



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Estudo das propriedades críticas do processo
de contato por par para diferentes
atualizações**

POR

MARCELA QUINTANA LANGONE

NATAL-RN, BRASIL

DEZEMBRO DE 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Estudo das propriedades críticas do processo de
contato por par para diferentes atualizações**

Marcela Quintana Langone

Dissertação apresentada ao Programa
de Pós-Graduação em Física do
Departamento de Física Teórica e
Experimental da Universidade Federal
do Rio Grande do Norte como parte dos
pré-requisitos à obtenção do
título de mestre em Física.

Orientador: Prof. Umberto Laino Fulco

**Natal RN, Brasil
Dezembro de 2008**

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Umberto Laino Fulco (Orientador - UFRN)

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra (Examinador Externo - UFAL)

Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque (Examinador Interno - UFRN)

Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva (Examinador Suplente - UFRN)

Aos meus Pais e Irmãs.

Agradecimentos

Ao **Prof. Umberto Laino Fulco**, pela orientação.

A **todos os professores** do DFTE\UFRN, que contribuíram para minha formação.

A **todos os funcionários** do DFTE\UFRN.

A **todos os colegas** do curso de Física.

Aos meus pais, **Humberto Luiz Langone Sobrinho** e **Rosângela Quintana Langone**, minhas irmãs **Andréa Quintana Langone Minuzzi**, **Patrícia Quintana Langone** e meu irmão de coração **Alessandro Andrade Minuzzi**, e a toda a minha família pelo apoio e compreensão.

À **CAPES** pelo apoio financeiro.

RESUMO

Neste trabalho investigamos as propriedades críticas do processo de contato por par (PCP) unidimensional usando o método Monte Carlo, simulando-o para vários tamanhos de rede e diferentes tempos de relaxação, e utilizando três tipos de atualização: aleatória, sequencial e paralela. Em nossas simulações acrescentamos uma pequena modificação ao modelo PCP a qual denominamos Método de Monte Carlo com Ressuscitamento (MCR). Ela consiste em ressuscitarmos uma partícula do sistema quando o parâmetro de ordem (densidade de pares de partículas) se anula. Fazemos isto porque em muitos modelos de não equilíbrio, como é o caso do PCP, na vizinhança do ponto crítico, o parâmetro de ordem se anula rapidamente, dificultando a identificação precisa deste ponto. Com o ressuscitamento de uma partícula do sistema contornamos este problema, pois a curva do parâmetro de ordem vai a zero de forma mais suave durante a transição, onde produz um ponto de inflexão que equivale ao ponto crítico. Desta forma podemos aplicar algumas relações de escala para estimarmos o ponto e os expoentes críticos. Aplicamos a técnica de análise de escala de tamanho finito para determinarmos o ponto crítico e estimarmos os expoentes críticos β , ν e z . Nossos resultados mostram-se consistentes com os já estabelecidos na literatura para o modelo PCP, mostrando que o fato de ressuscitarmos uma partícula não faz o sistema mudar o seu comportamento crítico, mas facilita a determinação do ponto crítico e dos expoentes críticos do modelo. Esta extensão ao método Monte Carlo também tem sido usada com sucesso no estudo de outros modelos de processos de contato. Por esta razão acreditamos que ela seja útil para estudar uma grande variedade de modelos de não equilíbrio.

ABSTRACT

We study the critical behavior of the one-dimensional pair contact process (PCP), using the Monte Carlo method for several lattice sizes and three different updating: random, sequential and parallel. We also added a small modification to the model, called “Monte Carlo com Ressucitamento” (MCR), which consists of resuscitating one particle when the order parameter goes to zero. This was done because it is difficult to accurately determine the critical point of the model, since the order parameter (particle pair density) rapidly goes to zero using the traditional approach. With the MCR, the order parameter becomes null in a softer way, allowing us to use finite-size scaling to determine the critical point and the critical exponents β , ν and z . Our results are consistent with the ones already found in literature for this model, showing that not only the process of resuscitating one particle does not change the critical behavior of the system, it also makes it easier to determine the critical point and critical exponents of the model. This extension to the Monte Carlo method has already been used in other contact process models, leading us to believe its usefulness to study several others non-equilibrium models.

Sumário

1	Introdução Geral	1
2	Simulação Computacional com o método de Monte Carlo	7
2.1	Introdução	7
2.2	Implementação do método Monte Carlo	9
2.2.1	Processos markovianos	10
2.2.2	Descrição matemática do método	12
2.2.3	Algoritmo de Metropolis e de Glauber	13
2.3	Um exemplo de aplicação do método Monte Carlo	15
2.3.1	O modelo de Ising	15
2.4	Método de Monte Carlo com Ressuscitamento	19
3	Transições de fase, relações de escala e classes de universalidade	22
3.1	Introdução	22
3.2	Transições de fase	24
3.2.1	Parâmetro de ordem	26
3.2.2	Relações de escala e expoentes críticos	26
3.3	Expoentes críticos de modelos de não-equilíbrio	29
3.3.1	Percolação dirigida e sua classe de universalidade	32
3.3.2	Classe de universalidade da conservação da paridade	35
4	Comportamento Crítico do Processo de Contato por Par	37
4.1	Introdução	37
4.1.1	O Modelo	38
4.1.2	Simulações	40
4.2	Resultados e Discussão	41
5	Conclusões e Perspectivas	56

Capítulo 1

Introdução Geral

O estudo de sistemas de muitas partículas é provavelmente a área de pesquisa mais ativa da física moderna fora do domínio da física de altas energias; e a Mecânica Estatística é a ciência que aborda o problema de deduzir as propriedades macroscópicas desses sistemas a partir de uma visão microscópica dos mesmos. A ME também foi a primeira das teorias físicas fundamentais na qual conceitos e explanações probabilísticas tiveram um papel essencial [1, 2, 3, 4].

O desenvolvimento formal da ME começou na metade do século XIX e se deve, principalmente, aos trabalhos teóricos de J. W. Gibbs (1844-1906), J. C. Maxwell (1831-1879) e L. Boltzmann (1844-1906) [5].

Maxwell e Boltzmann demonstraram que não era necessário conhecer a trajetória de cada átomo para determinar o estado de um sistema com um grande número deles; era apenas necessário conhecer o comportamento médio desses átomos. Então, grandezas como temperatura e pressão de um gás corresponderiam, por exemplo, à energia média do movimento dos átomos e à intensidade do choque destes com as paredes do recinto no qual estavam confinados, respectivamente. Esses resultados, junto a algumas hipóteses relativas ao comportamento médio dos átomos do gás, permitiram que Maxwell e Boltzmann encontrassem alguns resultados já conhecidos na Termodinâmica como, por exemplo, as leis de Boyle-Mariotte e Charles, que exprimiam relações entre a temperatura, a pressão e o volume de um gás [6].

Boltzmann, em um dos seus trabalhos de 1877 [7], apresentou uma expressão probabilística para a entropia. Ele pôde mostrar que a entropia S é proporcional ao volume do espaço de fase $6N$ -dimensional Ω , ocupado pelo

macroestado correspondente de um sistema de N partículas:

$$S \propto \log \Omega$$

Esta expressão é atualmente conhecida na notação escrita por Max Planck em 1901:

$$S = k \log W$$

onde k é chamada constante de Boltzmann e W é o número de microestados acessíveis ao sistema. Esta expressão foi chamada Princípio de Boltzmann por Albert Einstein em 1905, já que pode ser usada como o fundamento da Mecânica Estatística.

J. Willard Gibbs formalizou a ME tal qual nós a conhecemos hoje. Foi ele quem cunhou o termo Mecânica Estatística em uma conferência da Associação Americana para o Avanço da Ciência, na Filadélfia, em 1884 e o apresentou formalmente em seu livro publicado em 1902 [8].

Gibbs se baseia no conceito de ensembles, que significa coleções. Esse conceito torna possível a definição de macroestados em função do número de microestados a que correspondem. Ele estudou maneiras diferentes de calcular estes estados macroscópicos, são eles:

Ensemble micro-canônico - que corresponde a um ensemble de sistemas isolados os quais possuem a mesma energia. Nesse caso, cada constituinte do ensemble corresponde a um microestado, e todos os microestados possuem igual probabilidade. Este é o ensemble mais básico, mas não o mais prático, já que requer a investigação do espectro de energia do Hamiltoniano, o que geralmente é um problema complicado.

Ensemble canônico - que corresponde a sistemas em contato com um reservatório de calor. Nesse caso, a temperatura se mantém fixa, mas a energia individual dos sistemas pode flutuar em torno do valor médio E . Esse ensemble é de grande importância prática, já que é mais conveniente para os cálculos que o micro-canônico.

Ensemble grande-canônico - no qual não apenas a energia, como também o número de partículas dos sistemas individuais pode flutuar em torno do valor médio N ; a temperatura mantém-se fixa. Ele é bastante

prático, e pode ser aplicado, inclusive, a sistemas os quais é impossível fixar o número de partículas como, por exemplo, gases formados por quase-partículas.

Gibbs, portanto, foi quem formalizou a ME dentro de uma estrutura clara e prática. Mesmo assim, sua teoria dos ensembles só teve aceitação definitiva a partir da década de 40.

Outro grande cientista que contribuiu de forma significativa para o desenvolvimento da ME foi Albert Einstein; principalmente no que diz respeito análise de flutuações. Em 1924, ele chegou à formulação de uma nova distribuição de probabilidades, que passou a ser chamada de Bose-Einstein, que descrevia sistemas formados por partículas idênticas, que podem acumular-se em um mesmo nível de energia. Ele inclusive chegou a prever o fenômeno da condensação de Bose-Einstein, que só fora comprovado experimentalmente em 1995, 40 anos após sua morte.

A ME é uma teoria bem desenvolvida, e se divide em duas grandes áreas: a Mecânica Estatística de equilíbrio e a Mecânica Estatística de não-equilíbrio. A ME de equilíbrio já está bem fundamentada, descrevendo com êxito as propriedades termodinâmicas de sistemas em equilíbrio. Já a ME de não-equilíbrio está atualmente em grande desenvolvimento, e tem como objetivo principal o estudo dos processos irreversíveis.

A ME de não-equilíbrio começou seu desenvolvimento nas primeiras décadas do século XX. Podemos destacar como contribuições pioneiras para essa teoria a conceituação de caminhada aleatória, como também sua utilização na análise do movimento browniano (descrito pela primeira vez por Robert Brown, em 1827).

Outras contribuições importantes foram os trabalhos de Lars Onsager [9, 10] e Ilya Prigogine. Onsager obteve uma grande classe de teoremas de flutuação-dissipação para estados de não-equilíbrio próximos ao equilíbrio termodinâmico. Ele obteve uma série de expressões que relacionam correntes - térmicas, elétricas, etc. - aos gradientes de energia, também conhecidos como forças ou fluxos. Já Prigogine fez a análise de sistemas que se mantinham afastados do equilíbrio observando que, quando estes se mantêm afastados em razão de alguma força externa, podem originar quebras espontâneas de simetria, que se manifestam em nível macroscópico. Ele caracterizou o

estado longe do equilíbrio termodinâmico com o termo estrutura dissipativa, salientado a importância da dissipação para os fenômenos de não-equilíbrio.

Uma das atividades que mais cresce dentro da ME é o estudo das propriedades críticas de sistemas termodinâmicos. Dentro deste estudo, temos duas abordagens que se destacam: a abordagem analítica, onde as propriedades físicas dos sistemas são obtidas através das relações estabelecidas pela ME, e as simulações numéricas.

Entre os métodos de simulação computacional mais conhecidos estão o método de Monte Carlo (MC) [11] e a Dinâmica Molecular (DM) [12]. A DM trata os problemas de modo determinístico, buscando resolver numericamente as equações de Newton de um sistema de muitos corpos. O MC trata os problemas de modo estocástico, sem a necessidade de se escrever as equações diferenciais que descrevem o comportamento do sistema, sendo apenas necessário que este seja descrito por funções densidade de probabilidade. O MC tem se mostrado bastante útil e é atualmente o método mais utilizado no estudo de transições de fase e fenômenos críticos dentro da abordagem de simulações numéricas [13, 14, 15].

O método de Monte Carlo, desde a sua utilização na simulação de processos nucleares e na resolução aproximada de integrais de alta ordem pelos cientistas que desenvolveram a primeira bomba atômica (1942), tem se tornado uma ferramenta bastante poderosa para investigar sistemas de praticamente todas as áreas da ciência. Por isso, sempre existiu uma busca permanente para aumentar sua eficiência, tanto do ponto de vista de buscar melhores resultados, bem como de diminuir os esforços computacionais (tempo e memória). Neste sentido várias extensões vêm sendo feitas ao método de MC, como por exemplo: algoritmos de Metropolis [16], Glauber [17], Swendsen-Wang (SW) [18], Wolff [19], etc. [20, 21, 22, 23]. Recentemente, foi introduzido o Método de Busca Automática (MBA) [24, 25], como mais uma tentativa de melhorar a eficiência do MC. Esse método foi inspirado na teoria da criticalidade auto-organizada, segundo a qual o sistema evolui de acordo com alguma dinâmica espontaneamente ao ponto crítico.

Uma técnica bastante simples para facilitar a determinação do ponto crítico em modelos de não-equilíbrio que exibem transições de fase de estados ativos para estados absorventes foi introduzida recentemente [26, 27]. Ela consiste em ressuscitar uma partícula do sistema toda vez que o parâmetro

de ordem (densidade de partículas) se anula, fazendo com que a curva característica deste parâmetro tenha uma ida mais lenta ao ponto crítico, facilitando assim a determinação do mesmo.

Neste trabalho aplicamos a técnica de ressuscitar uma partícula, que aqui denominamos Método Monte Carlo com Ressuscitamento (MCR), para investigarmos o comportamento crítico do modelo processo de contato por par (PCP). Este modelo foi proposto inicialmente por Janssen [28] em 1993 e desde então tem sido largamente estudado [29, 30, 31, 32, 33, 34]. O modelo PCP envolve a criação e aniquilação de partículas aleatoriamente a partir dos pares, exibindo transição de fase contínua de um estado ativo (presença de pares de partículas) para estados absorventes (ausência de pares de partículas). Deste modo o modelo pode exibir múltiplos estados absorventes (IMAS), pois qualquer configuração com densidade não nula de partículas isoladas é um deles.

Nosso principal objetivo com o presente trabalho é mostrar que o fato de ressuscitarmos uma partícula do sistema quando o parâmetro de ordem vai a zero é útil para estimarmos o ponto de transição e conseqüentemente os expoentes críticos de modelos que evoluem para estados absorventes, em particular os diversos tipos de processos de contato e, desse modo, estabelecer o MCR como mais uma maneira eficiente de se estudar propriedades críticas dentro da Mecânica Estatística de não-equilíbrio. Estudamos o modelo PCP para várias redes com diferentes tempos de relaxação. Usamos três tipos de atualizações: aleatória, seqüencial e paralela, pois, também, estávamos interessados em verificar qual o efeito que um dado tipo de atualização provoca ou não no comportamento crítico de modelos de não-equilíbrio e quais as vantagens ou desvantagens de se optar por uma ou por outra dentre as três.

Escolhemos estudar o modelo PCP porque ele é considerado o protótipo para modelos que exibem múltiplos estados absorventes, também porque ele é um dos modelos mais simples e um dos mais conhecidos dentro da ME de não-equilíbrio. Desse modo podemos fazer comparações de nossos resultados com resultados do modelo PCP estabelecidos na literatura e assim verificarmos a eficiência do MCR.

Agora vamos apresentar as demais etapas deste trabalho que estão organizadas como segue:

No capítulo 2 apresentaremos o método Monte Carlo, iniciaremos com

uma breve retrospectiva histórica, em seguida falaremos um pouco sobre processos markovianos e por último utilizaremos o modelo de Ising como um exemplo de aplicação.

No capítulo 3 trataremos um pouco sobre transições de fase entre estado ativo e absorvente. Para isto iniciaremos com uma breve retrospectiva histórica sobre o estudo de transições de fase de um modo geral, explicaremos sucintamente o que é uma transição de fase, como também alguns conceitos básicos, por exemplo: parâmetro de ordem, expoentes críticos e classes de universalidade.

No capítulo 4 explicaremos o modelo PCP em detalhes. Iniciaremos o capítulo falando um pouco sobre as classes de universalidades Percolação Direcionada e Conservação da Paridade. Em seguida explicaremos o modelo, descrevendo o algoritmo definido para simulá-lo e por último apresentaremos nossos resultados e discussões.

No último capítulo apresentaremos nossas conclusões e perspectivas para este trabalho.

Capítulo 2

Simulação Computacional com o método de Monte Carlo

2.1 Introdução

Os métodos de simulação computacional representam um conjunto de técnicas fundamentais amplamente empregadas em diversas áreas da física e, devido à sua grande flexibilidade, vêm sendo utilizadas com sucesso também por outras ciências, como a matemática, a química e a biologia [35].

O método de Monte Carlo (MC) é um dos métodos numéricos mais conhecidos, senão o mais utilizado, para a realização de simulações estatísticas [11, 36, 37, 38, 39]. Entre suas primeiras aplicações está sua utilização para simular reações nucleares, durante o Projeto Manhattan na Segunda Guerra Mundial, pelos cientistas Von Newman, Ulan, Fermi e Metropolis. Este último, inclusive, foi quem cunhou o nome Monte Carlo, originado de uma cidade do principado de Mônaco, que era o centro de jogos de sorte na época, devido à semelhança das simulações estatísticas com estes.

Atualmente o método MC é utilizado rotineiramente em diversos campos de pesquisa, para simular fenômenos críticos complexos, como o transporte de radiação na atmosfera [40], reações químicas [41, 42, 43], dinâmicas populacionais [44], proliferação de epidemias [45], criação e aniquilação de partículas [46, 47], entre outros [48, 49, 50, 51, 52, 53].

