UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA

Marlon Nunes Gonzaga

DESORDEM CONGELADA NO PROCESSO DE CONTATO EM SUB-REDES

Ouro Branco - MG
Agosto de 2018

Marlon Nunes Gonzaga

DESORDEM CONGELADA NO PROCESSO DE CONTATO EM SUB-REDES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei, em associação ampla com as Universidades Federais de Alfenas e Lavras, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências, na área de Física.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada
Orientador: Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira

Ouro Branco– MG
Departamento de Física e Matemática- UFSJ
Agosto de 2018

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

G642d

Gonzaga, Marlon Nunes .
Desordem congelada no processo de contato em sub redes / Marlon Nunes Gonzaga ; orientador Marcelo Martins de Oliveira. -- Ouro Branco, 2018.
83 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei, 2018.

1. Física estatística. 2. Desordem congelada. 3. Processo de contato em sub-redes. 4. Fases de Griffiths. 5. Modelagem de sistemas físicos. I. de Oliveira, Marcelo Martins, orient. II. Título.

Universidade Federal de São João del-Rei

Programa de Pós-Graduação em Física

São João del-Rei, 29 de agosto de 2018

A Dissertação **"Desordem Congelada no Processo de Contato em Sub-redes"**, elaborada por **Marlon Nunes Gonzaga** e aprovada por todos os membros da Banca Examinadora, foi aceita pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei como requisito parcial à obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira (UFSJ)
Orientador

Prof. Dr. Silvio da Costa Ferreira Júnior – (UFV)

Prof. Dr. Francisco César de Sá Barreto - (UFSJ)

O preço do novo é o declínio da ordem
Marcelo Gleiser, A Dança do Universo (1997).

À minha mãe, Marta.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus que com sua benevolência me possibilitou a feitura e conclusão de mais essa etapa, sei que todas as providências e acontecimentos são seus desígnios.

Ao meu orientador Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira, pela atenção, dedicação, paciência e sensibilidade para me ajudar a transpor todos os obstáculos encontrados durante os últimos dois anos. Tenho certeza que sua expertise e inteligência foram fatores cruciais no desenvolvimento desse trabalho.

Ao Prof. Dr. Adélcio Carlos de Oliveira, que ao me aceitar como aluno de iniciação científica na graduação me mostrou como a junção entre física, matemática, modelagem e engenharia pode ser bastante valiosa. Agradeço também pelos conselhos, que sei que me fizeram uma pessoa muito melhor.

Ao prof. Dr. Sidiney Geraldo Alves por oferecer a disciplina de Física Computacional, que me forneceu embasamento para muitas das atividades desenvolvidas nesse trabalho e principalmente pela atenção e paciência em sanar minhas dúvidas.

Ao prof. Dr. Humberto César Fernandes Lemos, que, além de ser um ótimo profissional, é um ótimo ser humano. Sem seu apoio nas inúmeras alterações de horários e dias de aula do primeiro semestre para que eu não saísse prejudicado eu não teria conseguido permanecer no curso.

Aos meus colegas de curso, em especial Felipe Augusto O. Silveira, Crislayne Aparecida M. Reis, Igor Pereira Vieira e Adriano Sérgio T. F. Silva, pela companhia, apoio e paciência.

Aos meus familiares, que sempre me apoiam e incentivam. Aos meus amigos

Bárbara Mello, Rangel Z. Silva, Ríssia Z. Silva (minha psicóloga nas horas vagas) e minha irmã Marlette N. Gonzaga pelos momentos de descontração e auxílio nos momentos mais difíceis.

Aos meus amigos da graduação Jéssica C. Bonoto, Johnes Ricardo Golçalves, Alex Júnior e Stefânia Sousa Faria pela lealdade. Em especial à Denise dos Santos Castro, que me apoiou e me acompanhou em todos os momentos difíceis, sou muito grato a ela por ter me ajudado a persistir.

Àqueles que contribuíram direta ou indiretamente na elaboração dessa dissertação. Ao aprendolatex.com, que me ajudou a entender o LaTeX. À CAPES pelo auxílio financeiro que possibilitou a dedicação integral ao mestrado.

Conteúdo

1 Introdução **1**
1.1 Organização do trabalho 3

2 Transições de fase em sistemas no equilíbrio **4**
2.1 Transições de fase 4
2.1.1 Classificação das transições de fase 4
2.1.2 Universalidade e expoentes críticos 6
2.1.3 Transições descontínuas ou de primeira ordem 11
2.2 O modelo de Ising 11

3 Transições de fase para estados absorventes **16**
3.1 O Processo de Contato (PC) 16
3.2 Teoria de campo médio para o processo de contato 17
3.3 Simulações de Monte Carlo 19
3.3.1 Estados Iniciais Homogêneos 19
3.3.2 Simulações por sementes 20
3.4 Efeitos da desordem 21
3.4.1 Critério de Harris 22
3.4.2 Fases de Griffiths 23
3.4.3 Classe de Universalidade de Ising Transverso com campo aleatório 25
3.5 Percolação Direcionada (DP) 28

4 Processo de Contato em sub-redes **30**
4.1 Teoria de Campo Médio para o PC em sub-redes 31
4.2 Resultados obtidos por simulações 34
4.3 Extensões do modelo: Efeito da Difusão e de interações distintas 39
4.3.1 Processo de contato com dinâmica competitiva em redes bipartidas: Efeitos de distintas interações 39

