade, que também tornam-se infinitas em T_c nas transições ferromagnética e líquido-gás. O objetivo deste capítulo é o de guiar o leitor ao desenvolvimento da teoria que permite o estudo dessa singularidade, manifestada pela natureza em condições apropriadas.

Um dos fenômenos mais comuns do dia a dia é a transição entre os estados termodinâmicos da água. Presenciamos tal fenômeno em exemplos simples do cotidiano, como ao ferver a água para fazermos um café ou até mesmo quando esfriamos um suco com cubos de gelo. Nessas circunstâncias observamos a passagem da água (H_2O) do estado

líquido para o gasoso e do sólido para o líquido, respectivamente. A solidificação de metais para a criação de dispositivos em escalas variadas, a evaporação e a condensação da amônia em refrigeradores, o surgimento de supercondutividade a partir de materiais resfriados à baixa temperatura e a mudança entre as fases ferromagnética e paramagnética de materiais magnéticos são apenas poucos exemplos de transições de fase [6]. Além das fases mais conhecidas que acabamos de citar, muitos cientistas têm estudado e reconhecido fases comuns aos materiais a partir de superfluidos ¹, materiais magnéticos, de cristais líquidos ², dentre outros [6]; em geral, as diferentes fases de um determinado material são diferenciadas pelo arranjo entre as moléculas que o compõe. Na natureza podemos classificar as transições de fase como sendo contínuas ou descontínuas, como veremos a seguir.

As transições de primeira ordem, também conhecidas como transições descontínuas, envolvem uma descontinuidade em uma primeira derivada da energia livre em questão. Por exemplo, quando fervemos a água, essa descontinuidade é observada quando olhamos para a densidade em função da temperatura e pressão. Na curva de sublimação da água, a densidade passa descontinuamente da densidade típica do sólido para uma densidade cerca de 1000 vezes menor, típica do gás. Outro exemplo de transição de fase de primeira ordem pode ser visto em sistemas magnéticos. Em um ímã, por exemplo, a direção da magnetização pode mudar repentinamente, tal que o vetor densidade de magnetização mudará de forma descontínua. Esse comportamento pode ser observado na fig. 2.1(a), onde a magnetização de um material ferromagnético sofre uma descontinuidade

¹Superfluidos são caracterizados por possuírem viscosidade próxima de zero e condutividade térmica elevada

²Cristais líquidos apresentam simultaneamente características físicas do líquido e de cristais, como por exemplo, viscosidade e fenômenos de refração como birrefringência

quando o campo externo H passa de valores positivos para negativos, ou vice-versa, para temperaturas menores que T_c . Em geral, quando uma transição de fase (descontínua) está para ocorrer, deve ser verdade que fases termodinamicamente diferentes coexistam sobre as mesmas condições externas. No caso da água, por exemplo, temos a coexistência de água líquida e gasosa à pressão de 1 atm e a 100°C . No caso de um sistema ferromagnético as fases teriam a mesma densidade de magnetização, diferindo apenas por um sinal, como mostrado na figura 2.1(b).

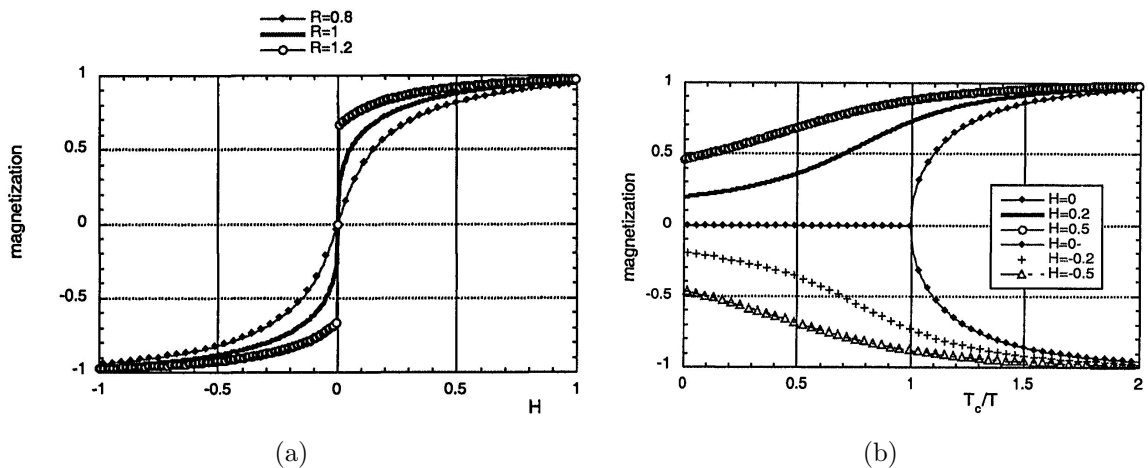


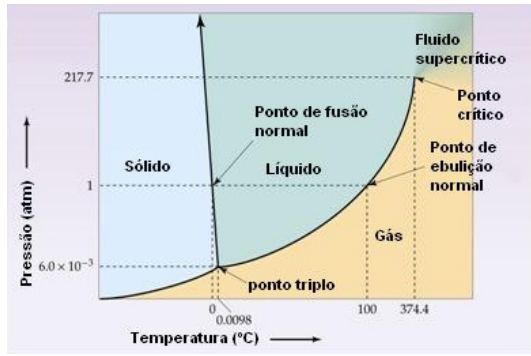
Figura 2.1: Densidade de magnetização obtida através de teoria de campo médio para o comportamento de sistemas ferromagnéticos. (a) Magnetização plotada como uma função do campo magnético. As curvas são plotadas para três valores de $R = T_c/T$. Note que para $T > T_c$ a curva é suave, enquanto que para $T < T_c$ o sistema apresenta uma descontinuidade para campo nulo. Para $T = T_c$, a descontinuidade desaparece e é trocada por uma inclinação infinita na magnetização versus a curva de campo. (b) Magnetização em função da razão R entre a temperatura crítica e a temperatura à qual o sistema está submetido para diferentes valores do campo magnético. Note o salto na magnetização para temperaturas abaixo da temperatura crítica para campo nulo. (exemplo retirado de [7])

Nos dois exemplos acima citados, à medida que aumentamos a temperatura a descontinuidade torna-se menor. No caso do fluido, a densidade de vapor se aproxima da densidade do líquido. No caso do sistema ferromagnético, o valor absoluto da mag-

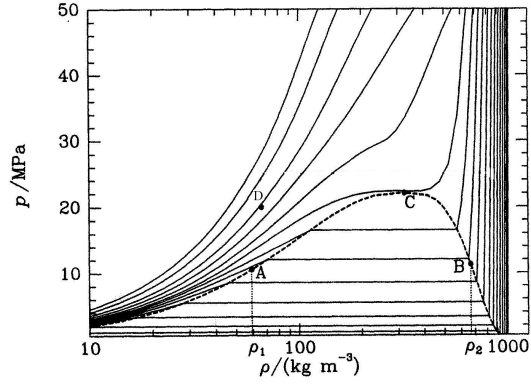
netização tende a zero. Em ambos os casos, em alguma temperatura crítica, T_c , essa descontinuidade se anula, e a transição de fase muda seu caráter. Nesse ponto especial, diz-se que existe uma transição de fase de segunda ordem ou uma transição de fase contínua.

No desenvolvimento de uma teoria quantitativa de transições de fase contínuas, o primeiro passo que se deve tomar é identificar uma quantidade chamada de parâmetro de ordem (por agora vamos guardar a variável ϕ para representar essa quantidade), cuja média térmica se anula de um lado da transição (geralmente do lado de temperaturas mais elevadas) e move-se para valores diferentes de zero a medida que caminhamos no sentido oposto [6]. Por sua vez, ϕ deve ser definido como uma quantidade que flutua no tempo e espaço, permitindo interpretar os fenômenos de transição em termos de flutuações em $\phi(\mathbf{x}, t)$. Contudo, como veremos a seguir, a quantidade de interesse é a média térmica de ϕ , isto é, uma média sobre os valores de ϕ tomado sobre um longo período de equilíbrio a uma temperatura constante. Como exemplos de definições de parâmetro de ordem, vamos usar as transições Líquido-Gás e Ferromagnético-Paramagnético como ilustração.

Para a transição líquido-gás, devemos notar que, a medida que nos aproximamos de T_c a partir de baixas temperaturas, a densidade das fases líquidas e vapor convergem para um valor comum, levando à escolha do parâmetro de ordem como $\phi(\mathbf{x}) \equiv \rho(\mathbf{x}) - \rho_{gas}(\mathbf{x})$. Nesse exemplo, $\rho(\mathbf{x})$ é considerado uma densidade média de moléculas contida em um volume V centrado em x , onde V deve ser considerado pequeno em relação ao aparato experimental, mas grande o suficiente para conter muitas moléculas. Já ρ_{gas} é a densidade de gás para a temperatura e pressão (média temporal) dominantes em \mathbf{x} . Para ilustrar esse conceito, considere o ponto D mostrado na figura 2.2(b). Nesse ponto, para temperatura e pressão definidos, temos uma densidade ρ_{gas} relacionada [6].



(a)



(b)

Figura 2.2: (a) Diagrama de fases da água em função da temperatura e da pressão. Atravessando de um estado termodinâmico para outro, passando através das linhas contínuas, teremos transições de primeira ordem. Somente no ponto onde a distinção entre vapor e água deixa de ser significativa (no ponto crítico) teremos uma transição de segunda ordem. (b) Isotermas da água. Cada ponto representa uma dada pressão e volume $= 1/\rho$ de um recipiente contendo uma unidade de massa de H_2O . Figuras retiradas respectivamente de [9] e [6]

Já em materiais magnéticos, devemos notar que na ausência de um campo magnético externo aplicado, a magnetização m muda a partir de valores não nulos para $T < T_c$ e se anula em T_c . Dessa forma, m poderia ser considerado como o parâmetro de ordem. Porém, a magnetização propriamente dita é uma média térmica global do material, enquanto que o parâmetro de ordem deve ser uma quantidade que flutua ponto a ponto. Dessa forma, é conveniente definir o parâmetro de controle como sendo uma magnetização local $\phi(x)$. Mais ainda, vamos considerar que o material em questão seja constituído de N spins distribuídos em uma rede, onde cada sítio da rede representa um átomo com valor de spin s_i . Dessa forma, a magnetização local está relacionada com s_i por

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\delta V} \sum_{i \in \delta V} s_i, \quad (2.1)$$

onde a soma é feita sobre todos os sítios dentro de um pequeno volume δV centrado em \mathbf{x} .

Além do parâmetro de ordem, quantidades como a compressibilidade isotérmica (κ_T), a susceptibilidade ($\chi_T \equiv (\partial m / \partial B)_T$), o calor específico (c) dentre outras, apresentam particularidades quando estamos suficientemente próximos de uma mudança de fase contínua (próximo ao ponto crítico). Como veremos a seguir, essas particularidades exibem comportamentos assintóticos com expoentes característicos de cada grandeza. Por exemplo, o calor específico c_v da água diverge a medida que nos aproximamos do ponto crítico de acordo com a relação

$$c(T) \propto \frac{1}{\alpha} \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha}, \quad (2.2)$$

onde o expoente α determina o comportamento de c . Como discutido anteriormente, a magnetização m a campo nulo ($B = 0$) tende a zero quando nos aproximamos de T_c a partir de temperaturas menores. Nesse limite, a relação $m \sim (T_c - T)^\beta$ é verificada, definindo o expoente β que caracteriza a aproximação do parâmetro de ordem ao ponto crítico, como ilustrado na figura 2.3(a).

No ponto crítico ($T = T_c$), m torna-se proporcional a B na forma $m \sim B^{1/\delta}$. Por sua vez, é verificada uma divergência na susceptibilidade na forma de $\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma}$ à medida que nos aproximamos de T_c . Os dois últimos comportamentos são ilustrados na figura 2.3(b) e definem os expoentes δ e γ .

Outra forma de analisar sistemas físicos é através da função correlação entre dois pontos. De uma forma geral, a função correlação é definida da seguinte forma

$$G^{(2)}(r) \equiv \langle \phi(0) \cdot \phi(r) \rangle - \langle \phi(0) \rangle \langle \phi(r) \rangle \quad (2.3)$$

com ϕ sendo o parâmetro de ordem do sistema. No ponto crítico, a função correlação

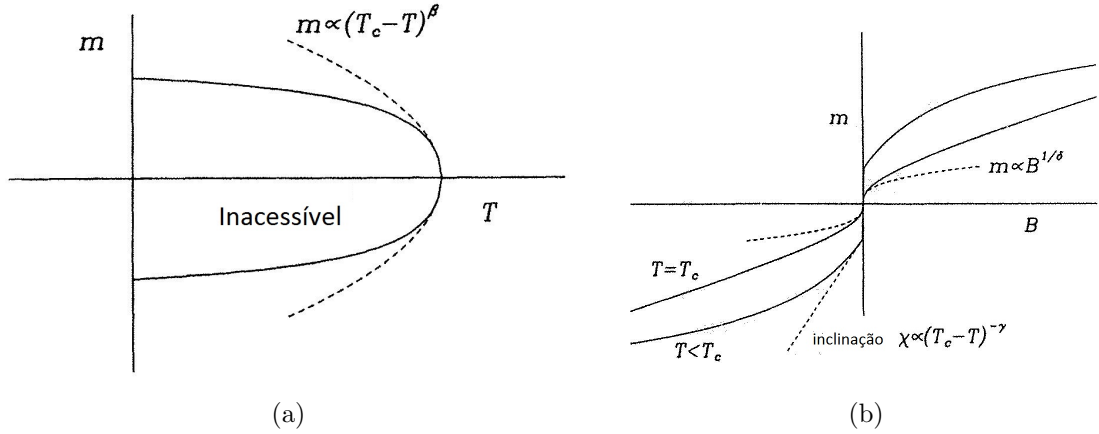


Figura 2.3: (a) Definição do expoente crítico β . Na ausência de um campo externo aplicado a magnetização tende a zero como $(T_c - T)^\beta$ quando aproximamos de T_c a partir de temperaturas menores. (b) Definição dos expoentes críticos γ e δ . Próximo a T_c a susceptibilidade é proporcional a $(T_c - T)^{-\gamma}$. Já em T_c a magnetização é proporcional a $B^{1/\delta}$.

tem uma forma assintótica quando olhamos para distâncias grandes quando comparadas às distâncias intermoleculares (r_0), podendo ser escrita como:

$$G^{(2)}(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (r \gg r_0, \quad T = T_c) \quad (2.4)$$

onde d é a dimensão do sistema, e η é um expoente crítico adicional. Já fora do ponto crítico, a função correlação tem a seguinte forma assintótica ³:

$$G^{(2)}(r) \sim e^{-r/\xi}, \quad (r \gg r_0, \quad 0 \neq |T - T_c|/T_c \ll 1.) \quad (2.5)$$

Aqui, o comprimento característico ξ é chamado de comprimento de correlação. De acordo com a equação acima, o parâmetro de ordem flutua em blocos de todos os tamanhos até o tamanho ξ , apesar de flutuações permitirem raramente tamanhos maiores. Aproximando-

³A equação 2.5 vale para a maioria dos sistemas, porém existem modelos nos quais $G(r)$ decai algebricamente para qualquer temperatura T com $0 < T \leq T_c$. O exemplo mais conhecido é o modelo XY bidimensional.

se de T_c , ξ cresce sem limite. De fato, experimentalmente é encontrado que

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (|T - T_c|/T_c \ll 1) \quad (2.6)$$

onde ν é o sexto e último expoente crítico. Na figura 2.4, uma idéia geral do comprimento de correlação é ilustrada usando-se paisagens geradas pelo modelo de Ising bidimensional. Nota-se portanto, que o comprimento de correlação ξ oferece uma medida do tamanho de uma região típica do parâmetro de ordem (representado pela cor branca na respectiva figura).

Tabela 2.1: Definições dos expoentes críticos.

expoente	Definição
α	$c_B \sim \alpha^{-1} ((T - T_c /T_c)^\alpha - 1)$, $T \rightarrow T_c$, $B = 0$
β	$m \sim (T_c - T)^\beta$, $T \rightarrow T_c$ a partir de T_- , $B = 0$
γ	$\chi_T \sim T - T_c ^{-\gamma}$, $T \rightarrow T_c$, $B = 0$
δ	$m \sim B^{1/\delta}$, $B \rightarrow 0$, $B = 0$
η	$G^{(2)}(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$, $T = T_c$, $B = 0$
ν	$\xi \sim T - T_c ^{-\nu}$, $B = 0$

Os expoentes α , β , γ , δ , η e ν (mostrados na tabela 2.1) são chamados de expoentes críticos, e alguns deles podem ser obtidos tanto acima quanto abaixo do ponto crítico.

Desde a década de 1960, vários autores desenvolveram uma teoria de escala sobre transições de fase, que tem sido verificada com sucesso através de experimentos e simulações. Desenvolvida principalmente por Widom [13] e Kadanoff [14] (em trabalhos distintos), esta teoria tem sido muito importante no estudo da mecânica estatística de equilíbrio. Em particular, a teoria de escala faz duas predições. A primeira delas, é um conjunto de relações chamado de *leis de escala* (do inglês - scaling laws) que diz que os

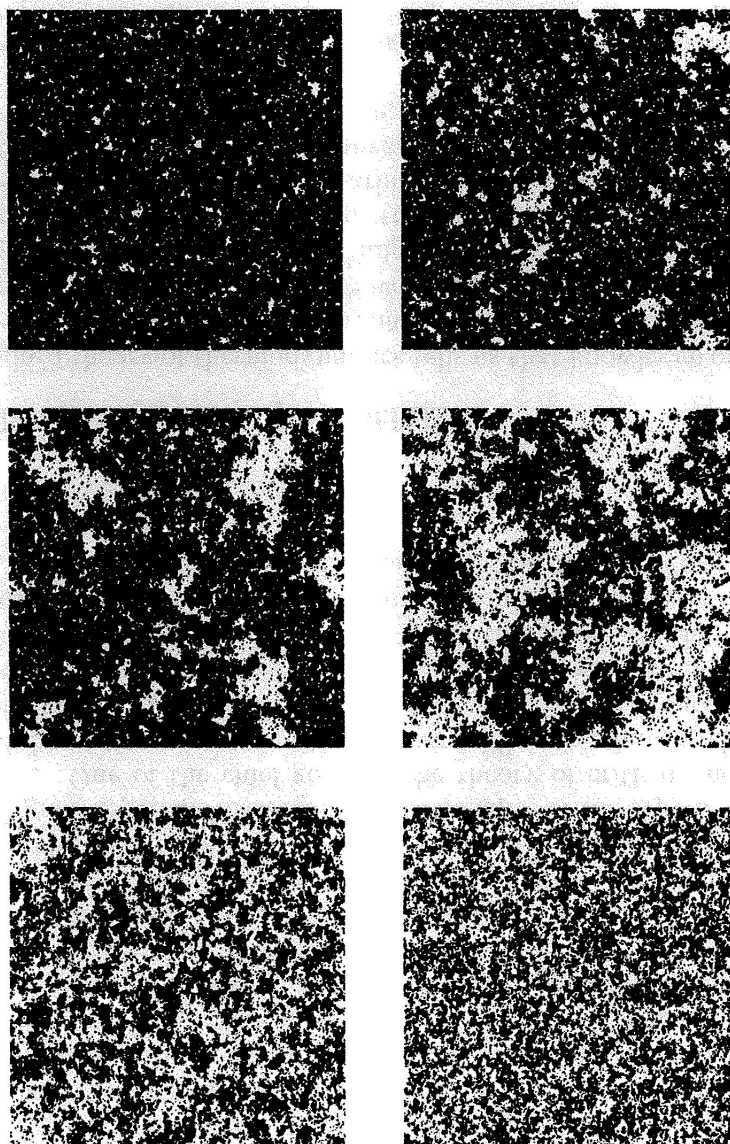


Figura 2.4: Influência da temperatura no modelo de Ising bidimensional. A partir de cima, e da esquerda para a direita, a temperatura do sistema aumenta, modificando o tamanho dos domínios de cor brancas, no qual o parâmetro de ordem difere do valor de fundo. Na temperatura crítica as regiões brancas e pretas ocupam, em média, a mesma área (imagem à esquerda no centro da figura). Quando a temperatura aumenta, as regiões pretas e brancas tornam-se menores e mais numerosas. O comprimento de correlação ξ oferece uma medida do tamanho típico das regiões brancas. Para $T = T_c$, a maior região branca contém um número infinito de pontos na rede levando à $\xi = \infty$ quando $L \rightarrow \infty$. As imagens correspondem a uma rede quadrada com 512 spins em cada lado com condições de contorno periódicas, com temperaturas iguais a $T/T_c = 0.97, 0.99, 1, 1.01, 1.06$ e 1.15 . Exemplo retirado de [6].

expoentes citados acima estão conectados da seguinte forma:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{2.7}$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (2.8)$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu \quad (2.9)$$

$$2 - \alpha = \nu d. \quad (2.10)$$

A última relação envolve a dimensão espacial d do sistema e geralmente é chamada de relação de hiperescala. Entretanto essa relação é válida somente abaixo de uma certa dimensão crítica d_c , sendo que, quando essa dimensão é excedida, todos os expoentes são independentes de d . Através dessas relações, podemos ver que o comportamento crítico do sistema pode ser determinado por apenas dois expoentes críticos. Essas relações podem ser encontradas a partir de considerações termodinâmicas (ver apêndice A), expansões em série e por teoria de grupo de renormalização. Podemos dizer entretanto que a teoria de escala é baseada na suposição de que, suficientemente próximo ao ponto crítico, a parte singular de um potencial termodinâmico é assintoticamente uma função homogênea generalizada ⁴.

A segunda previsão da teoria de escala é uma espécie de colapso de dados. Para explicar essa característica, vamos considerar o caso de um material ferromagnético uniaxial. A equação de estado para o parâmetro de ordem M , pode ser escrito como $M = M(B, \epsilon)$, onde B é o campo magnético e $\epsilon \equiv (T - T_c)/T_c$. Desde que $M(B, \epsilon)$ é uma função de duas variáveis, podemos representá-lo graficamente como M versus ϵ para uma sequência de valores de B . A teoria de escala prevê que todas as curvas desse grupo podem ser colapsadas sobre uma única curva, fornecida por um M escalado (M dividido por B a alguma potência) em função de um ϵ escalado (ϵ dividido por B a alguma potência diferente)

⁴ver apêndice A para mais detalhes

como mostra a figura 2.5.

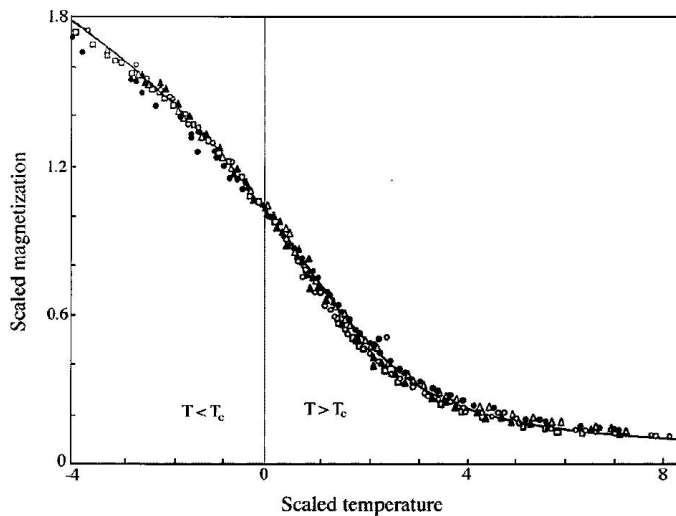


Figura 2.5: Magnetização escalada ($M/B^{1/\delta}$) versus temperatura escalada ($\epsilon/B^{1/(\delta\beta)}$). Dados experimentais para cinco materiais magnéticos diferentes plotados na forma escalada. Os cinco materiais são: $CrBr_3$, EuO , Ni , YIG , e Pd_3Fe . Apesar de possuírem características distintas, os dados para todos os materiais colapsam sobre uma única função de escala, calculada a partir do modelo de Heisenberg para $d = 3$. Figura retirada de [12].

Ambas as previsões da teoria de escala são confirmadas através de um grande número de trabalhos experimentais, bem como através de modelos teóricos como os modelos de Ising, Potts, dentre outros.

Em especial, o colapso dos dados experimentais para os cinco materiais mostrados na figura 2.5 permitiu estabelecer um conceito de *classe de universalidade* de comportamentos críticos. O fato marcante de que todos os dados colapsam sobre uma mesma função de escala, confirma a hipótese de escala discutida anteriormente e motivam as seguintes perguntas: *devemos esperar que o comportamento próximo à criticalidade valha para todos os sistemas que exibem transições de fase contínua? Quais características de um sistema são determinantes na caracterização dos expoentes críticos e das funções de*

escala e quais características podem ser descartadas?

Uma vez que dois sistemas possuam os mesmos valores de expoentes críticos e as mesmas funções de escala, eles são ditos pertencerem à mesma classe de universalidade. Dessa forma, o fato de que os expoentes e as funções de escala mostradas na figura 2.5 são as mesmas para todos os cinco materiais, implica que todos eles pertencem à mesma classe de universalidade.

Apesar da vasta quantidade de diferentes sistemas encontrados na natureza, dados experimentais mostram que o número de classes de universalidade parece ser pequeno. Mais ainda, dois tipos de interações microscópicas parecem ser quase suficientes para reproduzir as classes de universalidade necessárias para os fenômenos críticos estáticos [12]. Uma das interações pode ser representada pelo modelo de Potts de Q -estados e outra pode ser resumida pelo modelo n -vetor. O modelo de Potts assume que cada spin i pode estar em uma de Q possíveis orientações discretas ζ_i ($\zeta_i = 1, 2, \dots, Q$). Se dois spins vizinhos i e j possuem a mesma orientação, então eles contribuem com uma quantidade $-J$ na energia total da configuração; caso contrário a contribuição é nula. O Hamiltoniano desta interação é representado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(\zeta_i, \zeta_j),$$

onde $\delta(\zeta_i, \zeta_j) = 1$ se $\zeta_i = \zeta_j$ e zero caso contrário. A soma deve ser feita sobre todos os pares de vizinhos $\langle i, j \rangle$.

Já o modelo n -vetor é caracterizado por considerar que as variáveis de spins possam ser tomadas em um espaço contínuo de estados. Dessa forma temos:

$$\mathcal{H}(n, d) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

onde $\vec{S}_i \equiv (S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{in})$ é um vetor unitário n -dimensional, satisfazendo a condição $\sum_{\alpha=1}^n S_{i\alpha}^2 = 1$. Já os parâmetros d e n são, respectivamente, a dimensionalidade do sistema e a dimensionalidade do spin.

Ambos os modelos (esquematisados nas figuras 2.6(a) e 2.6(b)) são generalizações do simples modelo de Ising para um material ferromagnético uniaxial.

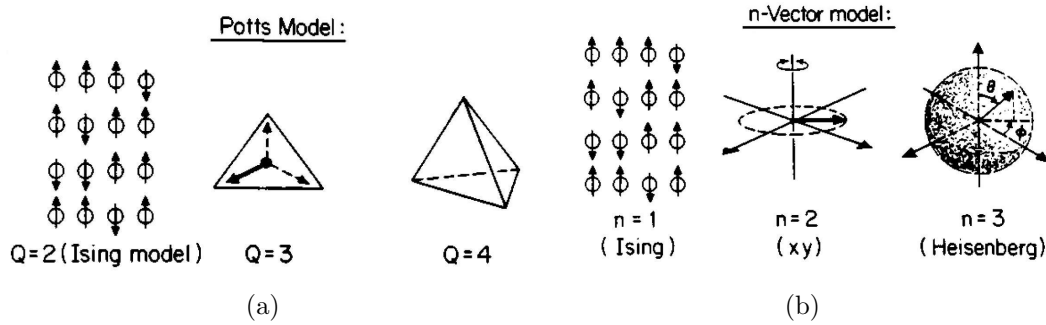


Figura 2.6: Ilustrações esquemáticas das possíveis orientações dos spins no modelo de (a) Potts de Q -estados e (b) n -vetor. Figura adaptada de [12].

A tabela 2.2 lista os valores dos expoentes característicos para o modelo n -vetor.

Tabela 2.2: Expoentes críticos para o modelo n -vetor. Tabela adaptada de [6]

Expoente	Campo médio	Ising $d = 2, n = 1$	XY $d = 3, n = 2$	Heisenberg $d = 3, n = 3$	Esférico $d = 2, n = \infty$
α	0	0	0.119(6)	-0.08(4)	-1
β	1/2	1/8	0.326(4)	0.38(3)	1/2
γ	1	7/4	1.239(3)	1.38(2)	2
δ	3	15	4.80(5)	4.63(29)	5
η	0	1/4	0.024(7)	0.07(6)	0
ν	1/2	1	0.627(2)	0.715(20)	1

Capítulo 3

Transições de fase fora do equilíbrio e sistemas com estados absorventes

O comportamento estocástico está presente em várias escalas na natureza, passando de níveis microscópicos como a formação de colônias de bactérias, à níveis macroscópicos como a formação de ciclones gigantes em meio aos oceanos. Embora o comportamento de muitos sistemas na natureza seja regido por leis físicas bem conhecidas, em muitos casos a dinâmica de evolução de vários sistemas não é determinada. Isso ocorre onde a dinâmica microscópica não é totalmente conhecida. Nesse caso, uma boa aproximação é supor que o comportamento das entidades do sistema evolua de acordo com certas regras probabilísticas. Nesse sentido, métodos de mecânica estatística tornam-se essenciais no estudo das propriedades físicas de sistemas complexos.

3.1 Processos estocásticos.

Um processo estocástico pode ser definido da seguinte maneira: seja um processo em tempos discretos t_1, t_2, t_3, \dots , para um sistema com um conjunto finito de estados S_1, S_2, S_3, \dots , e seja X_t o estado do sistema no tempo t . Considere a probabilidade condicional de que $X_{t_n} = S_{i_n}$,

$$P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}}, X_{t_{n-2}} = S_{i_{n-2}}, \dots, X_{t_1} = S_{i_1}) \quad (3.1)$$

dado que no tempo anterior o estado do sistema $X_{t_{n-1}}$ era $S_{i_{n-1}}$, etc. Tal processo é chamado de Markoviano se a probabilidade condicional depende somente do estado anterior e não da evolução de todos os antecedentes, ou seja, $P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}})$ ¹. Processos dessa natureza permitem interpretar a probabilidade condicional como a probabilidade de mudança do estado i para o estado j ,

$$W_{ij} = W(S_i \rightarrow S_j) = P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i), \quad (3.2)$$

com as condições que $W_{ij} \geq 0$ e $\sum_j W_{ij} = 1$. Dessa forma, podemos construir a probabilidade do sistema estar no estado S_j no tempo t como

$$P(X_t = S_j) = \sum_i P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i) P(X_{t_{n-1}} = S_i) = \sum_i W_{ij} P(X_{t_{n-1}} = S_i). \quad (3.3)$$

Do ponto de vista físico, é importante estudar sistemas de natureza estocástica, onde o comportamento coletivo de muitas entidades gera padrões em escalas macroscópicas. Como exemplo, podemos citar o modelo de agregação limitada por difusão (do inglês -

¹Processos Markovianos onde o tempo e o espaço são discretos recebem o nome de cadeia de Markov.