O método MC pode ser usado tanto na resolução de problemas de for-

mulação intrinsecamente analítica quanto na simulação de problemas puramente estatísticos. Ele é usado especialmente naqueles casos em que o número de fatores incluídos no problema é tão grande que a sua solução analítica é demorada ou, em termos práticos, impossível [54]. Contudo, existem algumas dificuldades que podem inviabilizar a sua aplicação. As principais dificuldades que encontramos nas simulações com o método de MC são as limitações computacionais e os erros estatísticos que são inerentes ao método. Dependendo do problema, a simulação pode durar dias, semanas, meses, etc., podendo tornar-se impraticável. O erro estatístico aparece como uma característica das simulações e, dependendo do número de amostras geradas, pode macular nossos resultados.

Devido a essas dificuldades, para podermos implementar o método MC na simulação de algum sistema físico temos que fazer, antes, algumas aproximações: uma delas é representá-lo por um sistema finito (factível à capacidade de processamento do computador); outra forma é representá-lo, quando definido em um meio contínuo, por outro definido em um meio discreto – o mais comum é representá-lo por um modelo definido em uma rede geométrica L^d (onde d é a dimensão espacial) dividida em N sítios.

Em modelos assim definidos o estado do sistema é caracterizado pelo conjunto de valores de variáveis, geralmente discretas, definidas nos sítios da rede $(1, 2, 3, \dots, N)$ em consideração. Essa variável pode assumir qualquer valor, por exemplo, $\sigma = 0, \pm 1, \pm 2$, etc. O caso mais simples é quando ela assume dois valores: $\sigma = 0$ caso o sítio esteja vazio ou $\sigma = 1$ caso o sítio esteja ocupado. Ao longo deste trabalho denotaremos o sítio vazio por \emptyset ; e o sítio ocupado por A .

Para se obter resultados mais próximos aos do sistema físico no limite termodinâmico, trabalha-se com redes de vários tamanhos com condições de contorno apropriadas e verifica-se a sua convergência ou analisa-se como as grandezas de interesse se escalonam com o tamanho das redes [55, 56, 57, 58, 59].

Mesmo com essas aproximações, ainda fica difícil realizarmos cálculos que envolvam todas as configurações (estados) do sistema. Por exemplo, considere o modelo de Ising [60]. Neste modelo cada átomo da rede tem momento de dipolo magnético (spin) com dois possíveis estados. Suponha que temos inicialmente uma rede quadrada com $L = 3$, desse modo teremos

9 sítios ao todo (cada um com um átomo). Como cada spin pode tomar duas configurações, existem $s = 2^9 = 512$ possíveis estados para o sistema. Agora suponha que tenhamos uma rede com $L = 10$, assim teremos 100 sítios. Logo o número de estados possíveis é $s = 2^{100} \approx 10^{30}$. Um computador que seja capaz de operar 10^9 pontos por segundo gastará aproximadamente 10^{21} segundos para operar esta informação, cerca de 1000 vezes a idade do universo!

Portanto, nos deparamos com um problema: para melhorar os resultados temos que aumentar o tamanho das redes, mas quando fazemos isso o número de estados s calculado para o sistema, cresce exponencialmente de acordo com o seu tamanho. Logo fica inviável fazer qualquer cálculo que envolva todos os estados possíveis. Por isso o que os estudiosos têm feito é desenvolver métodos que estimem as propriedades termodinâmicas mediante a escolha de pequenos subconjuntos de todos os estados possíveis.

Entre estes métodos os mais famosos são: algoritmos de atualização local, como por exemplo, de Metropolis e de Glauber [16, 17]; algoritmos de “clusters”, como Swendsen-Wang (SW) [18], Wolff [19], o algoritmo de Machta *et al* ou “invaded cluster” (IC) [20, 21], entre outros.

Agora vamos fazer uma breve descrição matemática de alguns conceitos importantes, em seguida apresentamos um exemplo de aplicação do método MC e finalizando este capítulo descreveremos o Método de Monte Carlo com Ressuscitamento (MCR).

Observação: convém lembrar que, embora o método MC seja baseado no caráter aleatório do problema que se deseja resolver, ele também pode ser aplicado para resolver outros tipos de problemas, como por exemplo, integrações numéricas, cálculos de números transcendentais, entre outros. O que se tem de fazer é traduzir o problema que se quer resolver de um jeito que dê para aplicá-lo.

2.2 Implementação do método Monte Carlo

O método MC trata os problemas de modo estocástico. Isto significa que em uma simulação com este método tentamos seguir a dependência temporal de um modelo que evolui segundo taxas estocásticas, que dependem de

uma sequência de números aleatórios, os quais são gerados durante a simulação. Como esse método é mais usado em processos que geram sequências markovianas vamos a partir de agora apresentar uma rápida abordagem sobre sequências de Markov.

2.2.1 Processos markovianos

Muitos sistemas estão em constante evolução ao longo do tempo. Estes sistemas são dinâmicos e sofrem diversas transformações devido a fatores internos e/ou externos. Em um dado momento eles são caracterizados pelo estado nos quais se encontram. Sistemas, cujo estado em um dado momento depende única e exclusivamente do estado no momento imediatamente anterior, são ditos obedecer a um processo markoviano – que é um tipo particular de processo estocástico. Por processo estocástico entende-se um processo no qual surge um fenômeno aleatório que evolui ao longo do tempo e que de alguma forma pode ser controlado por leis de probabilidades.

Matematicamente isto implica em termos um conjunto de variáveis aleatórias dependentes do tempo indexadas num conjunto U , isto é

$$\{X_t, t \in U\} \tag{2.1}$$

Não há restrições quanto à natureza do conjunto U , porém, dois casos importantes são: $U = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ ou $U = \{0, 1, 2, \dots\}$ (processo estocástico de parâmetro discreto), e $U = \mathfrak{R}$ ou $U = [0, \infty]$ (processo estocástico de parâmetro contínuo). Vamos comentar só o primeiro caso.

Para um dado sistema físico, obedecendo a certas leis de probabilidades podemos enunciar o seguinte princípio: *a probabilidade de que um sistema físico esteja num determinado estado no momento t_2 pode ser deduzido a partir do conhecimento do seu estado num dado momento anterior t_1 , e não depende da história do sistema antes do momento t_1 .* Este é o Princípio de Markov e o processo estocástico que representa observações de um sistema físico que satisfaça este princípio é um processo markoviano.

Um caso especial de um processo markoviano é uma *sequência ou cadeia de Markov*, que pode ser definida como um processo estocástico cujo desenvolvimento pode ser tratado como uma série de transições entre certos estados.

Em termos matemáticos, dizemos que um processo estocástico de parâmetro discreto $\{X_t, t = 0, 1, 2, \dots\}$ ou de parâmetro contínuo $\{X_t, t \geq 0\}$ é um processo markoviano se, para qualquer conjunto de n momentos $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ do conjunto U do processo, a distribuição condicional de X_{t_n} , para dados valores de $X_{t_1}, \dots, X_{t_{n-1}}$, depende apenas de $x_{t_{n-1}}$ (o valor conhecido mais recente); mais precisamente, para quaisquer valores reais x_1, \dots, x_n

$$P(X_{t_n} \leq x_{t_n} \mid X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_{n-1}} = x_{n-1}) = P(X_{t_n} \leq x_n \mid X_{t_{n-1}} = x_{n-1}) \quad (2.2)$$

A expressão 2.2 mostra que, dado o “presente” do processo, o “futuro” é independente do passado.

Em sequências de Markov de parâmetro discreto as variáveis aleatórias X_0, X_1, \dots, X_n são discretas, o conjunto U é discreto ($U = \{0, 1, 2, \dots, n\}$), o número de estados pode ser finito ou infinito e a equação 2.2 pode ser substituída por

$$P(X_m = x_m \mid X_0 = x_0, \dots, X_{m-1} = x_{m-1}) = P(X_m = x_m \mid X_{m-1} = x_{m-1}) \quad (2.3)$$

Um processo markoviano é descrito pela função de probabilidade de transição. Se o sistema estiver num estado s , no momento m , existe uma probabilidade fixa de ele no momento n está no estado s' . A função probabilidade de transição é dada por

$$p_{s,s'}(m, n) = P(X_n = s' \mid X_m = s) \quad (2.4)$$

A melhor forma de escrever as probabilidades de transição de uma cadeia de Markov com espaço de estados $\{0, 1, 2, \dots\}$ é através da matriz de transição a n passos

$$P(n) = [p_{s,s'}(n)] \quad (2.5)$$

os elementos desta matriz satisfazem, para todo s e s' , as seguintes propriedades:

$$p_{s,s'}(n) \geq 0 \quad (2.6)$$

$$\sum_{s'} p(s, s') = 1 \quad (2.7)$$

Note que a equação 2.7 é normalizada. Ou seja os elementos da matriz p devem ser não negativos e a soma dos elementos de uma coluna qualquer deve ser igual à unidade. Qualquer matriz quadrada que possua essas duas propriedades é chamada de matriz estocástica [61].

2.2.2 Descrição matemática do método

Dentro da ME, as propriedades de um sistema em equilíbrio termodinâmico são obtidas a partir de uma distribuição de probabilidades, conhecida a *priori*, e definida para possíveis estados (microscópicos) s do sistema. Seja $f(s)$ uma propriedade, isto é, uma função de estado [61]. A média $\langle f \rangle$ é dada por

$$\langle f \rangle = \sum_s f(s)P(s) \quad (2.8)$$

onde

$$P(s) = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta\mathcal{H}(s)\} \quad (2.9)$$

e Z é a função de partição dada por

$$Z = \sum_s \exp\{-\beta\mathcal{H}(s)\} \quad (2.10)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano.

O método Monte Carlo fornece uma estimativa para qualquer média $\langle f \rangle$ e consiste no seguinte. Suponha que um certo número M de estados seja gerado de acordo com a probabilidade $P(s)$; então a média aritmética

$$\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(s_i) \quad (2.11)$$

será uma estimativa para $\langle f \rangle$ onde $s_1, s_2, s_3, \dots, s_M$ são os estados gerados. A estimativa será tanto melhor quanto maior for o valor de M . Em seguida, devemos resolver o problema de gerar estados com a probabilidade $P(s)$. A solução se encontra na construção de um processo markoviano cuja probabilidade estacionária seja $P(s)$. Isto é, devemos construir uma matriz estocástica $T(s, s')$ tal que

$$\sum_{s'} T(s, s')P(s', s) = P(s) \quad (2.12)$$

Diferente de processos markovianos, onde T é dada e desejamos determinar P , aqui é dado P e desejamos obter T . A maneira mais utilizada para construir a matriz estocástica é fazer uso da condição de balanceamento detalhado, ou seja, construímos T tal que

$$T(s, s')P(s') = T(s', s)P(s) \quad (2.13)$$

A equação 2.13 fica automaticamente satisfeita desde que

$$\sum_{s'} T(s', s) = 1 \quad (2.14)$$

Um dos algoritmos mais utilizados para construir a matriz estocástica 2.14 é o de Metropolis, o qual passaremos a descrever. Juntamente com ele apresentaremos de forma sucinta o algoritmo de Glauber.

2.2.3 Algoritmo de Metropolis e de Glauber

O algoritmo de Metropolis foi elaborado por Metropolis *et al* [16] para simulação em dinâmica molecular. Ele é o mais usado em processos markovianos para sistemas de spins e o mais rápido quando comparado com outras dinâmicas, pois tem poucas instruções.

O algoritmo de Metropolis consiste no seguinte: para cada estado s definimos um conjunto $V(s)$ de estados vizinhos a s e adotamos $T(s', s) = 0$ para o caso em que s' não pertença a essa vizinhança. Desta maneira faz-se com que a transição de s para estados fora de sua vizinhança seja proibida. É importante escolher as vizinhanças dos diversos estados de modo que se um dado estado s' não pertença a vizinhança de um estado s , então s não pertence à vizinhança de s' . Por simplicidade, todas as vizinhanças são escolhidas com o mesmo número de estados que denotamos por N .

Para um estado s' que pertença a vizinhança de s , a matriz estocástica é definida por

$$T(s', s) = \frac{1}{N} \exp\{-\beta[\mathcal{H}(s') - \mathcal{H}(s)]\} \quad (2.15)$$

se $\mathcal{H}(s') > \mathcal{H}(s)$ e

$$T(s', s) = \frac{1}{N} \quad (2.16)$$

se $\mathcal{H}(s') \leq \mathcal{H}(s)$ desde que s' seja distinto de s

O elemento diagonal é dado por

$$T(s, s) = 1 - \sum_{s'(\neq s)} T(s', s) \quad (2.17)$$

Se as vizinhanças forem escolhidas de forma que qualquer estado possa ser alcançado a partir de qualquer outro, temos uma matriz estocástica regular

e, portanto, para ℓ suficientemente grande, o estado s_ℓ será escolhido com a probabilidade de equilíbrio $P(s_\ell)$.

Para implementarmos o algoritmo de Metropolis em um programa de computador, começamos por um estado qualquer, digamos s_0 e a partir dele geramos uma sequência de estados s_1, s_2, \dots, s_n da seguinte forma. Suponha que no ℓ -ésimo instante o estado seja s_ℓ . No instante seguinte escolhemos aleatoriamente um estado da vizinhança de s_ℓ . Suponha que o estado de equilíbrio escolhido seja s'_ℓ . Calculamos então a diferença $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(s'_\ell) - \mathcal{H}(s_\ell)$.

a) Se $\Delta\mathcal{H} \leq 0$, então o novo estado será s'_ℓ , ou seja, $s_{\ell+1} = s'_\ell$.

b) Se $\Delta\mathcal{H} > 0$, calculamos $p = \exp\{-\beta\Delta\mathcal{H}\}$ e geramos um número aleatório ξ distribuído no intervalo $[0, 1]$. Se $\xi \leq p$ então $s_{\ell+1} = s'_\ell$, se não $s_{\ell+1} = s_\ell$, que significa que o estado escolhido não se altera.

Descartamos os primeiros D estados (correspondentes a termalização do sistema), e usamos os M estados seguintes para estimar a média $\langle f \rangle$ para qualquer função de estado dada por

$$\frac{1}{M} \sum_{\ell=1}^M f(s_{\ell+1}) \quad (2.18)$$

O algoritmo de Glauber é uma variante do de Metropolis e descreve a interação de um sistema tipo Ising com um reservatório térmico a uma dada temperatura. Por reservatório térmico subentende-se o meio no qual variações de temperatura de sistemas nele contido não provoca mudanças significativas em sua temperatura, sendo um exemplo típico a atmosfera terrestre.

O algoritmo de Glauber pode ser interpretado como o método Monte Carlo para a simulação do modelo de sistemas em equilíbrio. Para tempos longos as configurações serão escolhidas de acordo com a probabilidade de Gibbs dada por

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp\left\{K \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j\right\} \quad (2.19)$$

a soma em parênteses se estende sobre os pares de sítios que sejam vizinhos mais próximos.

A diferença com o algoritmo de Metropolis, é que aqui usamos a probabilidade dada por

$$\tilde{\omega}_i(\sigma) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sigma \tanh\left[K \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}\right] \right\} \quad (2.20)$$

A idéia central desses algoritmos é construir uma sequência de configurações $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_n$ em que σ_i seja construída a partir de σ_{i-1} através de uma probabilidade de transição.

2.3 Um exemplo de aplicação do método Monte Carlo

Agora para um melhor entendimento e introdução de alguns conceitos básicos sobre simulação computacional com o método MC vamos utilizá-lo para simular um dos modelos bastante conhecido dentro da literatura da Mecânica Estatística. Trata-se do modelo de Ising.

Este modelo foi introduzido em 1920 [62] por W. Lenz e proposto para E. Ising, seu aluno de doutorado, como uma representação simples de um ferromagneto. O modelo inicial consistia em uma cadeia linear de momentos magnéticos interagentes. Lenz acreditava existir uma transição de fase a uma temperatura crítica acima (abaixo) da qual haveria (não haveria) ordenamento de toda a cadeia. Ising resolveu o modelo em 1925 [60], que para decepção de seu idealizador, não encontrou transição de fase. O resultado encontrado por Ising não deve ser visto como um fracasso, pois está correto. O pecado de Ising foi na verdade extrapolar este resultado para as demais dimensões. O que foi desmentido por Peirls ao demonstrar que o modelo de Ising em duas dimensões apresenta transição de fase em temperatura não nula [63]. Lars Onsager estudou o modelo de Ising em duas dimensões mostrando que, para este caso, de fato há transição de fase e chegou a expressões exatas para a função de partição, energia média, magnetização e calor específico para o modelo na ausência de campo externo [64].

Para o caso do modelo bidimensional na presença de campo externo e o caso tridimensional não existe ainda solução analítica até o presente. Para esses casos existem apenas soluções numéricas.

2.3.1 O modelo de Ising

Há muito tempo se sabe que certos materiais magnéticos como o ferro e o níquel possuem uma magnetização permanente que desaparece quando

o material é aquecido até uma temperatura característica (temperatura de Curie). Esta situação sugere que os spins dos átomos (ou moléculas) que constituem o material tenham uma certa tendência a se alinhar uns aos outros, dando origem a uma magnetização espontânea para temperaturas abaixo da temperatura de Curie. A descrição mais simples de tal fenômeno é dada pelo modelo de Ising.

Para entendermos o modelo de Ising consideremos uma rede bidimensional com cada ponto da rede ocupado por um átomo magnético. O estado de um átomo é caracterizado pela direção do momento dipolo magnético. O momento do dipolo magnético se encontra na direção do eixo z ou contrária a z (Figura 2.1) e é dado pela equação

$$\mu_i = \gamma\sigma_i \tag{2.21}$$

onde γ é uma constante e σ_i é a variável que assume os valores $+1$ caso o momento de dipolo magnético aponte na direção z ou -1 em caso contrário. O estado total, ou configuração do sistema, fica completamente especificado pelas variáveis $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N$ onde N é o número total de átomos magnéticos. Como cada variável toma dois valores, existem 2^N configurações para este sistema.