4.3.2 Efeitos da difusão no processo de contato competitivo em sub-redes 41

5 Processo de Contato em sub-redes com desordem 46

5.1 TCM aplicada ao modelo 46

5.1.1 Desordem isotrópica 48

5.1.2 Desordem Anisotrópica 51

5.2 Resultados obtidos por simulações 54

5.2.1 Desordem Isotrópica 54

5.2.2 Desordem Anisotrópica 58

6 Conclusões 61

Bibliografia 64

Lista de Figuras

1.1 A figura apresenta um sistema hipotético com três microestados A, B e C. Em 1.1(a) as transições ocorrem com iguais taxas em todas as direções, já em 1.1(b) as transições ocorrem apenas em um sentido, não havendo anulação entre as probabilidades de ocorrência de transições entre os microestados. 2

2.1 Magnetização espontânea para o ferromagneto uniaxial de Curie-Weiss. 7

2.2 Energia livre de Gibbs em função do parâmetro de ordem η para os valores de a da equação 2.12. Figura retirada da ref. [9]. 9

2.3 Continuidade da entropia e descontinuidade do calor específico na transição de fase. A descontinuidade na segunda derivada da energia livre de Gibbs é típica das transições de segunda ordem. Figura retirada da ref. [9]. 10

2.4 Representação pictórica do modelo de Ising. Figura retirada da ref. [10]. 11

2.5 Configurações típicas do modelo de Ising bidimensional em equilíbrio térmico para os estados subcrítico, crítico e supercrítico. Figura retirada da referência [1]. 14

3.1 Parâmetro de ordem ρ indicando os limites entre o estado absorvente e o regime ativo, onde ocorre o início da epidemia ($\lambda = \lambda_c$). Figura retirada da ref. [13]. 17

3.2 (a) Região de abrangência das fases de Griffths considerando a variação de λ; (b) Regiões raras; (c) Decaimento de ρ em função do tempo. Figura retirada da ref. [22]. 24

3.3 Clusters utilizados na transformação para o modelo TIM, onde $j_i = J_i/\Gamma$ pode assumir os valores 0 ou 1. A figura 3.3(b) apresenta o acoplamento $\tilde{j}_i$ entre os spins 1 e 3. Figura retirada da ref. [27]. 26
3.4 Diagrama de fluxos do modelo de Ising transverso bidmensional à temperatura zero mostrando o ponto fixo e as linhas de fluxo. Figura retirada da ref. [27]. 27
3.5 Interpretação dos processos de DP como um processo de reação de difusão:3.5(a) processo de morte, 3.5(b) e 3.5(c) processo de difusão, 3.5(d) processo de coagulação. 28

4.1 Configuração básica das sub-redes (a) e taxas de criação de novos indivíduos (b). 30
4.2 Comportamento dos parâmetros de ordem ρ (linha cheia) e ϕ (linha tracejada) em relação a variação de λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. 33
4.3 Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ para $\mu = 2$ mostrando as fases absorvente (ABS), ativo-simétrico (AS) e ativo-assimétrico (AA). As linhas foram obtidas através da teoria de campo médio e os símbolos através de simulação. Figura retirada da ref. [4]. 34
4.4 ln da densidade crítica quase-estacionária (QS) de sítios ativos ρ (reta inferior) e ln do tempo de vida τ do estado QS (linha superior) versus $\ln L$. Parâmetros: $\mu = 2$, $\lambda_1 = 0,2$ e $\lambda_2 = 1,5620$. Figura retirada da ref. [4]. 35
4.5 Razão de momentos m versus λ_2 para sistemas de tamanhos $L = 20, 40, 80$ e 160 na transição ABS-AS. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,2$. Figura retirada da ref. [4]. 36
4.6 Distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem ϕ. Parâmetros: $\lambda_1 = 0{,}2$, $\lambda_2 = 2{,}0$ (curva pontilhada), $\lambda_2 = 10{,}0$ (curva tracejada) e $\lambda_2 = 40{,}0$ (curva sólida). Figura retirada da ref. [4]. 37
4.7 Cumulante Binder versus λ_2 para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}2$ considerando $L = 20, 40, 80$ e 160. Figura retirada da ref. [4]. 38
4.8 ln da variância do parâmetro de ordem versus $\ln L$ na transição AS-AA e razão de momentos m dessa mesma transição para sistemas de tamanhos $L = 20, 40..., 320$. Parâmetros: $\mu = 2$, $\lambda_1 = 0,2$, $\lambda_2 = 3,94$. A inclinação da linha de regressão é de 1,76. Figura retirada da ref. [4]. 38

4.9 Diagrama de fases para os modelos 1 (esquerda) e 2 (direita) com $\mu = 1$. As fases absorvente, ativo-simétrico, ativo-assimétrico, o ponto crítico e o ponto tricrítico são representados por *ab*, *as*, *aa*, R e T respectivamente. Figura retirada da ref. [31]. . . 41
4.10 Densidade de sítios ativos ρ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Dimensão do sistema $L = 160$. Figura retirada da ref. [32]. 43
4.11 Densidade do parâmetro ϕ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Dimensão do sistema $L = 160$. Figura retirada da ref. [32]. 44
4.12 Diagrama de fases no plano $D - \lambda_2$ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$, mostrando as fases absorvente (ABS), ativo-assimétrico (AA) e ativo-simétrico (AS). Linhas sólidas (em vermelho): resultado da TCM. Círculos: Resultados de simulações para os pontos críticos da transição da fase absorvente. Quadrados: Resultados das simulações para os pontos críticos nas fronteiras de AA-AS. Nas simulações, os pontos críticos são obtidos pela extrapolação $L \to \infty$ de sistemas com dimensões lineares superiores a $L = 320$. Figura retirada da ref. [4]. 45