Diffusion-limited aggregation - **DLA**) [18] considerado o equivalente ao modelo de Ising no campo de fenômenos puramente difusivos. Tal modelo possui um estado inicial contendo uma partícula (semente) situada no centro de uma rede. Uma segunda partícula, adicionada aleatoriamente em algum sítio situado a uma distância suficientemente grande da origem, passeia aleatoriamente no sistema até encontrar um sítio vizinho ocupado ². Caso isso aconteça a partícula ficará fixa neste sítio, dando origem ao início de um agregado. Depois de fixada a partícula caminhante, outra partícula é solta longe do cluster, e o processo descrito anteriormente se repete. Este simples processo, de natureza estocástica, gera padrões similares àqueles encontrados através de eletrodeposições químicas, como pode ser visto na figura 3.1. Formação de padrões em sistemas difusivos incluem desde o crescimento de cristais [19] ao crescimento de colônias de bactérias [20]. Comportamentos coletivos também são frequentemente observados quando o um sistema sofre uma transição de fase contínua. Dentre esses sistemas, o exemplo mais conhecido é a transição de ordem-desordem no modelo bidimensional de Ising, onde os tamanhos típico dos domínios ordenados divergem à medida que nos aproximamos da temperatura crítica.

Como vimos, um processo estocástico markoviano fica completamente definido pelo espaço de estados, pelas probabilidades de transição W_{ij} e pela distribuição de probabilidade inicial $P(X_{t_0})$. Nesses tipos de sistemas, estamos interessados em determinar a solução estacionária da distribuição de probabilidade $P_t(s)$ de um sistema ser encontrado no tempo t com uma certa configuração s , ou seja, estamos interessados no limite $\lim_{t \rightarrow \infty} P_t(s) \equiv P_{est}(s)$. No ensemble canônico, esta distribuição é dada por $P_{eq}(s) \sim \exp[-H(s)/k_b T]$, onde $H(s)$ é o Hamiltoniano. Em princípio, com a distri-

²Inicialmente somente o sitio contendo a semente está ocupado.

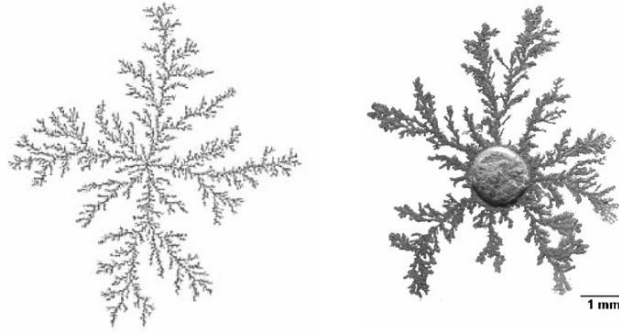


Figura 3.1: À esquerda padrão gerado pelo modelo DLA e à direita padrão gerado a partir da eletrodeposição de cobre. Figuras adaptadas de [21] .

buição de probabilidade de equilíbrio P_{eq} , podemos calcular o valor esperado de qualquer observável (independente do tempo) fazendo uma soma sobre todas as configurações possíveis. Na maioria das vezes, essa soma configuracional é muito difícil de ser realizada devido ao grande número de configurações apresentadas pelo sistema, sendo desenvolvidas novas técnicas como expansão em séries, teoria de grupo de renormalização, métodos de simulações de Monte Carlo, entre outras.

Na natureza, entretanto, o equilíbrio térmico parece ser mais uma exceção do que uma regra. Em muitos casos, a evolução inicial de um sistema começa em algum ponto muito distante do equilíbrio e sua evolução para o estado estacionário depende de propriedades específicas da dinâmica. Dessa forma, esses sistemas não podem ser descritos usando-se a abordagem da mecânica estatística de equilíbrio. De fato, para descrever sistemas como estes, faz-se o uso de modelos probabilísticos para a dinâmica microscópica do sistema.

Na modelagem de sistemas complexos com muitas unidades interagentes, normalmente usa-se o espaço euclidiano d -dimensional para representar o espaço físico. Nesse contexto, o espaço pode ser contínuo ou discreto. Caso seja contínuo, os graus de liberdade do sistema devem ser definidos através de um campo contínuo; no caso onde desejamos

que o espaço seja discreto, os graus de liberdade podem ser associados com os sítios de uma rede. Por sua vez, a variável temporal é introduzida como uma dimensão adicional ao sistema, tal que sistemas estocásticos são definidos em $d + 1$ dimensões.

Já o tempo pode ser contínuo ou discreto. A diferença entre as definições está na forma como consideramos a evolução. Se o tempo é contínuo as transições de um estado s para s' ocorrem a uma taxa $w_{s \rightarrow s'} \geq 0$. Considerando o tempo contínuo e o espaço discreto, a equação que descreve o fluxo de probabilidade para dentro e para fora de uma configuração s é chamada de equação mestra (do inglês - master equation) sendo escrita da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}P_t(s) = \sum_{s'} w_{s' \rightarrow s} P_t(s') - \sum_{s'} w_{s \rightarrow s'} P_t(s), \quad (3.4)$$

onde s e s' são estados distintos. Nesta equação, o primeiro termo representa as transições para dentro do estado s e o segundo as transições para fora de s . Esses dois termos se balanceiam de tal forma que a soma das probabilidades ($\sum_s P_t(s) = 1$) seja conservada.

Diferentemente de sistemas com evolução temporal contínua, em sistemas com evolução discreta do tempo, a equação que descreve o fluxo de probabilidade para dentro e para fora de uma configuração s é uma relação de recorrência:

$$P_{t+1}(s) = P_t(s) + \sum_{s'} p_{s' \rightarrow s} P_t(s') - \sum_{s'} p_{s \rightarrow s'} P_t(s), \quad (3.5)$$

obedecendo a condição ($\sum_s p_{s \rightarrow s'} = 1$). Vale a pena notar que, quando utilizamos a variável de tempo contínua, a taxa com que um dado evento ocorre pode ser maior que a unidade e pode ser reescalada por uma mudança na escala do tempo. De fato, ambas as

regras de dinâmica podem ser usadas na modelagem de sistemas complexos.

Fenômenos fora do equilíbrio podem ser encontrados desde a simples situação onde uma partícula está sujeita à uma força aleatória, ou em situações mais complexas como em sistemas de muitas entidades interagentes. Transições de fase fora do equilíbrio podem aparecer em modelos de população, epidemias, catálise, transporte coletivo, entre outros [8, 17, 22, 23].

3.2 Processo de Contato e estados absorventes.

A partir deste ponto, vamos abordar uma classe específica de sistemas fora do equilíbrio: **sistemas que apresentam transições de fase para estados absorventes**. Para ilustrar essa classe de sistemas, considere um processo de infecção onde um indivíduo infectado pode contaminar um vizinho ou se recuperar, diminuindo o número de agentes disseminadores da doença. Dependendo das taxas de infecção e de recuperação, teremos duas situações. Uma onde a taxa de infecção predomina, levando o sistema a um estado onde existam indivíduos saudáveis e infectados. Por outro lado, se a recuperação dos indivíduos predominar, o sistema evoluirá para a extinção dos agentes disseminadores, ficando somente com indivíduos saudáveis a partir do tempo t . Nesse caso, onde não existem mais agentes infectados, dizemos que o sistema alcançou um estado absorvente, isto é, para todo t' maior que t o sistema se encontrará nesse estado.

Nos casos mais simples, a transição entre as fases “infectado” e “saudável” é contínua, e portanto pode ser caracterizada através de um comportamento crítico universal, assim como no caso da mecânica estatística de equilíbrio. Em particular, duas classes de universalidades têm-se destacado entre os modelos fora do equilíbrio: a percolação

direcionada DP (do inglês - Directed percolation) e a percolação direcionada conservada CDP (do inglês - Conserved Directed Percolation). A classe de universalidade DP pode ser considerada como uma classe fundamental de sistemas fora do equilíbrio, assim como a classe de Ising é para sistemas em equilíbrio.

Dentre os modelos de rede da classe DP, o processo de contato CP (do inglês - Contact Process) é um paradigma para essa classe. Já os modelos da classe CDP são bem representados pelo modelo de pilhas de areia estocástica conservada (do inglês - stochastic conserved sandpile), também conhecido como modelo de Manna conservado (do inglês - conserved Manna). Uma característica fundamental dessa classe de sistemas é que eles possuem quantidades conservadas no tempo. No caso do modelo de pilhas de areia, o número de entidades, representados por partículas de areia, é fixo. Neste modelo, cada sítio da rede pode conter mais de uma partícula; se isso ocorrer dizemos que este sítio está ativo, caso contrário dizemos que o sítio está inativo. Partículas em sítios ativos são permitidas pular para um de seus primeiros vizinhos, podendo ativar sítios inativos. Dependendo do número inicial de partículas colocadas na rede, o sistema pode evoluir para um estado final “ativo” ou “inativo”, com apenas uma partícula por sítio. Nessa abordagem, fica claro que os estados onde a atividade do sistema é nula são estados absorventes.

Na maioria dos modelos de sistemas fora do equilíbrio, o parâmetro de ordem (que será representado pela letra grega ρ) representa a atividade do sistema, podendo ser definido como uma densidade de atividade. Para um sistema unidimensional de comprimento

L , a densidade pode ser definida como:

$$\rho(t) = \frac{1}{L} \sum_i s_i, \quad (3.6)$$

onde a variável s_i representa a atividade no sítio i no tempo t . Naturalmente, essa variável pode ser definida como $s_i = 1$ para sítios ativos e $s_i = 0$ para sítios inativos. A fim de fazermos uma estatística sobre o comportamento do sistema, o parâmetro de ordem deve ser tomado como uma média sobre amostras. Outra grandeza a ser definida é o parâmetro de controle (que será representado pela letra grega λ). Essa quantidade desempenha papel similar à temperatura no modelo de Ising, levando o sistema a sofrer uma transição de fase em algum ponto λ_c . Muitas vezes será conveniente representar as quantidades de interesse em função da distância ao ponto crítico, representado por $\Delta \equiv (\lambda - \lambda_c)/\lambda_c$. Para ilustrarmos esse comportamento, vamos usar o processo de contato com uma abordagem de campo médio.

Como vimos no início dessa seção, o processo de contato é um modelo de propagação de epidemia. Ele é definido da seguinte forma: cada sítio i de uma rede pode estar no estado $\sigma_i = 1$ ou $\sigma_i = 0$ representando um indivíduo infectado ou saudável, respectivamente. Indivíduos infectados tornam-se saudáveis a uma taxa unitária ($\sigma_i = 1 \rightarrow \sigma_i = 0$), independentemente dos seus vizinhos. Por sua vez, um indivíduo saudável pode ser infectado a uma taxa $n\lambda/2d$, onde n é o número de vizinhos infectados e d é a dimensão do sistema. As taxas de infecção e recuperação estão ilustradas na figura abaixo.

Uma análise qualitativa desse modelo pode ser feita através de análise de campo médio, também conhecido como aproximação de aglomerado. De um modo geral, o método consiste em tratar a dinâmica interna do aglomerado exatamente, mas repre-

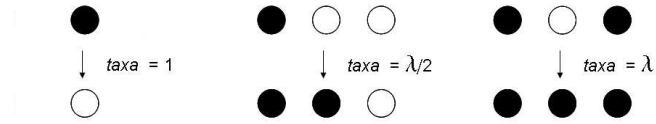


Figura 3.2: Taxas de infecção e de recuperação no CP unidimensional. Círculos pretos representam indivíduos infectados; o sentido da seta indica a evolução temporal.

sentando a influência dos vizinhos por um valor médio, calculado na base do resultado para o próprio aglomerado. Na análise mais simples, para a aproximação de um sítio, deve-se considerar que cada sítio da rede é independente do sítio vizinho. Com essa consideração, a probabilidade $P_s(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$ do sistema estar no estado s , pode ser fatorada, sendo escrita como $P_s = p(\sigma_1) \times \dots \times p(\sigma_i) \times \dots \times p(\sigma_N)$. Por hora, vamos considerar que a probabilidade de um sítio estar infectado no tempo t seja representado por ρ e de $1 - \rho$ do sítio estar saudável. Considerando o sistema homogêneo, e as transições ilustradas na figura 3.2, escrevemos a equação para a evolução de ρ como:

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho(\lambda - 1) - \lambda\rho^2 \quad (3.7)$$

O regime estacionário é encontrado fazendo $d\rho/dt = 0$. Para $\lambda \leq 1$ a única solução estacionária é $\rho = 0$, devido à definição de $\rho \geq 0$. Para $\lambda > 1$, além da solução trivial $\rho = 0$, a solução estacionária é dada por $\rho = 1 - 1/\lambda$. Com essa análise vemos que $\lambda = \lambda_c = 1$ marca um ponto onde o sistema sofre uma transição de fase de um estado inativo para um estado ativo, como ilustrado figura 3.3.

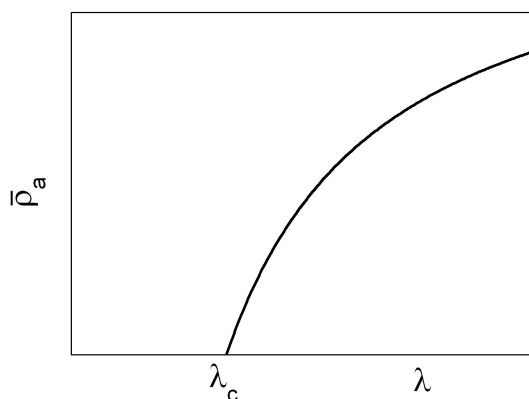


Figura 3.3: Comportamento da densidade estacionária ρ em função do parâmetro de controle λ para o processo de contato. O ponto λ_c marca o ponto crítico que separa as fases inativa e ativa.

3.3 Comportamento do sistema no estado quase - estacionário.

Para sistemas infinitos, a densidade de atividade $\rho(t)$ evolui com o tempo e satura em algum valor ρ diferente de zero na fase ativa, anulando-se no ponto crítico e consequentemente na região inativa. Essa densidade de saturação recebe o nome de *densidade estacionária*. Vale ressaltar que essa definição só é válida no limite de sistemas infinitos, uma vez que, para sistemas de tamanho finito, o único estado estacionário é o estado absorvente³, e portanto, o que estudamos na verdade, é a densidade de atividade antes do sistema atingir uma configuração absorvente. A esse regime de saturação em sistemas finitos chamamos de *regime quase estacionário*. Próximo da transição, o parâmetro de ordem varia de acordo com a lei de potência

$$\rho \sim |\Delta|^\beta, \quad (3.8)$$

³Dado a existência de um estado absorvente em um sistema finito, a evolução do sistema para $t \rightarrow \infty$ fará com que o estado absorvente seja visitado, e consequentemente definindo o estado estacionário.

onde β é o expoente crítico associado à densidade de atividade e Δ é a distância ao ponto crítico.

De maneira similar aos sistemas de equilíbrio, processos fora do equilíbrio exibem um comprimento de correlação espacial. Adicionalmente, faz-se necessário a existência de um tempo de correlação, uma vez que os fenômenos aqui estudados envolvem o tempo como uma dimensão adicional. Para distinguir esses comprimentos característicos, usam-se os símbolos \perp (perpendicular) para identificar a correlação espacial e \parallel (paralelo) para a correlação temporal. A função correlação entre dois pontos, considerada em um mesmo instante de tempo, pode ser escrita como:

$$C(x) \equiv \langle \sigma_x \sigma_0 \rangle - \rho^2. \quad (3.9)$$

Já a função de correlação temporal estacionária é escrita como se segue:

$$C(t) \equiv \text{Prob}[\sigma_0(t_0 + t) = 1; \sigma_0(t) = 1] - \rho^2, \quad (3.10)$$

(considerando $\lambda > \lambda_c$ e $t_0 \rightarrow \infty$). Para grandes valores de x e t , é esperado que ambas as funções correlações decaiam exponencialmente com as formas:

$$C(x) \propto e^{-|x|/\xi_{\perp}} \quad (3.11)$$

e

$$C(t) \propto e^{-t/\xi_{\parallel}} \quad (3.12)$$

Próximo à transição, esperamos que os comprimentos característicos divirjam como:

$$\xi_{\perp} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\perp}}, \quad \xi_{\parallel} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\parallel}} \quad (3.13)$$

com expoentes críticos característicos ν_{\perp} e ν_{\parallel} . Suficientemente próximo ao ponto crítico, os comprimentos de correlação estão relacionados por $\xi_{\parallel} \sim \xi_{\perp}^z$ onde $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ é chamado de expoente dinâmico. O significado físico desses comprimentos de escala está ilustrado na figura 3.4. Os expoentes críticos $\beta, \nu_{\perp}, \nu_{\parallel}$ caracterizam uma classe de universalidade, sendo considerados como um conjunto de expoentes fundamentais. Outros expoentes críticos, relacionados através desses tres expoentes fundamentais, podem ser determinados mais facilmente e comumente são apresentados como definições das classes de universalidade, como as razões $\beta/\nu_{\perp}, \beta/\nu_{\parallel}$ e $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ obtidas através de simples relações de escala, como veremos mais adiante.

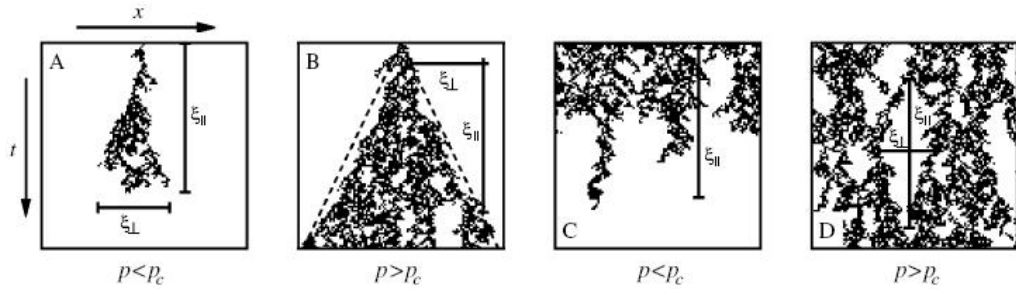


Figura 3.4: Interpretação dos comprimentos de correlação espacial ξ_{\perp} e temporal ξ_{\parallel} abaixo ($p < p_c$) e acima ($p > p_c$) da criticalidade. As figuras A e B, representam sistemas que começaram com um único sítio ativo, enquanto C e D, evoluem a partir de uma rede com todos os sítios ativos. Exemplo retirado de [17].

Voltando nossa atenção para as propriedades dependentes do tempo, vamos olhar para a densidade de partículas $\rho(t)$ (começando de uma rede com $\rho = 1$) e para a probabi-

lidade de sobrevivência $P(t)$ de um sistema permanecer ativo depois de t passos de tempo, com sua evolução começando a partir de um único sítio ativo. Para sistemas infinitos, esperamos que as quantidades de interesse dependam apenas da razão t/ξ_{\parallel} (geralmente escrita na forma $\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}$). No regime de escala, temos:

$$\rho(t) \simeq t^{-\alpha} f(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad P(t) \simeq t^{-\delta} g(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (3.14)$$

onde as funções f e g são funções de escala universais, o expoente α está relacionado ao decaimento de ρ e o expoente δ está relacionado ao decaimento da sobrevivência de atividade [27, 28].

Para pequenos valores dos argumentos das funções de escala, os valores de f e g tendem a um valor constante. No regime inativo, ρ e P decaem exponencialmente. No regime onde o argumento $\Delta t^{1/\nu_{\parallel}} \gg 1$, essas quantidades devem ser independentes de t , valendo:

$$\rho \sim \Delta^{\beta}, \quad P \sim \Delta^{\beta'}. \quad (3.15)$$

Dessa forma, f e g devem ser escritos como:

$$f(x) \sim x^{\alpha\nu_{\parallel}}, \quad g(x) \sim x^{\delta\nu_{\parallel}} \quad (x \rightarrow \infty). \quad (3.16)$$

Comparando com as equações em 3.15, encontramos as seguintes relações de escala:

$$\alpha = \beta/\nu_{\parallel}, \quad \delta = \beta'/\nu_{\parallel}. \quad (3.17)$$

Para modelos que não possuem quantidades conservadas (classe DP), os expoentes β e

β' coincidem. Em um contexto mais geral, esses expoentes podem ser diferentes, por exemplo em modelos que possuam muitos estados absorventes.

Por sua vez, para sistemas de tamanho finito, faz-se necessário uma teoria que incorpore os efeitos de dependência espacial, permitindo-nos obter as propriedades críticas do sistema. Nessas circunstâncias, a teoria a ser usada é a análise de tamanho finito FSS (do inglês - finite size scaling) [29, 30]. Nesta abordagem, as funções de escala devem depender apenas da razão L/ξ_{\perp} , normalmente representada por $\Delta L^{1/\nu_{\perp}}$.

Como vimos anteriormente, para tempos suficientemente longos e para sistemas de tamanho finito, esperamos que a densidade de atividade quase estacionária (obtida no regime quase estacionário) tenha um valor não nulo de acordo com a já conhecida equação $\rho \sim \Delta^{\beta}$. Através de FSS, a dependência de ρ com o tamanho do sistema deve ser escrita como:

$$\rho \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}} F(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}), \quad (3.18)$$

onde a função de escala depende do regime analisado, seja na região ativa ($\Delta > 0$), inativa ($\Delta < 0$) ou no ponto crítico ($\Delta = 0$). Para $\Delta > 0$ a função de escala deve ser $F(x) \propto x^{\beta}$ e o prefator $L^{-\beta/\nu_{\perp}}$ na equação acima, faz-se necessário para recuperarmos a equação $\rho \sim \Delta^{\beta}$. Para $\Delta < 0$ e $|\Delta L^{1/\nu_{\perp}}| \gg 1$, o sistema tende a alcançar o número mínimo de sítios ativos. Isso implica que a densidade de atividade quase estacionária deverá ser $\rho(\Delta, L) \propto L^{-1}$. Nesse regime a função de escala deverá ser $F(x) \propto x^{-\nu_{\perp} + \beta}$. No ponto crítico, FSS implica que ρ tem a seguinte forma:

$$\rho(\Delta = 0, L) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}}. \quad (3.19)$$

Contudo a análise da densidade QS é uma excelente opção para determinarmos a loca-

lização do ponto crítico, uma vez que na fase ativa, ρ tende a um valor constante, enquanto na região inativa ρ decai na forma L^{-1} , e no ponto crítico ρ exibe um comportamento do tipo lei de potência.

Outra relação que podemos estudar é a dependência da variância reescalada (similar à susceptibilidade definida em sistemas em equilíbrio térmico), definida como:

$$\chi(L) = L^d(\bar{\rho}^2 - \bar{\rho}^2). \quad (3.20)$$

A análise de tamanho finito leva à relação

$$\chi(\Delta, L) \sim L^{\gamma/\nu_\perp} Q(\Delta L^{1/\nu_\perp}). \quad (3.21)$$

Desta vez a função de escala deve ser $Q(x) \propto x^{-\gamma}$ para x suficientemente grande e o prefator L^{γ/ν_\perp} faz-se necessário para recuperarmos a relação $\chi \sim \Delta^{-\gamma}$.

Por agora, considere a distribuição de probabilidade $P(\rho_a, L)$ para a densidade de atividade, definida como $\rho_a \equiv N_a/L$, onde N_a é o número de sítios ativos. No ponto crítico é esperado que P dependa somente da razão $\rho_a/\bar{\rho}$, com $\bar{\rho} \equiv \rho(\Delta = 0, L)$. Seguindo essa análise, a distribuição de probabilidade pode ser escrita como:

$$P(\rho_a, L) \propto \frac{1}{\bar{\rho}} \tilde{P}(\rho_a/\bar{\rho}), \quad (3.22)$$

onde o prefator é necessário para a normalização de P . Usando a relação para a densidade QS no ponto crítico (eq. 3.19), temos:

$$P(\rho_a, L) \propto L^{\beta/\nu_\perp} \tilde{P}(\rho_a L^{\beta/\nu_\perp}). \quad (3.23)$$

Usando a equação acima, o n-ésimo momento da densidade é dado por:

$$\langle \rho^n \rangle = \int_0^1 \rho_a^n P(\rho_a, L) d\rho_a = \int_0^1 \rho_a^n L^{\beta/\nu_\perp} \tilde{P}(\rho_a L^{\beta/\nu_\perp}) d\rho_a = I_n L^{-n\beta/\nu_\perp}, \quad (3.24)$$

onde $I_n \equiv \int_0^\infty u^n \tilde{P}(u) du$ é independente do modelo e do tamanho do sistema (válido para modelos pertencentes a uma mesma classe de universalidade). Com essa propriedade em mãos, vemos que as razões do tipo $\rho^n / \rho_r^i \rho_s^j$, onde $n = ir + js$, são independentes de L . Voltando à definição da variância reescalada e usando a equação acima para o n-ésimo momento, segue que:

$$\begin{aligned} \chi(L) &= L^d (\bar{\rho}^2 - \bar{\rho}^2) \\ &= L^d (I_2 L^{-2\beta/\nu_\perp} - I_1^2 L^{-2\beta/\nu_\perp}) \\ &= (I_2 - I_1^2) L^{d-2\beta/\nu_\perp} \\ \chi(L) &\propto L^{(d\nu_\perp - 2\beta)/\nu_\perp}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Combinada com a forma da variância reescalada no ponto crítico, $\chi(\Delta = 0, L) \propto L^{\gamma/\nu_\perp}$, a seguinte relação de hiperescala é encontrada:

$$\gamma = d\nu_\perp - 2\beta \quad (3.26)$$

Como vimos anteriormente, no regime inativo a densidade QS tende a L^{-1} , fazendo com que o n-ésimo momento seja dado por $\langle \rho^n \rangle = I_n L^{-n}$. Dessa forma, χ pode ser escrita como $\chi \propto L^{d-2}$. Para recuperarmos a forma da variância no ponto crítico (eq. 3.21) a função de escala deve ser $Q(x) \sim x^{-2(\nu_\perp - \beta)}$.

Outra característica de sistemas fora do equilíbrio que podemos estudar, é o tempo médio de vida τ de um sistema com uma dada configuração inicial. Sua dependência com o tamanho do sistema é esperada escalar da seguinte forma:

$$\tau \propto L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}} R(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}) \quad (3.27)$$

com $R(x) \propto x^{-\nu_{\parallel}}$ para $x \gg 1$. Usando a mesma análise de ρ , o tempo médio de vida pode ser um bom recurso para se estimar o ponto crítico. Na região inativa o tempo de vida tende a um valor constante, enquanto que, na fase ativa ele cresce exponencialmente com L . No ponto crítico τ escala com a lei de potência $\tau \propto L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$.

Capítulo 4

Modelo de caminhantes aleatórios sonolentos

O modelo que vamos introduzir e estudar faz parte de um contexto geral sobre sistemas de partículas interagentes. Mais especificamente, pertence a uma classe particular que tem como característica fundamental conservar o número de partículas independente da dinâmica local. Os modelos gás de rede conservado (do inglês - conserved lattice gas - CLG) e pilha de areia estocásticas (do inglês - stochastic sandpile) [31, 32] representam bem a classe de sistemas em que estamos interessados.

O modelo CLG é um sistema de partículas com interações de curto alcance (do tipo caroço duro) que não permite que um sítio seja ocupado por duas ou mais partículas. Nele, uma partícula é considerada ativa se ela possuir pelo menos um vizinho ocupado. Estados contendo todas as partículas isoladas são absorventes. Por sua vez, partículas ativas movem-se para um de seus primeiros vizinhos, escolhido aleatoriamente (desde que ele esteja vazio). Partículas inativas serão ativadas desde que partículas ativas ocupem um de seus primeiros vizinhos. Já o modelo de pilha de areia estocástica diferencia-se

basicamente do CLG por permitir múltipla ocupação. Nesse modelo um sítio da rede é considerado ativo se possuir um número n de partículas maior que um certo valor limite n_c . Quando esse valor é atingido, todas as partículas neste sítio tornam-se ativas e algumas são distribuídas aleatoriamente entre seus primeiros vizinhos. Estados absorventes são alcançados desde que a condição $n < n_c$ seja satisfeita para todos os sítios. Em ambos os modelos, o parâmetro de controle é a densidade de partículas $\rho = N/L^d$ colocadas no sistema e o parâmetro de ordem é a densidade de partículas (ou sítios) ativas ρ_a . É evidente que a dinâmica de transferência de partículas entre sítios conserva o número de partículas, isto é, não existem processos de aniquilação e criação. Em ambos os modelos, existe uma transição de fase contínua em $\rho = \rho_c$ entre um estado ativo e um inativo caracterizado por $\rho_a = 0$. A figura abaixo ilustra esses dois sistemas, bem como o modelo de pilha de areia restrita, uma versão particular do modelo de Manna onde um sítio pode estar vazio ou ocupado por uma ou duas partículas. Sítios com $n = 2$ são considerados ativos. Devemos notar que os modelos acima citados possuem o parâmetro

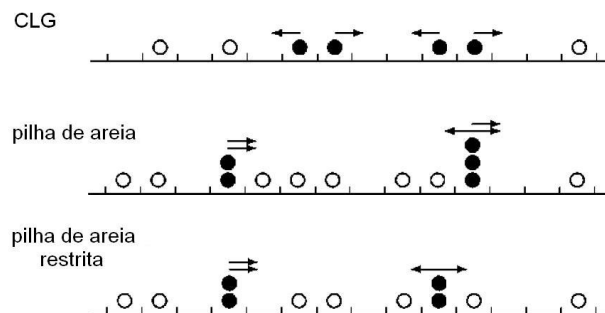


Figura 4.1: Ilustração unidimensional dos modelos CLG e pilha de areia. O último esquema é uma variação do modelo de pilha de areia chamado de pilha de areia restrita, onde o número de ocupação de um sítio não pode exceder um valor máximo. Círculos cheios representam partículas ativas e círculos vazios partículas inativas.

de controle condicionado a incrementos de $1/L$. Essa condição restringe um ajuste fino

em ρ e complica a obtenção do verdadeiro ponto crítico.

Dentro da classe de sistemas em que estamos interessados, o modelo de caminhantes aleatórios ativadas (do inglês - activated random walkers - ARW) foi recentemente proposto por Dickman e co-autores [5]. Este modelo chama a atenção por possuir um parâmetro de controle contínuo, independente do tamanho do sistema. O ARW é definido em uma rede d -dimensional onde cada partícula pode estar em um de dois estados possíveis: A (ativo) ou S (inativo ou dormindo (sleeping)). Partículas ativas descrevem uma caminhada aleatória a uma taxa unitária de salto para seus primeiros vizinhos. Não existe limite de partículas por sítio. Quando uma partícula A se move para um sítio com uma ou mais partículas S , qualquer partícula nesse sítio será imediatamente ativada (trocada para o estado A). Cada partícula A isolada muda para o estado S a uma taxa $\lambda > 0$ ¹. Partículas no estado S permanecerão imóveis até que uma partícula ativa tente ocupar o mesmo sítio. Configurações onde todas as partículas estão no estado S são absorventes. Foi mostrado em [5] que este modelo pertence à classe de universalidade CDP, como era de se esperar baseado nas considerações de simetria.