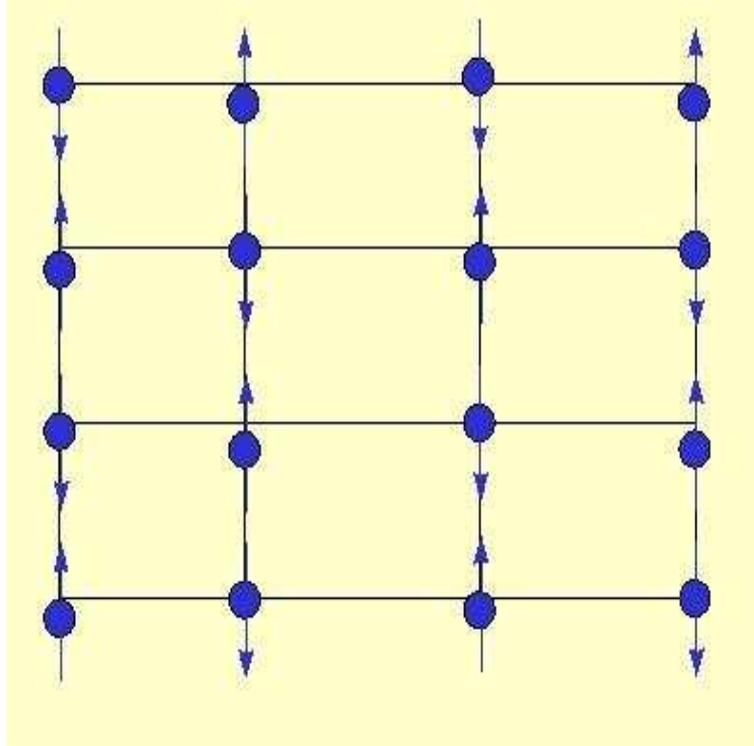


Figura 2.1: Esquema de um modelo de spin para um antiferromagneto [65]. Para o caso dos spins apontando para cima (\uparrow) $\sigma_i = 1$ e o caso dos spins apontando para baixo (\downarrow) $\sigma_i = -1$

No equilíbrio termodinâmico a uma temperatura T , a probabilidade $P(\sigma)$ de encontrar o sistema na configuração σ é dada por

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta E(\sigma)\} \quad (2.22)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann, e Z é a função de partição dada por

$$Z = \sum_{\sigma} \exp\{-\beta E(\sigma)\} \quad (2.23)$$

esta soma se estende sobre todas as 2^N configurações

Entre as quantidades macroscópicas que são de interesse físico temos:

a) **a magnetização média**

$$M = \langle M(\sigma) \rangle \quad (2.24)$$

onde

$$M(\sigma) = \sum_i \sigma_i \quad (2.25)$$

b) **a suscetibilidade**

$$X = \frac{1}{k_B T} \{ \langle [M(\sigma)]^2 \rangle - M^2 \} \quad (2.26)$$

c) **a energia média**

$$U = \langle E(\sigma) \rangle \quad (2.27)$$

d) **a capacidade térmica**

$$C = \frac{1}{k_B T^2} \{ \langle [E(\sigma)]^2 \rangle - U^2 \} \quad (2.28)$$

Conhecido o modelo de Ising vamos agora descrever um algoritmo para simulá-lo utilizando o MC.

Para simularmos o modelo de Ising inicialmente definimos o tamanho da rede que vai representar nosso sistema, por exemplo $L = 16$, $L = 32$, etc, (aqui por simplicidade vamos considerar uma rede quadrada). Em seguida preenchemos cada reticulado i da rede com um átomo com orientação do momento de dipolo magnético escolhida aleatoriamente. Usamos condição de contorno periódica, isto é, fazemos com que os átomos magnéticos das bordas interajam com os átomos magnéticos das bordas opostas a rede.

Temos agora uma configuração inicial aleatória $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$. A partir dela as demais configurações serão geradas como segue:

1. Escolhemos aleatoriamente um sítio i da rede no qual o momento de dipolo magnético do átomo presente tentaremos inverter ($\mu_i \rightarrow -\mu_i$).
2. Suponhamos que a inversão ocorra, o que implica a termos a configuração $\sigma^i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_n)$, calculamos a variação da energia $\Delta E(\sigma^i) - E(\sigma)$ para uma possível inversão. Que é dada por

$$\Delta E = 2J\sigma_i \left\{ \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} + H \right\} \quad (2.29)$$

onde a soma é feita sobre todos os átomos vizinhos ao átomo do sítio i escolhido e H é o campo externo.

3. Determinamos a probabilidade de inversão, que depende da dinâmica utilizada. No algoritmo de Metropolis é dada por $p = \exp\{-\beta\Delta E\}$.
4. Sorteamos um número aleatório ξ uniformemente distribuído num intervalo unitário.
5. Comparamos a probabilidade de inversão do momento de dipolo do átomo magnético com o número aleatório ξ
Dependendo do valor de ξ teremos
 - a) Se $\xi \leq p$, a nova configuração do sistema será σ^i ;
 - b) Se $\xi > p$, a configuração do sistema continuará a mesma, ou seja, será σ .
6. Repetimos as etapas descritas acima para todos os átomos da rede. Isto é o que chamamos de um passo de Monte Carlo.
7. Repetimos este procedimento inúmeras vezes até que o sistema se estabilize para então calcularmos as médias para as grandezas desejadas, como por exemplo a magnetização $M(\sigma)$, a energia $E(\sigma)$, etc.
8. Voltemos ao passo 1 para uma nova realização; a cada nova etapa temos uma trajetória distinta, porque temos uma sequência de números aleatórios diferentes, o que configura uma nova realização, embora comecemos de uma mesma condição inicial.
9. Fazemos as médias sobre o número de realizações geradas.

2.4 Método de Monte Carlo com Ressuscitamento

Quando simulamos modelos de equilíbrio como é o caso do modelo de Ising e suas generalizações (Potts, XY e Heisenberg), existe uma correlação temporal forte próximo à temperatura de transição, de modo que o tempo de relaxação aumenta rapidamente com o tamanho do sistema. Isto significa que próximo a temperatura crítica o sistema vai ao equilíbrio lentamente,

devido a dificuldade de se gerar configurações totalmente independentes. Este fenômeno é conhecido como amortecimento crítico (*critical slowing down*).

Em modelos de não equilíbrio, como é o caso de autômatas celulares e processos de contato, por exemplo, não ocorre o amortecimento crítico. Na vizinhança do ponto crítico o parâmetro de ordem (densidade de sítios ativos) se anula rapidamente e, uma vez nulo, o sistema não tem mais como evoluir. Neste caso se diz que o sistema atingiu o estado absorvente, no qual ele é capturado sem nenhuma chance de escapar. Esta ida rápida para o estado absorvente dificulta a determinação do ponto crítico e conseqüentemente dos expoentes críticos. De modo que para se obter resultados confiáveis na vizinhança do ponto crítico é necessário simular o modelo para vários tamanhos de redes, longos tempos de relaxação e efetuar as médias das grandezas de interesse sobre as amostras sobreviventes (aquelas em que o parâmetro de ordem não se anula completamente).

Uma técnica para facilitar a determinação do ponto e expoentes críticos de processos de contato investigados com o método MC foi lançada recentemente [24, 25]. Trata-se de um algoritmo que introduz uma pequena modificação na dinâmica evolutiva de modelos de não equilíbrio que exibem transição de fase entre estado ativo e absorvente. De forma mais específica, esta modificação consiste em se reativar um sítio (apenas um) do sistema sempre que o parâmetro de ordem se anula. Como reativamos apenas um sítio, o sistema não muda o seu comportamento crítico. O que ocorre é o aparecimento de uma cauda amortecida na curva do parâmetro de ordem próximo do ponto crítico, de forma que ela não vai a zero¹. Esta modificação na curva do parâmetro de ordem mostrado no diagrama de fases é de grande utilidade para podermos calcular as propriedades críticas utilizando os métodos conhecidos. Desta forma podemos, por exemplo, aplicar a técnica de análise de escala de tamanho finito para estimar o ponto crítico e os expoentes críticos do modelo que se deseja estudar .

Neste trabalho pretendemos formalizar esta técnica, que chamamos Método de Monte Carlo com ressuscitamento (MCR), como mais uma maneira de se estudar propriedades críticas de modelos de não equilíbrio, em particular os

¹O ressuscitamento produz no gráfico do parâmetro de ordem dos modelos de processos de contato fenômeno semelhante ao efeito de tamanho finito que se observa em sistemas magnéticos

diversos modelos de processos de contato. Para testar a eficiência do MCR o utilizamos na investigação do modelo processo de contato por par (PCP) (descrito em detalhes no capítulo 4).

Capítulo 3

Transições de fase, relações de escala e classes de universalidade

3.1 Introdução

A Mecânica Estatística procura explicar as propriedades macroscópicas dos sistemas físicos partindo da idéia que eles são constituídos por um número muito grande de sistemas menores (átomos, moléculas, etc). De acordo com esta teoria tais propriedades são devidas a efeitos cooperativos destes diversos subsistemas que interagem continuamente. Um exemplo típico destes efeitos cooperativos é a magnetização espontânea que alguns materiais apresentam a baixas temperaturas, como o ferro e o níquel, por exemplo. Ela é resultante da ordenação dos momentos de dipolos magnéticos de diversos átomos. Outro exemplo é a pressão que um gás exerce sobre as paredes de um recinto fechado que o contenha. A pressão é resultante da aplicação da força que diversas moléculas exercem nestas paredes.

Entre as primeiras teorias bem sucedidas que buscam explicar as transições de fase, temos a introduzida por van der Waals, antes do surgimento da Mecânica Estatística, para a transição líquido-vapor; a teoria de Weiss para o ferromagnetismo e a teoria de Bragg-Williams para a transição ordem-desordem em ligas metálicas. Essas teorias são ditas de campo médio ou clássicas e foram unificadas na teoria de Landau [66, 67].

A teoria de van der Waals introduziu a idéia inédita de que um único tipo de interação entre moléculas poderia descrever distintas fases termodinâmicas

[68]. Com a comprovação experimental da característica discreta da matéria e com o surgimento da Mecânica Estatística essa idéia de van de Walls tornou-se o ponto de partida na compreensão das transições de fase e fenômenos críticos.

Estas teorias tiveram sucesso inicial, contudo, com o tempo desvios dos resultados clássicos foram observados experimentalmente e obtidos teoricamente através da técnica de expansão em série introduzida por Domb e outros [69, 70, 71, 72, 73]. Em particular os expoentes críticos determinados por essa técnica e pelas soluções exatas começaram a diferir dos resultados clássicos. Criou-se o clima de que essas teorias estavam erradas, entretanto, as teorias clássicas possuem uma consistência própria e a conciliação entre elas e os novos resultados foi alcançada por Wilson com o método de grupo de renormalização baseado na idéia de invariância de escala, introduzida por Widom e Kadanoff, e no princípio de universalidade [74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82].

Universalidade é um conceito observado primeiramente na ME de equilíbrio. Próximo ao ponto crítico de uma transição de fase contínua em um sistema de equilíbrio, as quantidades mensuráveis do sistema seguem leis de potência, governadas por expoentes críticos. Acontece que sistemas completamente diferentes podem ter um conjunto de expoentes críticos que é idêntico. Esse conceito é o que chamamos de universalidade, e é explicado pela teoria de grupo de renormalização. Os expoentes críticos dependem apenas de algumas propriedades muito fundamentais das transições de fase: dimensionalidade, leis de conservação e simetrias. Como um resultado disso, mesmo transições de fase de processos que na natureza aparentemente pouco ou nada têm a ver um com o outro, como o magnetismo e a transição de fase líquido-gás, podem compartilhar os mesmos expoentes. Isso nos permite classificar transições de fase contínuas em sistemas de equilíbrio em um número limitado de classes de universalidade, cada uma com seu próprio conjunto de expoentes críticos, provendo um valioso insight nesse tipo de transições de fase [83].

Atualmente o estudo de transição de fase é feito principalmente através de simulação numérica, onde se destaca o método MC, e através de técnicas estocásticas baseadas na equação de Langevin [61].

A partir de agora vamos falar um pouco sobre transição de fase de um modo geral introduzindo alguns conceitos básicos, em seguida falaremos sobre transições de fase em modelos de não equilíbrio definidos em redes

geométricas e sobre algumas classes de universalidade.

3.2 Transições de fase

Uma transição de fase caracteriza-se basicamente por uma mudança global entre os estados físicos de equilíbrio do sistema a medida que variamos seus parâmetros externos, como por exemplo, temperatura, pressão, campo magnético, etc. Exemplos clássicos de transições de fase são a transição liquido-vapor, a transição ferromagnética-paramagnética e transição ordem-desordem em ligas metálicas. Ela é caracterizada por uma não analiticidade dos potenciais termodinâmicos, refletida em divergências de suas derivadas que, como se sabe estão diretamente relacionadas às respostas termodinâmicas (calor específico, suscetibilidade magnética, etc.) [75, 76, 77, 78, 79, 80].

Para esclarecer este conceito e outras idéias considere o modelo de Ising [60, 61] (descrito no capítulo 2) que é um exemplo clássico no estudo das transições de fase. Todas as propriedades macroscópicas do modelo de Ising podem ser obtidas a partir do conhecimento da energia livre, que é proporcional ao logaritmo da função de partição canônica $F(T, H) = -k \ln Z(T, H)$, onde T é a temperatura e H é o campo magnético. Elas são obtidas como segue:

a) **energia interna**

$$U = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln F}{\partial \beta}$$

b) **entropia**

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_H$$

c) **magnetização**

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T$$

d) **calor específico**

$$C_H = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H = T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)$$

e) **suscetibilidade**

$$X_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}\right)_T$$

Sistemas que apresentam descontinuidade da primeira derivada da energia livre exibem transições de fase de primeira ordem, caracterizadas pela presença de calor latente. No entanto, se as primeiras derivadas forem contínuas, mas as derivadas de segunda ordem (ou maiores) apresentarem singularidade, então dizemos que o sistema sofre uma transição de fase contínua ou de segunda ordem.

O ponto crítico representa o término de uma linha de coexistência de fases ou linha de transição de primeira ordem. Como exemplo, temos a curva de coexistência líquido-gás que acaba em um determinado ponto do diagrama $P - T$ (figura 3.1) e também a linha $H = 0$ do diagrama $H - T$ (figura 3.2) de um ferromagneto. Neste ponto as duas fases tornam-se idênticas e a transição é de segunda ordem.

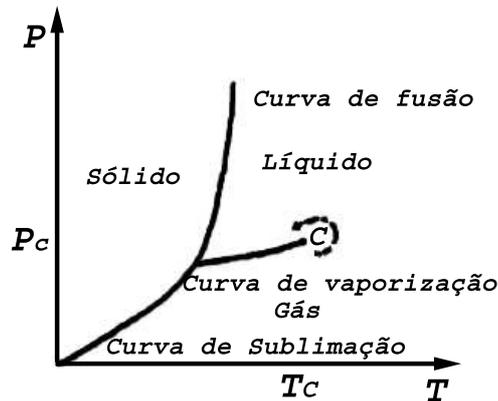


Figura 3.1: Diagrama de fase típico de um fluido, mostrando as fases líquida, gasosa e sólida [63]. Todas as transições de fase são de primeira ordem, exceto no ponto **C**. Além do ponto **C** ($T > T_c$), pode-se passar continuamente de líquido para gás.

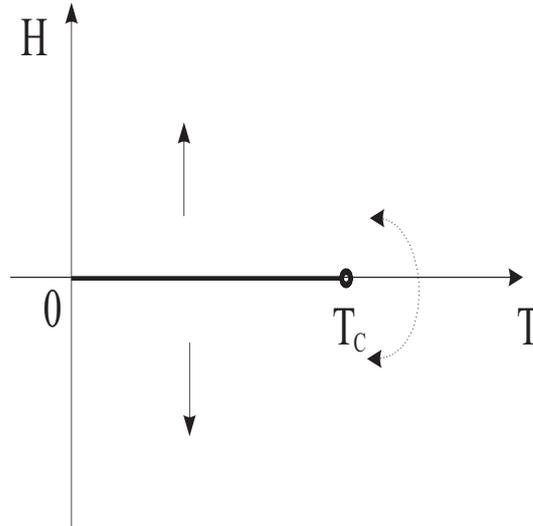


Figura 3.2: Diagrama de fase de um ferromagneto simples [63]. A linha de primeira ordem a campo zero termina no ponto crítico à temperatura $T = T_c$.

3.2.1 Parâmetro de ordem

No estudo das transições de fase a grandeza que caracteriza as diferentes fases de um sistema é chamada parâmetro de ordem. Uma de suas características principais é ser não nulo para temperaturas abaixo de T_c e nulo para temperaturas acima deste valor. Na transição líquido-gás ele é a diferença entre as densidades do líquido e do gás $\rho_l - \rho_g$, na transição ferromagnética-paramagnética é a magnetização espontânea M e na transição ordem-desordem em ligas binárias a diferença da densidade dos dois tipos de átomos dos elementos químicos que as constituem.

A maneira mais comum de se identificar ou classificar uma transição de fase é através da observação do comportamento do parâmetro de ordem enquanto ela ocorre. Nas transições de primeira ordem ele varia descontinuamente, enquanto nas transições de segunda ordem ele varia suavemente.