5.1 Configuração típica observada na rede bipartida para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0,1$ considerando o sistema limpo ($\Gamma = 0$) e sistema com desordem isotrópica de ($\Gamma = 0,2$). 48
5.2 Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ mostrando as fases ativo-simétrico (AS), ativo-assimétrico (AA) e absorvente (ABS). . . 49
5.3 Comportamento médio de ρ (linhas cheias) e ϕ (linhas pontilhadas) para $\Gamma_A = \Gamma_B = \Gamma$. 50
5.4 Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ contendo as fases absorvente (ABS) e ativo-assimétrico (AA). Note que a transição ocorre da fase inativa diretamente para a fase ativo-assimétrico. . . . 51
5.5 Raízes ρ_A (pontos vermelhos) e ρ_B (pontos pretos) versus λ_2. . 52
5.6 Comportamento médio de ρ (linhas cheias) e ϕ (linhas pontilhadas) para $\Gamma_A \neq \Gamma_B$. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. 53
5.7 Densidades ρ e ϕ em uma rede quadrada, para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Tamanho linear do sistema $L = 80$. 54
5.8 (a) Decaimento de sítios ativos em função do tempo. (b) Probabilidade de sobrevivência em função do tempo. Parâmetros: $L = 2000$ e $\mu = 2$. 55
5.9 Espalhamento de ρ com desordem $\Gamma = 0{,}3$ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}1$. 56

5.10 Densidades ρ e ϕ e variância de ϕ em uma rede quadrada, com $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. A presença de picos em χ (figura (c)) indica os pontos onde ocorrem as transições AS-AA e a ausência desses pontos de descontinuidade em χ no sistema desordenado (gráfico (d)) confirma que a desordem destrói as transições AS-AA. 57
5.11 Desordem anisotrópica: densidades ρ e ϕ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$ e $L = 80$. 59
5.12 Desordem assimétrica, com $\Gamma_A = 0{,}1$ e $\Gamma_B = 0{,}0$: (a) Densidade quase estacionária (QS) de sítios ativos $\ln \rho$ (reta inferior) e tempo de vida $\ln \tau$ (reta superior) para o estado QS versus $\ln L$. (b) Razão de momentos m versus λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}1$. 60
5.13 Desordem assimétrica, com $\Gamma_A = 0{,}2$ e $\Gamma_B = 0{,}0$: (a) Densidade quase estacionária (QS) de sítios ativos $\ln \rho$ (reta inferior) e tempo de vida $\ln \tau$ (reta superior) para o estado QS versus $\ln L$. (b) Razão de momentos m versus λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}1$. 60

Lista de Tabelas

2.1 Tabela de expoentes críticos de maiores significados termodinâmicos [7]. 15

3.1 Taxas de transição para o processo de contato unidimensional. Tabela adaptada da referência [13]. 18
3.2 Valores dos expoentes críticos da classe Ising Transverso [19]. Os valores da transição por percolação foram obtidos de [28]. . 27
3.3 Valores dos expoentes críticos da classe DP. Tabela retirada da ref. [1]. 29

5.1 Valores críticos dos parâmetros de controle $\lambda_{c,AS}$, $\lambda_{c,AA}$ e λ_c frente a variação de Γ. 50

Resumo

As transições de fase em sistemas espacialmente estendidos é um tema de grande interesse atual, sendo relacionado à descrição de vários fenômenos, como a dinâmica populacional, propagação de epidemias, reações químicas e outros. Neste trabalho, estudamos o processo de contato (PC) em duas dimensões com uma dinâmica competitiva em sub-redes. No modelo, a criação de partículas depende dos seus primeiros e segundos vizinhos e a extinção aumenta de acordo com a densidade local. Em contraste com o modelo original, a teoria do campo médio e as simulações numéricas preveem três fases estáveis: inativa (absorvente), ativo-simétrico, em que as sub-redes apresentam mesma densidade de ocupação e ativo-assimétrico, assinalada por diferentes taxas de ocupação nas sub-redes. De particular interesse é a forma como a desordem congelada afeta o comportamento crítico das transições de fase de não-equilíbrio. Nos sistemas reais, desordem é um ingrediente inevitável e aparece sob a forma de impurezas e defeitos. A desordem espacial pode afetar drasticamente o comportamento crítico em tais sistemas, induzindo fases de Griffths e/ou alterando a natureza ou a classe de universalidade da transição de fase. Portanto, neste trabalho investigamos os efeitos desta perturbação, sob a forma de exclusão aleatória de sítios nas transições de fase exibidas pelo modelo em uma rede quadrada bipartida.