4.1 Modelo proposto - SRW

A dinâmica do modelo SRW é definida em uma rede d -dimensional de L^d sítios com condições de contorno periódicas. Cada sítio i da rede pode estar em um de três estados: vazio ($\sigma_i = 0$), ocupado por uma partícula ativa ($\sigma_i = 1$), ou por uma partícula inativa ($\sigma_i = -1$). Ocupação múltipla é proibida. Partículas ativas tentam pular, com igual probabilidade, para um dos seus primeiros vizinhos a uma taxa unitária. Caso o sítio

¹Um sítio contendo mais de uma partícula inativa só é possível no início, desde que seja incluído na condição inicial

escolhido esteja vazio, a partícula executa o movimento. Transições de $\sigma_i = 1$ para $\sigma_i = -1$ ocorrem a uma taxa λ , a qual chamamos de *taxa de adormecer*, independente do estado dos outros sítios. Partículas inativas não podem mover-se. Transições de $\sigma_i = -1$ (inativo) para $\sigma_i = 1$ (ativo) ocorrem somente quando um vizinho ativo tenta ocupar o sítio i . Nesse caso, a partícula que tentou mover-se permanece no sítio em que estava enquanto a partícula que estava dormindo é ativada. Evidentemente esta dinâmica Markoviana conserva o número de partículas.

Inicialmente N partículas (todas ativas) são distribuídas aleatoriamente entre os sítios da rede. Denotando N_a como sendo o número de partículas ativas, qualquer configuração com $N_a = 0$ é absorvente. Neste modelo, o parâmetro de ordem é definido como a fração de partículas ativas $\rho \equiv N_a/N$ e existem dois parâmetros de controle: a taxa de adormecer λ e a densidade inicial de partículas $\zeta = N/L^d$.

Para $\zeta < 1$, o número de partículas é uma quantidade conservada não trivial ² e portanto é de se esperar que este sistema de partículas pertença à classe de universalidade CDP. No sentido de usar a grande vantagem deste modelo (o parâmetro de controle real), fixamos o número de partículas inicial, variando somente a taxa de dormir λ . Uma vez que a análise da distribuição QS é usada na análise de tamanho finito, optamos por usar um valor de ζ acessível a todos os sistemas com L par, fazendo $\zeta = 1/2$. A partir deste ponto, estudaremos o modelo em uma rede unidimensional de tamanho L com condições de contorno periódicas.

²Para $\zeta = 1$ teríamos o caso onde o número de partículas é igual ao número de sítios e portanto trataríamos um problema com quantidade conservada trivial que é o número de sítios, como é o caso do processo de contato, onde podemos considerar os sítios da rede como indivíduos.

4.2 Análise de campo médio

Como um primeiro passo na análise de sistemas fora do equilíbrio, vamos investigar o comportamento do modelo SRW através da aproximação por sítios, a mais simples aproximação de campo médio. Como vimos anteriormente, a equação de movimento para a probabilidade $P_t(s)$ do sistema estar no estado s no tempo t pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt}P_t(s) = \sum_{s'} w_{s' \rightarrow s} P_t(s') - \sum_{s'} w_{s \rightarrow s'} P_t(s). \quad (4.1)$$

Na análise em que estamos interessados, a probabilidade conjunta $P_t(s = \sigma_1, \dots, \sigma_N)$ é fatorizada passando a ser escrita como $P_t(s) = P_t(\sigma_1) \times \dots \times P_t(\sigma_N)$, onde σ_i é o estado do sítio i no tempo t . Portanto, considerando o sistema homogêneo, podemos escrever a equação de movimento para a probabilidade do sistema estar no estado $P(\sigma, t)$. Uma vez que o modelo proposto possui três estados possíveis, devemos definir as seguintes quantidades:

- $\rho_a \equiv P_A[\sigma_i = 1, t]$ a probabilidade do sítio i estar ativo no tempo t .
- $\rho_s \equiv P_S[\sigma_i = -1, t]$ a probabilidade do sítio i estar inativo no tempo t .
- $\rho_v \equiv P_V[\sigma_i = 0, t]$ a probabilidade do sítio i estar vazio no tempo t ,

com a condição de normalização das probabilidades

$$\rho_a + \rho_s + \rho_v = 1. \quad (4.2)$$

De uma forma geral, supomos que a taxa de salto seja r e que a taxa da partícula ficar inativa seja λ . As possíveis transições estão listadas na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Taxas de transição para o modelo de caminhantes aleatórios sonolentos no nível de aproximação de sítios. O símbolo \blacksquare representa um indivíduo ativo, \boxtimes um indivíduo inativo e \square representa um sítio vazio.

estados	inicial	final	probabilidade	equivalência
$A \xrightarrow{\lambda} S$	$\blacksquare\blacksquare\blacksquare$	$\rightarrow \blacksquare\boxtimes\blacksquare$	ρ_a^3	1
	$\blacksquare\blacksquare\square$	$\rightarrow \blacksquare\boxtimes\square$	$\rho_a^2\rho_v$	2
	$\square\blacksquare\square$	$\rightarrow \square\boxtimes\square$	$\rho_a\rho_v^2$	1
	$\blacksquare\blacksquare\boxtimes$	$\rightarrow \blacksquare\boxtimes\boxtimes$	$\rho_a^2\rho_s$	2
	$\boxtimes\blacksquare\boxtimes$	$\rightarrow \boxtimes\boxtimes\boxtimes$	$\rho_a\rho_s^2$	1
	$\boxtimes\blacksquare\square$	$\rightarrow \boxtimes\boxtimes\square$	$\rho_a\rho_v\rho_s$	2
$S \xrightarrow{r} A$	$\blacksquare\boxtimes\blacksquare$	$\rightarrow \blacksquare\blacksquare\blacksquare$	$\rho_a^2\rho_s$	2
	$\blacksquare\boxtimes\square$	$\rightarrow \blacksquare\blacksquare\square$	$\rho_a\rho_s\rho_v$	2
	$\blacksquare\boxtimes\boxtimes$	$\rightarrow \blacksquare\blacksquare\square$	$\rho_a\rho_s^2$	2

Nos eventos de transição do estado A para S (ativo para inativo) mostrados na tabela 4.1, a partícula central adormece ficando inativa, enquanto que as transições de S para A ativam a partícula central devido a um salto de uma partícula vizinha.

Considerando todos os eventos listados na tabela 4.1, a equação de movimento para ρ_a pode ser escrita como:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = (\zeta' - \lambda)\rho_a - 2r\rho_a^2, \quad (4.3)$$

onde $\zeta' \equiv 2r(1 - \rho_v)$. Como o modelo em que estamos estudando não possui preferência no sentido dos saltos, devemos ter a igualdade entre as taxas de salto para a esquerda e para a direita. Sem perda de generalidade, podemos fazer que a taxa total de saltos seja unitária, levando a $r = 1/2$. Essa consideração leva a

$$\frac{d\rho_a}{dt} = (\zeta' - \lambda)\rho_a - \rho_a^2, \quad (4.4)$$

dessa vez com $\zeta' \equiv (1 - \rho_v) = \zeta$.

O regime estacionário é encontrado fazendo-se $d\rho/dt = 0$. Para $\lambda \geq \zeta$ a única solução estacionária é o vácuo $\bar{\rho}_a = 0$. Entretanto, para $\lambda < \zeta$ a solução estacionária é dada por $\bar{\rho}_a = \zeta - \lambda$. O comportamento da solução estacionária está ilustrado na figura 4.2. Dessa forma, vemos que $\lambda_c = \zeta$ marca um ponto crítico, onde o sistema muda de forma singular entre um estado ativo e um inativo. A análise de campo médio por pares leva a $\lambda_c = \zeta/2$.

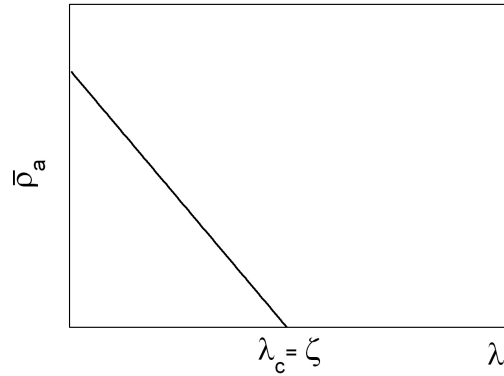


Figura 4.2: Solução estacionária obtida por aproximação de aglomerados para o modelo SRW. Acima de um valor crítico λ_c o único estado estacionário é o vácuo.

Considerando $\Delta \equiv \lambda_c - \lambda$ sendo a distância ao ponto crítico, a solução estacionária pode ser vista como $\bar{\rho} = \Delta$ para $\Delta > 0$. Da mecânica estatística de equilíbrio, esperamos que próximo ao ponto de transição o parâmetro de ordem siga uma lei de potência do tipo $\bar{\rho} \propto \Delta^\beta$, e portanto reconhecemos o expoente característico $\beta = 1$ para o SRW.

No ponto crítico, a equação 4.4 têm solução

$$\rho(t) = \frac{\rho_0}{1 + \rho_0 t} \quad (4.5)$$

com $\rho_0 \equiv \rho_a(t = 0) = 1 - \rho_v = \zeta$. Lembrando que a aproximação do parâmetro de ordem ao estado estacionário segue a lei de potência $\rho(t) \sim t^{-\delta}$, verificamos o valor para o expoente característico sendo $\delta = 1$.

Para $\lambda \neq \zeta$ a solução da equação 4.3 leva a

$$\rho_a(t) = \frac{\rho_0 \Delta}{\rho_0 + (\Delta - \rho_0) e^{-\Delta t}}. \quad (4.6)$$

Para sistemas fora do equilíbrio, o tempo de relaxação para o estado estacionário tem comportamento assintótico da forma $\rho - \bar{\rho} \sim e^{-t/\tau}$, onde $\tau \propto |\Delta|^{\nu_{\parallel}}$. Dessa forma reconhecemos na equação acima o expoente característico do tempo de vida sendo $\nu_{\parallel} = 1$.

Como veremos na sequência desta tese, os valores encontrados através da análise simples de campo médio, levam a resultados qualitativos muito bons, como o diagrama de fases e a existência de um ponto crítico. Porém, os valores para os expoentes críticos são muito ruins quando comparados com simulações de Monte Carlo e outros tipos de análise. De fato, isto ocorre pelo fato de desprezarmos as correlações entre os sítios, uma vez que eles são altamente correlacionados.

Capítulo 5

Solução exata de sistemas pequenos

A análise exata que vamos descrever nesse capítulo foi proposta recentemente para o estudo de sistemas fora do equilíbrio com estados absorventes e consiste em determinar numericamente a distribuição de probabilidade quase-estacionária de sistemas pequenos [41]. Com a distribuição de probabilidade QS em mãos, algumas propriedades críticas podem ser obtidas usando-se análise de tamanho finito. Testado em poucos sistemas, o método tem se mostrado bastante eficiente na análise de modelos pertencentes à classe de universalidade DP, com resultados obtidos em redes unidimensionais de tamanho até $L = 23$ sítios. Em especial, as propriedades críticas do modelo de processo de contato obtidas através dessa análise levaram a resultados com precisão de 0.06% ou melhores, quando comparados aos valores de referência do modelo. Por exemplo, o valor encontrado para o ponto crítico difere apenas 0.002% do valor encontrado usando-se análise de expansão em série [33]. Embora os resultados da análise exata tenham se mostrado excelentes para a classe DP, limitações computacionais não permitiram obter com precisão similar as propriedades críticas para a classe CDP, na qual o modelo ARW foi usado e os resultados ficaram limitados ao tamanho máximo de rede $L = 16$. Portanto, a robustez da técnica

desenvolvida por Dickman foi colocada em dúvida, necessitando do desenvolvimento de sistemas que pertençam a outras classes e que permitam a análise de sistemas maiores. Em especial, o modelo que propomos tem por objetivo testar o novo método.

Para descrever como o método funciona, partimos da definição da distribuição QS, onde

$$\bar{p}_c \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} p_c(t)/P(t). \quad (5.1)$$

Se o limite existe para todo c , essa expressão define a probabilidade QS de uma configuração c , com $p_c(t)$ sendo a probabilidade da configuração c no tempo t e $P(t)$ a probabilidade de sobrevivência. A distribuição QS deve ser normalizada, tal que $\sum_c \bar{p}_c = 1$, onde a soma é feita sobre todas as configurações não absorventes (por definição, a distribuição QS de qualquer configuração absorvente é zero). Essa definição nos diz que para tempos suficientemente longos a distribuição de probabilidade, condicionada pela sobrevivência, tende a um valor independente do tempo \bar{p}_c . Agora, olhamos para a equação mestra de um sistema qualquer, que pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \dot{p}_c &= \sum_{c'} W_{c' \rightarrow c} p_{c'} - \sum_{c'} W_{c \rightarrow c'} p_c \\ &= \sum_{c'} W_{c' \rightarrow c} p_{c'} - p_c \sum_{c'} W_{c \rightarrow c'} \\ &= r_c - p_c w_c, \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde $W_{c \rightarrow c'}$ é a taxa de transição de c para c' , $r_c = \sum_{c'} W_{c' \rightarrow c} p_{c'}$ é o fluxo de probabilidade para “dentro” da configuração c e $w_c = \sum_{c'} W_{c \rightarrow c'}$ é a taxa total para “fora” do estado c .

Como já vimos, a solução estacionária é dada por $\dot{p}_c = 0$, logo

$$\bar{p}_c = \frac{r_c}{w_c}. \quad (5.3)$$

Uma vez conhecidas todas as configurações (incluindo as absorventes) e os valores de todas as taxas de transições $W_{i \rightarrow j}$, a distribuição QS para sistemas com estados absorventes pode ser construída via um esquema iterativo demonstrado em [34]:

$$\bar{p}'_c = a\bar{p}_c + (1 - a)\frac{r_c}{w_c - r_a}, \quad (5.4)$$

onde $r_a = \sum_{c'} W_{c' \rightarrow a}$ é a taxa total para “dentro” do estado absorvente ($1/r_a$ é o tempo de vida do estado QS) e a é um parâmetro que pode receber qualquer valor entre 0 e 1 (uma vez verificados que os valores 0.1 e 0.5 levavam aos mesmos resultados para \bar{p}'_c , usamos em toda a simulação o valor 0.1 dado que sua convergência era mais rápida). Após cada iteração, a distribuição resultante é normalizada multiplicando-se cada probabilidade por $f = 1/[\sum_c \bar{p}'_c]$. Começando a iteração a partir de uma distribuição qualquer no conjunto de configurações não absorventes (por exemplo uma distribuição uniforme), a distribuição converge para a distribuição QS.

5.1 Configurações e transições

Desde que o número de configurações e transições cresce rapidamente com o tamanho do sistema, faz-se necessário o uso de um algoritmo computacional. Para começar, devemos enumerar todas as configurações de $L/2$ partículas em um anel de L sítios. Configurações que diferirem apenas por uma translação ou por uma reflexão são tratadas como equivalen-

tes. Dessa forma, o espaço de configurações passa a ser dividido em classes de equivalência \mathcal{C} . Para cada classe, devemos armazenar uma configuração representativa e o número $|\mathcal{C}|$ de configurações desta classe a que chamamos de “peso” da classe \mathcal{C} . Cada configuração é diferenciada por duas características fundamentais: a posição e o estado (ativo ou não) de cada partícula. Se ignorarmos os estados das partículas, as posições definem as *configurações bases* c , onde cada configuração tem todas as partículas ativas. Uma vez que todas as configurações bases foram enumeradas, começamos a enumerar as classes com $n_p = 0, 1, \dots, L/2$ partículas inativas e seus “pesos” associados.

O próximo passo é analisar as transições entre as configurações. Para isso, visitamos em sequência cada posição de cada classe de equivalência \mathcal{C} , enumerando todas as maneiras na qual \mathcal{C} surge de uma transição a partir de uma configuração antecedente \mathcal{C}' , seja devido a uma inativação ou a um salto, que pode levar à ocupação de um sítio vazio ou à uma ativação. Por sua vez, cada transição é caracterizada por uma taxa $w_{\mathcal{C},\mathcal{C}'}$ e por um peso associado $m_{\mathcal{C},\mathcal{C}'}$. Esse peso é necessário pois, em certos casos, duas ou mais transições distintas para a mesma classe \mathcal{C} tem configurações pertencentes à mesma classe \mathcal{C}' . Com o conjunto das classes, transições, taxas e pesos associados, a relação (5.4) já pode ser iterada para determinar a distribuição de probabilidade QS no conjunto das classes não absorventes. Agora a normalização deve ser $\sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}| \bar{p}_{\mathcal{C}} = 1$, onde a soma deve ser feita sobre as classes.

O critério que usamos para determinar a convergência da relação (5.4) foi que a soma dos valores absolutos das diferenças entre as probabilidades $\bar{p}_{\mathcal{C}}$ e $\bar{p}'_{\mathcal{C}}$ obtidas entre iterações sucessivas fosse menor que 10^{-15} .

No apêndice 2, mostramos passo a passo a obtenção das propriedades QS em um anel de $L = 6$ sítios usando o modelo proposto.

5.2 Resultados

A contagem das configurações para o modelo SRW ficou limitada a tamanhos de rede de até $L = 22$ sítios. O número de configurações distintas incluindo partículas ativas e inativas para $L = 22$ foi $n_C = 32\,842\,718$ enquanto o número de transições envolvendo processos de saltos e inativação foi, respectivamente, $T_{saltos} = 265\,512\,131$ e $T_{inativacao} = 180\,594\,624$. A tabela 5.1 mostra o número exato de cada uma das propriedades obtidas para todas as redes estudadas junto com o tempo computacional gasto em uma máquina com processador Intel Xeon (*E5430*) de $2.66GHz$ e $32Gb$ de memória RAM. Para a rede $L = 22$, o tempo de CPU necessário para enumeração das configurações e transições foi de aproximadamente 66,45 horas. Ao final da enumeração para cada tamanho de rede eram salvos dois arquivos: um contendo o número de partículas ativas, o número de saltos possíveis e o peso $|C|$ de cada configuração e outro contendo todas as transições possíveis (ver tabela 5.1). O tamanho aproximado de cada arquivo para $L = 22$ era de $1.35Gb$ para o primeiro e de $6.00Gb$ para o segundo; a memória RAM utilizada foi $\sim 11.1Gb$. O tempo gasto no processo de iteração para um valor do parâmetro de controle varia de acordo com o valor de λ . Por exemplo, para os valores $\lambda = 0.001$, 0.09002 e 0.3 o tempo gasto foi de 3.3, 4.5, e 29.7 horas; para os valores citados de λ foram necessárias aproximadamente 1500, 2100 e 10300 iterações usando o parâmetro $a = 0.1$.

5.2.1 Propriedades críticas

Na análise que fazemos nesse capítulo as propriedades críticas são obtidas por meio de extrapolações para tamanhos infinitos. A fim de obter o limite de $L \rightarrow \infty$, usaremos um procedimento sugerido por Bulirsch-Stoer (BST) [42,43] auxiliado por ajustes polinomiais.

rede	c	C	$\#T_{saltos}$	$\#T_{inativacao}$	tempo CPU
L=6	3	18	31	22	$< 10^{-3}s$
L=8	8	87	212	146	$< 10^{-3}s$
L=10	16	428	1 523	1 020	0.004s
L=12	50	2 573	11 069	7 430	0.076s
L=14	133	15 850	81 845	54 992	1.1s
L=16	440	103 697	610 778	412 116	15.7s
L=18	1 387	692 614	4 598 968	3 112 222	5.7min
L=20	4 752	4 734 998	34 850 126	23 650 772	$\approx 2.47h$
L=22	16 159	32 842 718	265 512 131	180 594 624	$\approx 66.45h$

Tabela 5.1: Da esquerda para a direita: tamanho L da rede, número de configurações só com partículas ativas c e com partículas nos dois estados C , número de transições envolvendo saltos T_{saltos} e inativação $T_{inativacao}$ e tempo gasto de CPU (ver especificações no texto).

Abaixo apresentamos a definição desta técnica e analisamos o comportamento da mesma para uma função conhecida.

Considere que T seja algum observável correspondente a um sistema estatisticamente infinito e que $T(L)$ seja o observável correspondente ao sistema de tamanho finito L . Em geral, devemos supor que $T(L)$ possa ser escrito como

$$T(L) = T_{\infty} + a_1 L^{-\omega_1} + a_2 L^{-\omega_2} + a_3 L^{-\omega_3} + \dots, \quad (5.5)$$

onde $0 < \omega_1 < \omega_2 < \omega_3 < \dots$ e T_{∞} é o valor para o sistema infinito. O algoritmo BST permite começar com uma sequência finita de valores $T(L_1), T(L_2), T(L_3), \dots, T(L_p)$ e estimar T_{∞} . Em particular o algoritmo permite construir uma tabela de extrapolantes

dessa sequência. Por exemplo, para $p = 5$ teremos:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & & & T_0^1 \\
 & & & & & & \\
 & & & & & & T_1^1 \\
 & & & & & & \\
 & & & & & & T_0^2 & & & T_2^1 \\
 & & & & & & \\
 & & & & & & T_1^2 & & & T_3^1 \\
 & & & & & & T_0^3 & & T_2^2 & & T_4^1 \\
 & & & & & & T_1^3 & & & & T_3^2 \\
 & & & & & & T_0^4 & & T_2^3 & & \\
 & & & & & & T_1^4 & & & & \\
 & & & & & & T_0^5 & & & &
 \end{array}$$

onde T_4^1 é a melhor estimativa do algoritmo para T_∞ . Os valores T_q^n são calculados através das seguintes relações:

$$T_{-1}^n = 0 \quad (5.6)$$

$$T_0^n = T(L_n) \quad (5.7)$$

$$T_m^n = T_{m-1}^{n+1} + (T_{m-1}^{n+1} - T_{m-1}^n) \left[\left(\frac{L_n}{L_{n+m}} \right)^\omega \left(1 - \frac{T_{m-1}^{n+1} - T_{m-1}^n}{T_{m-1}^{n+1} - T_{m-2}^{n+1}} \right) - 1 \right]^{-1}, \quad (5.8)$$

onde $m \geq 1$ e ω é um parâmetro livre. A estimativa para o erro ε referente ao valor extrapolado é encontrada fazendo $\varepsilon = |T_{m-2}^2 - T_{m-2}^1|$.

Como um exemplo da aplicação da técnica, considere a função teste $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$. Considere agora que temos uma série inicial de sete pontos, referentes aos valores de $f(L)$ para $L = 2, 3, \dots, 8$ mostrados na tabela 5.2, junto com a sequência dos extrapolantes para os valores de $\omega = 0.1, 0.5, 1$. Na figura 5.1(a) mostramos o erro ε

associado aos valores extrapolados, para valores de ω no intervalo $(0, 5)$ (espaçados por $\Delta\omega = 10^{-3}$). No intervalo de análise ε possui três mínimos, situados em $\omega = 0.084$, 0.250 e $\omega = 0.500$ e correspondem aos valores $T(\infty) = 0.98634(1)$, $0.9999999999(1)$ e $0.99999999999999(1)$. Na figura 5.1(b) podemos notar que nos pontos onde a incerteza ε é mínima, existe uma inversão da função correspondente dos valores extrapolados ($T_\infty(\omega)$).

Tabela 5.2: Estimativas BST para a função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$. A última coluna a direita é o valor extrapolado para a função no limite de $L \rightarrow \infty$. O módulo da diferença entre os valores da coluna 5 estimam a precisão do valor extrapolado dado ω .

$1/L$	T_m^n	m 0	1	2	3	4	5	6
$\omega = 0.1$								
0.5	1.176777	–	–	–	–	–	–	–
0.33333	1.144338	0.686806	–	–	–	–	–	–
0.25	1.125000	0.712480	0.901968	–	–	–	–	–
0.2	1.111803	0.731526	0.915812	1.564509	–	–	–	–
0.16667	1.102062	0.746555	0.924982	1.362198	1.036924	–	–	–
0.14286	1.094491	0.758888	0.931655	1.275090	1.032602	0.996154	–	–
0.125	1.088388	0.769293	0.936800	1.225711	1.029567	0.995628	0.991650	–
$\omega = 0.5$								
0.5	1.176777	–	–	–	–	–	–	–
0.33333	1.144338	1.019314	–	–	–	–	–	–
0.25	1.125000	1.014214	1.000000	–	–	–	–	–
0.2	1.111803	1.011300	1.000000	1.000000	–	–	–	–
0.16667	1.102062	1.009400	1.000000	1.000000	1.000000	–	–	–
0.14286	1.094491	1.008060	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	–	–
0.125	1.088388	1.007061	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
$\omega = 1.0$								
0.5	1.176777	–	–	–	–	–	–	–
0.33333	1.144338	1.084544	–	–	–	–	–	–
0.25	1.125000	1.070719	1.048579	–	–	–	–	–
0.2	1.111803	1.061974	1.041889	1.034617	–	–	–	–
0.16667	1.102062	1.055809	1.037394	1.030307	1.025428	–	–	–
0.14286	1.094491	1.051163	1.034100	1.027302	1.022597	1.020267	–	–
0.125	1.088388	1.047503	1.031551	1.025048	1.020560	1.018193	1.016333	–

Uma vez que dispomos de uma série com poucos pontos, decidimos usar a extra-

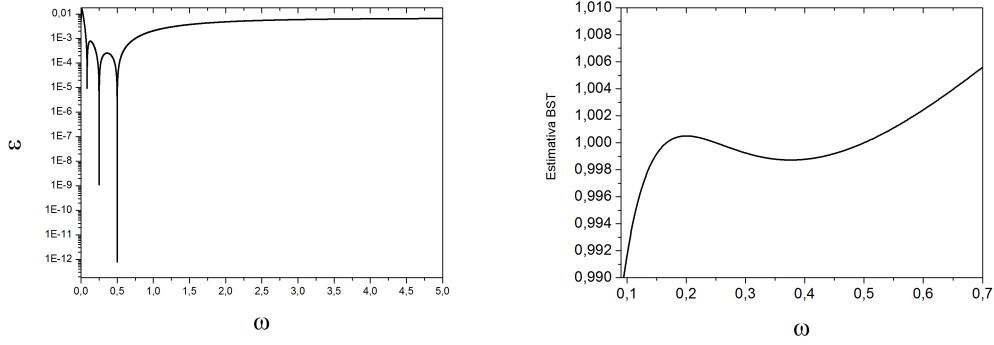


Figura 5.1: (a) Erro ε em função do parâmetro de ajuste ω para a extrapolação da função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$. (b) Valores extrapolados para $f(L_\infty)$ em função de ω .

polação BST buscando um valor de ω que minimize a diferença entre as estimativas em uma série de pontos reduzida. Para isso, dado N valores da série T_j , calculamos $N + 1$ estimativas retirando um ponto por vez, (h_k, T_k) , da série inicial.

Usando a função do exemplo acima, calculamos os valores extrapolados para todos os tamanhos (série de 7 pontos) $T_{\infty,1}^{L=2,3,4,\dots,8}(\omega)$, depois tiramos $L = 2$ e reestimamos os valores extrapolados no intervalo de interesse (série de 6 pontos) $T_{\infty,2}^{L=3,4,\dots,8}(\omega)$. Repetimos a análise descrita até termos as estimativas com um ponto a menos da série inicial. Ao final do processo, teremos oito curvas $T_{\infty,[1,2,3,4,\dots,8]}(\omega)$, cada uma representando estimativas de extrapolação para cada série de dados. A figura 5.2(a) mostra que para a função em análise existem três valores de ω onde a diferença entre as estimativas é mínima. Essa característica nos faz acreditar que o valor fornecido pela técnica BST é uma correção ao expoente de escala da função $f(L) \propto L^{0.5}$. Uma estimativa independente para esse expoente pode ser obtida usando-se um polinômio do tipo

$$f(L) = L_\infty + \frac{A}{L^{y_1}} + \frac{B}{L^{y_2}} \quad (5.9)$$

com $y_2 \geq y_1$. (Os parâmetros A , B , y_1 e y_2 devem ser determinados de forma a minimizar

a variância da diferença $\delta_L \equiv f(L) - AL^{-y_1} - BL^{-y_2}$. Um ajuste com esse polinômio na nossa série inicial de dados pode ser visto na figura 5.2(b) e leva aos valores de $y_1 = y_2 = 1/2$. Como exemplo complementar considere a função $g(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2} + 2(1/L)^{3/4}$. As

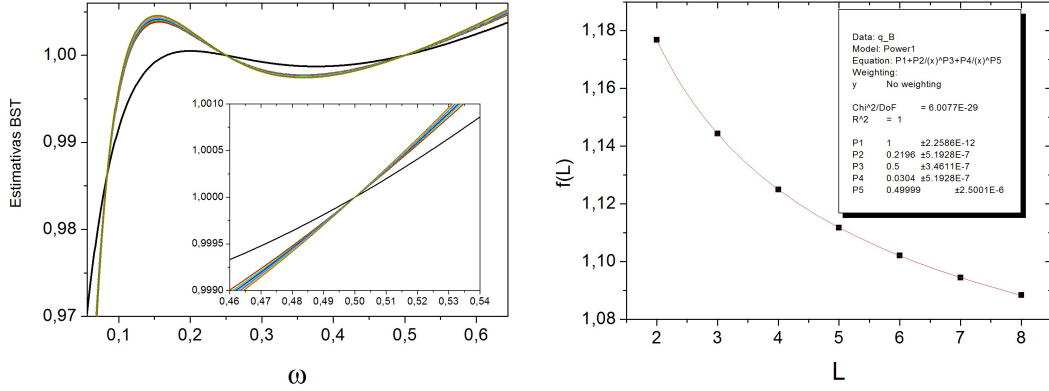


Figura 5.2: (a) Estimativas BST em função do parâmetro de ajuste ω para a extrapolação da função $f(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2}$. (b) Extrapolação dos mesmos dados usando-se a função $f(L) = L_\infty + \frac{A}{L^{y_1}} + \frac{B}{L^{y_2}}$.

estimativas BST (usando os tamanhos $L=2,3,4,\dots,8$ e o mesmo procedimento mostrado anteriormente) são mostradas na figura 5.3. Neste caso verificamos que ε possui três mínimos acentuados, situados em $\omega = 0.361$, 0.695 e $\omega = 0.721$ correspondendo aos valores $T(\infty) = 0.99881(1)$, $1.00298(1)$ e $1.00462(1)$. O ajuste da função 5.9 leva aos valores $y_1 = -0.55(3)$ e $y_2 = 0.758(7)$.

Dado toda esta análise, prosseguiremos com o estudo dos valores extrapolados usando ambas as abordagens como técnicas complementares, ou seja, os valores de ω , usados no cálculo do valor extrapolado via BST, serão determinados usando-se os pontos mais próximos ao expoente y_1 do ajuste polinomial. No caso do primeiro exemplo, os valores $\omega = 0.25$ e 0.5 (mais próximos a $y_1 = 0.5$) são usados para determinar a estimativa final do observável para $L \rightarrow \infty$, levando ao valor médio $T_\infty = 0.999999999(1)$. No segundo exemplo temos $T_\infty = 1.0035(10)$.