3.2.2 Relações de escala e expoentes críticos

O estudo das singularidades termodinâmicas que ocorrem próximas ao ponto crítico mostram que um conjunto de expoentes críticos caracteriza

as funções termodinâmicas na região crítica. Os diversos expoentes críticos associados a estas quantidades são definidos como segue:

1. Expoente α , associado ao calor específico

$$c \sim |\varepsilon|^{-\alpha} \quad (3.1)$$

onde $\varepsilon = T - T_c$

2. Expoente β , associado ao parâmetro de ordem

$$m \sim |\varepsilon|^\beta \quad (3.2)$$

válido para temperaturas abaixo da crítica ($T < T_c$)

3. Expoente γ , relativo à suscetibilidade

$$X \sim |\varepsilon|^{-\gamma} \quad (3.3)$$

4. Expoente δ associado a relação entre a magnetização e o campo magnético calculado ao longo da isoterma crítica

$$m \sim |\varepsilon|^{1/\delta} \quad (3.4)$$

5. Expoente ν , relacionado ao comprimento de correlação

$$\xi \sim |\varepsilon|^{-\nu} \quad (3.5)$$

6. Expoente η associado a função de correlação de pares, calculada no ponto crítico

$$\rho(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (3.6)$$

7. Expoente z , que mostra a relação entre o tempo de relaxação e o comprimento de correlação

$$\tau \sim \xi^z \quad (3.7)$$

8. Expoente ζ , relativo ao decaimento temporal da magnetização no ponto crítico

$$m \sim t^\zeta \quad (3.8)$$

Os expoentes críticos definidos acima não são todos independentes existindo certas desigualdades entres eles. Citamos as seguintes:

$$\alpha + 2\beta \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke, 1963}),$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (\text{Griffiths, 1965a; 1965b}),$$

$$d \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \geq (2 - \eta) \quad (\text{Buckingham - Gunton, 1969}),$$

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma \quad (\text{Fisher, 1969}),$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \quad (\text{Josephson, 1967a; 1967b})$$

Segundo a hipótese de escala introduzida por Windom [84, 85, 86] pode-se mostrar que estas desigualdades tornam-se igualdades. Duas delas são

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

e

$$2\beta + \gamma = d\nu$$

onde esta última é válida para dimensões d abaixo de uma dimensão crítica d_c . Para valores d maiores ou igual a d_c ela se torna $2\beta + \gamma = d_c\nu$.

Como os expoentes críticos não são independentes basta se conhecer o valor de dois deles para se determinar os demais.

Algo que é importante no estudo dos expoentes críticos é o seu caráter universal, ou seja, seus valores são bastante próximos para sistemas bastante diferentes, como por exemplo, um ferromagneto anisotrópico e um fluido. Este fato indica uma manifestação do *princípio de universalidade do comportamento crítico* [68]. De acordo com este princípio, o comportamento crítico depende apenas de um número pequeno de propriedades como: a) dimensionalidade espacial do sistema, b) dimensionalidade do parâmetro de ordem e c) simetria [64, 75, 76, 77, 87, 88, 89].

Estas observações sobre a semelhança entre os expoentes críticos de diversos sistemas motivou os pesquisadores a agrupá-los em classes de universalidades. Isto significa que sistemas com expoentes críticos semelhantes

podem ser agrupados em uma mesma classe de universalidade. Para sistemas de equilíbrio temos, por exemplo, a classe de universalidade de Ising [90], de Potts [91, 92] e do modelo XY [93]. Para sistemas de não equilíbrio as classes de universalidade mais conhecidas são percolação direcionada [94, 95, 96, 97, 98] e conservação da paridade conhecida também como Ising dirigido [99, 100, 101].

3.3 Expoentes críticos de modelos de não-equilíbrio

O estudo de sistemas de muitas partículas fora do equilíbrio tem se tornado um campo de intensa pesquisa dentro da Física, da Biologia, da Química, da Sociologia, entre outras. Para estudar esses sistemas vários modelos foram propostos como: processos epidêmicos [102], catalise cinética [103, 104], avalanches [105], crescimento em superfícies [101], criticalidade auto organizada [106], entre outros [107, 108, 109, 110, 111].

Entre estes modelos os mais conhecidos são os pertencentes a classe de universalidade percolação direcionada [94, 95, 96, 97]. Estes modelos descrevem fenômenos de espalhamento resultante da competição entre dois processos: criação (contaminação) e aniquilação (cura) de partículas (ser). Eles são úteis para representar algumas situações que ocorrem na natureza como proliferação de epidemias, fogos em florestas, fluxo de um fluido em um meio poroso, etc.

Dependendo do parâmetro de controle a competição entre os processos mencionados acima podem levar o sistema a sofrer uma transição de fase de um estado ativo (densidade não nula de sítios ocupados do sistema) para um ou mais estados absorventes (todos os sítios do sistema vazios). De modo mais claro, o estado absorvente corresponde a uma configuração atingida por um sistema a partir da qual ele não mais pode evoluir. Este estado é por definição irreversível, isto significa que a transição a partir dele para demais estados jamais ocorre, embora a transição de outros estados para ele possa ocorrer. Para exemplificar melhor o significado físico de estado absorvente consideremos o modelo processo de contato [102]

Esse modelo foi introduzido por Harris para representar um processo

epidêmico sem imunização. Ele é definido em uma rede geométrica onde em cada sítio reside um indivíduo que pode estar sadio ou infectado. Os indivíduos sadios podem tornar-se infectados se seus vizinhos mais próximos estiverem infectados, caso contrário ele se mantém sadio. Os indivíduos infectados podem se curar tornando-se sadios com uma probabilidade p , contudo a cura não lhes tornam imunes a novas infecções. Desse modo temos um processo dinâmico onde indivíduos são infectados e se curam continuamente. Na sua evolução temporal, o sistema exibe uma transição de fase de um estado ativo, com a presença de indivíduos sadios e infectados interagindo, para um estado absorvente, onde todos os indivíduos infectados tornaram-se sadios. Neste estado o sistema não mais pode evoluir, porque estando todos os indivíduos sadios a epidemia não tem mais como se espalhar.

Nos modelos de processo de espalhamento a transição entre estado ativo e absorvente, assim como em modelos de equilíbrio, geralmente, é contínua e caracteriza um comportamento universal [112]. No estudo das transições de fase, para a maioria dos modelos de processos de espalhamento, o parâmetro de ordem mais adequado é a densidade de sítios ativos definida como

$$\rho(t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum s_i(t) \right\rangle, \quad (3.9)$$

onde $s_i(t) = 1$ sítio ativo ou $s_i(t) = 0$ sítio inativo e $\langle \dots \rangle$ denota uma média termodinâmica. Consideremos primeiro o caso de um sistema infinito. Na fase ativa $\rho(t)$ decai e eventualmente satura em algum valor estacionário ρ^{stat} . Próximo a transição de segunda ordem o parâmetro de ordem varia de acordo com

$$\rho^{stat} \sim (p - p_c)^\beta \quad (3.10)$$

onde β é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem e $(p - p_c)$ a distância do ponto crítico. O valor deste expoente depende da dimensão do sistema, em $1 + 1$ dimensão seu valor é $\beta \simeq 0.277$ e em $2 + 1$ dimensões é $\beta \simeq 0.58$. Escrevemos $d + 1$ porque, diferentemente de modelos de equilíbrio, em modelos de não equilíbrio o tempo também é considerado como uma dimensão.

Os processos de espalhamentos também são caracterizados por certos comprimentos de correlação. Como comprimentos de correlação de escala espacial ξ_\perp e temporal ξ_\parallel . Perto do ponto crítico essas quantidades divergem

da seguinte forma

$$\xi_{\perp} \sim |p - p_c|^{-\nu_{\perp}} \quad (3.11)$$

$$\xi_{\parallel} \sim |p - p_c|^{-\nu_{\parallel}} \quad (3.12)$$

onde ν_{\perp} , também conhecido apenas como ν é o expoente crítico associado a correlação espacial e ν_{\parallel} o expoente crítico associado a correlação temporal. No regime de escala os dois comprimentos de correlação estão relacionados por $\xi_{\perp} \sim \xi_{\parallel}^z$, onde $z = \nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$. z é o chamado expoente dinâmico porque está relacionado a evolução espacial e temporal do sistema na vizinhança de p_c .

Em muitos modelos os três expoentes (β, ν, z) formam o conjunto dos expoentes fundamentais que indica a classe de universalidade. Os demais expoentes críticos estão relacionados com estes três e podem ser obtidos através de relações de escalas [112, 113].

Vimos que a densidade estacionária na fase ativa escala com $\rho^{stat} \sim \Delta^{\beta}$, onde $\Delta = p - p_c$ é a distância para o ponto crítico. Uma quantidade similar é a probabilidade de máxima sobrevivência P_{∞} , que mede a probabilidade da escolha aleatória de um sítio pertencer a um cluster infinito. Na fase ativa esta probabilidade é finita e escala com algum expoente crítico β'

$$P_{\infty} \sim \Delta^{\beta'} \quad (3.13)$$

Este expoente, no caso da percolação direcionada, coincide com β , embora eles sejam diferentes em um contexto mais geral, como por exemplo em modelos que exibem múltiplos estados absorventes. Por esta razão, transições de fase em modelos com estados absorventes são geralmente caracterizadas pelos quatro expoentes críticos $\beta, \beta', \nu_{\perp}$ e ν_{\parallel} [112].

O comportamento crítico de ρ e P_{∞} para tempos longos é descrito por

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

que comparada com as Eqs. 3.10 e 3.13 produz

$$\alpha = \beta/\nu_{\parallel}, \quad \delta = \beta'/\nu_{\parallel}$$

Outro expoente crítico para modelos definidos em redes geométricas representativos de processos de espalhamento, é o expoente θ associado ao crescimento médio do número de sítios ativos em função do tempo

$$N(t) \propto t^{\theta} \quad (3.15)$$

Estes expoentes críticos, assim como em modelos de equilíbrio, não são todos independentes, mas existem certas relações de igualdade entre eles, algumas delas são:

$$\nu_{\parallel}(1 + \theta) = \nu_{\parallel} + d\nu_{\perp} - \beta - \beta', \quad (3.16)$$

$$\nu_{\parallel}(1 - \delta) = \nu_{\parallel} - \beta', \quad (3.17)$$

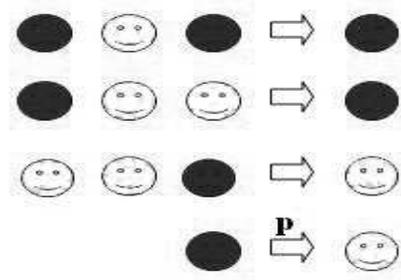
$$\nu_{\parallel}(d/z - \delta) = d\nu_{\perp} - \beta', \quad (3.18)$$

$$\nu_{\parallel}(d/z + 1 - \delta) = \nu_{\parallel} + d\nu_{\perp} - \beta' \quad (3.19)$$

Estas relações são obtidas através da derivação de propriedades de escalas cuja demonstração foge de nossos objetivos e as apresentamos aqui apenas para fundamentar este trabalho. (O leitor interessado em um texto mais completo e didático sobre relações de escala de modelos de não equilíbrio definidos em redes geométricas deve buscar a referência [112])

3.3.1 Percolação dirigida e sua classe de universalidade

A percolação direcionada imita a passagem de um líquido em um material poroso em d dimensões, onde o líquido está limitado a fluir em apenas uma direção devido a, por exemplo, gravidade. Definindo as trajetórias possíveis do líquido fluir com reações entre as partículas (sítios molhados), podemos descrever esse modelo nessa classe de universalidade com um sistema reação-difusão. Um dos modelos mais simples de reação-difusão pertencente à classe de universalidade da DP é o processo de contato (CP). Suas reações em 1+1 dimensões são as seguintes [83]:



onde os sítios em claro representam indivíduos sadios e os escuros representam os doentes.

A taxa p é a probabilidade de se criar um novo sítio ativo por unidade de tempo e, variando-se esse parâmetro, revela-se uma transição de fase no sistema. Para valores pequenos de p , a reação de aniquilação dominará, e o número de partículas irá diminuir. Eventualmente, não restarão mais partículas, deixando o sistema em um estado absorvente (um estado do qual o sistema não pode escapar). Contudo, se p for maior que seu valor crítico p_c , a criação de novas partículas vai manter o sistema longe do estado absorvente. Nessa fase ativa, o sistema irá, eventualmente, atingir uma densidade de equilíbrio baseada na distância até o ponto crítico $p - p_c$. O comportamento numérico da densidade ρ e do comprimento de correlação ξ do modelo é regido por leis de potência. A partir da configuração inicial no ponto crítico, a densidade dependente do tempo do sistema será dada por:

$$\rho_{p=p_c} \sim t^{-\delta} \quad (3.20)$$

Na fase ativa, onde $p < p_c$, a densidade de equilíbrio que o sistema alcançará também segue uma lei de potência, dada por:

$$\rho_{t \rightarrow \infty} \sim \varepsilon^\beta \quad (3.21)$$

onde $\varepsilon = |p - p_c|$ é a distância até o ponto crítico. O comprimento de correlação, definido como a distância máxima entre dois sítios que ainda podem se influenciar, cresce com o tempo no ponto crítico, obedecendo à seguinte lei de potência:

$$\xi_{p=p_c} \sim t^{1/z} \quad (3.22)$$

Existem mais dessas leis de potência, com outros expoentes críticos, mas para sistemas desse tipo, apenas três dos expoentes críticos são independentes. Os outros podem ser encontrados através de relações de escala. Por exemplo:

$$\delta = \beta/\nu_{\parallel} \quad (3.23)$$

$$z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp} \quad (3.24)$$

Portanto, apenas três expoentes, por exemplo, δ , β e z são necessários para determinar a classe de universalidade de um sistema. No geral, o sistema obedecerá a essas leis de potência apenas no limite termodinâmico, onde o tamanho do sistema $L \rightarrow \infty$, $\rho \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$. Em qualquer medição real ou simulação, efeitos de tempo e tamanho finitos farão com que os dados desviem-se um pouco dessas relações.

De acordo com a conjectura de Janssen e Grassberger [112] todos os sistemas exibindo uma transição de fase contínua para um único estado absorvente, sem alguma outra simetria ou lei de conservação, pertence a classe de universalidade DP. Segundo estes pesquisadores os modelos que pertencem a classe de universalidade DP devem atender as seguintes condições:

1. O modelo exibe uma transição de fase de um estado ativo para um único estado absorvente;
2. A transição é caracterizada por um parâmetro de ordem positivo de um único componente;
3. As regras da dinâmica envolve apenas processos de curto alcance;
4. O sistema não tem atributo especial semelhante a simetrias adicionais ou congelamento aleatório.

É preciso lembrar que estas condições não são bem rigorosas, no sentido em que não são derivadas de relações analíticas, mas, elas são baseadas principalmente em evidências numéricas. Especialmente a quarta condição, pois estudos revelam que ela é violada para alguns modelos, por exemplo em certos modelos com mais de um estado absorvente.

Alguns trabalhos tem mostrado que a abrangência da classe de universalidade de DP pode ser estendida para sistemas com mais de um estado absorvente. Um exemplo típico é o modelo Processo de Contato por Par (PCP). O PCP é considerado o protótipo de modelos que exibem múltiplos estados absorventes, ou seja, o número desses estados cresce com o tamanho do sistema indo ao infinito no limite termodinâmico.

Vários outros modelos com múltiplos estados absorventes têm sido introduzidos recentemente [114]. A dinâmica desses modelos é bastante complexa

se comparada com a de modelos com um único estado absorvente. Eles apresentam comportamento crítico novo com os expoentes críticos que governam sua dinâmica descrevendo dependência temporal dependendo da configuração inicial do sistema.

3.3.2 Classe de universalidade da conservação da paridade

A classe de universalidade Conservação da Paridade (PC)¹ ou Ising Dirigido engloba os modelos que conservam a paridade do número de partículas [98, 99, 110, 115]. Entre estes modelos temos os que são governados por processos de reação-difusão com dinâmicas semelhante a:

1. criação de duas partículas



2. difusão de uma partícula



ou



3. aniquilação de duas partículas



4. criação de uma partícula



ou



Neste tipo de processo partículas podem ser aniquiladas aos pares e a transição para o estado absorvente é caracterizada por um decaimento algébrico do parâmetro de ordem (concentração de pares) com o tempo. Os

¹Sigla derivada inglês Parity-conserving

modelos pertencentes a esta classe de universalidade conservam a paridade do número de partículas, isto significa dizer que em cada instante o número de partículas é sempre par ou é sempre ímpar. Se uma dada configuração inicial tiver um número par (ímpar) de partículas, em qualquer instante posterior o número será par (ímpar). Alguns exemplos de modelos que pertencem a esta classe de universalidade são modelo Ising cinético [116], versões generalizadas do modelo Domany-kinzel e modelos de processos de contato que apresentam dois estados absorventes simétricos - estado com a rede vazia e o estado com uma única partícula difundindo-se por ela [117, 118].

Fora estas duas classes de universalidade existem outras já estabelecidas, mas, menos conhecidas, e existem candidatas a novas classes de universalidade como é o caso do processo de contato por par com difusão (PCPD) [119], mas acredita-se que o número dessas possíveis classes de universalidade, especialmente em $1 + 1$ dimensão, pode ser finita [120, 113]. (Para uma leitura mais completa sobre as diversas classes de universalidade atualmente bem estabelecidas ver referência [113]).

Capítulo 4

Comportamento Crítico do Processo de Contato por Par

4.1 Introdução

O modelo original do processo de contato por par (PCP) foi introduzido por Janssen em 1993 [28]. Ele demonstrou que o modelo PCP sem difusão ou acréscimo de partículas de alguma fonte externa pertence a classe de universalidade DP. Desde então várias modificações vêm sendo feitas a esse modelo. Dickman, Rabêlo e Ódor [117] estudaram o PCP com uma fonte de partículas e demonstraram que a fonte altera o ponto crítico, mas os valores dos expoentes críticos, com exceção de β que aparece com um desvio de 4% do valor de DP, são consistentes com os valores de DP. Trabalhos recentes acrescentaram difusão ao modelo e alguns sugerem o processo de contato por par com difusão (PCPD) na classe de universalidade de PC [121] outros dizem que não, e que talvez ele pertença a uma nova classe de universalidade [120, 122, 123, 124]. Trabalhos recentes mostram que de fato o PCPD forma uma distinta classe de universalidade, pois os expoentes críticos β , η e z dependem da taxa de difusão, com exceção de ν , que parece independender deste parâmetro [124].

Neste trabalho estudamos o modelo PCP via simulação computacional com o método Monte Carlo. Acrescentando uma pequena modificação na dinâmica original do modelo, que consiste em ressuscitarmos uma partícula do sistema quando a concentração de pares vai a zero. Aplicamos esta modificação para obtermos uma estimativa precisa do ponto crítico do modelo.