Abstract

Nonequilbrium phase transitions in spatially extended systems is a topic of current great interest, being related to the description of several phenomena, such as population dynamics, epidemic spreading, chemical reactions and others. In this work, we study the two-dimension contact process (CP) with a competitive dynamics in bipartite sublattices. In the model. the particle creation depends on its first and second neighbors and the extinction increases according to the local density. In contrast to the standard CP model, mean-field theory and numerical simulations predict three stable phases: inactive (absorbing), active symmetric and active asymmetric, signed by distinct sublattice particle occupations. Of particular interest is how spatially quenched disorder affects the critical behavior of nonequilibrium phase transitions. In real systems, quenched disorder is an inevitable ingredient and appears in the form of impurities and defects. Quenched disorder can affect dramatically the critical behavior in such systems, inducing Griffths phases and/or changing the nature or the universality class of the phase transition. Therefore, in this work we investigate the effects of quenched disorder, in the form of random deletion of sites, in the phase transitions exhibited by the model in a bipartite square lattice.

Capítulo 1

Introdução

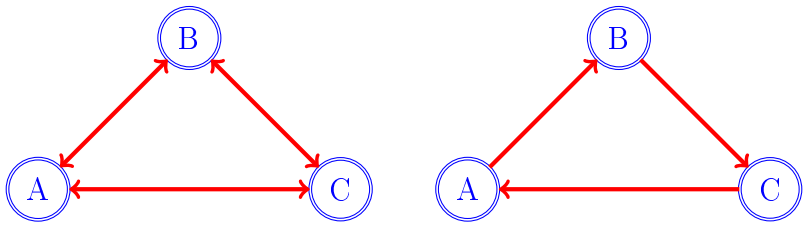
A física estatística é a área que busca entender os fenômenos inerentes à sistemas de muitas entidades interagentes. Esse ramo da física obteve sucesso ao explicar de maneira mais fundamental fenômenos macroscópicos observados em termodinâmica e magnetismo. Em comparação com os demais ramos da física, a física estatística surgiu há pouco tempo. Nas últimas décadas a caracterização das transições de fases na criticalidade se desenvolveu e foi capaz de unificar fundamentos sobre as transições gás-líquido, cristais líquidos, transições magnéticas e outros sistemas [1]. Contudo, a importância dos estudos em torno das transições de fase vai além das transformações que ocorrem em sistemas termodinâmicos. Os fundamentos desenvolvidos nesta área foram difundidos para áreas além da física, sendo utilizados em estudos de dinâmicas de redes complexas, teoria de populações biológicas, funcionamento de laser, processos que utilizem processo de contato e inteligência artificial [1].

As transições de fase podem ocorrer em sistemas em equilíbrio e sistemas fora do equilíbrio. Define-se sistema em equilíbrio todo o sistema que não viola o balanço detalhado. Se construirmos regras de dinâmica que reproduzam a distribuição estacionária de um dado modelo em equilíbrio, é sempre possível determinar uma taxa de transição de tal forma que o sistema obedeça o balanço detalhado, isto é,

$$P_{eq}(c)w_{c\to c'} = P_{eq}(c^{'})w_{c'\to c} \tag{1.1}$$

em que c representa uma das configurações microscópicas acessíveis ao sistema (A, B ou C na figura 1.1), $P_{eq}(c)$ a probabilidade de ocorrência de uma dada configuração c e $w_{c\to c'}$ representa a taxa de transição da configuração c para

uma configuração c' (sendo $w_{c'\to c}$ a taxa no sentido oposto). A equação 1.1 mostra que o fluxo de probabilidade entre pares de configurações c e c' se anulam em sistemas no equilíbrio termodinâmico, como mostra a figura 1.1(a).



(a) Sistema coerente com o balanço detalhado

(b) Sistema fora do equilíbrio

Figura 1.1: A figura apresenta um sistema hipotético com três microestados A, B e C. Em 1.1(a) as transições ocorrem com iguais taxas em todas as direções, já em 1.1(b) as transições ocorrem apenas em um sentido, não havendo anulação entre as probabilidades de ocorrência de transições entre os microestados.

Existem ainda sistemas nos quais as probabilidades das configurações acessíveis não se anulam entre si. Por exemplo, o modelo de Glauber-Ising [2] que ainda não tenha alcançado o estado estacionário (figura 1.1(b)) viola o balanço detalhado e, consequentemente, encontra-se fora do equilíbrio.

A análise de sistemas fora do equilíbrio é muito importante, já que a maioria dos fenômenos da natureza ocorrem nesse estado. Existem ainda sistemas como processos estocásticos que violam o balanço detalhado tão fortemente que os conceitos de física estatística do equilíbrio já não podem mais ser aplicados, mesmo com aproximações (apesar de existirem tentativas para isso). Neste contexto, faz-se necessário um estudo mais aprofundado sobre as características das transições de fase que ocorrem fora do equilíbrio, sendo importante ressaltar alguns aspectos importantes como a distribuição de fenômenos por classes de universalidade, parâmetros de ordem, parâmetros de controle e expoentes críticos. Tais grandezas serão apresentadas de forma mais clara ao longo do texto.

Na busca de descrever melhor os fenômenos da natureza, a inserção de desordem na modelagem de tais fenômenos se mostra crucial e determinante. A desordem pode ser encontrada em forma de imperfeições e pode ser inserida nos modelos de estudo em forma de espaços inertes ou falhas na rede utili-

zada na modelagem da dinâmica do sistema sob análise. Estudos em cristais com alta concentração de defeitos são de vital interesse no meio científico e principalmente na ciência de materiais. Na modelagem pode-se verificar a influência de uma gama bastante abrangente de valores de concentração de impureza na rede, suprindo a deficiência da análise experimental sobre as imperfeições de vários sistemas físicos e químicos relacionada à dificuldade de implementação de dopagem com pequenas concentrações, auxiliando na determinação dos pontos onde ocorrem as transições de fase [3].