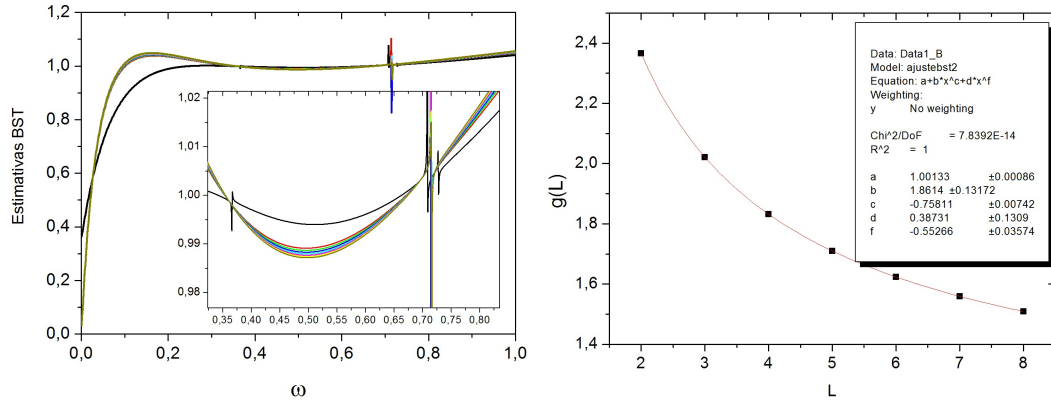


Figura 5.3: (a) Estimativas BST em função do parâmetro de ajuste ω para a extrapolação da função $g(L) = 1 + \frac{1}{4}(1/L)^{1/2} + 2(1/L)^{3/4}$. (b) Extrapolação dos mesmos dados usando-se a função $f(L) = L_\infty + \frac{A}{L^{y_1}} + \frac{B}{L^{y_2}}$.

Outra análise que será bastante usada é a determinação dos valores de cruzamento entre tamanhos consecutivos de algum observável \mathcal{O} e os respectivos valores do parâmetro de controle $\lambda_{\mathcal{O}}$ nos cruzamentos. Em uma análise preliminar, usando intervalos de $\Delta\lambda = 10^{-3}$, determinamos graficamente ¹ onde ocorre o cruzamento. Após essa estimativa, os valores de \mathcal{O} são refinados numericamente usando intervalos de $\Delta\lambda = 10^{-5}$. Em seguida, o valor final dos cruzamentos é obtido via algoritmo de Neville's [36], chegando a uma precisão no resultado final da ordem de 10^{-12} ou melhor. Por fim, vamos precisar localizar o máximo da variância reescalada χ e o mínimo da kurtosis q . Para esse procedimento, ajustamos um polinômio de grau 4 (ou maior) na região de interesse usando dados com incrementos de $\Delta\lambda = 10^{-3}$. Usando a derivada do polinômio ajustado, pudemos estimar com precisão maior que 10^{-6} o máximo e o mínimo de cada curva. Embora a precisão obtida seja razoável, usamos apenas os ajustes polinomiais para determinarmos os valores extrapolados.

Para obter as propriedades críticas do modelo em estudo, vamos fazer uso da

¹O procedimento gráfico é feito plotando os dados como linhas e aproximando do cruzamento desejado até que a escala fique da ordem de 10^{-5} . O software utilizado foi o *Origin Pro 7.0*

análise de tamanho finito (FSS). Para encontrar os expoentes β/ν_\perp e $z = \nu_\parallel/\nu_\perp$ usamos o fato de que no ponto crítico os observáveis ρ e τ se comportam como leis de potência, como prediz a teoria de escala (através da distribuição de probabilidade QS, o parâmetro de ordem é encontrado fazendo-se $\rho = (L/2)^{-1} \sum_C \bar{p}_C N_{a,C}$, onde $N_{a,C}$ é o número de partículas ativas na configuração C). Para sistemas finitos, esperamos que, próximo ao ponto crítico, $\rho_L = L^{-(\beta/\nu_\perp)L} \mathcal{R}(L^{(1/\nu_\perp)L} |\lambda - \lambda_{c,L}|)$, onde \mathcal{R} é uma função de escala e os expoentes característicos β/ν_\perp e $1/\nu_\perp$ bem como o ponto crítico λ_c são versões finitas daqueles obtidos no limite $L \rightarrow \infty$. Para estimar essas versões finitas, usamos a relação sugerida por Mendonça [35], onde

$$\frac{\ln[\rho(\lambda, L)/\rho(\lambda, L')]}{\ln[L/L']} = \frac{\ln[\rho(\lambda, L'')/\rho(\lambda, L)]}{\ln[L''/L]} = (\beta/\nu_\perp)_L,$$

com $L' < L < L''$. A análise gráfica mostrada na figura 5.4 ilustra de forma clara a obtenção da relação acima.

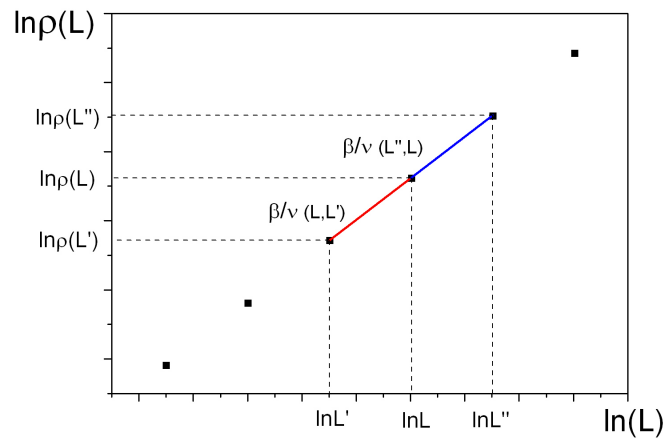


Figura 5.4: Esboço da lei de potência para o parâmetro de ordem em função do tamanho da rede. Igualando as inclinações das retas azul e vermelha, estimamos o expoente $(\beta/\nu_\perp)_L$.

Definindo $S_L(\lambda)$ como

$$S_L(\lambda) \equiv \frac{\ln[\rho(\lambda, L)/\rho(\lambda, L-2)]}{\ln[L/(L-2)]}, \quad (5.10)$$

podemos estimar as versões finitas de $(\beta/\nu_\perp)_L$ e de $\lambda_c(L)$ através de $S_L(\lambda) = S_{L+2}(\lambda)$.

Para estimar o expoente dinâmico z olhamos para o fluxo de probabilidade QS para “dentro” do estado absorvente, esperado comportar-se como $r_a \propto L^{-z} \mathcal{F}(\Delta L^{1/\nu})$. Os cruzamentos de

$$R_L(\lambda) \equiv \frac{\ln[r_A(\lambda, L-2)/r_A(\lambda, L)]}{\ln[L/(L-2)]} \quad (5.11)$$

forneem as estimativas para z_L . Como no caso de S_L discutido acima, os valores de λ nos cruzamentos também são esperados convergir para λ_c .

Além das relações mostradas acima, vimos que o comportamento crítico de transições de fase em modelos com estados absorventes também pode ser caracterizado pelas razões entre momentos do parâmetro de ordem do tipo $m_n/(m_r^i m_s^j)$ para $ir + js = n$, relação satisfeita no ponto crítico. Em especial analisamos a kurtosis $q = K_4/K_2^2$ e as razões m_{211} , m_{3111} e $m_{-1}m_1$, sendo $m_{-1} \equiv (L/2) \sum_C \bar{p}_C N_a^{-1}$ e $m_1 = \rho$. Espera-se que os valores de λ que marcam os cruzamentos das curvas referentes a tamanhos consecutivos do sistema (L e $L+2$) para as razões citadas convirjam para λ_c quando $L \rightarrow \infty$.

Como discutido acima, para determinar o ponto crítico λ_c vamos usar os cruzamentos entre as quantidades S , R , e as razões entre os momentos. Após a análise preliminar dos cruzamentos, mostrados na figura 5.5, determinamos os pontos de interseção entre as curvas usando o algoritmo de Neville. A figura 5.6 mostra os resultados para os cruzamentos de S_L . Nota-se, entretanto, que esta quantidade exhibe um comportamento não monotônico com o tamanho L do sistema, o que não ocorre para as demais quantidades

no intervalo de tamanhos estudados, como mostra a figura 5.7.

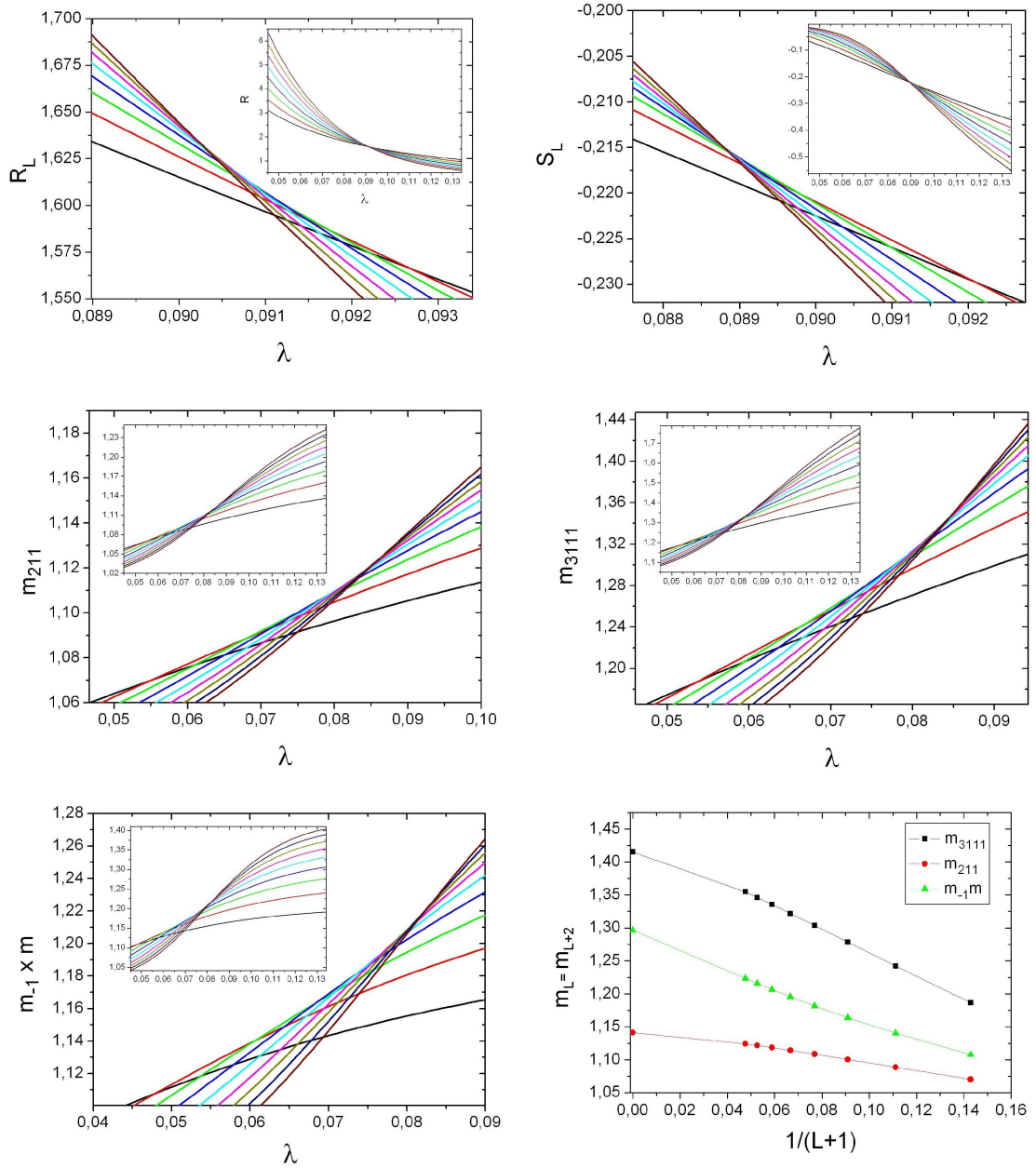


Figura 5.5: As figuras principais mostram uma vista aproximada dos locais onde ocorrem os cruzamentos de R_L e S_L e das razões m_{211} , m_{3111} e $m_{-1}m$ em função de λ para os tamanhos de $L = 6$ a $L = 22$. A distância entre os pontos de interseção diminui a medida que L aumenta. O comportamento em um intervalo maior de λ é mostrado no interior das figuras. A figura inferior direita mostra as extrapolações dos cruzamentos entre os momentos $m_L = m_{L+2}$ usando BST; os valores extrapolados são mostrados em $x = 0$ onde as linhas são apenas guias para os olhos. Demais legendas no gráfico.

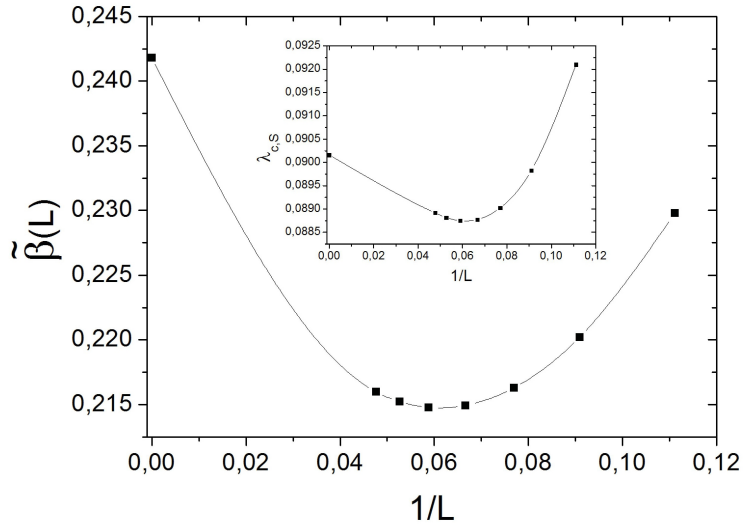


Figura 5.6: Valores de cruzamento para $\tilde{\beta}(L)$ versus $1/L$. No interior da figura mostramos os pontos de cruzamento $\lambda_{S,L}$. Os pontos em $x = 0$ mostram os valores extrapolados usando BST, onde as linhas são apenas guias para os olhos.

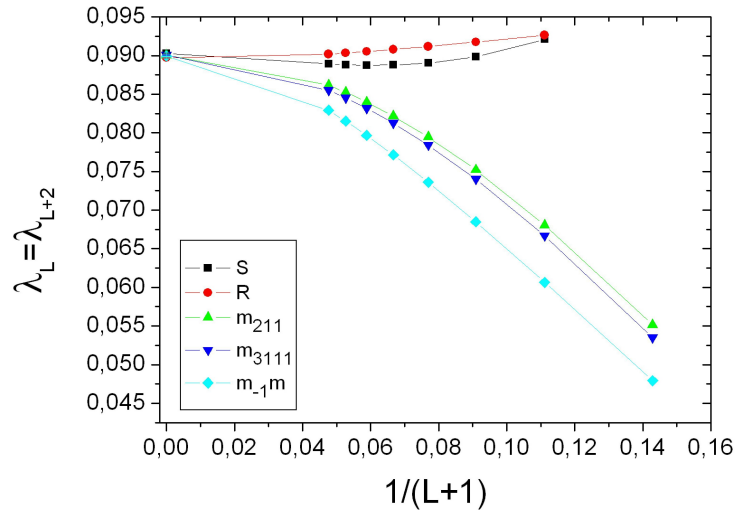


Figura 5.7: Valores de cruzamentos $\lambda_{.,L}$ para R_L , S_L , m_{211} , m_{3111} e $m_{-1}m_1$ (de cima para baixo).

A estimativa de λ_c usando BST depende dos valores de ω determinados pelos cruzamentos entre as curvas referentes a uma dada sequencia inicial de pontos. A figura 5.6 mostra o comportamento para $\lambda_{c,S}$ (estimativa para λ_c a partir dos valores de cruzamento de $\lambda_{S,L}$). Neste caso existem quatro cruzamentos, que ocorrem em $\omega = 1.051380$, 1.658703 , 2.109962 , e 2.550852 ; os valores associados a $\lambda_{c,S}$ são 0.0904577 , 0.0903878 , 0.0902354 , e

0.0900773. Para escolher entre esses valores, usamos o ajuste da função 5.9, mostrada na análise do método BST. Isso implica que procuramos pela função

$$\lambda_{S,L} = \lambda_{c,S} + \frac{A}{L^{y_1}} + \frac{B}{L^{y_2}} \quad (5.12)$$

onde $y_2 > y_1$. O ajuste desta leva ao valor $y_1 = 2.02$. Usando os valores de ω próximo a y_1 , temos $\lambda_{c,S} = 0.09016$. Esse procedimento é usado na obtenção das demais estimativas (mostradas nas tabelas 5.3 e 5.4) onde notamos que a correção ao expoente de escala y_1 encontra-se na faixa de 2.02-2.23 para os valores de cruzamento λ , e na faixa 1.1-1.6 para as quantidades associadas a $\tilde{\beta}$, z , e as razões entre momentos.

As tabelas 5.3 e 5.4 incluem as extrapolações polinomiais, de maior grau possível, como alternativa às estimativas das quantidades de interesse. Dessa forma, a estimativa final para a quantidade de interesse fica determinada pela média entre o resultado via BST e via ajuste polinomial. A diferença entre as duas estimativas determina a incerteza associada ao observável. Usando as cinco estimativas independentes para λ_c , encontramos $\lambda_c = 0.08996(7)$ via BST e $0.09007(10)$ via ajuste polinomial. A média desses resultados leva a estimativa final para o ponto crítico, como sendo $0.09002(10)$. Os valores encontrados para λ_c e as razões entre os momentos são consistentes com os resultados da simulação, enquanto que as estimativas para β/ν_\perp e z não são. (Uma comparação detalhada será feita no próximo capítulo.) A figura 5.7 mostra os dados obtidos para tamanhos finitos e os valores extrapolados de $\lambda_{.,L}$.

Os valores para a kurtosis em λ_c aproximam-se do limite $q_c = -0.454(4)$ (ver Fig. 5.8). Para um dado tamanho do sistema, $q(\lambda, L)$ exhibe um mínimo na vizinhança de λ_c ,

Tabela 5.3: Estimativas para a taxa de dormir λ_c obtidas via análise da distribuição de probabilidade QS usando extrapolações via BST e ajustes polinomiais. Na última coluna são mostrados os valores do expoente dominante no ajuste da função 5.9.

Quantidade	BST	Ajuste pol.	y_1
$\lambda_{c,S}$	0.09016	0.09039	2.019
$\lambda_{c,R}$	0.08973	0.08993	2.143
$\lambda_{c,211}$	0.08999	0.09008	2.23
$\lambda_{c,3111}$	0.08995	0.09016	2.09
$\lambda_{c,-11}$	0.08998	0.08979	2.09

Tabela 5.4: Estimativas das propriedades críticas obtidas via análise da distribuição de probabilidade QS usando extrapolações via BST e ajustes polinomiais. A coluna y_1 mostra os valores do expoente dominante da função 5.9 (nos casos onde a análise BST leva a um único cruzamento não usamos o ajuste da função citada). A última coluna nos dá a estimativa final para cada expoente crítico.

Quantidade	BST	Ajuste pol.	y_1	Melhor est.
β/ν_\perp	0.2418(1)	0.2405(1)	1.31	0.241(1)
z	1.668(1)	1.660(1)	1.52	1.664(4)
γ/ν_\perp	0.5428(1)	0.53942(1)		0.541(2)
m_{211}	1.1412(1)	1.1422(1)	1.58	1.1417(5)
m_{3111}	1.4151(1)	1.4249(1)		1.420(5)
$m_{-1}m$	1.2965(1)	1.3203(1)	1.10	1.308(12)
q	-0.460(5)	-0.454(4)		-0.457(6)

o que também é observado para o processo de contato [41]. Extrapolando $q(\lambda, L)$ para $L \rightarrow \infty$ usando uma série de valores próximos a λ_c , nós obtemos uma função que exhibe um mínimo próximo a $\lambda = 0.0947$ (o valor da função no mínimo é -0.521). Como veremos no próximo capítulo, este resultado mostra que o valor do mínimo de q não está localizado no ponto crítico. Analisando a variância do parâmetro de ordem χ , verifica-se que existe um máximo mesmo para tamanhos pequenos, como mostrado na figura 5.9. Usando o valor para o ponto crítico $\lambda_c = 0.09002$ encontramos $\gamma/\nu_\perp = 0.541(2)$ como nossa melhor estimativa, como mostra a tabela 5.4 (neste caso, os pontos a serem analisados exibiam uma curvatura nos dados log – log, levando-nos a usar as estimativas das inclinações locais, definidas como $\tilde{\gamma}(L) \equiv \ln[\chi(L+1)/\chi(L-1)]/\ln((L+1)/(L-1))$ para determinar

o valor extrapolado).

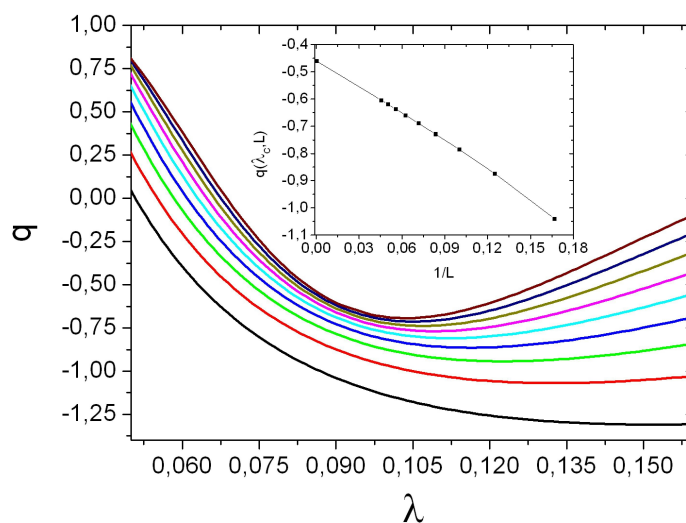


Figura 5.8: Kurtosis q em função de λ para os tamanhos 6, 8, ..., 22 (de baixo para cima). No interior da figura são mostrados os valores de $q(L)$ no ponto crítico e nossa estimativa para $q_{\lambda_c, \infty}$.

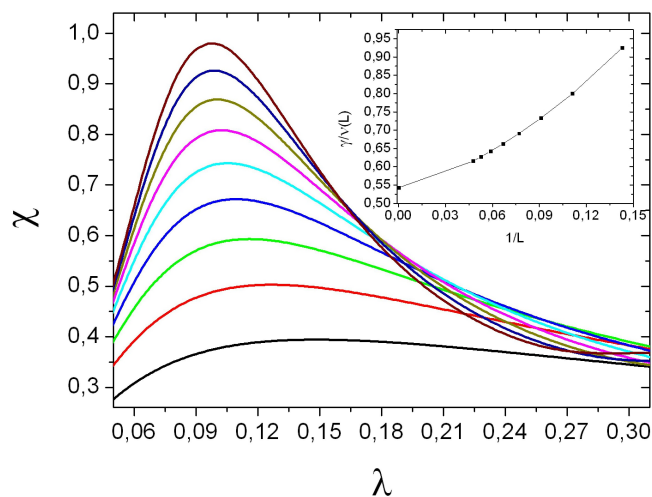


Figura 5.9: Variância escalada χ em função de λ para os tamanhos 6, 8, ..., 22 (de baixo para cima). No interior da figura são mostradas as estimativas de γ/ν_{\perp} obtidas via análise das inclinações locais, e o valor extrapolado para tamanho infinito.

Enquanto as análises descritas acima fornecem as razões entre os expoentes β/ν_{\perp} e $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$, é possível estimar ν_{\perp} diretamente. A análise de tamanho finito leva a $m_{211} \simeq \mathcal{R}(\Delta L^{1/\nu_{\perp}})$, onde \mathcal{R} é uma função de escala. Então $r' \equiv |dm_{211,L}/d\lambda|_{\lambda_c} \propto L^{1/\nu_{\perp}}$. Para determinar r' em λ_c , construímos um ajuste linear no intervalo $0.08992 \leq \lambda \leq 0.09012$ com incrementos de $\Delta\lambda = 10^{-5}$. Desde que as estimativas de r' em função de L exibem uma curvatura significativa, o expoente ν_{\perp} é estimado usando as inclinações locais, fazendo $\nu_{\perp}(L) = \ln(L/(L+2))/\ln(r'_L/r'_{L+2})$. A extrapolação via BST dessas estimativas leva a $\nu_{\perp} = 1.293(5)$. Da mesma forma, obtemos $\nu_{\perp} = 1.285(10)$ e $1.2644(2)$ através do parâmetro de ordem ρ (fazendo $r' \equiv |d\ln \rho/d\lambda|_{\lambda_c}$) e do fluxo de probabilidade QS para o estado absorvente r_A . Baseado nesses resultados encontramos $\nu_{\perp} = 1.281(9)$.

Capítulo 6

Simulações de Monte Carlo

Simulações de Monte Carlo (MC), em geral, reproduzem de maneira estocástica a dinâmica de um dado sistema, (seja ele real, uma aproximação ou apenas um modelo matemático) através de uma sequência de números aleatórios. Desde que cada execução da evolução do modelo seja realizada com uma sequência diferente desses números, o método de simulação de MC torna-se um método de amostragem e os resultados obtidos devem ser diferentes dentro de uma incerteza estatística. Apesar da idéia de tratar a evolução de certos sistemas como sendo de natureza estocástica ser bem antiga, simulações de Monte Carlo surgiram na década de 1940 quando Fermi, Ulam, von Neumann, Metropolis e outros [40] começaram a considerar o uso de amostragem aleatória para examinar diferentes problemas. Desde então, vários métodos de simulação de MC têm sido desenvolvidos, permitindo avaliar sistemas que em princípio não possuem uma solução exata. Sua aplicação pode ser encontrada no estudo da evolução de sistemas com muitas entidades interagentes (fluidos, materiais magnéticos, polímeros, etc.) bem como em várias partes da ciência [40].

Neste capítulo, mostraremos como a evolução do modelo SRW é feita através de

uma simulação convencional de MC, em uma rede unidimensional de tamanho L com condições de contorno periódicas.

Inicialmente, $N = L/2$ partículas ativas são distribuídas aleatoriamente entre os sítios da rede, respeitando a condição de somente uma partícula por sítio. A dinâmica do sistema ocorre da seguinte maneira: a cada incremento de tempo, definido como $\Delta t = 1/N_a$, uma partícula ativa é escolhida entre as existentes. Com probabilidade $p = \lambda/(1+\lambda)$ essa partícula torna-se inativa e com probabilidade $q = 1/(1 + \lambda)$ a partícula descreve um passo de tamanho unitário. Para realizarmos essa escolha, sorteamos um número aleatório z em uma distribuição uniforme entre 0 e 1. Caso $z \leq p$ a partícula se torna inativa; caso contrário, a partícula move-se para um de seus primeiros vizinhos, escolhidos com igual probabilidade. Nesse último caso, se o sítio escolhido estiver ocupado por uma partícula ativa, o sistema não muda de estado, permanecendo ambas as partículas ativas. Caso o vizinho esteja ocupado por uma partícula inativa, esta se torna ativa. Sempre que houver uma tentativa de salto para um sítio já ocupado as posições das partículas envolvidas permanecerão inalteradas. Ao fim desse processo o tempo é aumentado para $t = t + \Delta t$ e a partir do regime de interesse o histograma (nesse caso a distribuição de probabilidade QS de encontrar uma configuração com N_a partículas ativas) é atualizado fazendo-se $h(N_a) = h(N_a) + \Delta t$. Todo esse processo deve ser repetido até o tempo t desejado ou até que o sistema alcance o estado absorvente. A partir daí, começamos uma nova simulação, sorteando novas posições iniciais para as partículas e evoluindo novamente o sistema com uma nova sequência de números aleatórios. Um esboço do algoritmo de MC usado para simular a dinâmica Markoviana do modelo SRW está ilustrado na fig 6.1. Padrões espaço-temporais gerados a partir desta dinâmica para diferentes valores de λ são mostrados nas figuras 6.2(a),6.2(b) e 6.2(c) .

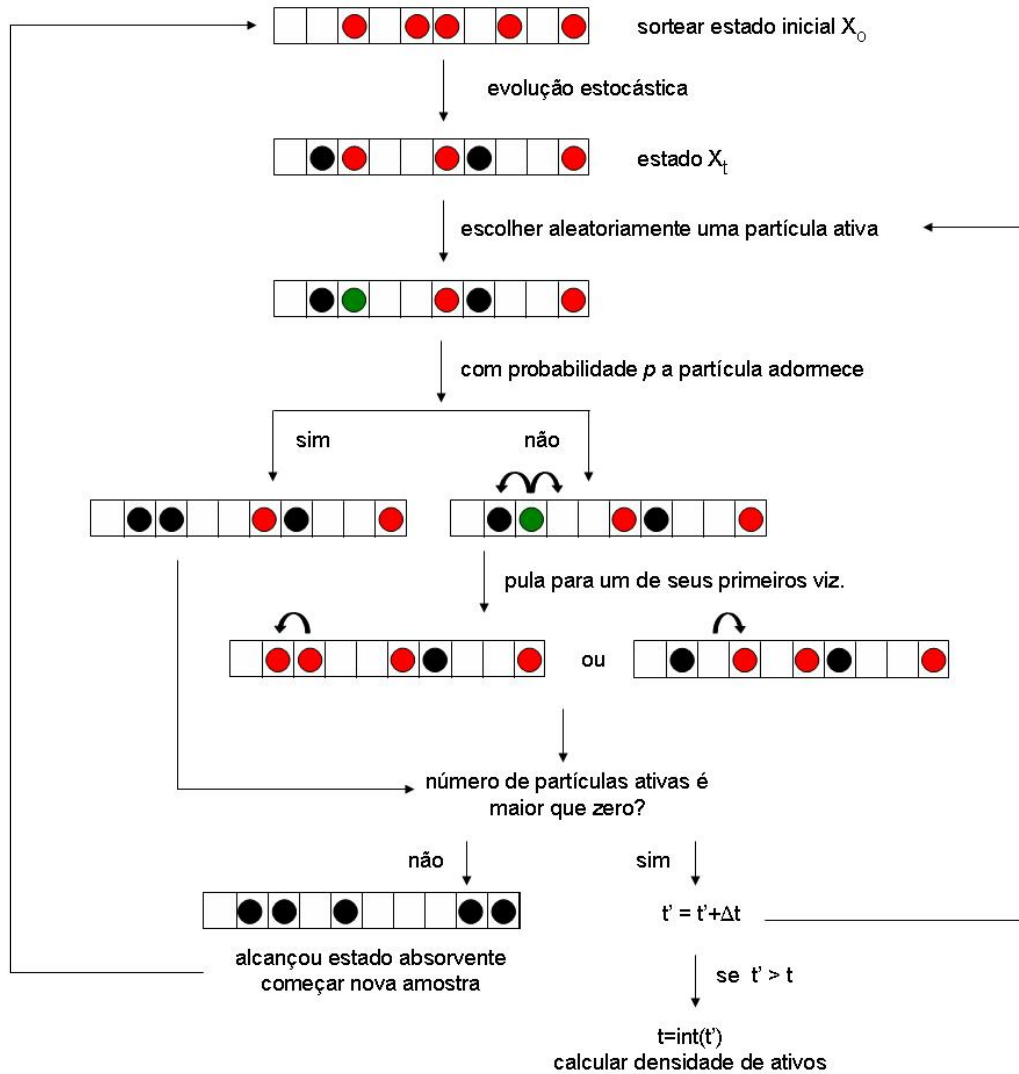


Figura 6.1: Esboço do algoritmo de MC para o modelo SRW em uma rede de tamanho $L = 10$ com 5 partículas. Discos vermelhos e pretos representam respectivamente partículas ativas e inativas. Disco verde representa a partícula escolhida.