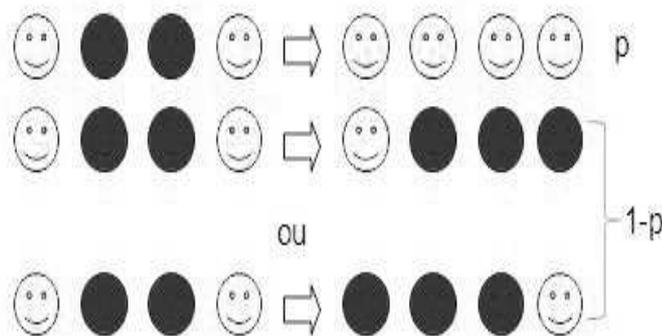
Nosso objetivo neste trabalho é estudar o comportamento crítico e o diagrama de fase do modelo e comparar nossos resultados com os já estabelecidos na literatura para mostrar que o fato de ressuscitarmos uma partícula do sistema não altera de maneira significativa o seu comportamento crítico, mas facilita a determinação do ponto e conseqüentemente o cálculo dos expoentes críticos. Na análise de nossos dados aplicaremos a técnica de análise de escala tamanho finito [55, 56, 57, 58] para estimar os valores dos expoentes críticos β , ν e z

Descreveremos a partir de agora o modelo em detalhes, em seguida apresentaremos nossos resultados e discussão.

4.1.1 O Modelo

O modelo PCP [28] é um dos modelos mais simples com múltiplos estados absorventes que exhibe uma transição de fase contínua. Ele envolve a aniquilação de pares de partículas e a criação de partículas individuais a partir dos pares aleatoriamente [28, 29].

No modelo PCP estabelecido na literatura cada sítio i da rede L^d está vazio ou ocupado por uma partícula. Cada duas partículas vizinhas mais próximas formam um par tendo uma probabilidade p de se aniquilarem mutuamente e uma probabilidade $1 - p$ de gerar uma nova partícula no sítio vizinho mais próximo, da direita ou da esquerda, que estiver vazio. Esquematicamente, para o caso unidimensional, temos:



No processo de aniquilação um par é removido dos sítios i e $i + 1$. O processo de criação envolve os sítios $i - 1$ e $i + 2$, com a partícula gerada, po-

dendo ser colocada (com igual chance) no sítio $i - 1$ ou $i + 2$ desde que ambos estejam vazios, caso contrário ela automaticamente ocupa o sítio que estiver vazio. Como resultado desta competição o modelo exibe uma transição de fase contínua em uma probabilidade crítica p_c de um estado ativo (caracterizado pela presença de pares de partículas no sistema) para um estado absorvente (caracterizado pela presença de apenas partículas isoladas no sistema). Na literatura, as estimativas para a probabilidade crítica confirmam que $p_c = 0.07709(1)$, para o caso aleatório [28, 29, 30], o número em parêntese indica a incerteza na estimativa.

A concentração de pares ρ é o parâmetro de ordem adequado para o modelo. Durante a evolução do sistema ele decai assintoticamente de acordo com a relação

$$\rho \propto (p_c - p)^\beta \quad (4.1)$$

quando $p \rightarrow p_c$, onde β é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem e p_c a probabilidade crítica.

Como em transições de fase de segunda ordem de modelos de equilíbrio, na vizinhança do ponto crítico onde a correlação é forte o sistema fora do equilíbrio, também caracteriza um comprimento de escala, o qual diverge na criticalidade conforme a relação:

$$\xi \propto (p_c - p)^{-\nu} \quad (4.2)$$

onde ν é o expoente associado ao comprimento de correlação espacial. Algumas quantidades mensuráveis depende fortemente do tamanho do sistema assim que o comprimento de correlação ξ torna-se comparável com o tamanho L do sistema.

Atingido o estado absorvente não temos mais pares, mas temos uma densidade ϕ de partículas isoladas em alguns sítios espalhadas no sistema. No modelo PCP puro (sem difusão ou acréscimo de partículas de uma fonte externa) $\phi \cong 0.25$. Esta densidade não nula de partículas isoladas é que faz com que o modelo PCP exiba múltiplos estados absorventes, pois qualquer estado sem pares é absorvente. O número de tais estados é $> 2^N$ em uma dimensão, onde N é quantidade de sítios da rede. Sistemas finitos eventualmente caem em algum desses estados. Em adição a estes estados o sistema (no limite de tamanho infinito) apresenta um estado “ativo” não trivial com uma con-

centração ρ não nula de pares quando a probabilidade p é suficientemente pequena.

4.1.2 Simulações

Estudamos o modelo PCP simulando a sua evolução dinâmica com o método Monte Carlo. Para isto inicialmente criamos uma rede L com N sítios em uma dimensão com condição de contorno periódica (fazendo da rede um toroide). Em seguida preenchemo-na completamente colocando uma partícula em cada sítio ($\rho = 1.0$). Feito isto damos as regras dinâmicas do modelo e construímos nosso algoritmo como segue: (1) escolhemos o processo (aniquilação com probabilidade p , criação com probabilidade $1 - p$); (2) escolhemos aleatoriamente um par de partículas da rede; (3) deletamos este par, no caso da aniquilação, ou, adicionamos uma partícula no sítio adjacente ao par, no caso de criação, se possível. De forma mais específica, no caso de criação, passo (3), a nova partícula pode ser colocada (com uma mesma chance) no sítio da direita ou da esquerda; (4) observamos a evolução do parâmetro de ordem ρ em função da probabilidade p ; (5) quando ρ atingir o valor zero ressuscitamos uma partícula em um dos sítios que estiver vazio e monitoramos novamente a sua evolução tanto temporal como em função da probabilidade p .

Simulamos este processo para vários tamanhos de redes. Usamos três tipos de atualizações: **aleatória** – que como o próprio nome sugere consiste em modificarmos os estados dos sítios aleatoriamente, **sequencial** – onde os estados dos sítios são alterados seguindo uma sequência previamente determinada, e **paralela** – neste tipo de atualização geramos inicialmente duas matrizes para representar o sistema em um dado momento, aplicamos as regras do modelo em uma delas e atualizamos os estados dos sítios na outra (nova). O número de passos de Monte Carlo t e o número de diferentes amostras independentes S variaram de $t = 1000$, $S = 20000$, para $L = 50$ a $t = 10000$, $S = 1000$, para $L = 800$. Armazenamos todas as observações de nossas simulações para posterior análise dos dados coletados.

4.2 Resultados e Discussão

Usamos o algoritmo descrito acima para produzir o gráfico do parâmetro de ordem. Em todas as nossas simulações iniciamos a dinâmica do modelo com todas as redes completamente cheias. Monitoramos continuamente o parâmetro de ordem $\rho(p)$, a probabilidade $p(t)$, e a densidade isolada de partículas ϕ , em particular no estado absorvente.

Para estimarmos a probabilidade crítica p_c consideramos que o parâmetro de ordem ρ satisfaz a relação de escala:

$$\rho(p, L) = L^{-\beta/\nu} f[L^{-1/\nu}(p - p_c)] \quad (4.3)$$

A equação precedente implica em termos a função auxiliar

$$g(L, L', p) = \frac{\ln[(\rho/\rho')]}{\ln(L/L')} \quad (4.4)$$

que aplicada ao gráfico do parâmetro de ordem de alguns tamanhos de rede produz a intersecção das curvas cujo ponto comum é $(p_c, \beta/\nu)$ [26, 27].

Na figura 4.1 mostramos a concetração ρ de pares como uma função de p para vários tamanhos de rede. Na figura 4.2, mostramos $g(L, L', \rho)$ em função de p para vários tamanhos de redes e diferentes passos de tempo para a simulação com atualização aleatória. Da intersecção das diversas curvas estimamos a probabilidade crítica $p_c = 0.0771(2)$ e o expoente relacionado a correlação espacial $\beta/\nu = 0.25(1)$ (Figura 4.3), onde o número entre parênteses representa a incerteza na estimativa. Esses valores estão de acordo com os obtidos para o modelo PCP ($p_c = 0.0771(2)$ e $\beta/\nu = 0.255(5)$).

Nas figuras 4.4 e 4.5 mostramos o mesmo gráfico da função $g(L, L', \rho)$ em função de p para diversos tamanhos de redes só que agora usando atualizações sequencial e paralela, respectivamente. Do ponto comum às diversas curvas obtemos $p_c = 0.0938(2)$ (Figura 4.3), $\beta/\nu = 0.24(1)$ (Figura 4.4) para a atualização sequencial e $p_c = 0.1165(3)$ (Figura 4.3), $\beta/\nu = 0.26(1)$ (Figura 4.5) para a atualização paralela. Observamos que o ponto crítico muda conforme o tipo de atualização aplicado na simulação. Este resultado mostra que a atualização aleatória leva o sistema mais rapidamente ao estado absorvente relativamente ao parâmetro de controle, que no nosso caso é a probabilidade de criação-aniquiação.

Podemos determinar β através da relação β/ν , conhecendo o expoente ν que pode, por sua vez, ser estimado por $(1/\rho_c)d\rho_c/dp|_{p_c} \propto L^{1/\nu}$. Dos resultados descritos na figura 4.3, podemos estimar, para o caso aleatório, $1/\nu = 0.89(2)$ que produz $\beta = 0.28$ (Fig.4.6), em concordância com $\beta = 0.28(1)$. Para o caso sequencial temos $1/\nu = 0.89(2)$ (Fig. 4.6) que nos dá $\beta = 0.27$ e no caso da atualização paralela temos $1/\nu = 0.89(2)$ (Fig.4.6) e $\beta = 0.28$.

As figuras 4.7, 4.8 e 4.9 mostram a média sobre o número das amostras sobreviventes da densidade de pares como função do tempo no ponto crítico para os três tipos de atualizações. Dado um estado inicial em que todos os indivíduos estão no estado ativo, esperamos observar $\rho(p_C, t) \propto t^{-\beta/z\nu}$, onde z é o expoente dinâmico crítico que governa a evolução temporal do comprimento de correlação típico no ponto crítico $\xi \propto t^{1/z}$. Como resultado, obtivemos $\beta/z\nu = 0.181(1)$ (atualização aleatória Fig. 4.7), $\beta/z\nu = 0.160(1)$ (atualização sequencial Fig. 4.8) and $\beta/z\nu = 0.181(1)$ (atualização paralela Fig. 4.9). Estimamos também o expoente z , acompanhando a evolução temporal da flutuação relativa do parâmetro de ordem, usando a relação $U(p_c, t) \propto t^{1/z}$, obtendo $1/z = 0.61(1)$ (atualização aleatória Fig. 4.10), $1/z = 0.61(1)$ (atualização sequencial Fig. 4.11) e $1/z = 0.66(1)$ (atualização paralela Fig. 4.12).

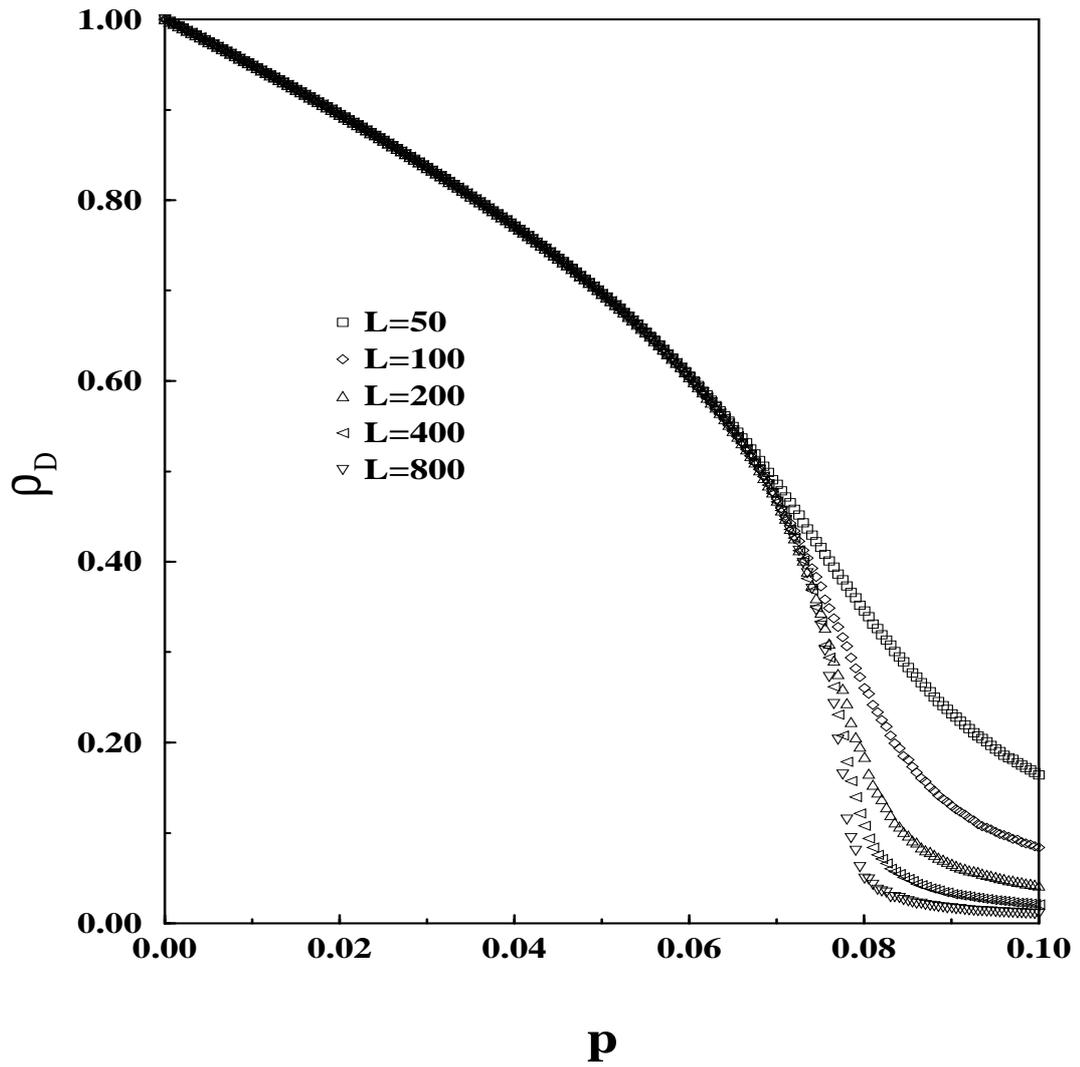


Figura 4.1: Concentração ρ de pares do modelo PCP como função da probabilidade p de aniquilação para vários tamanhos de redes L (atualização aleatória). A região do gráfico para $p < p_c$ é chamada supercrítica correspondente ao estado ativo e a região para $p > p_c$ é chamada subcrítica correspondente ao estado absorvente.

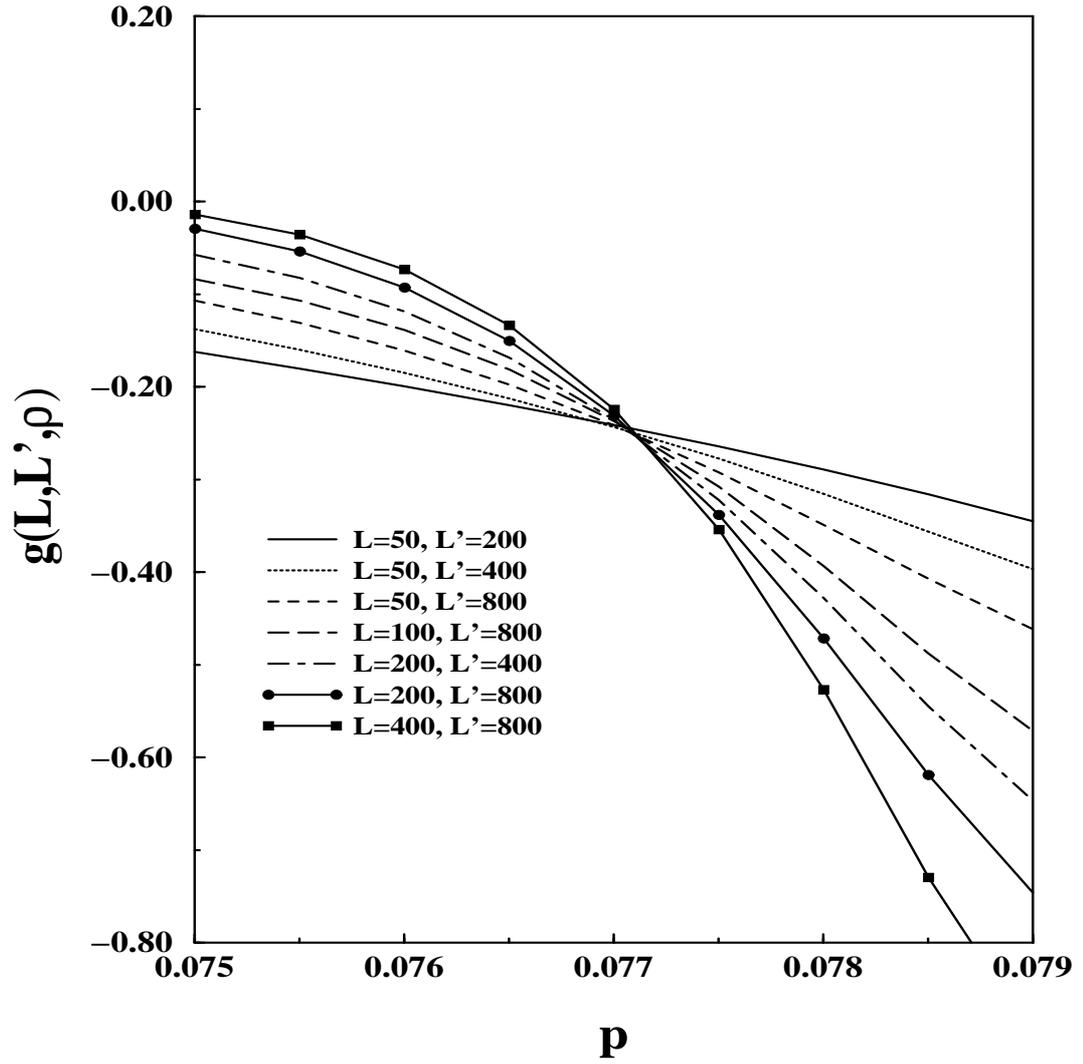


Figura 4.2: Função $g(L, L', \rho)$ versus p para vários pares de (L, L') . A intersecção das diversas curvas corresponde ao ponto $(p_c, \beta/\nu) = (0.0771(2), 0.25(1))$. Para este caso utilizamos atualização aleatória.