1.1 Organização do trabalho

O capítulo seguinte contém uma breve discussão sobre alguns conceitos relacionados aos sistemas em equilíbrio. Muitas teorias aplicadas à modelagem de sistemas fora do equilíbrio tiveram sua origem em análises feitas para sistemas em equilíbrio e a esse fato atribuímos a necessidade de se apresentar os assuntos abordados no próximo capítulo. Nele introduzimos o conceito de universalidade e expoentes críticos que foram amplamente utilizados no desenvolvimento do trabalho.

No capítulo 3 mostramos como os conceitos da física estatística de equilíbrio foram expandidos para aplicação em sistemas fora do equilíbrio. Através de um tratamento estocástico utilizando o processo de contato, mostramos como esse modelo pode ser utilizado na modelagem de diferentes tipos de sistemas, salientando alguns princípios relacionados à sistemas acometidos pela desordem e os métodos de simulação utilizados nesse contexto. Já no capítulo 4, apresentamos o processo de contato em sub-redes estudado por de Oliveira e Dickman [4], pesquisa que serviu de base para o trabalho aqui apresentado. Além disso, apresentamos duas extensões desse mesmo trabalho, que fornecem importantes conceitos relacionados à interação de indivíduos nas sub-redes através de modificações nas taxas de interação e a inserção da difusão na rede.

O Capítulo 5 apresenta os resultados encontrados considerando-se a inserção de desordem congelada nas sub-redes. Apresentamos uma análise feita considerando a desordem inserida de forma isotrópica e anisotrópica, construindo primeiramente a teoria de campo médio para o modelo e reiterando os resultados encontrados utilizando simulações de Monte Carlo. Por fim, o capítulo 6 resume as conclusões obtidas durante o desenvolvimento do trabalho e a perspectiva de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Transições de fase em sistemas no equilíbrio

2.1 Transições de fase

Transições de fase são fenômenos ocorrentes em vários tipos de sistemas, sejam eles físicos, biológicos, sociais ou econômicos. A transição de fase pode ser determinada a partir da detecção da mudança de um cenário macroscópico com a variação de algum parâmetro de controle. As transições de fases frequentemente envolvem algum tipo de parâmetro de ordem associado à quebra de simetria, sendo essa quebra de simetria descrita por um parâmetro de ordem que normalmente aumenta na mesma direção da fase ordenada e mede o grau de ordem à medida que a transição de fase prossegue. A compreensão de como essas transições de fase ocorrem é extremamente importante, já que além de fornecer informações acerca do comportamento dos sistemas frente a uma dada variação de grandezas macroscópicas, essas mesmas informações tem sido utilizadas no desenvolvimento de inúmeras tecnologias inovadoras [2].

2.1.1 Classificação das transições de fase

Basicamente, pode-se classificar uma transição de fase como contínua ou descontínua. As transições de fase contínuas no equilíbrio envolvem uma mudança contínua na entropia, o que significa que não existe calor latente. Exemplos desse tipo de transição são a transição líquido-gás à temperaturas acima da temperatura crítica, transição metal-supercondutor e muitas

outras transições em sistemas magnéticos. As transições descontínuas são caracterizadas por uma mudança descontínua na entropia em um valor fixo de temperatura. Essa descontinuidade na entropia corresponde ao calor latente que é dado por $L = T\delta S$, onde T é a temperatura na transição e δS a respectiva variação na entropia. Alguns exemplos são transições dos tipos líquido-gás e sólido-líquido.

A primeira classificação geral das transições de fase foi introduzida por Paul Ehrenfest em 1933. Essa classificação surgiu a partir de uma nova transição de fase no hélio líquido observada em 1932, a "transição lâmbda". Nessa transição, W.H. Keesom e outros pesquisadores observaram um salto de descontinuidade na curva de transição, determinando uma dependência da temperatura com o calor específico do hélio em um determinado ponto. Esse salto aparente levou Ehrenfest a introduzir uma classificação das transições de fase com base na derivada da função de energia livre de Gibbs (**G**):

1. transição de primeira ordem: As transições apresentam descontinuidades na primeira derivada de **G**:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V \tag{2.1}$$

2. transição de segunda ordem [1]: As transições apresentam descontinuidades na segunda derivada de **G**:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p = \frac{-c_p}{T}, \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T = -V\kappa_T, \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p}\right) = V\beta_p \tag{2.2}$$

Uma das mais conhecidas transições de fase em mecânica estatística de equilíbrio é a transição ordem-desordem no modelo de Ising em duas dimensões, na qual o tamanho típico dos domínios ordenados diverge à medida que a temperatura crítica T_c se aproxima. No equilíbrio térmico essa transição é caracterizada pelas propriedades de simetria do modelo em estudo e não depende dos detalhes das interações microscópicas. Essa independência microscópica permite que vários sistemas de naturezas diferentes, porém de aspectos

[1] O primeiro exemplo físico de transição de fase de segunda ordem parece ter sido descoberto por Cagniard de la Tour em 1822 que observava o fenômeno de opalescência crítica em uma mistura formada por água e álcool. Essa mistura se torna opaca perto do ponto crítico, que é quando os comprimentos de correlação espaciais se tornam comparáveis com o comprimento de onda da luz visível.

macroscópicos parecidos sejam caracterizados como sistemas pertencentes a uma determinada classe de universalidade [5]. A ideia de universalidade foi implantada inicialmente por pesquisadores experimentais que observaram que alguns sistemas físicos aparentemente não-correlacionados podem ser caracterizados pelo mesmo comportamento quando estão próximos da transição. A divisão em classes de universalidade também pode ser aplicada de maneira eficiente nos campos relacionados às transições de fase fora do equilíbrio. Contudo, a universalidade aplicada nesse contexto pode envolver o tempo como um grau de liberdade adicional às propriedades de simetria relacionadas a evolução da dinâmica do sistema, dificultando assim sua caracterização [6].