Como vimos nos capítulos 2 e 3, sistemas com transições de fase podem ser estudados em dois regimes distintos. Um deles, refere-se à relaxação ao estado quase-estacionário. O outro regime compreende estudar as propriedades do sistema no estado QS. Convencionalmente as propriedades QS são obtidas através de um processo de amostragem, onde os valores das propriedades de interesse (por exemplo o parâmetro de ordem) são médias $\phi(t)$ sobre realizações sobreviventes até o tempo t . Para tempos curtos essas médias exibem um transiente que relaxa para o regime QS; para tempos longos $\phi(t)$ flutua expressiva-

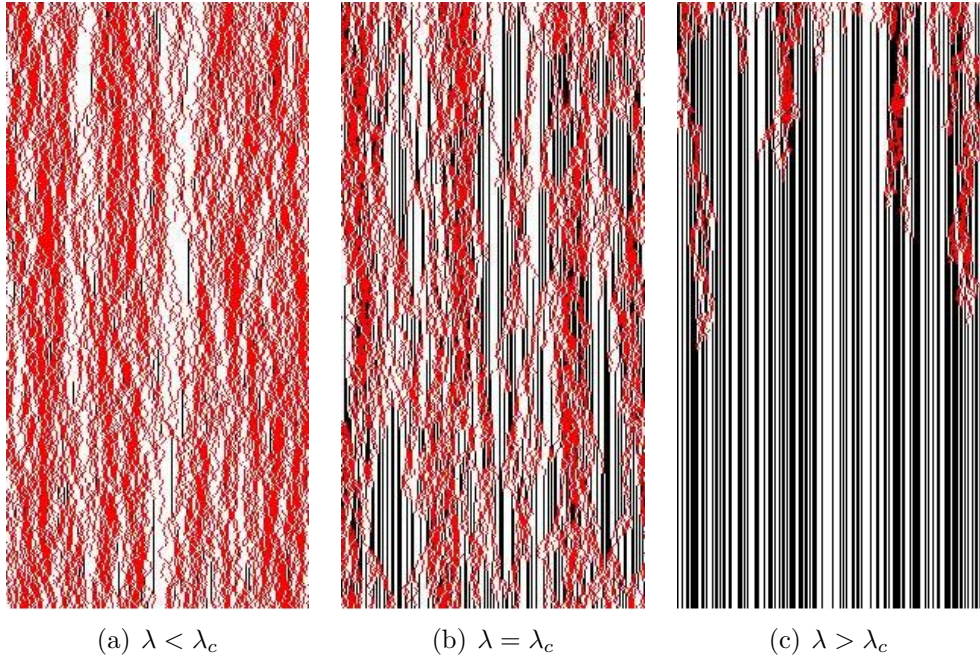


Figura 6.2: Padrões espaço-temporais para valores da taxa de dormir (a) $\lambda = 0.01$, (b) $\lambda = 0.090085$ e (c) $\lambda = 0.2$. O eixo vertical representa a evolução temporal a partir de uma configuração inicial (parte superior) até $t = 400$ (parte inferior); O eixo horizontal representa a atividade das partículas em uma rede de tamanho $L = 200$. As cores vermelho e preto representam respectivamente partículas ativas e inativa, enquanto sítios vazios são representados pela cor branca.

mente. Entretanto, através dessa análise é possível encontrar uma região do estado QS com flutuações limitadas, permitindo estimar o valor de ϕ com precisão aceitável. Muitas vezes esse é um processo custoso computacionalmente, sendo necessário o uso de novas técnicas.

Para estudar o regime QS, utilizamos um método de simulação baseado na equação de movimento da distribuição de probabilidade, proposto em 2005 por M. M. de Oliveira e R. Dickman [37]. Esse método tem se mostrado bastante eficiente na determinação das propriedades QS de sistemas exibindo transições de fase para estados absorventes. A grande vantagem nesse tipo de análise é o tempo computacional gasto para determinar as propriedades de interesse, que chega a ser uma ordem de grandeza menor quando comparado ao método de simulação convencional. O método consiste em utilizar configurações

não absorventes armazenadas em uma lista durante o processo de evolução estocástica. Cada vez que a dinâmica levar a um estado absorvente, a configuração responsável por esta transição é substituída por uma não absorvente, escolhida aleatoriamente entre as configurações da lista e, a partir desta configuração, a evolução do sistema continua da forma usual (com as mesmas probabilidades de transição). Dessa forma, ao invés de iniciarmos uma nova amostra com todas as partículas ativas sempre que o sistema “cair” em um estado absorvente, continuamos a evolução a partir de uma configuração não absorvente armazenada. Por sua vez, a lista de configurações utilizada deve ser atualizada periodicamente trocando-se uma configuração existente pela configuração atual. Com este processo e para tempos suficientemente longos, o sistema visitará estados de acordo com a distribuição QS, como foi demonstrado na Ref. [37]. Na figura 6.3 mostramos a evolução temporal utilizando esse método no modelo SRW. Descartado o tempo de relaxação T_R necessário para que o sistema atinja o estado QS, é acumulado um histograma $h(n)$ contendo o tempo em que o estado n foi visitado até o fim da simulação.

6.1 Resultados

Usando simulações QS, estudamos o modelo SRW em redes de tamanhos $L = 100, 200, 400, 800, 1000, 2000, 4000, 8000, 16000$ e $L = 32000$. Cada realização do processo foi feita através de $T = 10^9$ passos de tempo. Apesar de uma análise preliminar indicar que o tempo de relaxação necessário para que o sistema atingisse o estado QS fosse $T_R \approx 3 \times 10^7$ para $L = 32000$, decidimos por descartar os primeiros $T_R = 10^8$ passos de tempo, garantindo que todo o transiente inicial fosse eliminado. A figura 6.4 mostra a evolução temporal para $L = 32000$ para diferentes valores do parâmetro de controle. Para

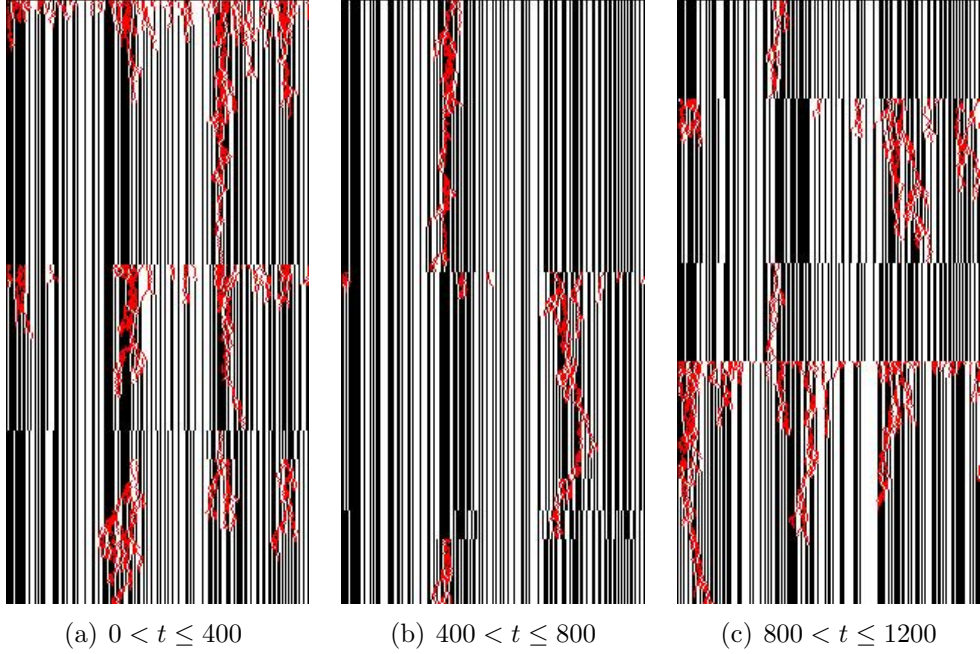


Figura 6.3: Padrão espaço-temporal para o SRW usando método de simulação QS com $\lambda = 0.22$ em uma rede com $L = 200$ sítios. As figuras (a), (b) e (c) mostram a evolução temporal do sistema nos intervalos de tempo mostrado embaixo das figuras. Cores iguais à figura 6.2.

continuarmos a evolução do sistema após uma tentativa de visita a um estado absorvente, salvamos uma lista com $M = 1000$ configurações. Tais configurações eram atualizadas para $T > T_R$ com probabilidade $p_{rep} = 10^{-5}$. Já durante o tempo de relaxação as configurações eram atualizadas com probabilidade $p_{rep} = 10^{-2}$, de forma a apagar a memória inicial. A escolha do valor de p_{rep} foi feita de modo a satisfazer a condição de que o tempo de permanência (τ_M) de uma configuração na lista deve ser maior que o tempo de vida τ do sistema, permitindo portanto o uso das configurações armazenadas. Essa condição pode ser escrita como $T > \tau_M > \tau$, onde $\tau_M = M/p_{rep}$. O tempo de vida pode ser estimado usando o número de vezes N_{abs} em que o sistema tentou visitar o estado absorvente, fazendo-se $\tau = (T - T_R)/N_{abs}$. Para cada valor de λ analisado foram usadas $N_R = 20$ amostras para o cálculo das médias e das incertezas, com exceção de $L = 16000$ para o qual foram usadas $N_R = 40$ amostras. Para aumentar a eficiência do algoritmo, uma

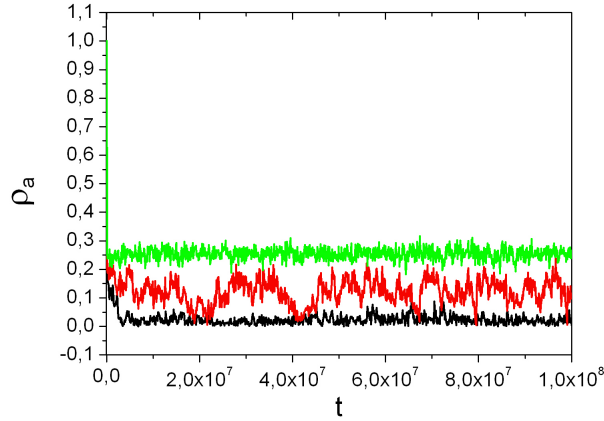


Figura 6.4: Densidade de ativos ρ_a em função do tempo t de MC usando simulações QS para diferentes valores de $\Delta \equiv (\lambda_c - \lambda)/\lambda_c$. A partir de baixo temos $\Delta = -0.01$, 0 e $\Delta = 0.01$.

lista com as posições das partículas ativas era armazenada de forma a evitar a escolha de partículas inativas durante a evolução do sistema. Para $T > T_R$ acumulamos um histograma $h(N_a)$ do tempo total em que o sistema esteve com N_a partículas ativas. Assim, o histograma normalizado é a nossa melhor estimativa para a distribuição de probabilidade $P(N_a)$, a partir da qual podemos determinar qualquer momento do parâmetro de ordem fazendo $m_k = \sum_{N_a=1}^N (N_a/N)^k P(N_a)$. O histograma também permite estimar o tempo de vida no estado QS através da relação $\tau_h = 1/[\lambda P(1)]$, onde o subscrito h serve apenas para distinguir daquele encontrado a partir do número de visitas ao estado absorvente.

O tempo computacional gasto em redes de tamanho $L = 32000$ e tempo total $T = 10^8$ ¹ foi de aproximadamente $t = 10.2$ horas para $\Delta = 0$, $t = 34.5$ horas para $\Delta = 0.01$ e $t = 1.7$ horas para $\Delta\lambda = -0.01$ em processadores de $2.66GHz$. O comportamento da densidade de ativos QS é mostrado na figura 6.4 para alguns valores de $\Delta \equiv (\lambda_c - \lambda)/\lambda_c$ tomados em intervalos de tempo $\Delta T = 10^5$. Podemos notar dessa figura que, no ponto crítico, as flutuações são bem maiores do que para $|\Delta = 0.01|$.

¹Para $T = 10^9$ o tempo computacional é aproximadamente 10 vezes maior.

6.1.1 Comportamento dos observáveis no ponto crítico.

Para estimar a localização do ponto crítico λ_c usamos os cruzamentos da razão entre momentos $m_{211} = m_2/m_1^2$ entre pares de tamanhos de rede consecutivos, usando redes de tamanho $L = 100$ a $L = 4000$, tempo de simulação $T = 10^7$ e $T_R = 10^6$ e $N_R = 40$ amostras. A análise preliminar é mostrada nas figuras 6.5(a) e 6.5(b). Este cálculo, sem caráter definitivo, permite estimar de forma rápida a região da transição entre as fases ativa e inativa.

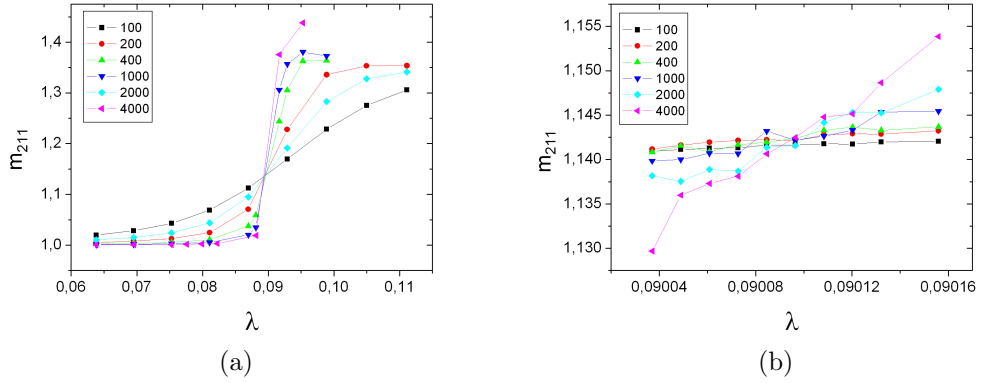


Figura 6.5: Estimativa do ponto crítico através dos cruzamentos de m_{211} usando intervalos de (a) $\Delta\lambda \approx 5 \times 10^{-3}$ e (b) $\Delta\lambda \approx 1,2 \times 10^{-5}$.

A partir da estimativa preliminar de λ_c , todos os tamanhos até $L = 32000$ foram usados próximo a essa região com os parâmetros mencionados no início desta seção. O ponto crítico foi então determinado através dos cruzamentos de m_{211} e através da análise de tamanho finito que prevê as leis de potência para $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ e $\tau \sim L^z$ na transição. Os desvios das leis de potência são facilmente verificados através de uma curvatura não nula quando plotamos ρ e τ em escala logarítmica. Esse comportamento é mostrado nas figuras 6.6 e 6.7. Uma vez que m_{211} independe do tamanho do sistema no ponto crítico, o desvio do ponto crítico é identificado quando plotamos m_{211} em função de $1/L$. Usando

esses critérios encontramos $\lambda_c = 0.090085(12)$. Uma característica exibida pelo modelo é o forte efeito de tamanho finito (mostrado no interior das figuras 6.6, 6.7 e 6.8) para $L < 1000$. Devido a isso, as estimativas finais para os expoentes críticos foram obtidas usando-se somente os tamanhos $L \geq 1000$. Como discutido no capítulo 3, espera-se que o primeiro momento negativo $m_{-1} \equiv \langle \rho_{-1} \rangle$ comporte-se como uma lei de potência no ponto crítico, satisfazendo a relação $m_{-1}(L, \lambda_c) \propto L^{\beta/\nu_{\perp}}$, e conseqüentemente, permitindo uma estimativa adicional do expoente β/ν_{\perp} .

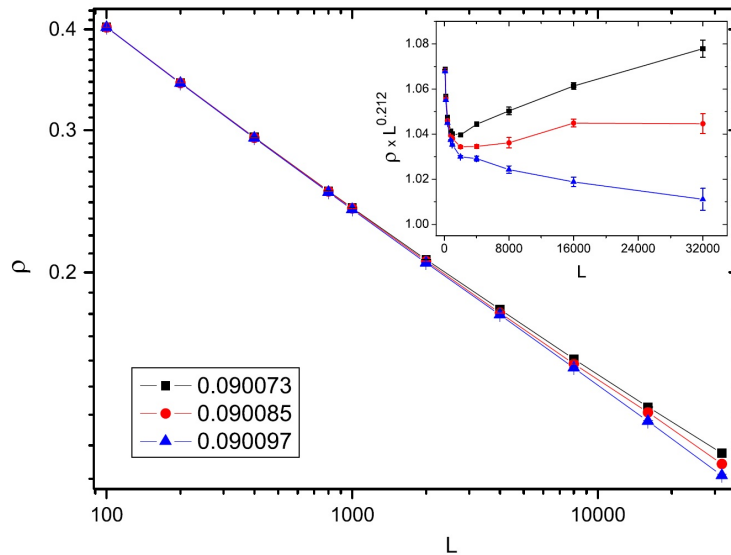


Figura 6.6: Parâmetro de ordem ρ em função do tamanho do sistema L . Interior: $\rho \times L^{0.212}$ versus L . As linhas são apenas guias para os olhos.

Usando os dados para $L \geq 1000$ encontramos $\beta/\nu_{\perp} = 0.212(6)$ a partir da análise de ρ e $\beta/\nu_{\perp} = 0.217(10)$ a partir de m_{-1} . A análise do tempo de vida QS τ e τ_h levou respectivamente ao expoente dinâmico $z = 1.50(4)$ e $z_h = 1.51(4)$. Já o valor da razão entre momentos levou a $m_{211,c} = 1.141(8)$. Para o expoente característico determinado através da relação $\chi(L, \lambda_c) \propto L^{\gamma/\nu_{\perp}}$ encontramos $\gamma/\nu_{\perp} = 0.58(1)$ usando os dados para $L \geq 4000$, uma vez que a melhor reescala ($\chi(L, \lambda_c)L^{-\gamma/\nu_{\perp}}$) foi obtida nessa região (ver interior da

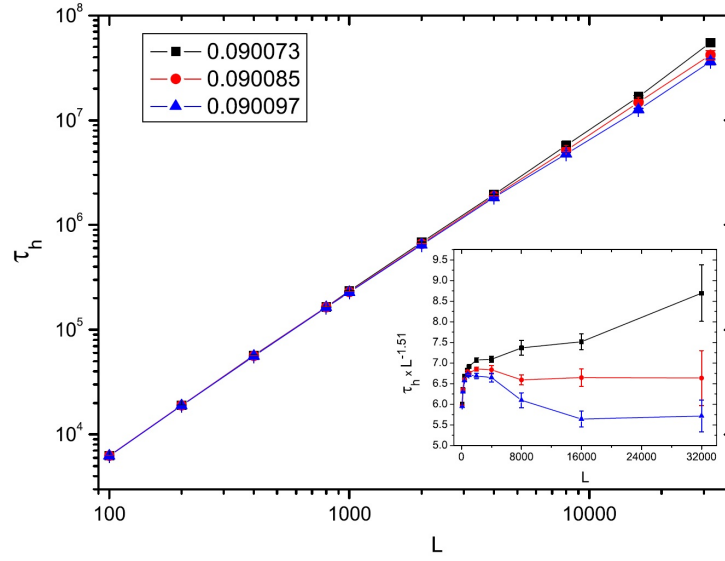


Figura 6.7: Tempo de vida QS τ_h versus o tamanho do sistema L . Interior: $\tau_h \times L^{-1.51}$ versus L . As linhas são apenas guias para os olhos.

figura 6.8). Restringindo a mesma análise para tamanhos maiores, as estimativas para os expoentes analisados concordam dentro das incertezas dos valores citados acima, como mostrado na tabela 6.1. Em todos os casos, a principal contribuição para a incerteza dos valores mencionados é devido à própria incerteza em λ_c . Para ilustrar o cálculo dessa quantidade consideremos o parâmetro de ordem mostrado na figura 6.6. Considere que as inclinações para $\lambda = 0.090073$, $\lambda_c = 0.090085$ e $\lambda = 0.090097$, tomadas a partir de $L = 1000$, valham $(\beta/\nu_\perp)^-$, β/ν_\perp e $(\beta/\nu_\perp)^+$. O erro em β/ν_\perp é determinado somando a incerteza de β/ν_\perp (encontrada pelo ajuste linear) mais a média entre as inclinações acima e abaixo de λ_c . Explicitamente temos:

$$\begin{aligned} \beta/\nu_\perp &= 0.2121 \pm [0.0004 + |((\beta/\nu_\perp)^- + (\beta/\nu_\perp)^+)/2|] \\ &= 0.2121 \pm [0.0004 + |(0.2065 - 0.2176)|/2] = 0.212(6). \end{aligned}$$

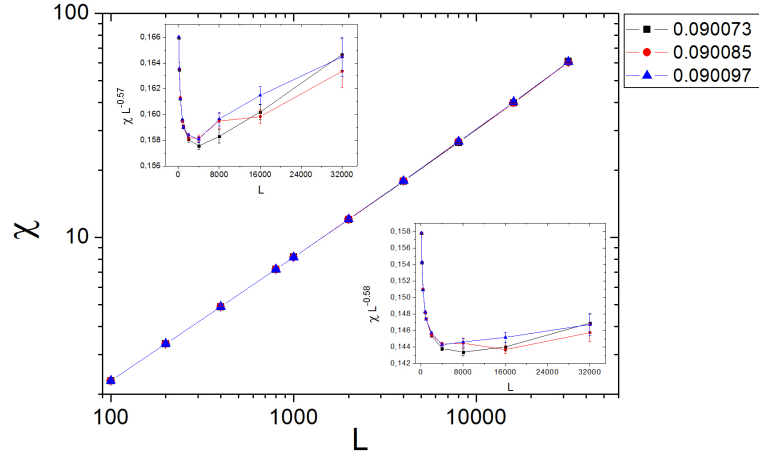


Figura 6.8: Variância reescalada χ versus o tamanho do sistema L . Inset superior: $\chi \times L^{-0.57}$ versus L . Inset inferior: $\chi \times L^{-0.58}$ versus L . As linhas são apenas guias para os olhos.

Tabela 6.1: Estimativas do expoente β/ν_{\perp} a partir de ρ e $(\beta/\nu_{\perp})^*$ a partir de m_{-1} . O expoente dinâmico z é determinado através de N_{abs} e pelo histograma $h(N_a)$. O expoente γ/ν_{\perp} obtido a partir da variância reescalada também é analisado. Os valores foram obtidos em diferentes regiões de L .

	$100 \leq L \leq 1000$	$L \geq 1000$	$L \geq 2000$	$L \geq 4000$
β/ν_{\perp}	0.2260(8)	0.212(6)	0.208(8)	0.206(11)
$(\beta/\nu_{\perp})^*$	0.2295(17)	0.217(10)	0.213(13)	0.210(19)
z	1.578(7)	1.50(4)	1.48(6)	1.46(9)
z_h	1.578(3)	1.51(4)	1.49(6)	1.48(10)
γ/ν_{\perp}	0.5500(4)	0.571(2)	0.576 (2)	0.58(1)

O expoente ν_{\perp} foi calculado através das derivadas $r' \equiv |d \ln \rho / d \lambda|$, $dm_{211}/d\lambda$, $|d \ln \tau / d \lambda|$ e $|d \ln \tau_h / d \lambda|$ no ponto crítico. Os valores $\lambda = 0.090073$, 0.090085 e 0.090097 foram usados para estimar r' em λ_c . A figura 6.9 mostra o comportamento de r' em função do tamanho do sistema. As estimativas para ν_{\perp} são mostradas na tabela 6.2 usando os tamanhos $L \geq 1000$. Uma média ponderada leva ao valor $\nu_{\perp} = 1.31(4)$. A falta de consistência entre os valores obtidos por meio de diferentes quantidades não permitiu a determinação do expoente com boa precisão.

No ponto crítico, espera-se que a distribuição de probabilidade para $\rho_a \equiv N_a/N$

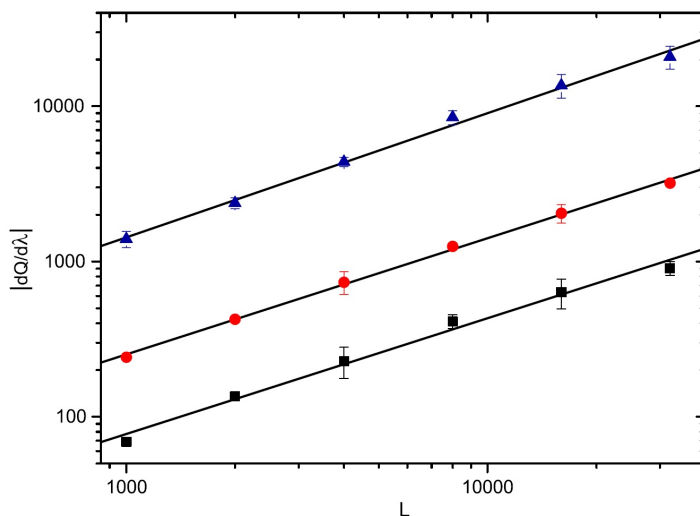


Figura 6.9: Derivadas $r' \equiv |dQ/d\lambda|_{\lambda_c}$ para m_{211} (quadrados), $\ln \rho$ (círculos), $\ln \tau$ e $\ln \tau_h$ (triângulos para cima e para baixo). As linhas são ajustes lineares aos dados e suas inclinações são 0.746(37), 0.749(16), e 0.80(3) de baixo para cima.

Tabela 6.2: Estimativas de ν_{\perp} obtidas a partir da análise das derivadas de m_{211} , $\ln \rho$, $\ln \tau$.

$r' \equiv dQ/d\lambda _{\lambda_c}$	$Q \equiv m_{211}$	$Q \equiv \ln(\rho)$	$Q \equiv \ln(\tau)$
$1000 \leq L \leq 32000$	1.34(7)	1.34(4)	1.25(5)

tenha a seguinte forma [38]:

$$P_L(\rho_a, \lambda_c) = \frac{2}{\bar{\rho}L} \tilde{P}(\rho_a/\bar{\rho}), \quad (6.1)$$

onde $\bar{\rho} \equiv \langle \rho_a \rangle$ e \tilde{P} é uma função de escala normalizada. O prefator de \tilde{P} é devido à normalização de P_L , com $N = L/2$. A figura 6.10 mostra a distribuição de probabilidade no ponto crítico para tamanhos de rede de $L = 1000$ a $L = 32000$ e a reescala em P_L usando a função de escala 6.1. Também podemos notar que, apesar da distribuição de probabilidade sofrer efeitos de tamanho finito, os tamanhos $L = 16000$ e $L = 32000$ apresentam um colapso muito bom. O histograma que acumulamos durante a simulação é uma função do número de partículas ativas N_a e não de ρ_a como mostra a equação

6.1. Usando o critério de normalização da distribuição de probabilidade QS, a relação $NP(N_a) = P(\rho_a)$ é facilmente verificada.

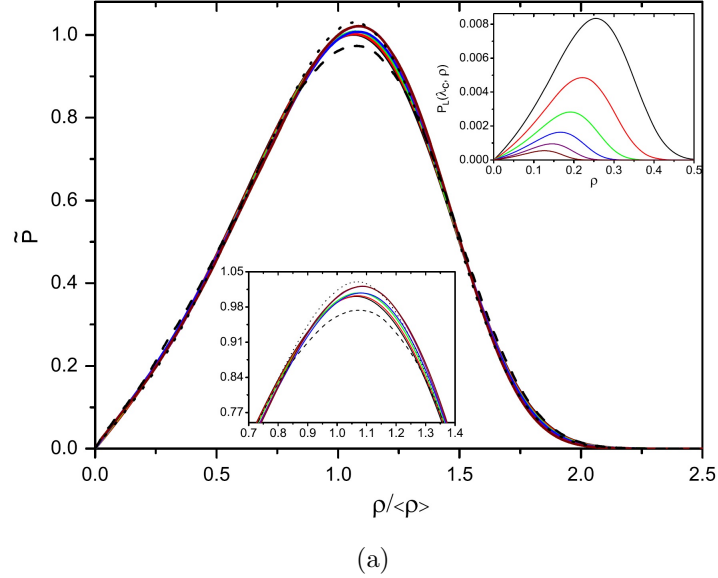


Figura 6.10: Figura principal: Reescala de P_L através da função $\tilde{P} \equiv \bar{\rho}L/2 \times P_L(\rho_a/\bar{\rho})$ versus $\rho_a/\bar{\rho}$ (os tamanhos aumentam de baixo para cima); No canto superior direito a distribuição de probabilidade P_L para sistemas de tamanho $L = 1000, 2000, \dots, L = 32000$ (de cima para baixo). Abaixo da figura principal, o detalhe da região onde \tilde{P} exibe um máximo. As curvas pontilhadas e tracejadas mostram os resultados obtidos para o modelo unidimensional de pilhas de areia restrita usando tamanhos de $L = 20000$ and 50000 respectivamente.

Uma vez que as propriedades da distribuição de probabilidade QS levam à independência sobre o tamanho do sistema no ponto crítico, como verificado na figura 6.10 e discutido no cap. 3, espera-se que as razões entre momentos da forma $m_n/(m_r^i m_s^j)$ para $ir + js = n$, (por exemplo, $m_{211} \equiv m_2/m_1^2$) não dependam do tamanho L do sistema. A fim de verificar essa propriedade, analisamos as razões m_{211} e m_{3111} , o quarto cumulante reduzido q (também conhecido como kurtosis) e $m_{-1}m$, todos definidos no cap. 3. A figura 6.11 mostra o comportamento dessas quantidades, consistente com a análise de tamanho finito, onde, no limite $L \rightarrow \infty$, essas quantidades tendem a valores independentes de L .

Uma extrapolação linear de $m_{-1}m$ usando somente os quatro maiores tamanhos leva ao valor assintótico 1.327(27). Devido às flutuações em torno de um valor médio para as razões entre momentos (com excessão de $m_{-1}m$), os valores característicos são estimados através da média dos valores correspondentes aos tamanhos $L \geq 1000$. Como no caso dos expoentes discutidos anteriormente, a maior parcela da incerteza nessas quantidades se deve à incerteza no ponto crítico. Os valores dessas razões nos pontos $\lambda = 0.090073$ e $\lambda = 0.090097$ são estimados através de uma extrapolação (via ajuste linear) usando os quatro maiores tamanhos. Os resultados obtidos são mostrados na tabela 6.3.

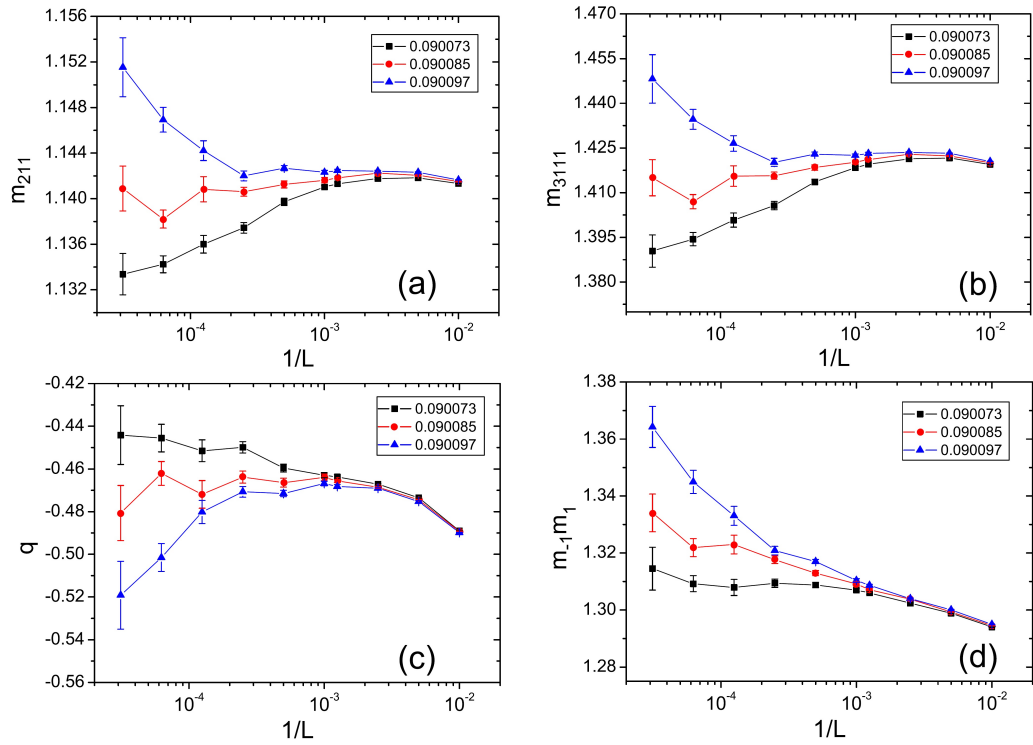


Figura 6.11: Razões entre momentos (a) m_{211} ; (b) m_{3111} ; (c) quarto cumulante reduzido q ; e (d) $m_{-1}m$ versus o tamanho do sistema L .