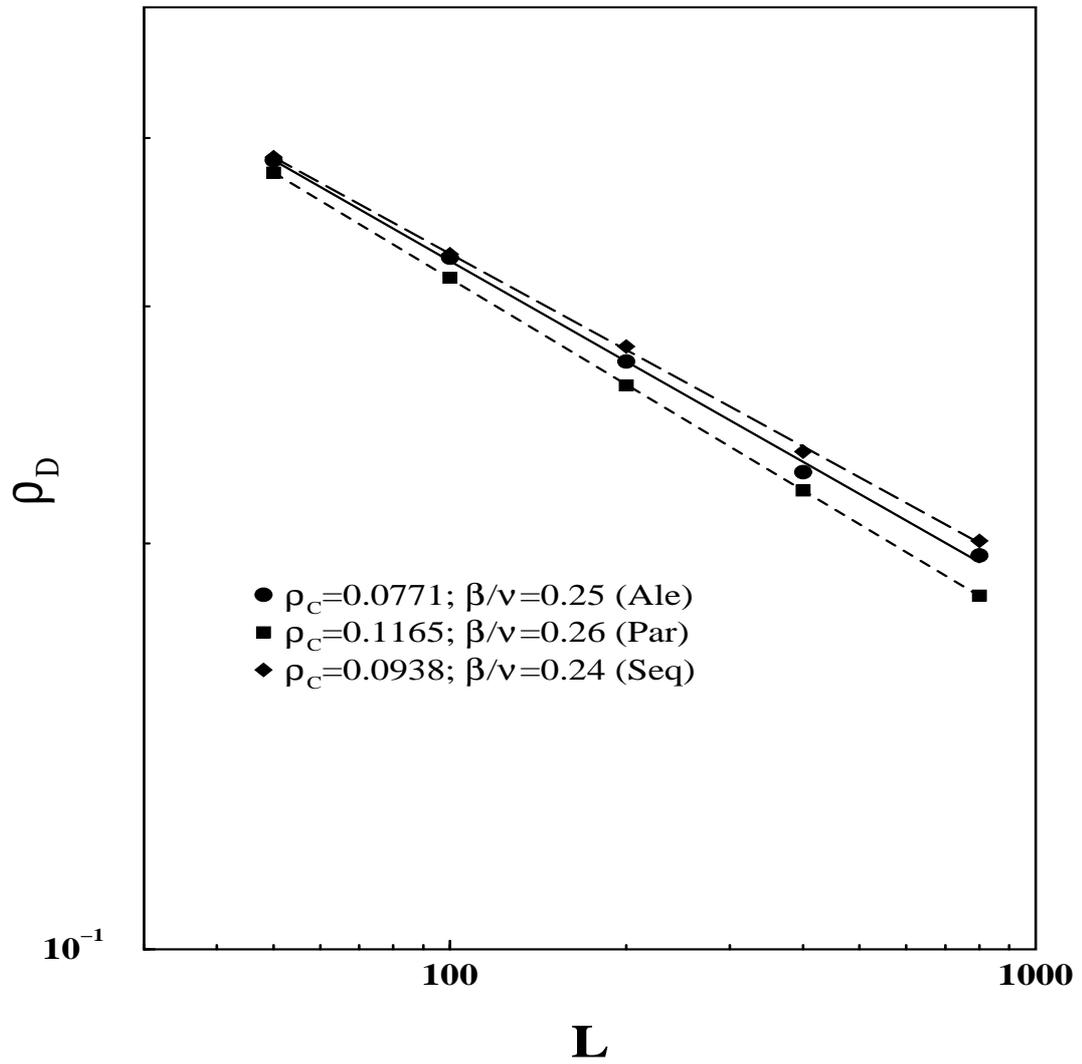


Figura 4.3: Gráfico Log-log de $\bar{\rho}(p_c, L)$ versus L . A inclinação das curvas correspondem a $\beta/\nu = 0.24(1)$ (atualização sequencial), $\beta/\nu = 0.25(1)$ (atualização aleatória) $\beta/\nu = 0.26(1)$ (atualização paralela).

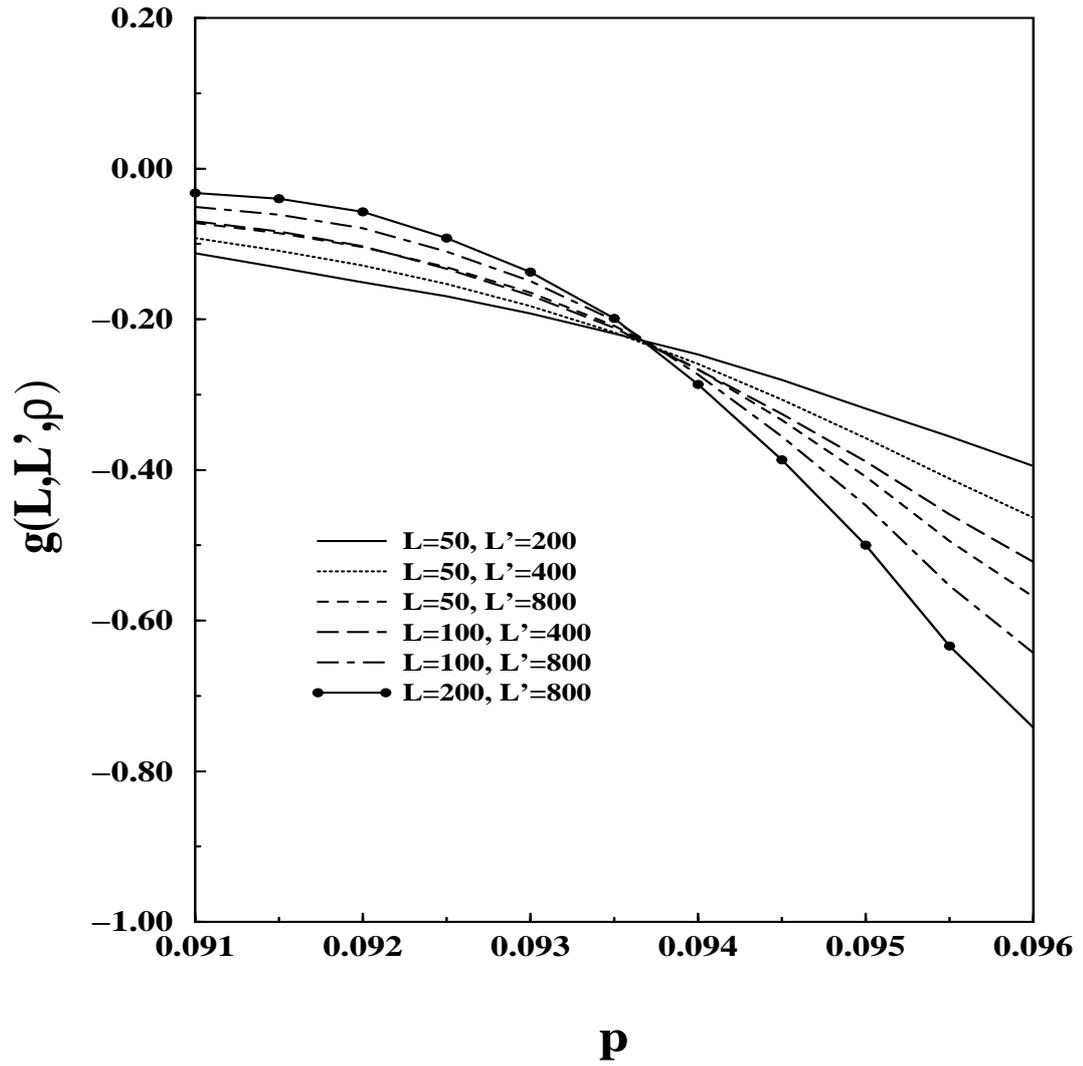


Figura 4.4: Função $g(L, L', \rho)$ versus p para vários pares de (L, L') . A intersecção das diversas curvas corresponde ao ponto $(p_c, \beta/\nu) = (0.0938(2), 0.24(1))$. Para este caso utilizamos atualização sequencial.

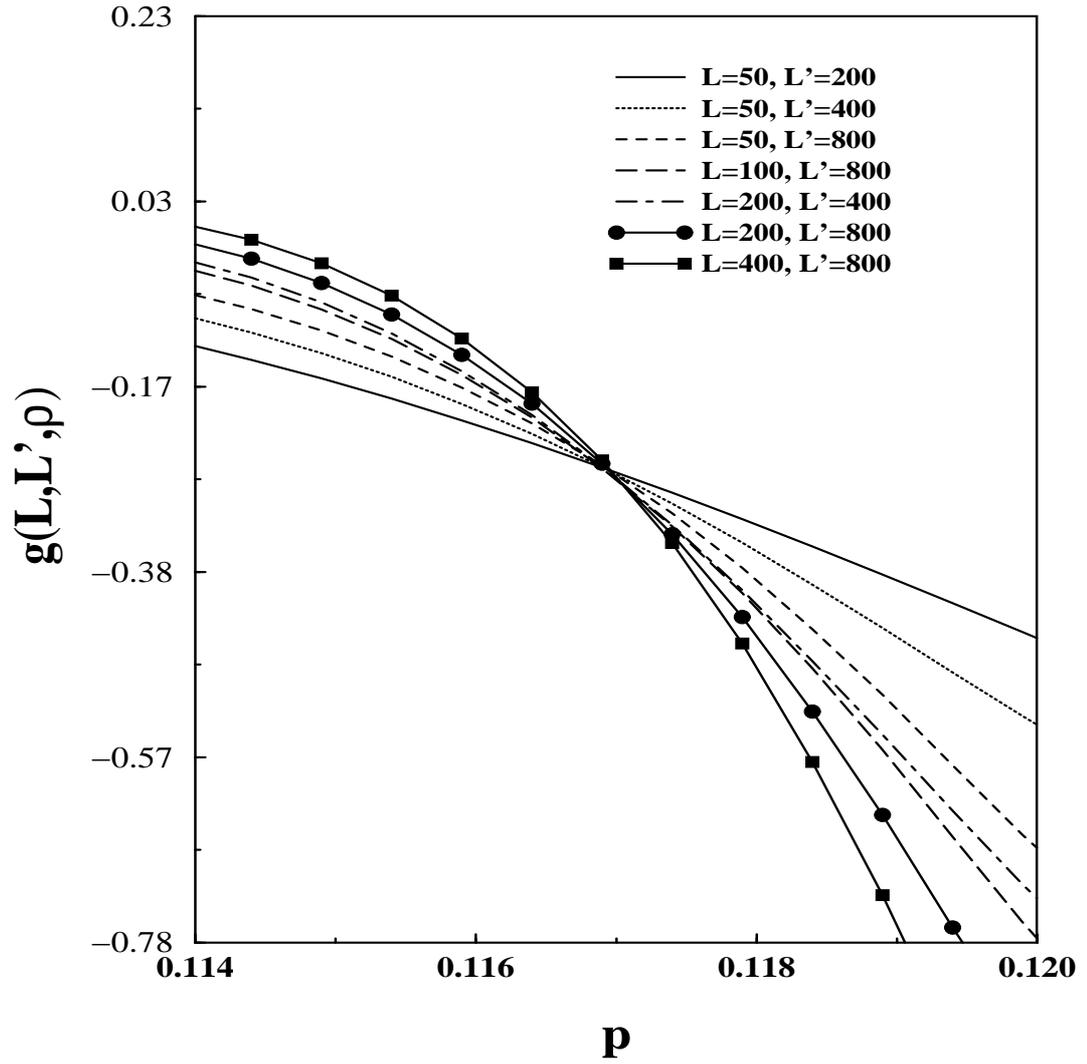


Figura 4.5: Função $g(L, L', \rho)$ versus p para vários pares de (L, L') . A intersecção das diversas curvas corresponde ao ponto $(p_c, \beta/\nu) = (0.1165(3), 0.26(1))$. Para este caso utilizamos atualização paralela.

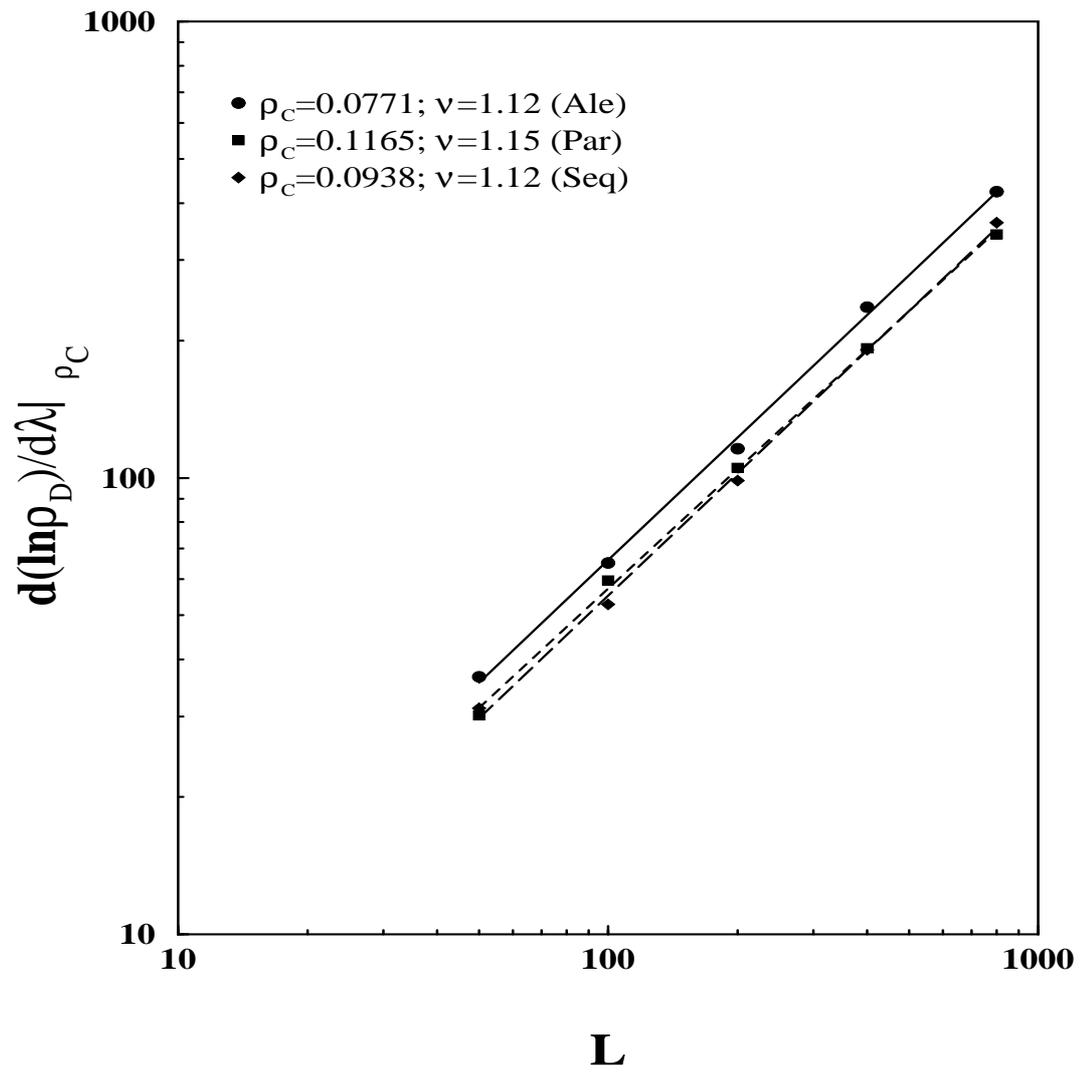


Figura 4.6: Cálculo de ν para as três atualizações.

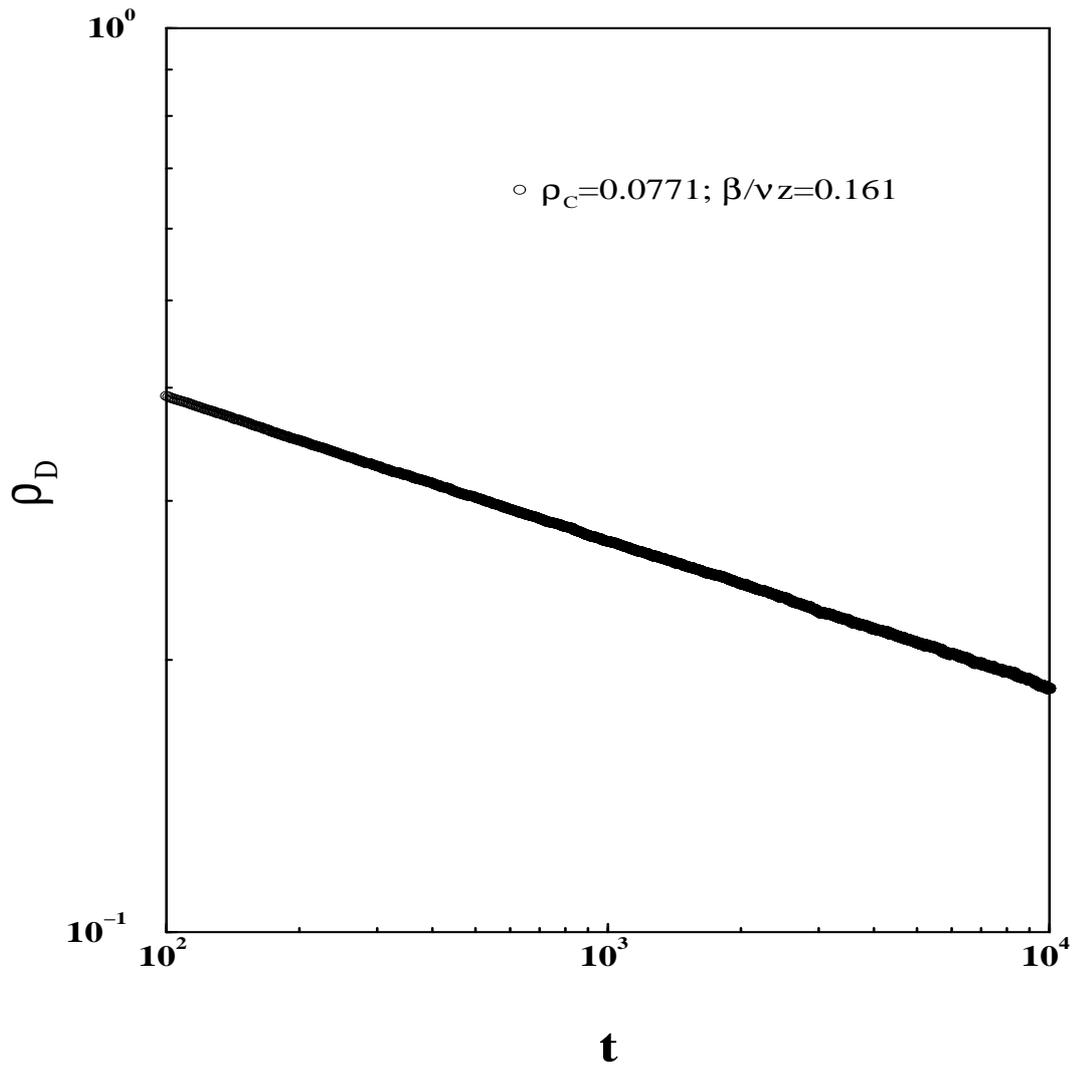


Figura 4.7: Cálculo de $\beta/z\nu = 0.181(1)$ para atualização aleatória.