2.1.2 Universalidade e expoentes críticos

Com o crescimento das pesquisas experimentais e teóricas em torno das transições de fase e fenômenos críticos, viu-se o surgimento de novas teorias de forma mais expressiva a partir da década de 60 [7]. Na verdade, a primeira teoria relacionada às transições de fase e criticalidade surgiu na tese de doutorado de van der Waals publicada em 1873. Apesar da ciência ter se desenvolvido muito depois dessa época, a teoria fundamentada por van der Waals continua importante para análise do comportamento crítico de sistemas fluidos. A partir da análise de um diagrama de fases para um fluido simples, van der Waals percebeu que com o aumento da temperatura, a diferença ψ entre o volume específico da fase líquida v_L e o volume específico da fase gasosa v_G na coexistência também diminuía até se anular em um ponto específico denominado ponto crítico. Além disso, ele percebeu que acima da temperatura crítica a pressão varia de forma bem comportada com o volume específico. Considerando esses pontos, pode-se caracterizar o comportamento assintótico do parâmetro ψ quando $T \to T_c$ como:

$$\psi = v_L - v_G \sim B \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\beta} \tag{2.3}$$

onde o fator B e a temperatura T_c não tem caráter universal, porém, observou-se experimentalmente que o expoente β vale aproximadamente $1/3$ para qualquer fluído ou até mesmo outros sistemas físicos que possuam grandezas análogas.

Outro fundamento importante foi o estudo do ferromagneto uniaxial simples e a determinação da equação de Curie-Weiss. A figura 2.1 apresenta a variação da magnetização espontânea (m) em função da temperatura (T) .

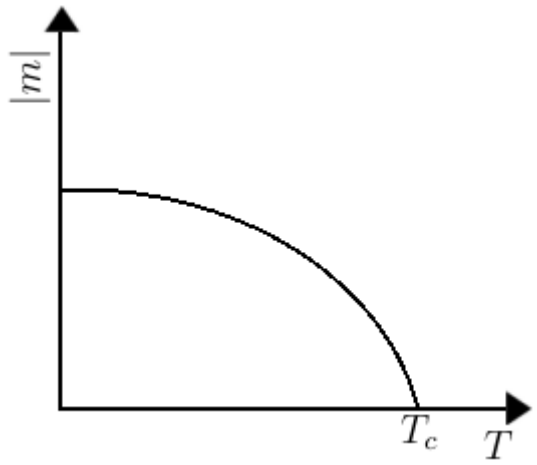


Figura 2.1: Magnetização espontânea para o ferromagneto uniaxial de Curie-Weiss.

Fazendo uma análise ao longo da curva ($H = 0, T < T_c$), podemos determinar o comportamento da magnetização espontânea $\psi = |m|$. Nesse caso, ψ está associado à quebra espontânea de simetria do sistema na vizinhança do ponto crítico. Grandezas desse tipo são denominadas parâmetros de ordem, enquanto o parâmetro variável, nesse caso a temperatura, é denominado parâmetro de controle.

A noção de parâmetro de ordem foi introduzida por Landau na década de 30 quando ele criou uma teoria aplicada às transições de fases contínuas. A teoria de Landau [8] é baseada na expansão da energia livre do sistema em potências do parâmetro de ordem η específico de cada sistema [9]. Considerando a vizinhança do ponto crítico, a energia livre de Gibbs pode ser expandida em potências de η, por exemplo:

$$G = G_0 + \alpha\eta + a\eta^2 + c\eta^3 + b\eta^4 + ... \tag{2.4}$$

A expansão foi feita até a quarta ordem devido ao baixo valor de η e α, a, c e b são funções de pressão (P) e temperatura (T). η é obtido a partir da minimização de G, sendo assim:

$$\frac{\partial G}{\partial \eta} = \alpha + 2a\eta + 3c\eta^2 + 4b\eta^3 = 0 \tag{2.5}$$

$$\alpha + \eta(+2a + 3c\eta + 4b\eta^2) = 0 \tag{2.6}$$

Da equação 2.6 temos as seguintes soluções possíveis:

$$\begin{aligned} \alpha = 0 \quad e \quad \eta = 0 \\ \alpha = 0 \quad e \quad \eta \neq 0 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Para garantir a minimização, a derivada segunda de G deve ser sempre positiva. Logo:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \eta^2} = 2a + 6c\eta + 12b\eta^2 > 0 \tag{2.8}$$