Tabela 6.3: Razão entre momentos m_{211} , m_{3111} , q e $m_{-1}m$ obtidos via simulações de MC no ponto crítico $\lambda_c = 0.090085$.

	m_{211}	m_{3111}	q	$m_{-1}m$
MC ($\lambda_c = 0.090085(12)$)	1.141(8)	1.415(26)	-0.47(3)	1.327(27)

6.1.2 Comportamento das funções de escala nas proximidades do ponto crítico.

Em adição às propriedades críticas obtidas anteriormente, é de interesse estudar o comportamento do parâmetro de ordem e do tempo de vida em função da distância ao ponto crítico, definida como $\Delta = (\lambda_c - \lambda)/\lambda_c$. A partir dessa definição, podemos estudar dois regimes distintos: um caracterizado pela atividade do sistema - regime supercrítico ($\Delta > 0$) e o outro caracterizado pela inatividade - regime subcrítico ($\Delta < 0$). A análise feita nesses regimes permite verificar as funções de escala características de cada parâmetro, determinadas no cap. 3.

Como veremos a seguir, as funções de escala serão verificadas através do melhor colapso entre as curvas de determinada grandeza em função de Δ . Esses melhores colapsos são determinados graficamente, observando-se os deslocamentos necessários para a superposição das curvas obtidas para diferentes tamanhos do sistema L . Para ilustrar o procedimento, considere a dependência sobre L e Δ do parâmetro de ordem como $\rho(L, \Delta) = L^{-\beta/\nu_\perp} R(\Delta L^{1/\nu_\perp})$ onde R é uma função de escala. Seja $\rho(L_1, \Delta)$ e $\rho(L_2, \Delta)$ a densidade QS para os tamanhos de rede L_1 e L_2 a uma distância Δ em relação ao ponto crítico. Quando plotadas no mesmo gráfico, essas quantidades não estarão superpostas como mostrado à esquerda da figura 6.12. Então deslocamos uma das curvas (no exemplo deslocamos L_2) por uma distância δy no eixo y e δx no eixo x . Com esses deslocamentos as curvas são colapsadas, como ilustrado à direita da figura 6.12. Com esse procedimento,

para o eixo y , teremos

$$\ln(\rho(L_1)) = \ln(\rho(L_2)) + \delta y. \quad (6.2)$$

A dependência de ρ com o tamanho pode ser cancelada fazendo $\rho \times L^{\beta/\nu_\perp}$ (note que estamos cancelando apenas a dependência em y). Sendo assim, em y teríamos a igualdade $\rho(L_1)L_1^{\beta/\nu_\perp} = \rho(L_2)L_2^{\beta/\nu_\perp}$. Usando esta igualdade e a eq. 6.2 temos:

$$\delta y = \ln \frac{\rho(L_1)}{\rho(L_2)} = \beta/\nu_\perp \ln\left(\frac{L_2}{L_1}\right). \quad (6.3)$$

Logo, plotando os deslocamentos δy em função da razão entre tamanhos diferentes,

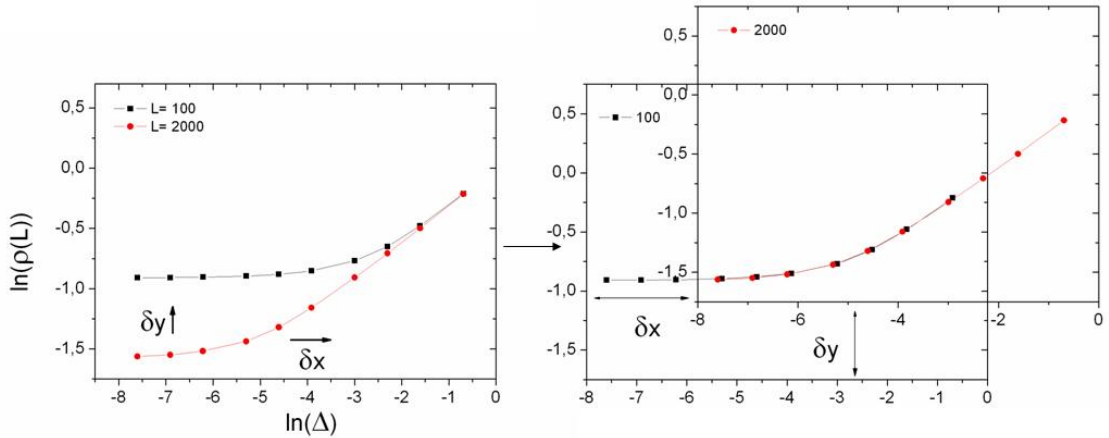


Figura 6.12: Exemplo dos deslocamentos necessários para que haja o colapso de duas curvas, diferenciadas pelo tamanho do sistema. Aqui, usamos o parâmetro de ordem ρ para $L = 100$ e $L = 2000$.

estamos aptos a determinar o expoente que determina o melhor colapso dos dados. Similarmemente a análise em x leva a

$$\delta x = \frac{1}{\nu_\perp} \ln\left(\frac{L_2}{L_1}\right). \quad (6.4)$$

Razões entre L_2/L_1 que levam a dois ou menos pontos foram excluídos da análise

por falta de amostragem. Todas as outras razões foram usadas no cálculo do melhor colapso. Por exemplo, para $L_2/L_1 = 2$ foram usadas as razões 200/100, 400/200, ..., 32000/16000. Já as razões $L_2/L_1 = 320$ (de 32000/100) ou $L_2/L_1 = 160$ foram descartadas.

Em ambos os regimes as distâncias ao ponto crítico analisadas foram $\Delta = 5 \times 10^{-4}$, $(1, 2, 5) \times (10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1})$. Para cada tamanho de rede verificamos o tempo de relaxação necessário para que o estado QS fosse atingido. A partir disso o tempo total de MC foi mudado de forma a economizar tempo computacional. Uma análise preliminar para a rede de tamanho $L = 32000$ mostrou que $T_R \approx 5 \times 10^5$ para o menor valor de Δ , como pode ser verificado na figura 6.13. Com essa estimativa usamos na análise do regime ativo $T = 10^8$ e $T_R = 10^7$. No regime inativo usamos $T = 3 \times 10^8$ e $T_R = 5 \times 10^7$ (como o número de partículas ativas é pequeno, o tempo computacional gasto também é pequeno). Em ambos os regimes o valor da probabilidade de reposição (na matriz QS) de uma configuração após o tempo de relaxação foi $p_{rep} = 10^{-3}$.

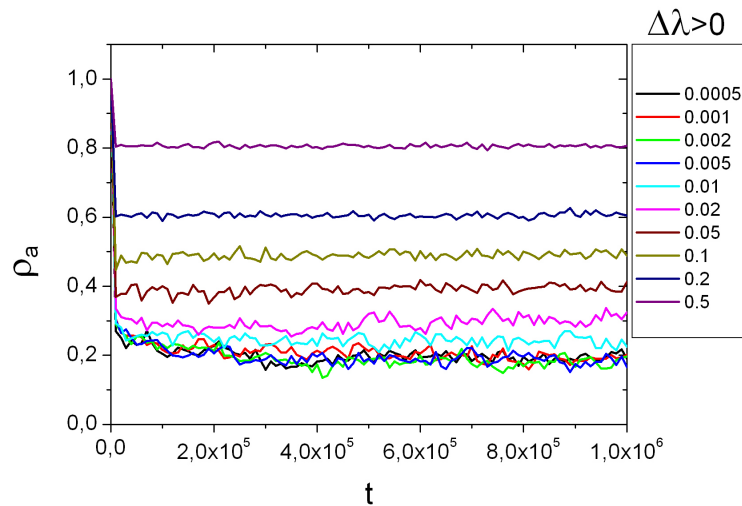


Figura 6.13: Densidade QS em função do tempo para diferentes valores de Δ no regime ativo para $L = 32000$.

No início de cada análise que faremos a seguir, uma breve revisão das propriedades de escala no regime analisado será feita, de forma que o leitor sintá-se confortável quanto às propriedades críticas obtidas.

6.1.2.1 Regime ativo

Como vimos no cap. 3, a dependência do parâmetro de ordem no regime QS fora do ponto crítico pode ser escrita como $\rho(L, \Delta) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}} F(\Delta L^{1/\nu_{\perp}})$. Na região ativa a densidade QS escala com $\rho \sim \Delta^{\beta}$ e portanto a função de escala deve ser $F(x) \propto x^{\beta}$ para $x \gg 1$. Para $x \rightarrow 0$ $F(x)$ deve atingir um valor constante maior que zero. Plotando $\rho^* \equiv \rho L^{\beta/\nu_{\perp}}$ versus $\Delta^* \equiv \Delta L^{1/\nu_{\perp}}$ devemos encontrar $F(x)$ com inclinação β . A figura 6.14(a) mostra ρ em função de Δ para todos os tamanhos analisados.

Através da análise de melhor colapso (figura 6.14(b)) os expoentes encontrados foram $\beta/\nu_{\perp} = 0.218(5)$ e $\nu_{\perp} = 1.34(3)$. Utilizando o colapso das curvas de $\rho(L, \Delta)L^{0.218}$ para $\Delta L^{1/1.34} \geq 10$ encontra-se o valor $\beta = 0.293(2)$ (figura 6.14(c)). A incerteza encontrada nesse expoente é devido somente ao ajuste linear.

A densidade QS também pode ser escrita como $\rho = \Delta^{\beta} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}})$. Para L finito e $\Delta \rightarrow 0$, ρ deve ser não nulo e não singular, levando a $G(x) \sim x^{-\beta}$. No regime ativo e para valores de Δ suficientemente grandes, $\rho \sim \Delta^{\beta}$, o que leva a $G(x) \sim x^0$. Plotando $\tilde{\rho} \equiv \rho \Delta^{-\beta}$ versus Δ^* esperamos que os dados colapsem. Os resultados para ρ em função de L são mostrados na figura 6.15(a) para diferentes valores de Δ . O melhor colapso foi determinado através de uma análise visual variando os parâmetros β e ν_{\perp} . Variando β em incrementos de 0.005, verificamos que o melhor colapso está entre os valores 0.290 e 0.295, levando ao valor final $\beta = 0.293(3)$. Já para os valores de ν_{\perp} encontramos o melhor colapso com os valores entre 1.30 e 1.35, levando ao valor final $\nu_{\perp} = 1.32(3)$. A figura

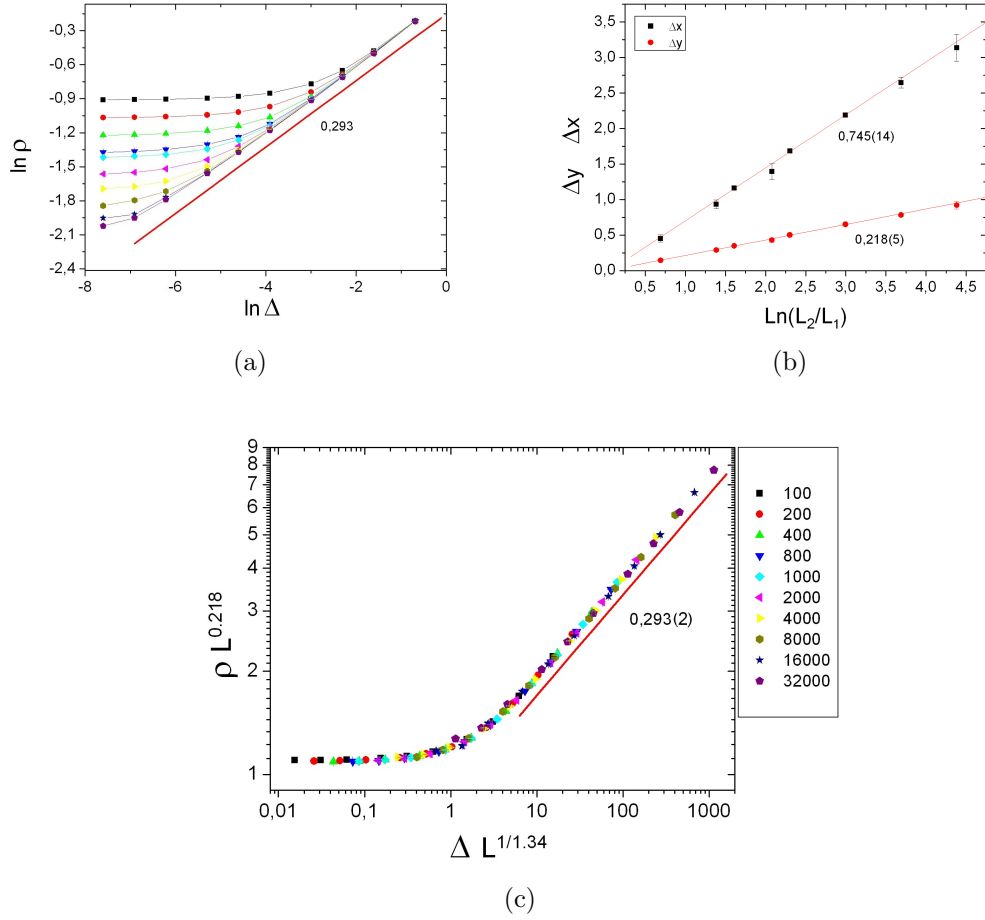


Figura 6.14: (a) Parâmetro de ordem ρ em função da distância ao ponto crítico Δ no regime ativo. (b) Análise do expoente que leva ao melhor colapso (ver texto). (c) Parâmetro de ordem reescalado $\rho L^{0.218}$ versus $\Delta L^{1/1.34}$. As inclinações em (a) e (c) valem $\beta = 0.293$. Ao lado da figura (c) os símbolos correspondentes aos tamanhos do sistema são válidos também para a figura (a).

6.15(b) mostra o colapso dos dados usando os expoentes determinados acima. Usando os dados na região onde $\Delta L^{1/1.32} < 0.2$ encontramos $\beta = 0.288(3)$.

Espera-se que a variância reescalada comporte-se como $\chi(L, \Delta) \propto L^{\gamma/\nu_{\perp}} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}})$.

Por analogia com os fenômenos de equilíbrio temos $\chi \sim \Delta^{-\gamma}$, levando à função de escala $G(x) \sim x^{-\gamma}$. A relação de hiperescala $\gamma = d\nu_{\perp} - 2\beta$ é encontrada calculando-se explicitamente a variância reescalada através da relação $\chi = L^d(\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2)$. A figura 6.16(a) mostra o comportamento de χ em função de Δ para diferentes tamanhos de rede. Para $\Delta = 0.5$, os diferentes tamanhos têm praticamente o mesmo valor para χ indicando

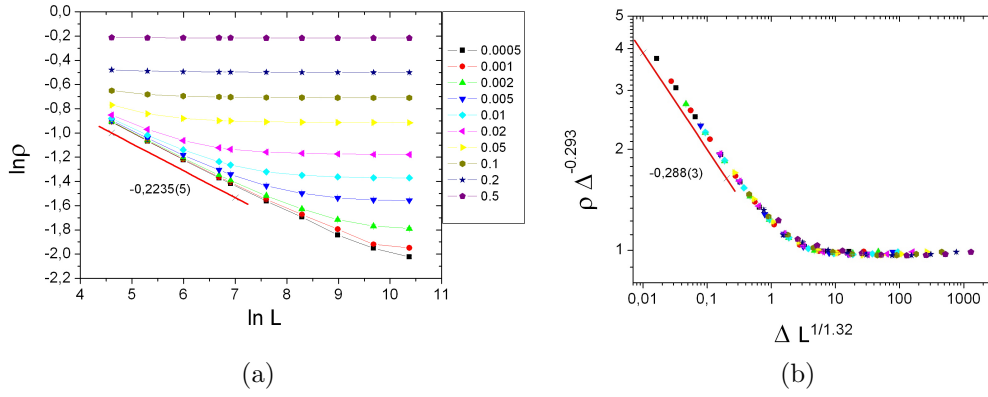


Figura 6.15: (a) Parâmetro de ordem ρ em função do tamanho L do sistema para os valores de Δ mostrados ao lado da figura. (b) Parâmetro de ordem reescalado $\rho\Delta^{-0.293}$ versus $\Delta L^{1/1.32}$. A estimativa final para a inclinação β é $0.288(3)$, ilustrada na reta em (b).

que este ponto estaria fora do regime de escala.

Para estimarmos o expoente γ devemos plotar $\chi^* \equiv \chi L^{-\gamma/\nu_\perp}$ versus Δ^* . Os expoentes que melhor levaram ao colapso dos dados foram $\gamma/\nu_\perp = 0.568(8)$ e $\nu_\perp = 1.32(3)$, como mostrado na figura 6.16(b). Reescrevendo a relação de hiperescala para $d = 1$ como $\beta/\nu_\perp = (1 - \gamma/\nu_\perp)/2$, encontramos $\beta/\nu_\perp = 0.216(5)$, que concorda dentro da incerteza com aquele estimado diretamente através de ρ . Excluindo $\Delta = 0.5$ por estar fora do regime de escala e fazendo um ajuste linear nos pontos para $\Delta L^{1/1.32} > 10$ encontramos $\gamma = 0.733(7)$. A figura 6.16(c) mostra o comportamento da reescala feita para todos os valores de Δ . Os expoentes característicos estão representados por linhas tracejadas na figura 6.17.

Combinando os expoentes encontrados até aqui com a relação de hiperescala $\gamma = d\nu_\perp - 2\beta$, podemos estimar: (a) $\beta = (1.32(3) - 0.733(7))/2 = 0.29(2)$, (b) $\beta/\nu_\perp = (1 - \gamma/\nu_\perp)/2 = (1 - 0.568)/2 = 0.216(5)$ e (c) $\nu_\perp = \gamma + 2\beta = 0.733(7) + 0.580(8) = 1.31(2)$. Todas essas estimativas são consistentes com os valores usados nos colapsos e aqueles encontrados no ponto crítico.

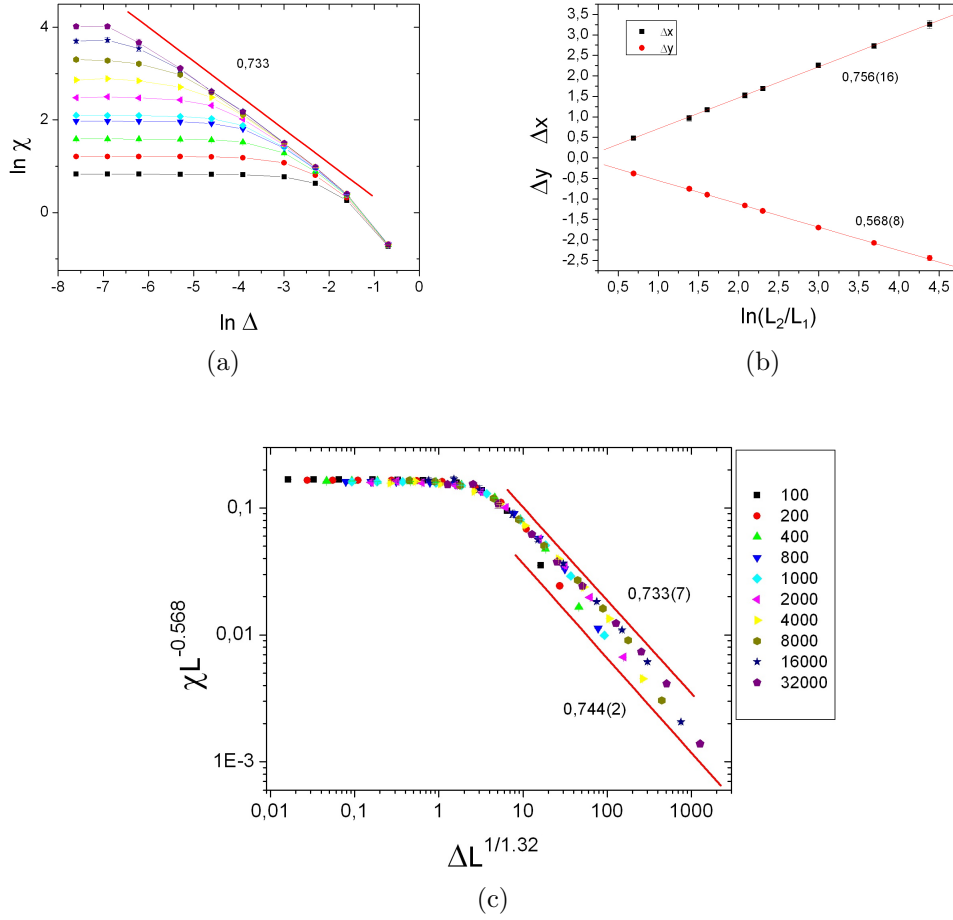


Figura 6.16: (a) Variância reescalada χ em função de Δ no regime ativo. (b) Análise do expoente que leva ao melhor colapso (ver texto). (c) Variância do parâmetro de ordem reescalado $\chi L^{-0.568}$ versus $\Delta L^{1/1.32}$. A estimativa final para o expoente $\gamma = 0.733(7)$ é ilustrada nas inclinações em (a) e (c). Na figura (c) a inclinação 0.744(2) é encontrada usando somente a reescala em $\Delta = 0.5$. Demais legendas iguais a figura 6.14.

6.1.2.2 Regime inativo

Para distâncias suficientemente grandes do ponto crítico no regime inativo, devemos esperar que a quantidade de partículas ativas no sistema seja da ordem de unidade, levando ao comportamento $\rho \sim L^{-1}$ para a densidade QS. Usando a já conhecida relação $\rho(L, \Delta) \propto L^{-\beta/\nu_\perp} F(\Delta L^{1/\nu_\perp})$ devemos ter a função de escala $F(x) \sim x^{\beta-\nu_\perp}$ para recuperar o comportamento de ρ . Plotando $\rho^* \equiv \rho L^{\beta/\nu_\perp}$ versus Δ^* estamos aptos a verificar a função $F(x)$ e estimar o valor de $(\beta - \nu_\perp)$. Através do colapso das curvas carac-

Tabela 6.4: Expoentes característicos encontrados através do comportamento do sistema fora do ponto crítico. Para cada relação de escala (primeira coluna), os expoentes encontrados através de um ajuste linear aos dados são mostrados na segunda coluna. A terceira e quarta colunas dão os expoentes encontrados através da análise de melhor colapso. x representa o argumento da função de escala.

Fase Ativa			
$\rho^* \propto x^\beta$	$\beta = 0.293(2)$	$\beta/\nu_\perp = 0.218(5)$	$\nu_\perp = 1.34(3)$
$\tilde{\rho} \propto x^{-\beta}$	$\beta = 0.288(3)$	$\beta = 0.293(3)$	$\nu_\perp = 1.32(3)$
$\chi^* \propto x^{-\gamma}$	$\gamma = 0.733(7)$	$\gamma/\nu_\perp = 0.568(8)$	$\nu_\perp = 1.32(3)$
Fase Inativa			
$\rho^* \sim x^{\beta-\nu_\perp}$	$\beta - \nu_\perp = -0.95(4)$	$\beta/\nu_\perp = 0.214(2)$	$\nu_\perp = 1.26(2)$
$\tilde{\rho} \sim x^{-\beta}$	$\beta = 0.29(1)$	$\nu_\perp = 1.22(5)$	$\nu_\perp = 1.26(3)$
$\chi^* \sim x^{-(\nu_\perp+\gamma)}$	$\nu_\perp + \gamma = 1.85(4)$	$\gamma/\nu_\perp = 0.57(1)$	$\nu_\perp = 1.28(3)$
$\tau^* \sim x^{-\nu_\parallel}$	$\nu_\parallel = 1.86(6)$	$\nu_\parallel/\nu_\perp = 1.53(3)$	$\nu_\perp = 1.30(2)$

terísticas, estimamos os expoentes $\beta/\nu_\perp = 0.214(2)$ e $\nu_\perp = 1.26(2)$. Considerando a relação $\rho = \Delta^\beta G(\Delta L^{1/\nu_\perp})$ para $\Delta L^{1/\nu_\perp}$ suficientemente grande, a função de escala deve ser $G(x) \sim x^{-\nu_\perp}$. No limite oposto (para L finito e $\Delta \rightarrow 0$) ρ deve ser não nulo e não singular, levando a $G(x) \sim x^{-\beta}$.

Suficientemente longe do ponto crítico o n -ésimo momento do parâmetro de ordem é dado por $\langle \rho^n \rangle = I_n L^{-n}$ levando à forma $\chi \propto L^{d-2}$. Uma vez que $\chi(L, \Delta) \propto L^{\gamma/\nu_\perp} G(\Delta L^{1/\nu_\perp})$, para recuperarmos a forma da variância no ponto crítico ($\chi \propto L^{\gamma/\nu_\perp}$) a função de escala deve ser $Q(x) \sim x^{-(\nu_\perp+\gamma)}$ para $d = 1$. Através do colapso de χ^* versus Δ^* o valor de $\nu_\perp + \gamma$ pode ser encontrado. O colapso dos dados é mostrado na figura 6.17.

Usando ρ^* e fazendo um ajuste linear nos pontos onde $|\Delta^*| > 20$ encontramos a relação $\nu_\perp - \beta = -0.95(4)$. A partir do resultado de melhor colapso temos $\beta = 0.95(4) - 1.26(2) = 0.29(4)$. Analisando os dados colapsados para $\tilde{\rho}$ encontramos $\beta = 0.29(1)$ no limite onde $|\Delta^*| \rightarrow 0$. No limite oposto encontramos $\nu_\perp = 1.22(5)$, ilustrado na figura 6.17. Para o colapso de dados a partir de χ^* versus Δ^* encontramos $\nu_\perp + \gamma = 1.85(4)$. Combinando esses resultados com a relação de hiperescala já usada e com os valores

dos expoentes encontrados para os melhores colapsos mostrados na tabela 6.4 para χ^* encontramos: (a) $\gamma/\nu_{\perp} = 0.57(1) \Rightarrow \gamma = 0.57(1) \times 1.28(3) = 0.73(3)$, (b) $\beta/\nu_{\perp} = (1 - \gamma/\nu_{\perp})/2 = (1 - 0.57(1))/2 = 0.215(5)$ e (c) $\gamma = 1.85(4) - 1.28(3) = 0.57(5)$.

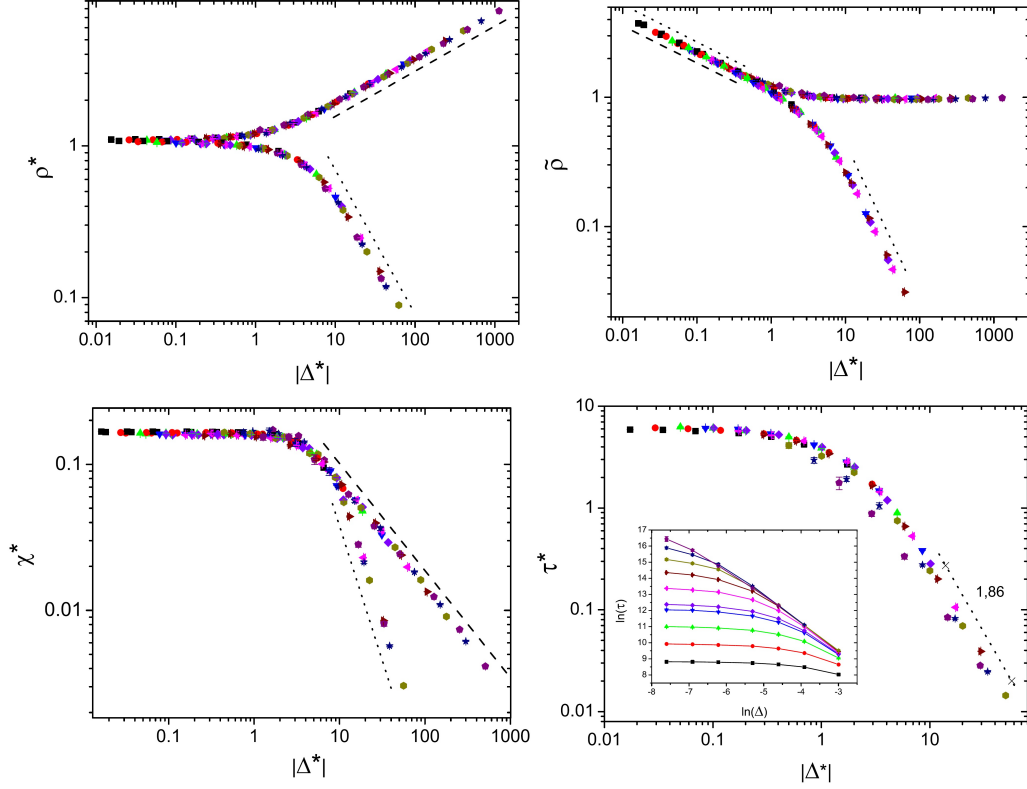


Figura 6.17: Parâmetro de ordem reescalado $\rho^* = \rho L^{\beta/\nu_{\perp}}$ (superior esquerdo) e $\tilde{\rho} = \rho \Delta^{-\beta}$ (superior direito), variância reescalada $\chi^* = \chi L^{-\gamma/\nu_{\perp}}$ (inferior esquerdo) e o tempo de vida reescalado $\tau^* = L^{-z}\tau$ (inferior direita) em função da distância reescalada ao ponto crítico, $\Delta^* = \Delta L^{1/\nu_{\perp}}$, nas fases ativa e inativa (curvas superior e inferior, respectivamente). Os expoentes associados com os melhores colapsos são mostrados na tabela 6.4. A inclinação das linhas tracejadas e pontilhadas representam as leis de potência exibidas pelas funções de escala, respectivamente nas fases ativa e inativa.

Na fase inativa, o tempo de vida QS diverge com $\tau \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$ (apesar das propriedades de escala não serem restritas ao regime absorvente, a determinação do expoente crítico de τ é muito difícil, uma vez que o sistema raramente visita o estado absorvente). Como podemos observar na figura 6.17, um bom colapso é encontrado plotando-se $\tau^* \equiv L^{-z}\tau$

versus Δ^* . Um ajuste linear aos dados para $L \leq 8000$ e $\Delta^* > 10$ fornece $\nu_{\parallel} = 1.86(6)$. Este resultado está em concordância com a relação de escala $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$, se usarmos os valores encontrados no ponto crítico ($z = 1.50(4)$ e $\nu_{\perp} = 1.34(6)$) e aqueles encontrados para o melhor colapso ($z = 1.53(3)$ e $\nu_{\perp} = 1.30(2)$).