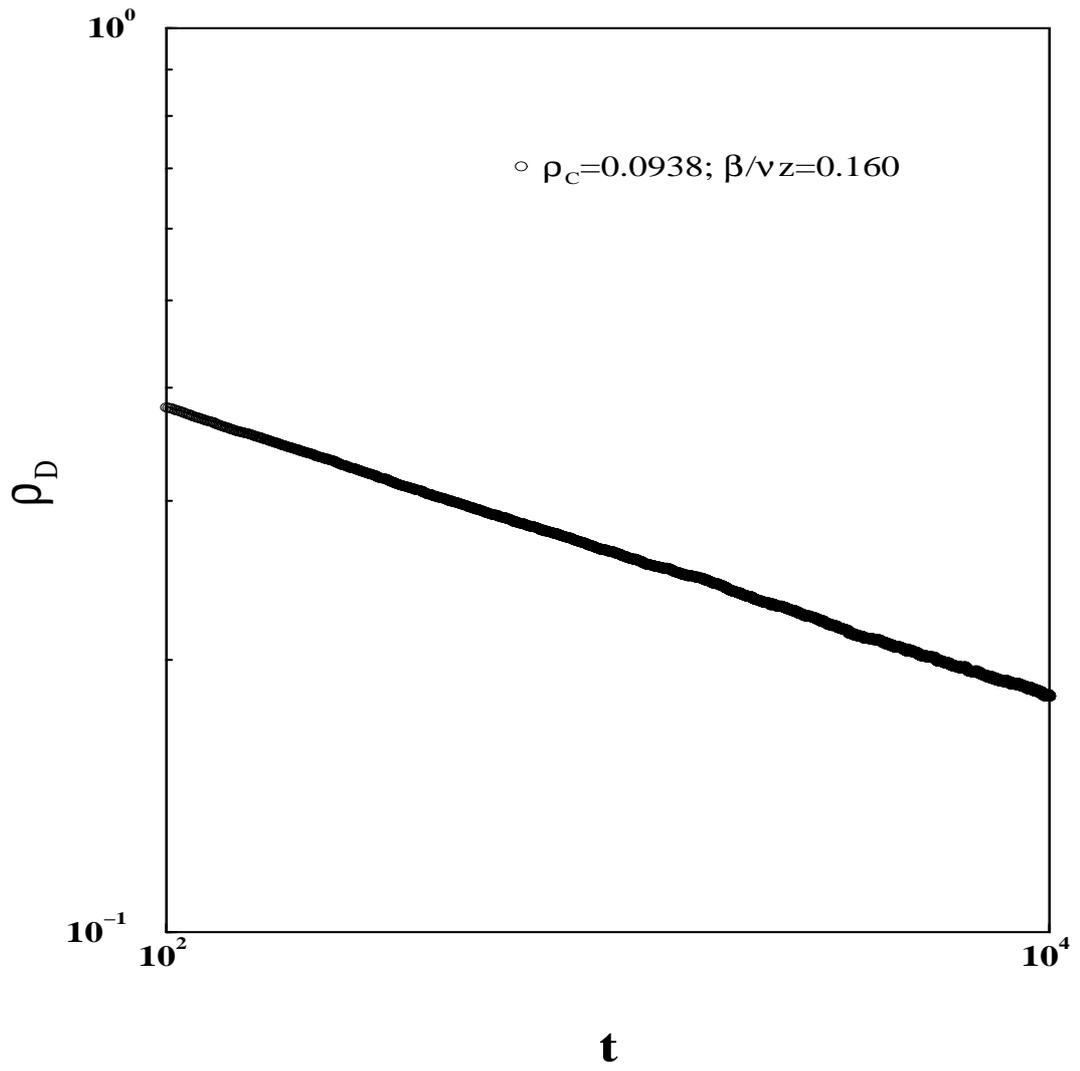


Figura 4.8: Cálculo de $\beta/z\nu = 0.160(1)$ para atualização sequencial.

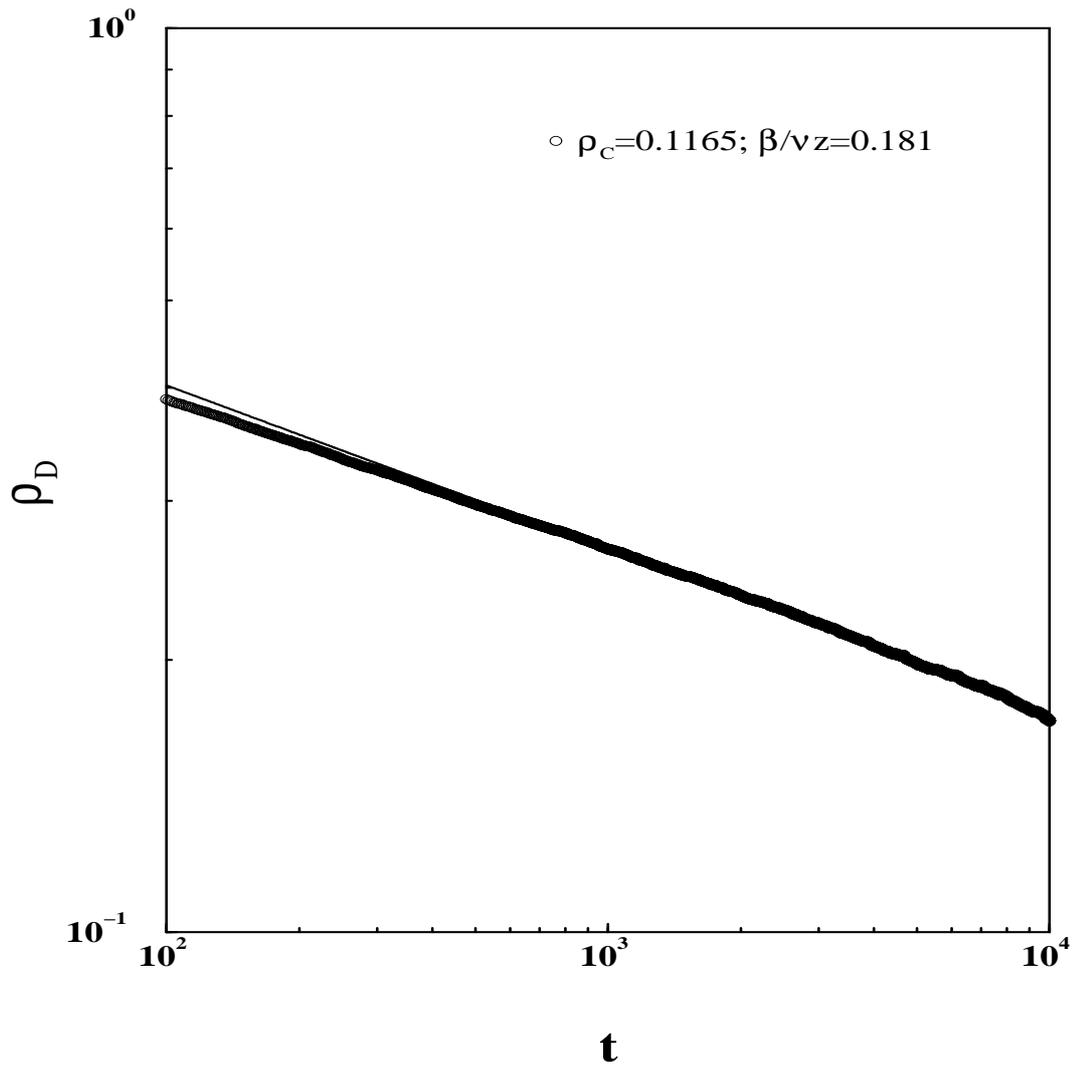


Figura 4.9: Cálculo de $\beta/z\nu = 0.181(1)$ para atualização paralela.

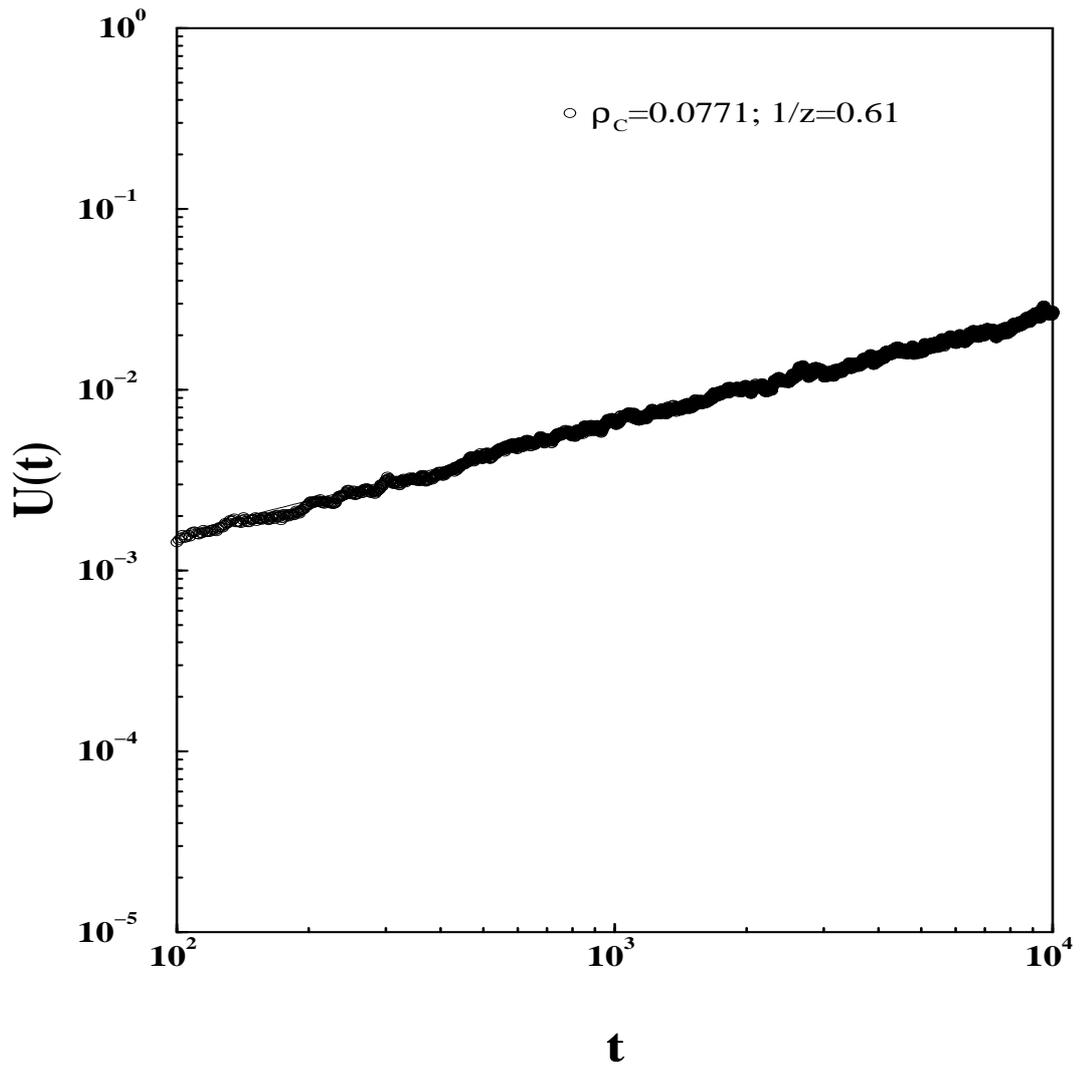


Figura 4.10: Cálculo do expoente z para atualização aleatória.

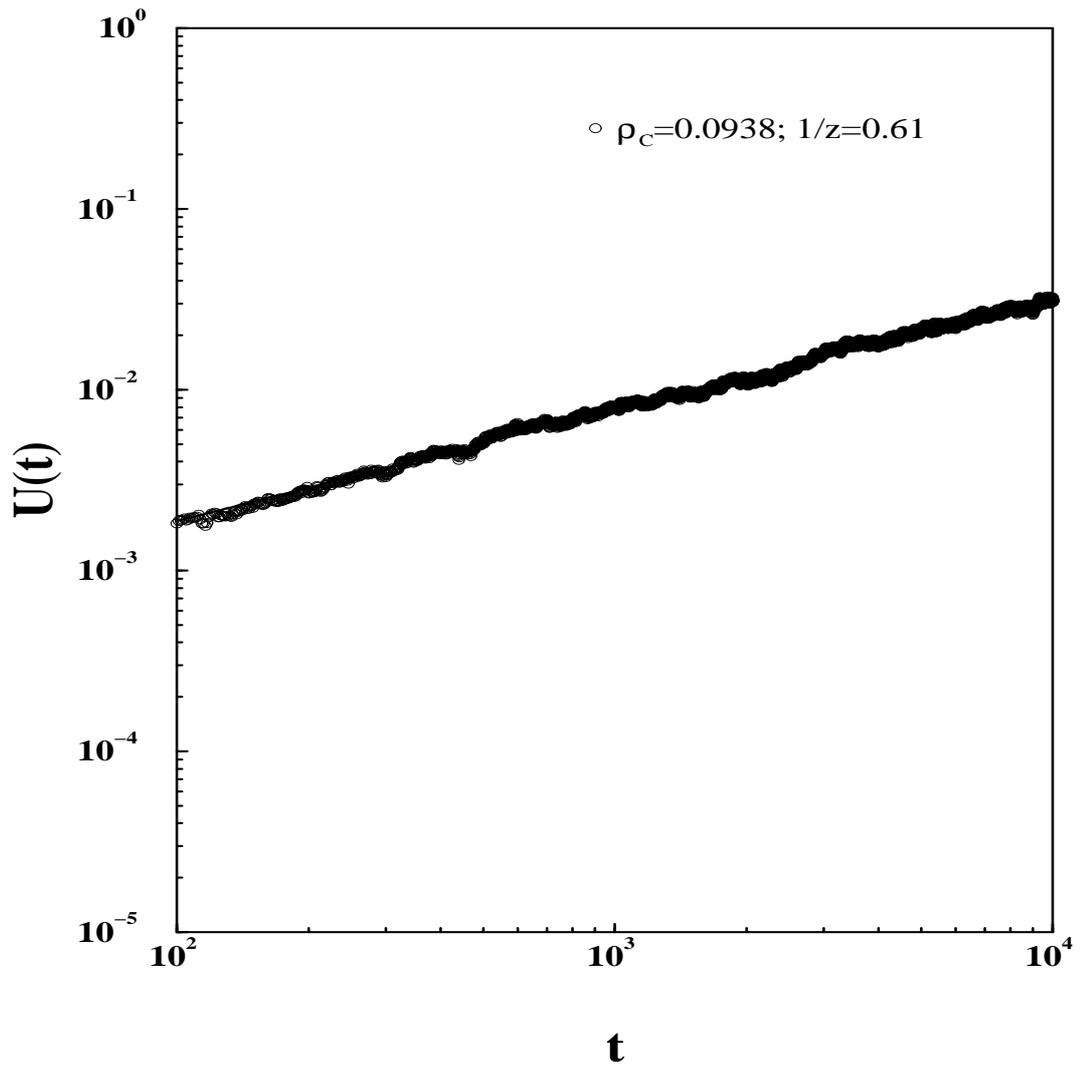


Figura 4.11: Cálculo do expoente z para atualização sequencial.