Para $\eta = 0$, que corresponde a $T > T_c$, devido a definição do parâmetro de ordem, a equação 2.8 mostra que a derivada segunda é positiva se a for positivo. Já para $\eta \neq 0$ ($T < T_c$), a segunda derivada de G desprezando-se o termo de ordem 2 fornece a seguinte relação

$$\eta = \frac{-2a}{3c} \tag{2.9}$$

Substituindo a equação 2.9 na equação 2.8 sem a constante b, têm-se:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \eta^2} = -4a \tag{2.10}$$

Assim, para que a equação 2.10 seja positiva, a obrigatoriamente deve ser negativa. Já que a é positiva para temperaturas maiores que T_c e negativa abaixo dessa temperatura, conclui-se que a se anula no ponto crítico. Assumindo que a não possui singularidades no ponto crítico [9], Landau propôs a seguinte expressão:

$$a = a_0(T - T_c) \tag{2.11}$$

onde

$$\begin{aligned} a > 0 \quad para \quad T > T_c \\ a = 0 \quad para \quad T < T_c \\ a < 0 \quad para \quad T < T_c \end{aligned} \tag{2.12}$$

Feitas essas considerações e lembrando que $\alpha = 0$ e que $a = 0$ no ponto crítico, a equação da energia livre de Gibbs e da sua segunda derivada na criticalidade tomam as formas

$$G_c = G_0 + c_c\eta^3 + b_c\eta^4 \tag{2.13}$$

e

$$\frac{\partial^2 G_c}{\partial \eta^2} = 6c_c\eta + 12b_c\eta^2 \tag{2.14}$$

Considerando $c = 0$[1], (caso que apresenta uma linha de pontos críticos) [8], a energia livre de Gibbs pode ser reescrita na forma da equação 2.15 e a figura 2.2 apresenta sua representação gráfica para os casos indicados na equação 2.12.

$$G = G_0 + a_0(T - T_c)\eta^2 + b\eta^4 \tag{2.15}$$

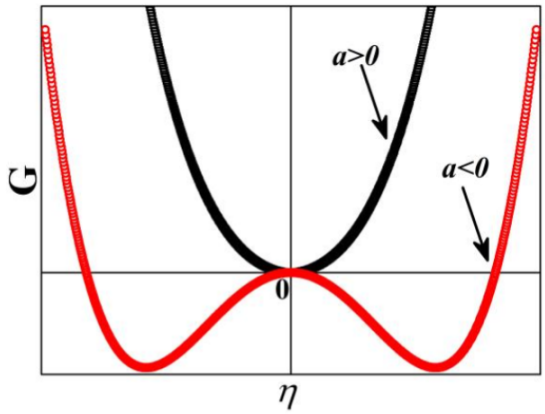


Figura 2.2: Energia livre de Gibbs em função do parâmetro de ordem η para os valores de a da equação 2.12. Figura retirada da ref. [9].

Minimizando a energia livre de Gibbs, obtêm-se:

$$\eta^2 = -\frac{a_0(T - T - c)}{2b} = \frac{|a|}{2b} \tag{2.16}$$

Desprezando as potências mais altas de η, a entropia do sistema pode ser definida como:

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T} = S_0 - a_0\eta^2 \tag{2.17}$$

[1]Para o caso em que $c < 0$, as transições são classificadas como transições de primeira ordem e, dessa forma, a descontinuidade aparece na entropia.

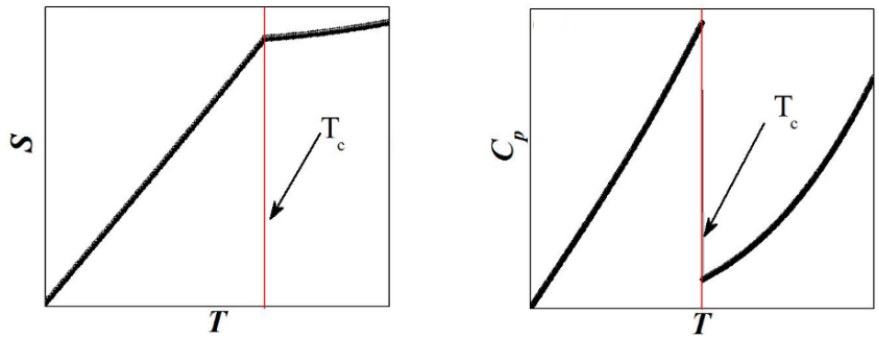
Lembrando que para $T > T_c$ $\eta = 0$ pela própria definição do parâmetro de ordem [8], têm-se:

$$\begin{aligned} S &= S_0(T), & para \quad T > T_c \\ S &= S_0 + \left(\frac{a_0^2}{2b}\right)(T - T_c) & para \quad T < T_c \end{aligned} \tag{2.18}$$

Para $T = T_c$ e $S = S_0$, a entropia permanece contínua mesmo nesse ponto. O calor específico é definido como visto na equação 2.1 e a partir da equação 2.18 temos:

$$\begin{aligned} C_P = C_{P0} &= T\left(\frac{\partial S_0}{\partial T}\right)_P & para \quad T > T_c \\ C_P &= C_{P0} + T\left(\frac{a_0^2}{2b}\right) & para \quad T < T_c \end{aligned} \tag{2.19}$$

A figura 2.3 mostra o aspécto da variação da entropia (2.3(a)) e do calor específico (2.3(b)) em função da variação da temperatura. A continuidade da entropia e a descontinuidade do calor específico permitem caracterizar essa transição de fase como sendo uma transição de fase de segunda ordem, já que a descontinuidade aparece na segunda derivada da energia livre de Gibbs.