6.1.3 Simulações convencionais

Como vimos no início deste capítulo, simulações convencionais nos permitem estudar o comportamento do parâmetro de ordem (ou outro observável) em função do tempo de MC. Em especial, estamos interessados no comportamento de ρ_a e m_{211} no ponto crítico. Nessa análise usamos para todos os tamanhos de rede $N = 1000$ amostras. Para tamanhos $L \leq 16000$, todas as realizações foram feitas até $T = 10^8$ ou até o sistema atingir o estado absorvente. Para $L = 32000$, somente $N = 100$ amostras foram realizadas até $T = 10^8$ enquanto as outras foram executadas até $T = 10^7$. Para a análise do comportamento das quantidades de interesse usamos um procedimento que é usualmente chamado de caixas logarítmicas (do inglês - logarithmic bin). Com esse procedimento, os valores de $\rho_a(t)$ e $m_{211}(t)$ são calculados como médias sobre as amostras sobreviventes até o tempo t . Para tempos grandes, t é representado por incrementos uniformes de $\ln(t)$. A figura 6.18 mostra o comportamento para ρ_a em função do tempo t . As flutuações para tempos suficientemente grandes foram retiradas das análises que se seguem.

No ponto crítico, espera-se que ρ_a comporte-se como $\rho_a \propto t^{-\delta}$ onde $\delta = \beta/\nu_{\parallel}$. Entretanto, a partir da análise mostrada na figura 6.18 (onde a parte QS é retirada da análise), podemos notar que a inclinação do gráfico muda à medida que tomamos intervalos cada vez mais próximos ao regime de saturação. De fato, usando um algoritmo que calcula a derivada de uma curva usando uma janela de l pontos, verificamos que

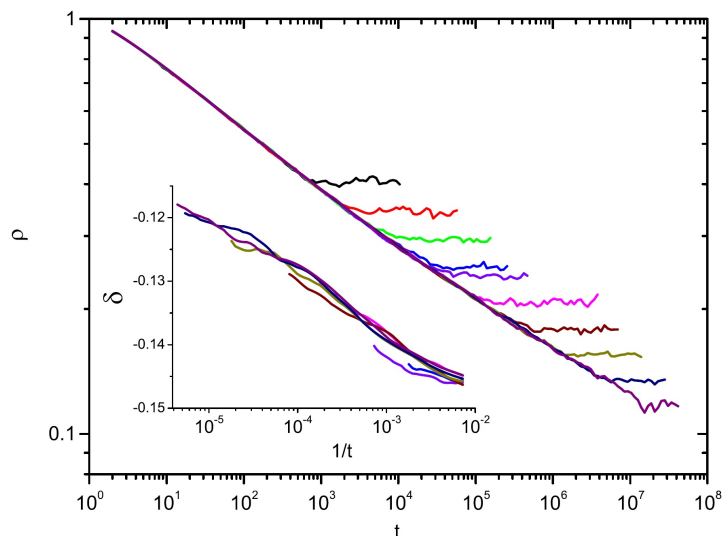


Figura 6.18: Densidade de partículas ativas ρ_a em função do tempo t para os tamanhos do sistema $L = 100, 200, 400, \dots, L = 32000$ (de baixo para cima). A figura interna mostra as inclinações locais obtidas em um intervalo de t ($t \pm 25$) em função de $1/t$.

$|\delta|$, apesar das flutuações, diminui sistematicamente desde ≈ 0.145 para tempos curtos a ≈ 0.12 para tempos longos.

Através da análise de tamanho finito temos:

$$\rho(L, t) = L^{-\beta/\nu_\perp} H(t/L^z). \quad (6.5)$$

Para tempos longos $H(x) = cte$ e pra tempo suficientemente pequenos $H(x) \sim x^{-\delta}$. Logo, o expoente δ pode ser encontrado plotando-se $\rho(t)L^{\beta/\nu_\perp} \times t/L^z$. Ajustando o melhor colapso, como feito na seção anterior, podemos estimar os valores de β/ν_\perp e z . A curva colapsada deve seguir o comportamento da função de escala $H(x) = x^{-\delta}$ permitindo a estimativa direta de δ . Durante a análise usual de colapso dos dados, verificamos a existência de um melhor colapso considerando tempos curtos e outro melhor colapso considerando tempos longos. Dessa forma pudemos associar expoentes a regimes de tempo distintos: (a) $\delta \approx 0.143(3)$ para regimes curtos e (b) $\delta \approx 0.121(3)$ para regimes de tempos

longos. Usando a relação de escala $\delta = \beta/\nu_{\parallel} = \beta/(\nu_{\perp}z)$ encontramos $\delta = 0.212/1.50 = 0.14$, em boa concordância para o regime de tempos curtos. Plotando $\rho_a^* = L^{\beta/\nu_{\perp}}\rho_a$ como uma função de $t^* = t/L^z$, encontramos melhores colapsos usando $z = 1.50$ no primeiro regime e $z = 1.72$ no segundo regime. Em ambos os casos o expoente crítico que levou a melhor colapso foi $\beta/\nu_{\perp} = 0.215$.

Curiosamente, ao contrário do que acontece para $\rho(t)$, a quantidade $m_{211} - 1$ exhibe um comportamento simples de lei de potência sobre quatro ou mais ordens de grandeza no tempo. Usando $t^* = t/L^z$ com $z = 1.71$ obtemos um colapso muito bom dos dados para todos os tamanhos do sistema estudados, como mostra a figura 6.19. A relação $m_{211} - 1 \sim t^{1/z}$ leva a $z = 1.70(1)$ que é inconsistente com o valor de $z = 1.50(4)$ encontrado no regime QS através da análise de tamanho finito. Podemos notar que o valor $\delta = 0.121(2)$ associado com o segundo regime do parâmetro de ordem é consistente com $\beta/\nu_{\perp} = 0.212$ e $z = 1.71$, mostrando que a escala de m_{211} parece estar associada ao regime de tempos longos observados em ρ_a .

Sem esforço computacional adicional, usando os dados encontrados através das simulações convencionais, encontramos o expoente $\beta/\nu_{\perp} = 0.209(6)$. Essa estimativa, usando somente os valores de ρ_a no regime QS (ver interior da figura 6.20), está em perfeita concordância com aqueles obtidos usando simulações QS. Também podemos estimar o valor de m_{211} no regime QS. Tomando a média dos dados para $t/L^{1.723} > 0.5$ (regime saturado na figura 6.19) encontramos $m_{211} = 1.13990(43)$, que também concorda com o valor encontrado nas simulações QS.

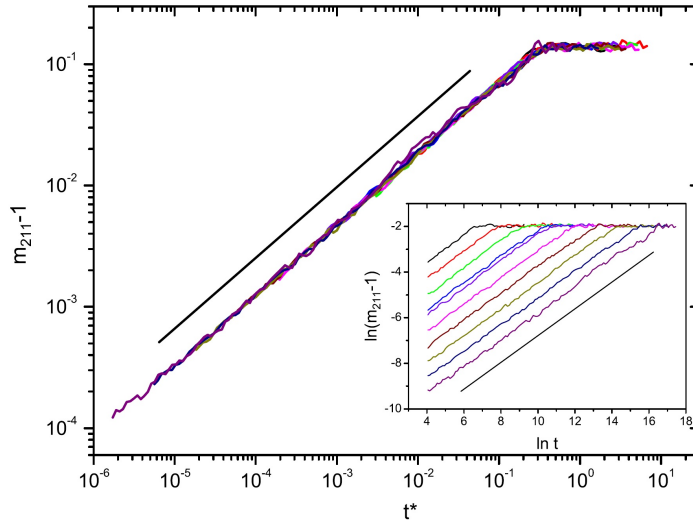


Figura 6.19: Colapso da razão entre momentos $m_{211} - 1$ em função de $t^* = t/L^z$ no ponto crítico, usando $z = 1.70$, para sistemas até $L = 32000$. A figura interna mostra os dados não reescalados para $100 \leq L \leq 32000$ (de cima para baixo). A inclinação das retas em ambas as figuras é 0.587 .

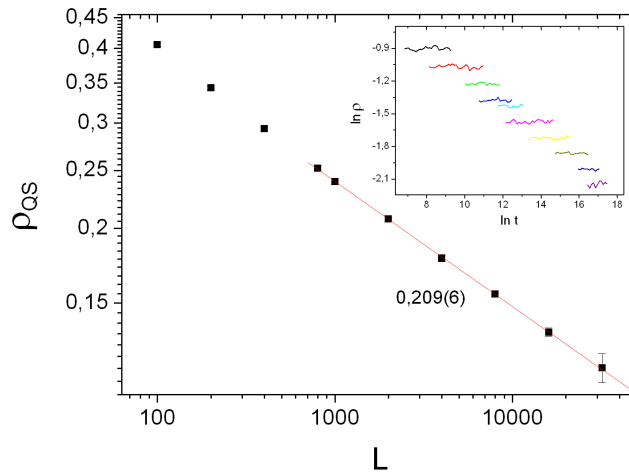


Figura 6.20: Densidade QS ρ obtida através de simulações convencionais em função do tamanho L do sistema. Através de um ajuste linear nos tamanhos $L \geq 1000$ encontramos $\beta/\nu_{\perp} = 0.209(6)$.

6.2 Comparação entre os resultados da Análise Exata e da Simulação de Monte Carlo.

Na tabela 6.5 comparamos os resultados obtidos via análise exata de sistemas pequenos (QSA) e simulações de Monte Carlo. Os resultados são consistentes dentro das incertezas

obtidas, exceto para o expoente dinâmico z . Os resultados obtidos para β/ν_{\perp} e z via QSA são menos satisfatórios quando comparados aos valores de referência da classe CDP e aqueles obtidos pelas simulações em sistemas até $L = 32000$. Por outro lado, as estimativas da análise exata para as razões entre momentos exibem precisão melhor que os obtido pela simulação. Contudo, devemos lembrar que os resultados da análise QSA estão sujeitos a correções de tamanho finito. (Os resultados aqui obtidos, bem como outros estudos em modelos da classe CDP, sugerem que os modelos pertencentes a essa classe sofram mais fortemente de efeitos de tamanho finito do que os modelos pertencentes à classe CP). A tabela 6.5 também inclui os resultados para o modelo de pilha de areia e para o gás em rede conservado. A concordância entre esses resultados e os obtidos na presente tese são muito bons, deixando pouca dúvida de que o modelo SRW pertence à mesma classe de universalidade de que a pilha de areia conservada e a percolação direcionada conservada.

Tabela 6.5: Comparação das propriedades críticas do modelo SRW encontradas via análise exata de sistemas pequenos (QSA) e simulações de Monte Carlo (MC), com os resultados obtidos em estudos anteriores (Prev) em modelos da classe CDP: *a*: pilha de areia restrita [45]; *b*: gás em rede conservado [50]; *c*: pilha de areia restrita [51].

Quantidade	QSA	MC	Prev
λ_c	0.09002(10)	0.090085(12)	
β/ν_{\perp}	0.241(1)	0.212(6)	0.213(6) ^a
β		0.290(4)	0.289(12) ^a
γ/ν_{\perp}	0.541(2)	0.58(1)	0.55(1) ^c
ν_{\perp}	1.28(1)	1.33(5)	1.36(2) ^a
z	1.664(4)	1.50(4)	1.55(3) ^b
m_{211}	1.142(1)	1.141(8)	1.142(8) ^a
m_{3111}	1.420(5)	1.415(26)	1.425(25) ^c
$m_{-1}m$	1.308(12)	1.327(27)	1.332(10) ^c
q_c	-0.454(2)	-0.47(3)	-0.46(3) ^c

Capítulo 7

Discussão

Nesta tese estudamos extensivamente o modelo de caminhantes aleatórios sonolentos unidimensional usando uma análise numérica em sistemas pequenos e através de simulações de Monte Carlo em sistemas até $L = 32000$ sítios. Uma vez que o modelo proposto não possui simetrias adicionais quando comparado aos modelos da classe da percolação direcionada conservada, esperamos que o SRW pertença a essa classe assim como o modelo de pilha de areia estocástica. Os resultados para os expoentes críticos bem como as razões entre momentos aqui encontrados reforçam essa hipótese. Diferentemente da maioria dos modelos pertencentes à classe CDP, o SRW possui um parâmetro de controle contínuo o que facilita bastante as análises numéricas e os resultados das simulações.

Este trabalho representa a continuidade do estudo da análise exata do estado QS em sistemas pequenos, inicialmente proposto em [41]. Além de permitir a localização do ponto crítico com boa precisão, a análise exata QS nos forneceu bons resultados para o expoente crítico ν_{\perp} e excelentes estimativas para as razões entre momentos m_{211} e m_{3111} . Apesar dos bons resultados exibidos pela análise exata para o modelo SRW, este método mostrou-se mais eficiente nos modelos da classe DP [41]. Tal característica parece estar

intimamente relacionada com o forte efeito de tamanho finito e as correções de escala observadas em modelos da classe CDP. Entretanto, a análise exata das propriedades QS fornece um estudo complementar à simulação, dado que neste caso as simulações dependem de um tempo de relaxação para se alcançar o estado QS e a análise exata não. Comparando o tempo computacional gasto em ambas as análises, vimos que o tempo gasto nas simulações é cerca de 15 vezes maior do que na análise de sistemas pequenos.

Usando simulações de Monte Carlo testamos várias relações de escala utilizando o colapso dos dados tanto nos regimes acima e abaixo do ponto da transição de fase, permitindo comparar os resultados para os expoentes críticos com aqueles obtidos via análise de tamanho finito no ponto crítico. Em geral os resultados são consistentes em ambos os regimes bem quando comparados com estudos já realizados em outros modelos. Apesar da boa concordância entre os resultados, encontramos algumas inconsistências e um comportamento anômalo. Os resultados para o expoente ν_{\perp} mostraram que na região inativa ele é aproximadamente 5% menor que na fase ativa ou no ponto crítico. De forma surpreendente, a aproximação do parâmetro de ordem ao seu valor QS no ponto crítico é marcado aparentemente por dois regimes de escala, com expoentes associados a tempos suficientemente curtos $z_{t \ll} = 1.50$, $\delta_{t \ll} = 0.143$, e suficientemente grandes com $z_{t \gg} = 1.71$, e $\delta_{t \gg} = 0.121(3)$. O último valor está em concordância com o expoente de decaimento de $0.124(1)$ obtido por Dornic e colaboradores no estudo de um modelo contínuo da classe CDP [52]. De forma contraditória, $z_{t \ll}$ é próximo ao expoente encontrado pela análise de tamanho finito no regime QS. Esse comportamento também é observado no modelo de pilha de areia estocástica [46], com $z_{t \gg} = 1.75(3)$. A densidade reescalada $\rho^* \equiv \rho L^{\beta \nu_{\perp}}$ versus a distância ao ponto crítico reescalada $\Delta^* \equiv \Delta L^{1/\nu_{\perp}}$ para o modelo SRW apresentou um regime de escala mais longo que o modelo de pilha de areia restrito,

estudado em [45] com tamanhos de rede até $L = 50000$ no regime supercrítico. Em [45], os resultados sugeriam que o regime de escala seria válida somente em intervalos próximos ao ponto crítico. Entretanto, nossos resultados mostram que o regime de escala é válido em uma região maior, como mostrado na comparação da figura 7.1. Por fim, a variância

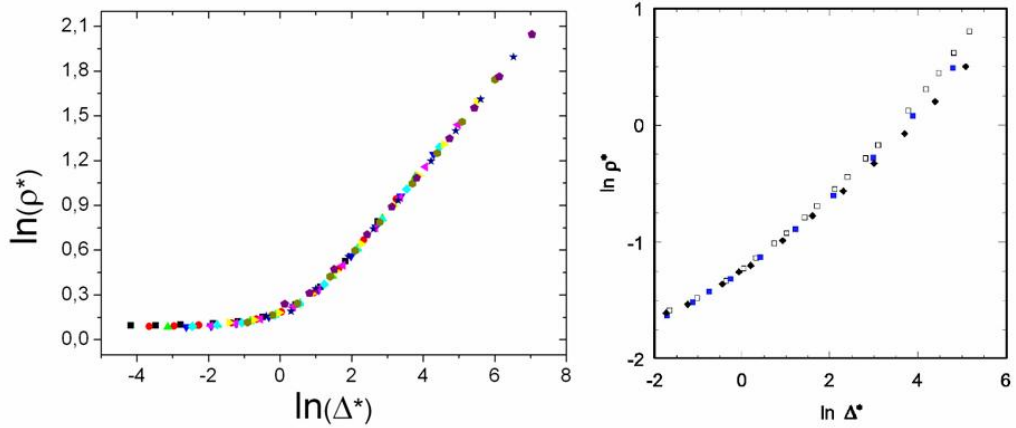


Figura 7.1: Densidade reescalada $\rho^* \equiv \rho L^{\beta\nu_{\perp}}$ versus $\Delta^* \equiv \Delta L^{1/\nu_{\perp}}$ para (a esquerda) o modelo SRW com tamanhos até $L = 32000$ e (a direita) para o modelo pilha de areia restrita [45], com os tamanhos $L = 10^4$, $2 \cdot 10^4$ e $L = 5 \cdot 10^4$ de cima para baixo.

reescalada do parâmetro de ordem χ parece violar a relação de escala na fase inativa onde $\gamma + \nu_{\perp} = 1.85(4)$.

Dado a complexidade do decaimento da densidade de sítios ativos para o estado estacionário é surpreendente que $m_{211} - 1$ (também esperado exibir uma lei de potência no ponto crítico) apresente um colapso de dados quase que perfeito com um único regime de escala na mesma região onde o parâmetro de ordem apresenta dois comportamentos. Nesta análise o expoente dinâmico encontrado foi $z = 1.71(1)$, o mesmo que $z_{t \gg}$ dentro da incerteza. Este expoente é consideravelmente maior que $z = 1.50(4)$ encontrado no ponto crítico pela análise de tamanho finito. Como discutido em [44], essa diferença pode refletir a existência de duas escalas de tempo, uma associada com o decaimento do parâmetro de

ordem ao seu valor QS e outro relacionado ao tempo de vida em tamanhos finitos. Esses dois tempos escalam da mesma maneira em transições de fase absorventes em modelos sem quantidades conservadas, tal como o processo de contato.

Esses resultados inesperados motivam novos estudos do SRW e modelos similares, no intuito de dar à classe CDP uma teoria mais completa, certamente mais complexa que a classe da percolação direcionada. Todos as análises bem como os resultados aqui mostrados foram publicados em [1].

Apêndice A

Relações entre expoentes críticos

Em transições de fase contínuas, podemos caracterizar o sistema através de leis de potência analisando seu comportamento próximo o suficiente do ponto crítico. Como vimos no capítulo II, essas leis de potência fornecem expoentes críticos característicos de cada sistema, podendo ser agrupados dentro de classes de universalidade desde que seus valores sejam iguais (ou dentro de incertezas experimentais). As idéias de escala e de universalidade, quando tomadas em conjunto, produzem uma teoria do comportamento crítico. Em 1965, o químico Ben Widom, estudando o comportamento de fluidos, encontrou evidências experimentais de que a energia livre de Helmholtz poderia ser aproximada para uma função de apenas uma variável, a chamada variável de escala [13]. Para um sistema magnético, Widom sugeriu que próximo a T_c a parte singular da energia livre pode ser aproximada para

$$f(T, H) = t^{1/y} \psi(H/t^{x,y}),$$

onde $t \equiv |T - T_c|/T_c$. A equação acima é conhecida como hipótese de escala de Widom, e trouxe grandes avanços no entendimento dos fenômenos críticos.

Desde então, grande parte da teoria de escala tem sido desenvolvida a partir da suposição de que próximo do ponto crítico, a parte singular de um dado potencial termodinâmico é assintoticamente uma função homogênea generalizada.

Uma função $f(x_1, x_2, \dots)$ é dita homogênea generalizada se ela satisfaz a relação

$$f(\lambda^{s_1}x_1, \lambda^{s_2}x_2, \dots) = \lambda f(x_1, x_2, \dots)$$

para todos os valores positivos de λ . Os expoentes s_1, s_2, \dots são chamados de potências de escala, enquanto as variáveis x_1, x_2 são chamadas de campos de escala.

Para encontrar a relação entre os expoentes críticos, vamos usar o princípio exposto acima. É conveniente expressarmos a parte singular da energia livre próximo à transição, na forma:

$$G(t, h) = \lambda^{-d}G(\lambda^y t, \lambda^x h). \quad (\text{A.1})$$

Uma vez definida a energia livre, podemos encontrar as grandezas de interesse, como:

$$m(t, h) = - \left(\frac{\partial G}{\partial h} \right)_t \Rightarrow m(t, h) \sim \lambda^{-d+x} m(\lambda^y t, \lambda^x h) \quad (\text{A.2})$$

$$\chi(t, h) = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial h^2} \right)_t \Rightarrow \chi(t, h) \sim \lambda^{-d+2x} \chi(\lambda^y t, \lambda^x h) \quad (\text{A.3})$$

$$C_h(t, h) = -t \left(\frac{\partial^2 G}{\partial t^2} \right)_h \Rightarrow C_h(t, h) \sim \lambda^{-d+2y} C_h(\lambda^y t, \lambda^x h) \quad (\text{A.4})$$

Sabendo que as equações acima são válidas para todos os valores positivos de λ vamos analisar dois casos especiais: primeiro vamos considerar que o campo magnético externo seja nulo ($h = 0$) escolhendo $\lambda = t^{-1/y}$. No segundo caso, vamos considerar

a temperatura reduzida nula ($t \equiv (T - T_c)/T_c = 0$) e fazer $\lambda = h^{-1/x}$. Com essas considerações obtemos as seguintes equações:

$$m(t, 0) = (-t)^{(d-x)/y} m(-1, 0) \quad (\text{A.5})$$

$$m(0, h) = |h|^{(d-x)/x} m(0, \pm 1) \quad (\text{A.6})$$

$$\chi(t, 0) = |t|^{-(2x-d)/y} \chi(\pm 1, 0) \quad (\text{A.7})$$

$$C_h(t, 0) = |t|^{-(2y-d)/y} C_h(\pm 1, 0). \quad (\text{A.8})$$

A equações A.5 é válida somente para $T < T_c$ já que a magnetização só existe nesse limite. Comparando com as definições dos expoentes críticos (ver tab. 2.1) encontramos as seguintes relações:

$$\beta = (d - x)/y \quad (\text{A.9})$$

$$1/\delta = (d - x)/x \quad (\text{A.10})$$

$$\gamma = (2x - d)/y \quad (\text{A.11})$$

$$\alpha = (2y - d)/y \quad (\text{A.12})$$

Eliminando x e y das equações acima, verificamos as seguintes relações de escala:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{A.13})$$

$$\beta(\delta - 1) = \gamma, \quad (\text{A.14})$$

Outras duas relações podem ser obtidas através de uma idéia intuitiva dada por Kadanoff para a forma da energia livre. Basicamente, devemos considerar $\lambda = L$; agora

o parâmetro λ é considerado como um parâmetro de “dilatação” (nos argumentos de Kadanoff, uma rede de spins de N sítios pode ser dividida em blocos de spins de tamanho L , sendo que cada um desses blocos pode ser representado por um único estado). Dessa forma a energia livre pode ser expressa como:

$$G(t, h) = L^{-d}G(L^y t, L^x h). \quad (\text{A.15})$$

Uma vez que a separação entre os blocos de spins é $L \times a_0$, onde a_0 é a separação entre spins, podemos esperar que o comprimento de correlação seja reduzido pelo mesmo fator:

$$\xi(t, h) = L\xi(L^y t, L^x h). \quad (\text{A.16})$$

Assumindo que as equações acima são válidas para qualquer valor de L e considerando as condição de campo nulo $h = 0$ e $L = |t|^{-1/y}$ é possível obter as seguintes relações:

$$G(t, 0) = |t|^{d/y}G(\pm 1, 0) \quad (\text{A.17})$$

$$\xi(t, 0) = |t|^{-1/y}G(\pm 1, 0). \quad (\text{A.18})$$

Lembrando que próximo ao ponto crítico o comprimento de correlação diverge na forma $\xi(t, 0) \sim |t|^{-\nu}$ e que a razão d/y pode ser dada pela relação da eq. A.8, temos:

$$\begin{aligned} d/y &= 2 - \alpha \\ d\nu &= 2 - \alpha \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

A relação A.19 envolve explicitamente a dimensionalidade espacial do sistema, recebendo

o nome especial de relação de hiperescala.

Outra relação que também pode ser encontrada através da formulação de blocos de spins de Kadanoff é usando a função correlação, obtendo a seguinte relação entre os expoentes:

$$\gamma = (2 - \eta)\nu \tag{A.20}$$

Apêndice B

Análise de campo médio para o SRW

Sejam as seguintes quantidades:

- $\rho_a \equiv P_A[\sigma_i = 1, t]$ a probabilidade do sítio i estar ativo no tempo t .
- $\rho_s \equiv P_S[\sigma_i = -1, t]$ a probabilidade do sítio i estar inativo no tempo t .
- $\rho_v \equiv P_V[\sigma_i = 0, t]$ a probabilidade do sítio i estar vazio no tempo t ,

com a condição

$$\rho_a + \rho_s + \rho_v = 1. \quad (\text{B.1})$$

A equação de movimento para a probabilidade de termos uma partícula ativa em um dado sítio no tempo t pode ser escrita como:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = -T[A \rightarrow V] + T[V \rightarrow A] - T[A \rightarrow S] + T[S \rightarrow A], \quad (\text{B.2})$$

onde a seta indica a transição entre o estado inicial e o estado final do sítio em questão (os possíveis estados são: A - ativo, S - inativo e V - vazio). Podemos notar que as transições $A \rightarrow V$ e $V \rightarrow A$ ocorrem à uma mesma taxa, e portanto serão canceladas na equação

acima, restando apenas

$$\frac{d\rho_a}{dt} = -T[A \rightarrow S] + T[S \rightarrow A], \quad (\text{B.3})$$

A análise mais simples de campo médio consiste em considerar cada sítio como independente. Isso leva aos eventos mostrados na figura 4.1. Os cálculos para montar a equação de movimento são simplificados se notarmos que:

- A soma das taxas de transição de A para S pode ser reescrita como

$$\lambda\rho_a(\rho_a + \rho_a + \rho_a)^2 = \lambda\rho_a$$

onde usamos a normalização das probabilidades e a relação $(a + b + c)^2 = a^2 + 2ab + b^2 + 2ac + 2bc + c^2$.

- Reescrevendo $\rho_v = 1 - \rho_a - \rho_s$, a soma das taxas de transição de S para A , leva a

$$\rho_a^2\rho_s + \rho_a\rho_s\rho_v + \rho\rho_s^2 = \rho_a\rho_s,$$

onde devemos notar que o fator 2 da simetria de reflexão cancela com o fator $r = 1/2$ da taxa de salto para uma direção,

levando à seguinte equação:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \rho_s\rho_a - \lambda\rho_a. \quad (\text{B.4})$$

Reescrevendo a equação acima em função da densidade de sítios vazios (fixa no sistema), temos $\frac{d\rho_a}{dt} = (1 - \rho_a - \rho_v)\rho_a - \lambda\rho_a$. É conveniente reescrevermos a equação de movimento

como:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_a}{dt} &= (1 - \rho_v - \lambda)\rho_a - \rho_a^2 \\ &= (\zeta' - \lambda)\rho_a - \rho_a^2,\end{aligned}\tag{B.5}$$

onde $\zeta' \equiv 1 - \rho_v$ é a densidade de partículas no sistema.

A solução dependente do tempo da equação de movimento pode ser encontrada integrando-se a equação acima, como se segue:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \mu\rho_a - \rho_a^2\tag{B.6}$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\rho_a}{\mu\rho_a - \rho_a^2} = \int dt,\tag{B.7}$$

onde $\rho_0 \equiv \rho(t = 0) = 1 - \rho_v$ e $\mu = 1 - \rho_v - \lambda$. Usando frações parciais, a integral é facilmente resolvida. Note:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu x - x^2} = \frac{1}{x(\mu - x)} &= \frac{A}{x} + \frac{B}{\mu - x} = \frac{A(\mu - x) + Bx}{x(\mu - x)} \\ &= \frac{A\mu + (B - A)x}{x(\mu - x)} \\ \Rightarrow A = 1/\mu \quad e \quad B = A\end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho_a}{\mu\rho_a - \rho_a^2} &= \int_0^t dt \\ \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho}{\mu\rho} + \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho}{\mu(\mu - \rho)} &= t \\ \ln \frac{\rho}{\rho_0} - \ln \frac{\mu - \rho}{\mu - \rho_0} &= \mu t \\ \frac{\rho(\mu - \rho_0)}{\rho_0(\mu - \rho)} &= e^{\mu t}\end{aligned}\tag{B.8}$$

Isolando ρ , temos:

$$\rho(t) = \frac{\rho_0\mu}{\rho_0 + (\mu - \rho_0)e^{-\mu t}}\tag{B.9}$$

Apêndice C

Enumeração das configurações e taxas em uma rede de $L = 6$ sítios

Para uma maior eficiência na obtenção de uma lista de configurações e taxas, sugerimos uma certa sequência de passos. Devemos lembrar que configurações que diferirem apenas por uma rotação ou uma reflexão são tratadas como iguais. Sendo assim, cada configuração deve ser representada também por um “peso” que indicará seu número de equivalência. Os passos sugeridos são os seguintes:

1. Gerar todas as configurações de $N = L/2$ partículas em um anel de L sítios e separá-las em classes. Cada configuração nesse passo representará uma configuração espacial possível.
2. Gerar todas as configurações de n partículas ativas e $(N - n)$ partículas inativas para $n = 0, 1, \dots, N$ a partir de cada classe gerada no item anterior. Novamente as configurações devem ser separadas na condição de equivalência e então enumeradas.
3. Dada uma configuração, visitar cada sítio em sequência e determinar as confi-

gurações antecedentes.

Os passos acima citados são analisados em detalhes para uma rede de $L = 6$ sítios, contendo 3 partículas.

- ✓ Após gerar uma configuração, analisamos se esta já pertence a alguma classe base c (a primeira configuração gerada será a primeira de uma sequência de classes). Caso isso ocorra, devemos armazenar a equivalência da configuração i em um vetor $|C_p|^{(i)}$. As configurações geradas são mostradas na figura abaixo e a equivalência entre elas é listada na tabela C.1.

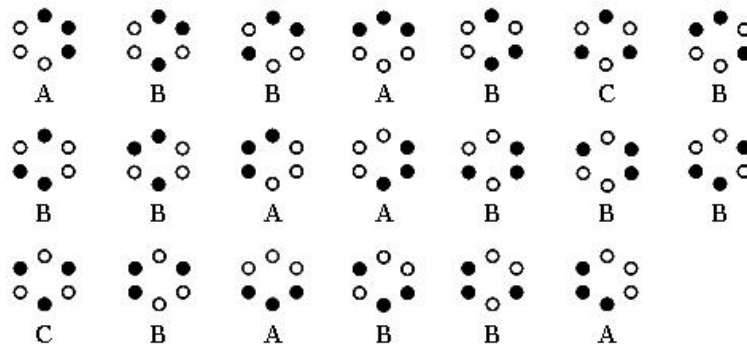


Figura C.1: Todas as configurações espaciais com $N = L/2$ partículas são geradas dando origem a três tipos distintos de classe base (A, B e C). Os círculos cheios representam sítios ocupados.