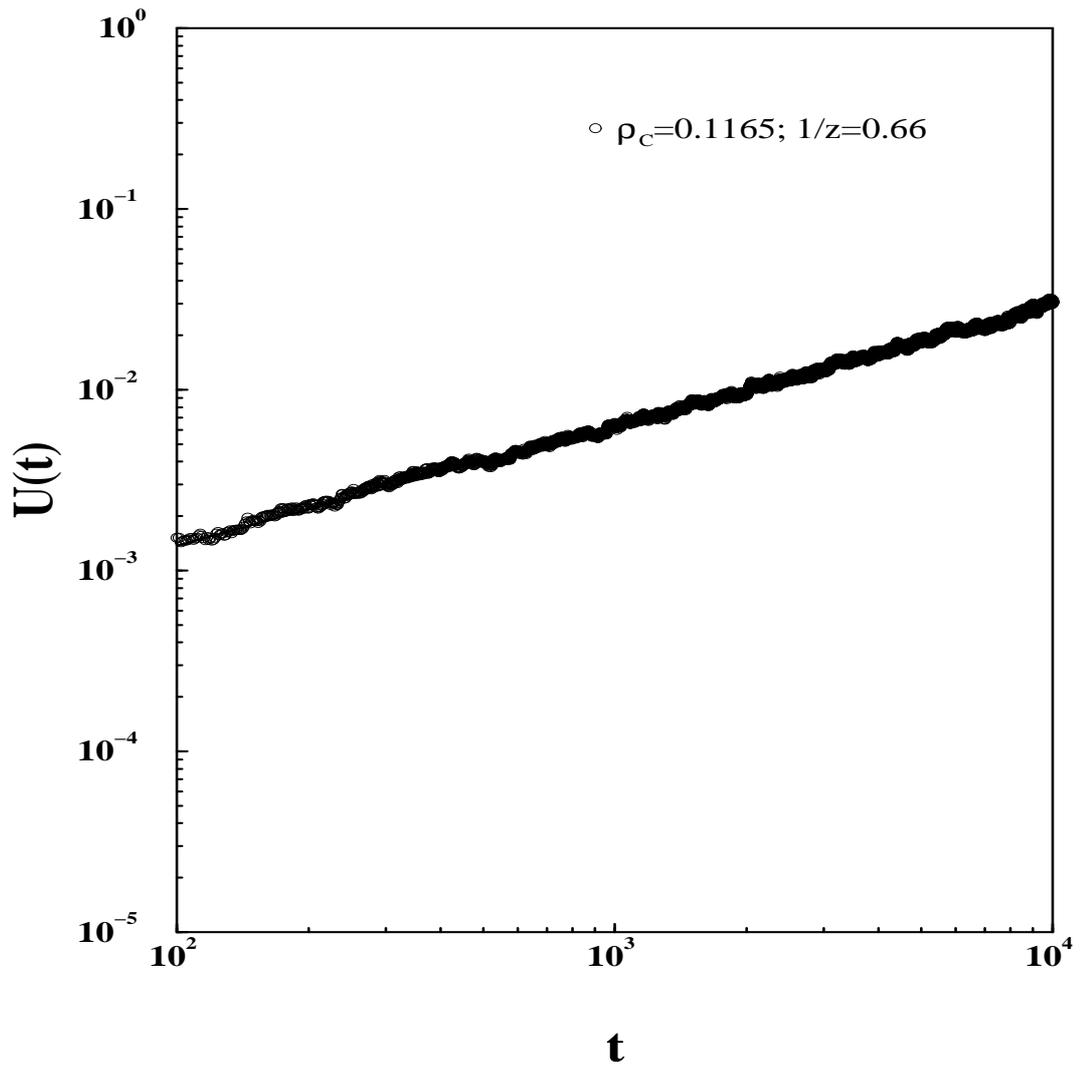


Figura 4.12: Cálculo do expoente z para atualização paralela.

	p_c	β/ν	ν	z	$\beta/\nu z$	β/ν^a
aleatória	0.0771(2)	0.25(1)	1.12(2)	1.64(4)	0.161(1)	0.26(1)
sequencial	0.0938(2)	0.24(1)	1.15(3)	1.64(4)	0.160(1)	0.25(1)
paralela	0.1165(3)	0.26(1)	1.12(2)	1.52(4)	0.181(1)	0.27(1)
literatura	0.0771(2)	0.251	1.10	1.58		0.251

^aCalculado a partir dos valores dos outros expoentes.

Tabela 4.1: Comparação entre os valores dos expoentes críticos β , ν e z na literatura [1] e para os três tipos de atualização.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Estados absorventes são, por definição, irreversíveis. Em modelos de processos de contato o parâmetro de ordem, geralmente, é a densidade de sítios ativos, o qual é zero no estado absorvente. Nestes modelos durante a transição de fase para tais estados, na vizinhança do ponto crítico, o parâmetro de ordem se anula rapidamente, o que dificulta a determinação do ponto crítico e conseqüentemente dos expoentes. Para a determinação do ponto crítico e dos expoentes críticos de tais modelos o que os pesquisadores fazem é simular grandes sistemas com longos tempos de relaxação desprezando, em suas médias, as amostras para os quais o parâmetro de ordem se anula completamente.

O MCR busca, exatamente, contornar esta dificuldade, pois com a reativação de um sítio inativo fazemos com que o gráfico do parâmetro de ordem tenha uma queda mais suave sofrendo uma inflexão na vizinhança do ponto crítico. Com a queda mais suave da curva do parâmetro de ordem podemos aplicar a técnica de análise de escala de tamanho finito para estimarmos o ponto e os expoentes críticos do modelo em consideração.

Esta nova extensão ao método MC tem sido aplicada com sucesso para estudar processos de reação-difusão para modelos que exibem um único estado absorvente [26, 27]. Com este trabalho queríamos nos certificar que ela também é útil para se investigar propriedades críticas de modelos com mais de um estado absorvente. Motivados pela questão que o modelo PCP é um dos modelos mais conhecido na literatura da ME que exhibe múltiplos estados absorventes o escolhemos para tal fim.

Analisando os valores dos expoentes críticos e do ponto crítico calculados

a partir do MCR vemos que ele nos dá bons resultados, em excelente acordo com os valores estabelecidos na literatura para o modelo PCP [28, 29]. Assim, mostramos claramente que o ato de ressuscitarmos uma partícula do sistema não altera o seu comportamento crítico. Com isto concluímos que o MCR é útil para estudar propriedades críticas de modelos de não equilíbrio que apresentam múltiplos estados absorventes.

Com relação aos três tipos de atualização utilizados em nossas simulações percebemos que elas alteram o valor do ponto crítico sem modificar a classe de universalidade. Em nosso trabalho os pontos críticos determinados para as atualizações aleatória, sequencial e paralela foram, respectivamente: 0.0771(1), 0.0938(2) e 0.1165(3).

Entre as perspectivas para este trabalho está o estudo do comportamento crítico do modelo PCP com difusão de partículas, já que esta muda completamente o seu comportamento crítico, utilizando o MCR. O PCP com difusão é caracterizado por um processo de reação-difusão no qual partículas difundem-se na rede com uma certa velocidade e são criadas e aniquiladas a partir dos pares (se tivermos um ou mais pares de partícula em um sítio qualquer tentamos aniquilá-los um a um com probabilidade p , caso a aniquilação não ocorra, uma nova partícula é criada com probabilidade $1 - p$).

A difusão tira o modelo PCP da categoria de modelos com IMAS, já que o modelo pode exibir apenas dois estados absorventes: um deles correspondente a rede totalmente vazia e o outro correspondente a rede com uma única partícula difundindo-se por ela. A difusão provoca uma mudança tamanha no comportamento crítico do modelo PCP que por algum tempo criou-se uma polêmica entre os pesquisadores a cerca de qual classe de universalidade o assim chamado processo de contato por par com difuso (PCPD) pertence. Atualmente vários trabalhos mostram que o PCPD constitui-se como uma nova classe de universalidade [120, 113, 122, 123, 124].

Referências Bibliográficas

- [1] J. Marro e R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge university Press, Cambridge, 1996).
- [2] R. Dickman, in *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*, edited by V.Privman (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [3] T. M. Liggett, *Interacting Particle Systems* (Springer-Verlag, New York, 1985).
- [4] L. Neise W. Greiner e H. Stocker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1995).
- [5] José Fernando M. Rocha (Org), *Origem e evolução das idéias da física*, 1nd. ed. (EDUFBA, Salvador, 2002).
- [6] Yoav. Ben-Dov, *Convite à Física* (Jorge Zahar Editor, Rio de Janeiro, 1996).
- [7] L. Boltzmann, Wien. Ber (1877).
- [8] G. W. Gibbs, *Elementary principles of Statistical Mechanics* (Ox Bow Press, New York, 1902).
- [9] L. Onsager, Phys. Rev. **37**, 405 (1931).
- [10] L. Onsager, Phys. Rev. **38**, 2265 (1931).
- [11] K. Binder e D. W. Heerman, *Monte Carlo in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1988).
- [12] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods* (John Wiley & Sons, New York, 1992).

- [13] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M. E. J. Newman, *The theory of critical phenomena an introduction to the renormalization group*, 1nd. ed. (Oxford University Press, Oxford - New York, 1992).
- [14] E. M. de S. Luz, Tese de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2000.
- [15] Everaldo Arashiro, Tese de Mestrado, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2001.
- [16] N. Metropolis et al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [17] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- [18] R. H. Swendsen e J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [19] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [20] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer e L. V. Chayes, Phys. Rev. Lett. **75**, 2792 (1995).
- [21] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer e L. V. Chayes, Phys. Rev. E **54**, 2792 (1996).
- [22] P. M. Kasteleyn e C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jap. (suppl.) **26**, 11 (1969).
- [23] V. L. Líbero, Rev. Bras. de Ens. de Física **22**, 346 (2002).
- [24] U. L. Fulco, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2000.
- [25] U. L. Fulco, F. D. Nobre, L. R. da Silva e L. S. Lucena, Physica A **284**, 223 (2000).
- [26] U. L. Fulco, D. N. Messias e M. L. Lyra, Phys. Rev. E **63**, (2001).
- [27] U. L. Fulco, D. N. Messias e M. L. Lyra, Physica A **295**, 49 (2001).
- [28] Iwan Jensen, Phys. Rev. Lett **70**, 1465 (1993).
- [29] Iwan Jensen an Ronald Dickman, Phys. Rev. E **48**, 1710 (1993).

- [30] W. R. M. Rabelo R. Dickman e Géza Ódor, *Phys. Rev. E* **65**, 016118 (2001).
- [31] Attila Szolnoki, *Phys. Rev. E* **66**, 057102 (2002).
- [32] M. A. Munoz, G. Grinstein, R. Dickman e R. Livi, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 451 (1996).
- [33] M. A. Munoz, G. Grinstein, R. Dickman e R. Livi, *Physica D* **103**, 485 (1997).
- [34] S. L. A. de Queiroz, *Rev. Bras. Ens. Física* **22**, 339 (2000).
- [35] D. W Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1986).
- [36] K. Binder, *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1995).
- [37] M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, New York, 1999).
- [38] H. Gould e J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods* (Addison-Wesley Publishing company, Massachusetts, 1996).
- [39] J. M. Hammersley, *Methods in Computational Physics* (Academic Press, New York, 1963).
- [40] O. H. Bustos, A. G. Flesia e A. C. Frery, *A Monte Carlo Study of Classical Spectral Estimation of the Backscatter from Correlated K-Distributed Speckled sar images*, disponível em: <http://www.cin.ufpe.br/frery/articles/files/BustosFlesiaFreryPerformanceLAAR2001.pdf>. Acesso em: 05/10/2008. Artigo científico.
- [41] R. Ziff, E. Gulari e Y. Barshad, *Phys. Rev. Lett* **56**, 2553 (1986).
- [42] E. V. Albano e Heterog, *Chem. Rev.* **3**, 389 (1996).
- [43] E. V. Albano e Braz, *J. Phys* **30**, (2000).
- [44] J. E. Satalovsky e T. Tomé, *Phys. Rev. E* **49**, (1994).

- [45] T. E. Harris, *Ann. Prob.* **2**, (1974).
- [46] P. Grassberger, F. Krause e T. von der Twer, *J. Phys. A* **17**, (1983).
- [47] P. Grassberger, *J. Phys. A* **22**, (1989).
- [48] B. C. S. Grandi e W. Figueredo, *Phys. Rev. E* **53**, (1996).
- [49] B. C. S. Grandi e W. Figueredo, *J. Phys.* **30**, (2000).
- [50] E. Domany e W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 311 (1984).
- [51] C. Warrent, E. Somfai e L. M. Sander, *Braz. J. Phys* **30(1)**, 157 (2000).
- [52] R. A. Zara e E. Koehler, *Rev. Bras. de Ensino de Fsica* **26**, 53 (2004).
- [53] N. Menyhárd e G. Ódor, *Braz. J. Phys.* **30(1)**, 113 (2000).
- [54] C. E. Fröberg, *Introduction to numerical analysis* (Addison-Wesley, , 1966).
- [55] M. E. Fisher, in *Proceedings of the International Summer School 'Enrico Fermi', CourseLI* (Academic Press, New York, 1971).
- [56] M. E. Fisher e M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
- [57] M. N. Barber, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Comb e J. L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983), Vol. 8.
- [58] T. Aukrust, D. A. Browne e I. Webman, *Europhys. Lett.* **10**, 249 (1989).
- [59] T. Aukrust, D. A. Browne e I. Webman, *Phys. Rev. A* **41**, 5294 (1990).
- [60] E. Ising, *Z. Physik.* **31**, 253 (1925).
- [61] Tânia Tomé e Mário José de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Edusp, São Paulo, 2001).
- [62] W. Lenz, *Z. Physik.* **21**, 613 (1920).
- [63] R. E. Peierls, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **32**, 471 (1936).
- [64] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

- [65] *Modelo de Ising*, disponível em: <http://www.if.ufrj.br/teaching/sergio/ising/ising.html>. Acesso em 05/10/2008. Texto didático.
- [66] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (MIT Press, Massachusetts and London, 1966).
- [67] L. Tisza, *Generalized Thermodynamics* (MIT Press, Cambridge, Massachusetts and London, 1966).
- [68] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, 1975).
- [69] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13**, 253 (1945).
- [70] P. Heller e G. B. Benedek, *Phys. Rev. Lett.* **8**, 428 (1962).
- [71] J. L. Lebowitz, *Phase Transition and Critical Phenomena* (Academic Press, New York, 1977-95).
- [72] C. Domb, *Adv. Phys.* **9**, (1960).
- [73] M. E. Fisher, *Rep. Prog. Phys.* **30**, 615 (1967).
- [74] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, , 1985).
- [75] L. P. Kadanoff e M. S. Green, *Critical Phenomena* (Academic Press, London, 1971).
- [76] L. P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966).
- [77] L. P. Kadanoff e J. S. Swift, *Phys. Rev.* **89**, 166 (1968).
- [78] K. G. Wilson, *Phys. Rev.* **4**, 3174 (1971).
- [79] K. G. Wilson e M. E. Fisher, *Phys. Rev.Lett.* **28**, 240 (1972).
- [80] K. G. Wilson, *Phys. Rev.Lett.* **28**, 548 (1972).
- [81] M. E. Fisher, *Critical Phenomena* (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [82] Jr. G. A. Baker, *Quantitative Theory of Critical Phenomena* (Academic Press, Boston, 1990).

- [83] F. Smallenburg, Tese de Mestrado, Institute of Theoretical Physics, Utrecht University, 2007.
- [84] B. Windom, J. Chem. Phys. **43**, 3898 (1965).
- [85] B. Windom, J. Chem. Phys. **44**, 3888 (1966).
- [86] B. Windom, J. Chem. Phys. **58**, 4043 (1973).
- [87] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transition* (Clarendon Press-Oxford, New York, 1993).
- [88] S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Edusp, São Paulo, 1999).
- [89] W. F. Wreszinski, *Termodinâmica* (Edusp, São Paulo, 2003).
- [90] M. Henkel, *Conformal invariance and critical phenomena* (Springer, , 1999).
- [91] R. B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952).
- [92] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [93] A. Polisseto e E. Vicari, eprint cond-mat/0012164 (2000).
- [94] S. R. Broadbent e J. M. Hammersley, Proc. Comb. Phil. Soc **43**, 3699 (1957).
- [95] P. Grassberger, Z. Phys. B **47**, 365 (1982).
- [96] G. Gristein, Z. W. Lai e D. A. Browne, Phys. Rev. A **40**, 4820 (1989).
- [97] H. K. Janssen, Phys. B **42**, 151 (1981).
- [98] L. Cardy e U. C. Tauber, Phys. Rev. Lett. **77**, 4780 (1996).
- [99] D. ben Avraham, F. Leyvraz e S. Redner, Phys. Rev. E **50**, 1843 (1994).
- [100] P. Grassberger, J. Phys. A **22**, 3673 (1989).
- [101] R. Dickman, Phys. Rev. A **42**, 6985 (1990).
- [102] T. E. Harris, Ann. Prob. **2**, 969 (1974).

- [103] J. Kohler e D. ben Avraham, *J. Phys. A* **24**, L621 (1991).
- [104] D. ben-Avraham e J. Kohler, *J. Stat. Phys.* **65**, 893 (1991).
- [105] P. Bak e C. Tang e Weisenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [106] S. Maslov, M. Paczuski e P. Bak, *Europhys. Lett.* **55**, 2527 (1994).
- [107] S. S. Manna, *J. Phys. A* **24**, L363 (1991).
- [108] e J. F. F. Mendes M. C. Marques, *Eur. Phys. J. B* **12**, 123 (1999).
- [109] J. F. F. Mendes, R. Dickman, M. Henkel e M. C. Marques, *J. Phys. A* **27**, 3019 (1994).
- [110] H. Takayasu e A. Yu. Tretyakov, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3060 (1992).
- [111] S. Know e H. Park, *Phys. Rev. E* **52**, 5955 (1995).
- [112] H. Hinrichsen, *cond-mat/0001070* **2**, (2000).
- [113] Gézar Ódor, *Rev. Mod. Phys.* **3**, 76 (2004).
- [114] I. Jensen, *Phys. Rev. Lett.* **70**, (1993).
- [115] I. Jensen, *Phys. Rev. E* **50**, 3623 (1994).
- [116] N. Menyhard, *J. Phys. A* **27**, 6139 (1994).
- [117] M. H. Kim e H. Park, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2579 (1994).
- [118] H. Hinrichsen, *Phys. Rev. E* **55**, 219 (1997).
- [119] M. J. Howard e U. C. Tauber, *J. Phys. A* **30**, 7721 (1997).
- [120] H. Hinrichsen, *Phys. Rev. E* **63**, 036102 (2001).
- [121] M. Henkel e U. Schollwock E. Carlon, *Phys. Rev. E* **63**, 036101 (2001).
- [122] G. Ódor, *Phys. Rev. E* **67**, 01611 (2003).
- [123] K. Park e H. Hinrichsen e In-mook Kim, *cond-mat/0101181* **2**, (2001).
- [124] R. Dickman e M. A. F. de Menezes, *cond-mat/0207720* **1**, (2002).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)