Classe base c	$ C_p ^{(i)}$
A	6
B	12
C	2

Tabela C.1: Equivalência espacial $|C_p|$ entre as configurações em um anel de $L = 6$ sítios com $N = L/2$ partículas.

- ✓ A partir das classes encontradas no primeiro passo, são geradas todas as confi-

gurações com $n = 0, 1, \dots, N$ partículas inativas. Desta vez as configurações que forem equivalentes são armazenadas em um novo vetor $|C_e|^{(i)}$. Essas configurações são mostradas na figura C.2 e suas equivalências são mostradas na tabela C.4. Para $L = 6$ existem um total de 18 configurações distintas. A partir das equi-

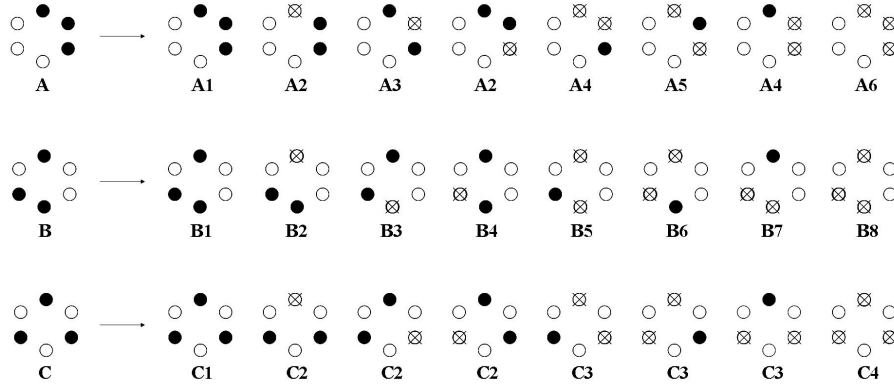


Figura C.2: Todas as configurações com $n = 0, 1, \dots, N$ partículas inativas geradas a partir das classes A, B e C. A partir dessas classes originam-se 18 classes C_e distintas. Os círculos cheios representam sítios ocupados por partículas ativas enquanto os círculos marcados com um “x” representam partículas inativas.

Classe C	A1	A2	A3	A4	A5	A6	B1	B2	B3
$ C_e $	1	2	1	2	1	1	1	1	1
Classe C	B4	B5	B6	B7	B8	C1	C2	C3	C4
$ C_e $	1	1	1	1	1	1	3	3	1

Tabela C.2: Equivalência $|C_e|$ entre configurações com n partículas inativas.

valências $|C_p|$ e $|C_e|$ determinamos o peso $|C|$ de cada configuração fazendo $|C|^{(k')} = |C_p|^{(k)} \times |C_e|^{(k')}$ (k' gerada a partir de k). Este peso representa o número de vezes que a configuração k pode ser gerada na rede de tamanho L . Nesse passo também determinamos o número de partículas ativas N_{pact} de cada configuração e o número total de saltos possíveis N_{salp} (dado pela soma de saltos que cada partícula ativa na

Config. #		N_{pact}	N_{salp}	$ \mathcal{C} $	Config. #		N_{pact}	N_{salp}	$ \mathcal{C} $
1		3	2	6	10		2	4	12
2		2	2	12	11		1	2	12
3		2	4	6	12		1	2	12
4		1	2	12	13		1	2	12
5		1	2	6	14		0	5	12
6		0	0	6	15		3	6	2
7		3	4	12	16		2	4	6
8		2	2	12	17		1	2	6
9		2	4	12	18		0	0	2

Figura C.3: Todas as configurações enumeradas para uma rede de tamanho $L = 6$. O número de partículas ativas, o número de saltos permitidos e o peso total de cada configuração estão representados respectivamente por N_{pact} , N_{salp} e $|\mathcal{C}|$. As setas de uma posição à outra indicam saltos possíveis da partícula analisada. Demais legendas iguais a da figura C.2.

k -ésima configuração pode descrever em um intervalo de tempo). Essas quantidades são usadas no cálculo da taxa total de transições para fora do estado c , fazendo-se $w_c = r_s N_{salp} + \lambda N_{pact}$ onde r_s é a taxa de salto e λ é a taxa com que uma partícula fica inativa. No cálculo de w_c , o número total de saltos N_{salp} considera tanto saltos para a direita quanto para a esquerda da partícula ativa analisada. Entretanto, podemos considerar que a taxa de salto para um só lado seja $r_s = 1$ (ao contrário

de $r_s = 1/2$). Dessa forma, para que a razão entre as taxas seja a mesma, devemos multiplicar a taxa de adormecer por um fator 2, levando à equação

$$w_c = N_{salp} + 2\lambda N_{pact} \quad (\text{C.1})$$

3. ✓ Por último, devemos analisar quais os estados antecedentes da k -ésima configuração, que irão determinar o fluxo de probabilidades r_k para dentro de k . No procedimento adotado, percorremos cada posição ocupada e geramos o estado k' que levaria a k , seja por um dos três processos possíveis (salto, ativação ou inativação). Configurações que levarem a k por um processo de inativação devem ser distinguidas daquelas originadas por um salto. No nosso caso, distinguimos esses processos por um sinal negativo na configuração antecedente, como ilustrado na figura C.4, onde analisamos as configurações número 7 e 12. Todas as transições envolvidas na rede de $L = 6$ sítios são mostradas nas figuras C.5 e C.6, e resumidas na tabela C.4. A tabela C.5 mostra a síntese de todos os dados necessários para obtermos a distribuição QS do modelo analisado.

Com todas as transições enumeradas, resta calcular as taxas envolvidas na equação abaixo:

$$\bar{p}'_c = a\bar{p}_c + (1 - a)\frac{r_c}{w_c - r_a}. \quad (\text{C.2})$$

Primeiro, suponha que a distribuição de probabilidade QS inicial seja constante e lembre que por definição a probabilidade QS de configurações absorventes é zero. Dessa

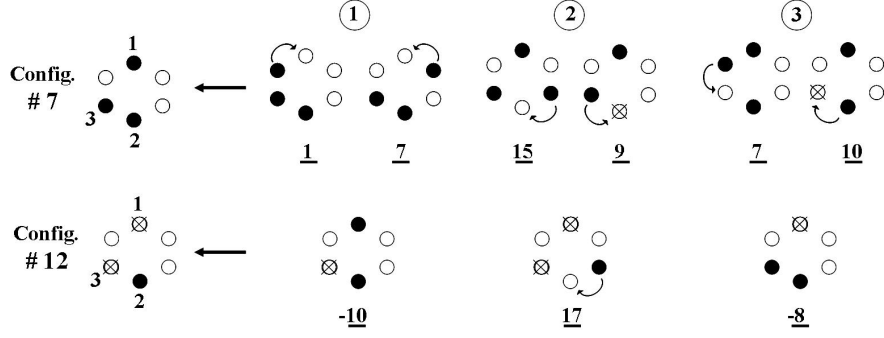


Figura C.4: Transições que levam às configurações número 7 e 12. Os números circulos representam a sequência dos sítios (ocupados) analisados, sendo determinada a partir do sítio mais alto no sentido horário. O número embaixo de cada configuração é o número referente a essa na lista de configurações. Números negativos indicam processos de desativação. Demais legendas iguais as das figuras C.2 e C.3.

forma, temos:

$$\bar{p}_j = \begin{cases} 1/(\sum_j |C|^{(j)}), & j \neq \text{absorvente} \\ 0, & j = 6, 14, 18, \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

necessário para que a condição $\sum_c |\mathcal{C}| \bar{p}_c = 1$ seja satisfeita. Escrevendo explicitamente o fluxo de probabilidade para dentro da configuração #1, temos:

$$r_1 = \sum_{c'} \bar{p}_{c'} W_{c' \rightarrow 1} = \bar{p}_2 W_{2 \rightarrow 1} + \bar{p}_3 W_{3 \rightarrow 1} + \bar{p}_4 W_{4 \rightarrow 1} + \dots + \bar{p}_{18} W_{18 \rightarrow 1}. \quad (\text{C.4})$$

Da tabela C.4 vemos que existem transições para dentro de #1 apenas das configurações número 2, 3, e 7. Com essa restrição temos:

$$r_1 = \bar{p}_2 W_{2 \rightarrow 1} + \bar{p}_3 W_{3 \rightarrow 1} + \bar{p}_7 W_{7 \rightarrow 1}. \quad (\text{C.5})$$

Se a transição envolvida para dentro da configuração analisada ocorrer devido a um salto, a taxa da transição é dada por $W_{c' \rightarrow c} = r_s m_{c' \rightarrow c}$, onde r_s é a taxa de salto e $m_{c' \rightarrow c}$ é o peso da transição. Caso seja por inativação teremos $W_{c' \rightarrow c} = \lambda' m_{c' \rightarrow c}$. Considerando $r_s = 1$ e

$\lambda' = 2\lambda$, e os respectivos pesos (ver tabela C.5) temos:

$$r_1 = 2\bar{p}_2 + 2\bar{p}_3 + 2\bar{p}_7. \quad (\text{C.6})$$

Os demais fluxos de probabilidade são mostrados na tabela C.3. Também podemos calcular explicitamente a taxa total para fora da configuração w_c . Seja $w_c = \sum_{c'} W_{c \rightarrow c'}$ temos:

$$\begin{aligned} w_1 &= W_{1 \rightarrow 2} + W_{1 \rightarrow 3} + W_{1 \rightarrow 4} + \dots + W_{1 \rightarrow 18} \\ &= W_{1 \rightarrow 2} + W_{1 \rightarrow 3} + W_{1 \rightarrow 7} \\ &= 2\lambda' + \lambda' + 2 \\ w_1 &= 3\lambda' + 2, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

mostrando que a relação $w_{(1)} = N_{salp}^{(1)} + \lambda' N_{pact}^{(1)} = 2 + 3\lambda'$ também é válida.

Calculando explicitamente o fluxo de probabilidade para dentro do estado absorvente temos $r_a = r_6 + r_{14} + r_{18}$, onde:

$$\begin{aligned} r_6 &= \bar{p}_4 W_{4 \rightarrow 6} + \bar{p}_5 W_{5 \rightarrow 6} = 2\lambda' \bar{p}_4 + \lambda' \bar{p}_5 \\ r_{14} &= \bar{p}_{13} W_{13 \rightarrow 14} + \bar{p}_{12} W_{12 \rightarrow 14} + \bar{p}_{11} W_{11 \rightarrow 14} = \lambda' \bar{p}_{13} + \lambda' \bar{p}_{12} + \lambda' \bar{p}_{11} \\ r_{18} &= \bar{p}_{17} W_{17 \rightarrow 18} = 3\lambda' \bar{p}_{17} \end{aligned}$$

logo

$$r_a = \lambda' [(2\bar{p}_4 + \bar{p}_5) |C^{(6)}| + (\bar{p}_{13} + \bar{p}_{12} + \bar{p}_{11}) |C^{(14)}| + 3\bar{p}_{17} |C^{(18)}|]. \quad (\text{C.8})$$

Como vemos na última linha da equação acima, no cálculo de r_a devemos considerar a multiplicidade $|C|$ das configurações absorventes.

Tabela C.3: Fluxo de probabilidade e taxas envolvidas em uma rede de $L = 6$ sítios. A taxa de salto para um lado vale $r_s = 1$ levando a taxa de adormecer $\lambda' = 2\lambda$.

$r_1 = 2\bar{p}_2 + 2\bar{p}_3 + 2\bar{p}_7$	$w_1 = 2 + 3\lambda'$
$r_2 = \lambda'\bar{p}_1 + \bar{p}_4 + \bar{p}_5 + \bar{p}_9$	$w_2 = 2 + 2\lambda'$
$r_3 = \lambda'\bar{p}_1 + 2\bar{p}_{10}$	$w_3 = 4 + 2\lambda'$
$r_4 = \bar{p}_{13} + \lambda'\bar{p}_3 + \lambda'\bar{p}_2$	$w_4 = 2 + \lambda'$
$r_5 = 2\lambda'\bar{p}_2$	$w_5 = 2 + \lambda'$
$r_6 = 2\lambda'\bar{p}_4 + \lambda'\bar{p}_5$	$w_6 = 0$
$r_7 = \bar{p}_1 + 2\bar{p}_7 + \bar{p}_9 + \bar{p}_{10} + \bar{p}_{15}$	$w_7 = 4 + 3\lambda'$
$r_8 = \lambda'\bar{p}_7 + \bar{p}_9 + \bar{p}_{11} + \bar{p}_{12} + \bar{p}_{16}$	$w_8 = 2 + 2\lambda'$
$r_9 = \bar{p}_2 + \lambda'\bar{p}_7 + \bar{p}_8 + \bar{p}_{10}$	$w_9 = 4 + 2\lambda'$
$r_{10} = \bar{p}_3 + \lambda'\bar{p}_7 + \bar{p}_9 + \bar{p}_{16}$	$w_{10} = 4 + 2\lambda'$
$r_{11} = \lambda'\bar{p}_8 + \lambda'\bar{p}_9 + \bar{p}_{11}$	$w_{11} = 2 + \lambda'$
$r_{12} = \lambda'\bar{p}_8 + \lambda'\bar{p}_{10} + \bar{p}_{17}$	$w_{12} = 2 + \lambda'$
$r_{13} = \bar{p}_4 + \lambda'\bar{p}_9 + \lambda'\bar{p}_{10} + \bar{p}_{13}$	$w_{13} = 2 + \lambda'$
$r_{14} = \lambda'\bar{p}_{11} + \lambda'\bar{p}_{12} + \lambda'\bar{p}_{13}$	$w_{14} = 0$
$r_{15} = 6\bar{p}_7$	$w_{15} = 6 + 3\lambda'$
$r_{16} = 2\bar{p}_8 + 2\bar{p}_{10} + \lambda'\bar{p}_{15}$	$w_{16} = 4 + 2\lambda'$
$r_{17} = 2\bar{p}_{12} + 2\lambda'\bar{p}_{16}$	$w_{17} = 2 + \lambda'$
$r_{18} = 3\lambda'\bar{p}_{17}$	$w_{18} = 0$

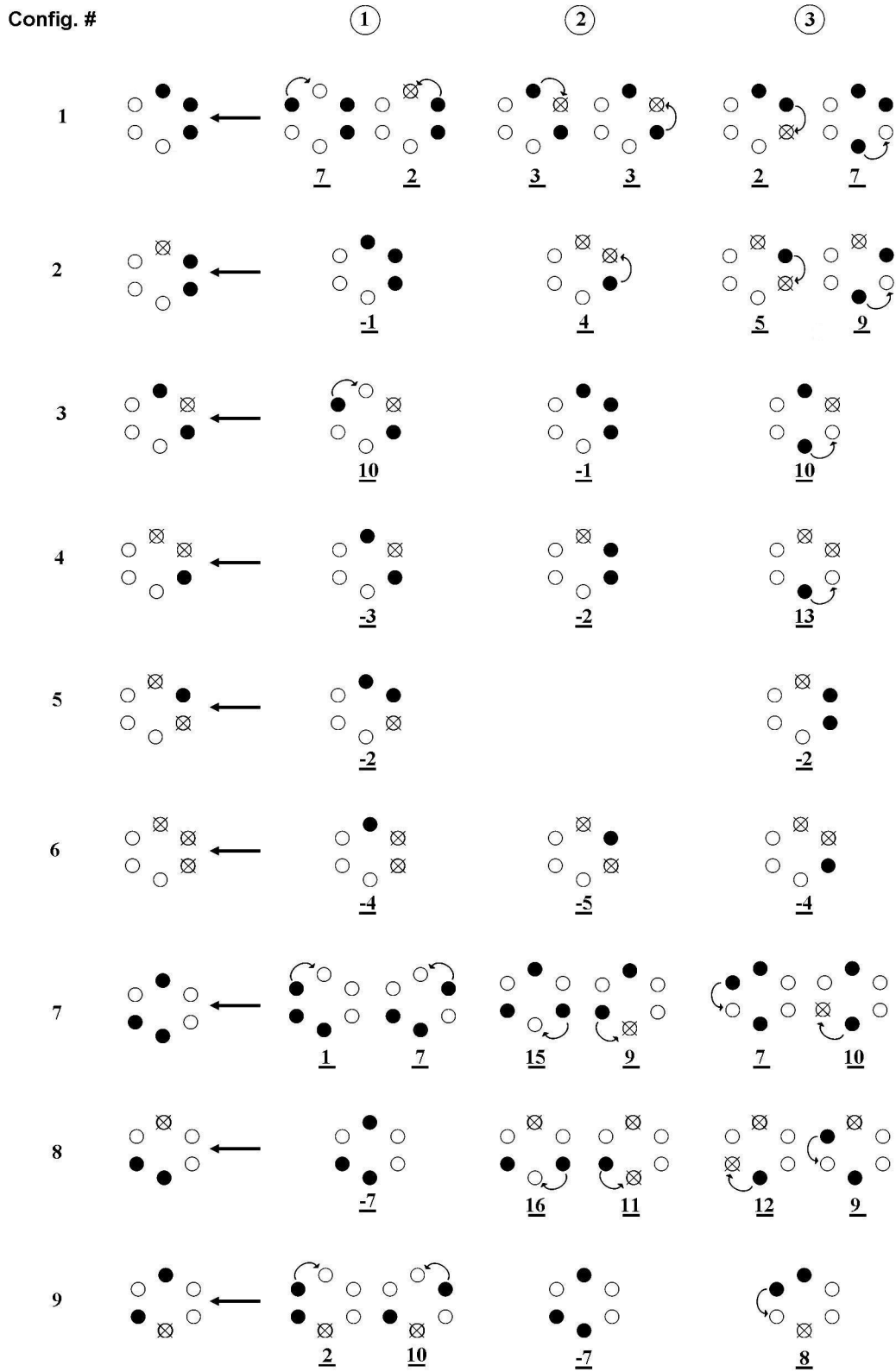


Figura C.5: Configurações antecedentes das configurações número 1 à número 9, seja por um processo de inativação ou um salto. Demais legendas igual à figura C.4.

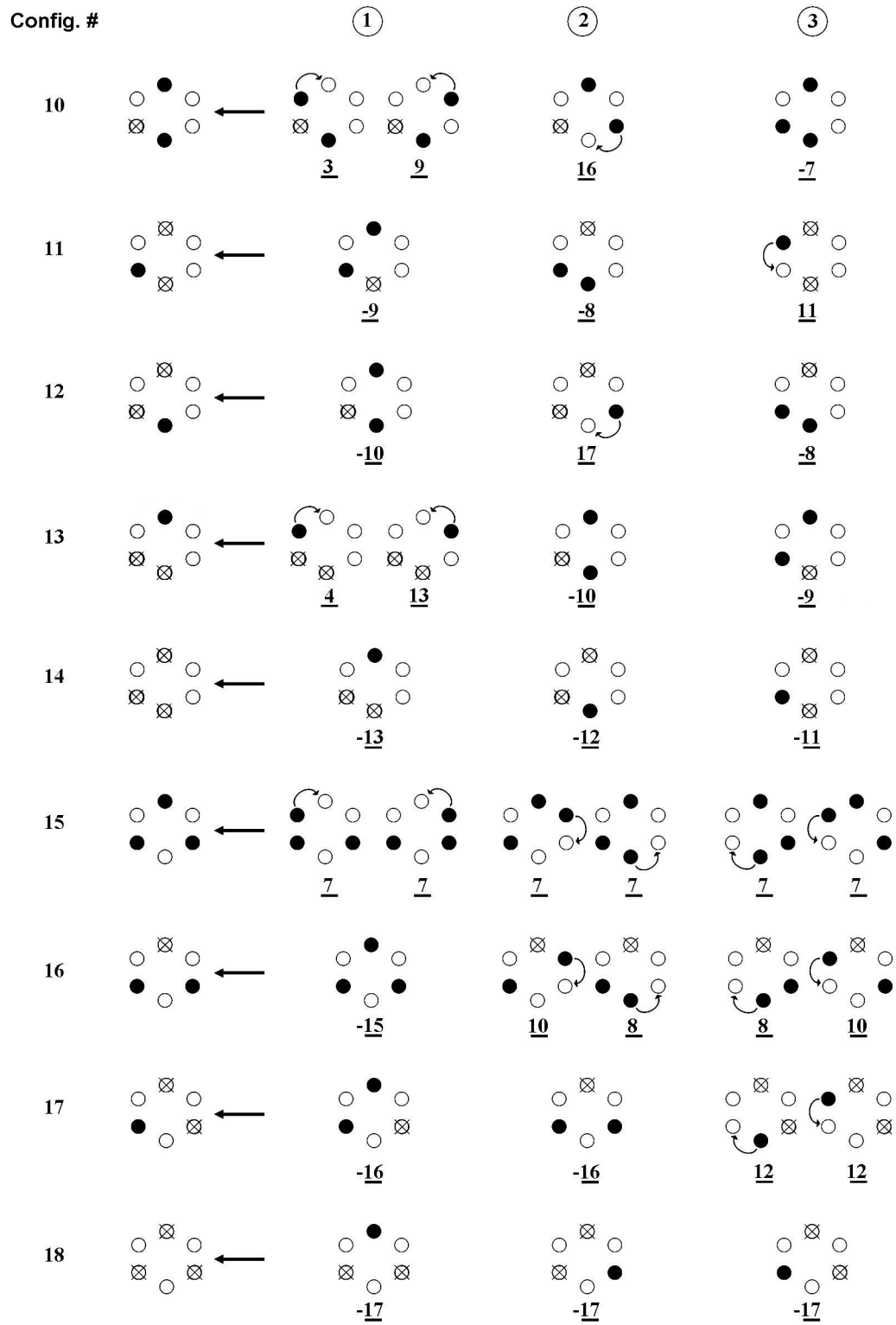


Figura C.6: Configurações antecedentes das configurações número 10 à número 18, seja por um processo de inativação ou um salto. Demais legendas igual à figura C.4.

Tabela C.4: Resumo das transições das figuras C.5 e C.6.

Config. #	N_{trans}	Config. antecedentes					
1	6	7	2	3	3	7	2
2	4	-1	4	9	5		
3	3	10	-1	10			
4	3	-3	-2	13			
5	2	-2	-2				
6	3	-4	-5	-4			
7	6	1	7	15	9	7	10
8	5	-7	16	11	9	12	
9	4	2	10	-7	8		
10	4	3	9	16	-7		
11	3	-9	-8	11			
12	3	-10	17	-8			
13	4	4	13	-10	-9		
14	3	-13	-12	-11			
15	6	7	7	7	7	7	7
16	5	-15	10	8	8	10	
17	4	-16	-16	12	12		
18	3	-17	-17	-17			

Tabela C.5: Síntese dos dados necessários para iterar a a distribuição quase estacionária. Da esquerda para a direita: (1) Transições envolvendo saltos - T_{saltos} , (2) transições por inativação - $T_{inativacao}$ e (3) conjunto de: partículas ativas - N_{pact} , número de saltos possíveis - N_{salp} e peso de cada configuração - $|C|$.

T_{saltos}		
c'	c	$m_{c' \rightarrow c}$
7	1	2
2	1	2
3	1	2
4	2	1
9	2	1
5	2	1
10	3	2
13	4	1
1	7	1
7	7	2
15	7	1
9	7	1
10	7	1
16	8	1
11	8	1
9	8	1
12	8	1
2	9	1
10	9	1
8	9	1
3	10	1
9	10	1
16	10	1
11	11	1
17	12	1
4	13	1
13	13	1
7	15	6
10	16	2
8	16	2
12	17	2

$T_{inativacao}$		
c'	c	$m_{c' \rightarrow c}$
1	2	1
1	3	1
3	4	1
2	4	1
2	5	2
4	6	2
5	6	1
7	8	1
7	9	1
7	10	1
9	11	1
8	11	1
10	12	1
8	12	1
10	13	1
9	13	1
13	14	1
12	14	1
11	14	1
15	16	1
16	17	2
17	18	3

Config. #	N_{pact}	N_{salp}	$ C $
1	3	2	6
2	2	2	12
3	2	4	6
4	1	2	12
5	1	2	6
6	0	0	6
7	3	4	12
8	2	2	12
9	2	4	12
10	2	4	12
11	1	2	12
12	1	2	12
13	1	2	12
14	0	0	12
15	3	6	2
16	2	4	6
17	1	2	6
18	0	0	2

Referências Bibliográficas

- [1] J. C. Mansur Filho and R. Dickman, *Conserved directed percolation: exact quasistationary distribution of small systems and Monte Carlo simulations*. J. Stat. Mech. **P05029** (2011)
- [2] H. K. Janssen, *On the Non-Equilibrium Phase-Transition in Reaction-Diffusion Systems with an Absorbing Stationary State*. Z. Phys. B: Cond. Mat **42**, 151 (1981).
- [3] P. Grassberger, *On phase transitions in Schlögl's second model*. Z. Phys. B: Condens. Matter **47**, 365 (1982).
- [4] Cardy, J., and U. C. Täuber, *Theory of Branching and Annihilating Random Walks*. Phys. Rev. Lett. **77**, 4780 (1996).
- [5] R. Dickman, L. T. Rolla, V. Sidoravicius, *Activated Random Walkers: Facts, Conjectures and Challenges*. J. Stat. Phys. **138** (2010)
- [6] J. J. Binney, N.J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The theory of critical phenomena: an introduction to renormalization group*. Clarendon Press, Oxford (1992)
- [7] Leo P. Kadanoff, *Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2000)

- [8] S. Lübeck, *Universal scaling behavior of non-equilibrium phase transitions*. J. of Modern Physics **B18**, 3977 (2004)
- [9] Centro de física teórica e computacional, <http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo8/topico1.php> (2010).
- [10] E. A. Guggenheim, *The Principle of Corresponding States*. J. Chem. Phys. **13**, 253 (1945).
- [11] J. V. Sengers and J. M. H. Levelt Sengers, *Critical phenomena in classical fluids in Progress in liquid physics*. John Wiley&Sons, New York, 1978.
- [12] H. E. Stanley, *Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena*. Rev. Mod. Phys. **71**, S358 (1999)
- [13] B. Widom, *Equation of state in the neighborhood of the critical point*. J. Chem. Phys., **43**, 3898 (1965).
- [14] L. P. Kadanoff, *Scaling Laws for Ising Models Near T_c* . Physics, **2** 263 (1966).
- [15] Ising, E. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Z. der Physik **31**, 253 (1925)
- [16] Onsager, L. *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*. Phys. Rev., **65**, 117 (1944).
- [17] H. Hinrichsen, *Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states*. Adv. Phys. **49** 815, (2000).
- [18] Witten, T.A. and Sander, L. M., *Diffusion limited aggregation, a kinetic critical phenomena*. Phys. Rev. Lett. **47**, 1400 (1981).

- [19] P. Meakin, *Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [20] I. Cohen, A. Cziro' k, E. Ben-Jacob, *Chemotactic-based adaptive self-organization during colonial development*. Phys. A **233** 678 (1996).
- [21] J.C. Mansur Filho, A.G. Silva, A.T.G. Carvalho, M.L. Martins, *Electrocrystallization under magnetic fields: experiment and model*. Phys. A **350** 393 (2005).
- [22] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. Editora da Universidade de São Paulo (2001).
- [23] G. Odor, *Universality classes in nonequilibrium lattice systems*. Rev. Mod. Phys. **76**, 663 (2004).
- [24] R. Dickman and J. Kamphorst Leal da Silva, *Moment ratios for absorbing-state phase transitions*. Phys. Rev. E **58**, 4266(R) (1998).
- [25] Katz, S., Lebowitz, J.L., Spohn, H., *Phase transitions in stationary nonequilibrium states of model lattice systems*. Phys. Rev. B **28**, 1655 (1983) and Katz, S., Lebowitz, J.L., Spohn, H., *Nonequilibrium steady states of stochastic lattice gas models of fast ionic conductors*. J. Statist. Phys. **34**, 497 (1984).
- [26] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*. (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [27] Grassberger, P., and De La Torre, A., Ann. Phys. (New York), **122**, 373 (1979).
- [28] Muñoz, M. A., Grinstein, G., and Tu, Y., *Survival probability and field theory in systems with absorbing states*. Phys. Rev. E, **56**, 5101 (1997).

- [29] M. E. Fisher and M. N. Barber, *Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region*. Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
- [30] *Finite-size Scaling and Numerical Simulations of Statistical Systems*, edited by V. Privman (World Scientific, Singapore, 1990).
- [31] S. S. Manna, *Two-state model of self-organized criticality*. J. Phys. A **24**, L363 (1991).
- [32] S. S. Manna, *Large-scale simulation of avalanche cluster distribution in sand pile model*. J. Stat. Phys. **59**, 509 (1990).
- [33] I. Jensen and R. Dickman, *Nonequilibrium phase transitions in systems with infinitely many absorbing states*. J. Stat. Phys. **71**, 89 (1993).
- [34] R. Dickman, *Numerical analysis of the master equation*. Phys. Rev. E **65**, 047701 (2002).
- [35] J. R. G. de Mendonça, *Precise critical exponents for the basic contact process*. J. Phys. A **32**, L467 (1999).
- [36] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, and B. Flannery, *Numerical Recipes*. (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [37] M. M. de Oliveira and R. Dickman, *How to simulate the quasistationary state*. Phys. Rev. **71**, 016129 (2005).
- [38] T. Aukrust, D. A. Browne and I. Webman, *Critical behavior of an autocatalytic reaction model*. Phys. Rev. A **41**, 5294 (1990).

- [39] R. Dickman and J. Kamphorst Leal da Silva, *Moment ratios for absorbing-state phase transitions*. Phys. Rev. E **58**, 4266(R) (1998).
- [40] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press (2005).
- [41] R. Dickman, *Absorbing-state phase transitions: Exact solutions of small systems*. Phys. Rev. E **77**, 030102(R) (2008).
- [42] M. Henkel and G. Schütz, *Finite-lattice extrapolation algorithms*. J. Phys. A **21**, 2617 (1988).
- [43] J. L. Monroe, *Extrapolation and the Bulirsch-Stoer algorithm*. Phys. Rev. E **65**, 066116 (2002).
- [44] S. B. Lee and Sang-Gui Lee, *Validity of scaling relations in absorbing phase transitions with a conserved field*. Phys. Rev. E **78**, 040103R (2008).
- [45] R. Dickman, *Critical exponents for the restricted sandpile*. Phys. Rev. E **73**, 036131 (2006).
- [46] R. Dickman, M. Alava, M. A. Muñoz, J. Peltola, A. Vespignani, and S. Zapperi, *Critical behavior of a one-dimensional fixed-energy stochastic sandpile*. Phys. Rev. E **64**, 056104 (2001).
- [47] J. J. Ramasco, M. A. Muñoz, and C. A. D. Santos, *Numerical study of the Langevin theory for fixed-energy sandpiles*. Phys. Rev. E **69**, 045105 (2004).
- [48] M. Rossi, R. Pastor-Satorras, and A. Vespignani, *Universality Class of Absorbing Phase Transitions with a Conserved Field*. Phys. Rev. Lett. **85**, 1803 (2000).

- [49] R. da Silva, R. Dickman, and J. R. Drugowich de Felício, *Critical behavior of none-equilibrium models in short-time Monte Carlo simulations*. Phys. Rev. E **70**, 067701 (2004).
- [50] J. Kockelkoren and H. Chaté, e-print cond-mat/0306039.
- [51] R. Dickman, unpublished.
- [52] I. Dornic, H. Chaté, and M. A. Muñoz, Phys. Rev. Lett. **94**, 100601 (2005).