(a) (b)

Figura 2.3: Continuidade da entropia e descontinuidade do calor específico na transição de fase. A descontinuidade na segunda derivada da energia livre de Gibbs é típica das transições de segunda ordem. Figura retirada da ref. [9].

2.1.3 Transições descontínuas ou de primeira ordem

2.2 O modelo de Ising

No equilíbrio, as transições de fase de segunda ordem são consequência das correlações de longo alcance criadas entre os componentes do sistema, mesmo que as interações microscópicas do sistema original sejam de curto-alcance [1]. O modelo de Ising é provavelmente o modelo de transição de fase de segunda ordem no equilíbrio mais conhecido e melhor descrito. Apesar de ser um modelo ferromagnético, esse modelo possui caráter universal, sendo capaz de captar os aspectos principais do comportamento dos sistemas na criticalidade. O modelo pode ser representado por um conjunto de variáveis spins que possuem a mesma direção, porém podem assumir o mesmo sentido ou sentidos opostos, como mostra a figura 2.4.

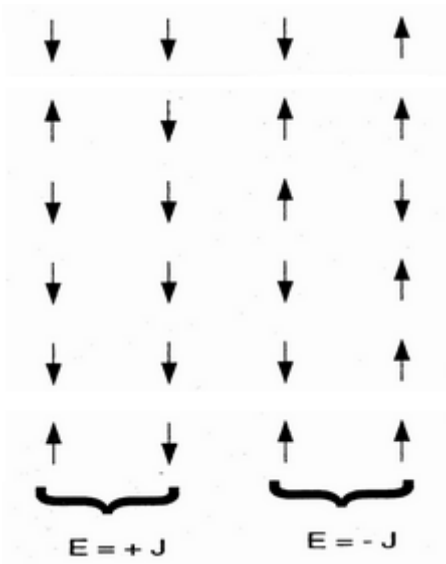


Figura 2.4: Representação pictórica do modelo de Ising. Figura retirada da ref. [10].

O modelo de Ising tem grande importância na construção da teoria microscópica de transição ferromagnética por incorporar interações de curto-alcance numa rede d-dimensional. O modelo é definido pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \tag{2.20}$$

sendo σ_i uma varável que pode assumir os valores ± 1 nos sítios $i = 1, 2, 3..., N$ de uma rede d-dimensional. O primeiro termo realiza a soma entre os vizinhos mais próximos na rede, representando a energia de interação que deve ser capaz de produzir um estado ferromagneticamente acoplado ($J > 0$). O segundo termo apresenta a interação entre o sistema de spins e um campo magnético externo aplicado.

As variáveis de spins podem ser interpretadas de diversas formas [7]:

1. como spins de átomos que apontam para cima e para baixo;
2. liga binária com sítios ocupados por átomos de dois tipos diferentes ($i = j, E = -J, i \neq j, E = +J$);
3. número de ocupação, assinalando a presença ou ausência de partículas na rede;

Resolver o modelo de Ising implica na definição da função partição canônica Z_N, sendo

$$Z_N = Z(T, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) \tag{2.21}$$

onde $\beta = 1/k_B T$, a soma é realizada sobre todas as configurações possíveis das variáveis de spins e o hamiltoniano $\mathcal{H}$ é dado pela equação 2.20. Também é necessário encontrar uma expressão de forneça a energia livre de Gibbs magnética por sítio (g):

$$g = g(T, H) = \lim_{N \to \infty} \left[\frac{-1}{\beta N} \ln Z_N \right] \tag{2.22}$$

Para uma rede unidimensional, a energia livre de Gibbs é obtida sem muita dificuldade e sua expressão (equação 2.23) é perfeitamente analítica (exceto para $T = H = 0$), não produzindo nenhuma magnetização espontânea.

$$g(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta H) + \left[e^{2\beta J} \cosh^2(\beta H) - 2 \sinh(2\beta J) \right]^{1/2} \right] \tag{2.23}$$

Através da expressão da enegia livre de Gibbs é possível determinar todas as propriedades termodinâmicas do sistema [7]. A magnetização por spin m é dada por

$$m(T,H) = \left(-\frac{\partial g}{\partial H}\right)_T = \frac{\sinh(\beta H)}{\left[\sinh^2(\beta H + \exp(-4\beta J))\right]^{1/2}} \tag{2.24}$$

que se anula quando não há aplicação de campo magnético externo ($H = 0$), mostrando que o modelo não se aplica ao ferromagnetismo e essa solução indica a ausência de qualquer tipo de transição, o que deixou Ising bastante frustrado [1].

Ao longo da história, várias técnicas foram desenvolvidas na busca de resoluções para os modelos de Ising em duas e três dimensões. Essas técnicas são utilizadas para resolver problemas relacionados aos sistemas mais complexos e fornecem bons resultados qualitativos de diagramas de fases. Porém, no limite termodinâmico a não-analiticidade da energia de Gibbs torna discutível qualquer truncamento realizado nessas técnicas.

Em 1944, Onsager [41] produziu uma solução não-analítica para o modelo de Ising numa rede quadrada com interações de primeiros vizinhos sem a presença de um campo externo. Para $T \to T_c$, o calor específico diverge de acordo com a equação 2.25, com uma temperatura crítica T_c bem definida e dada por $\kappa_B T_c/J = 2/\ln(1+\sqrt{2})$.

$$c_{H=0} \sim \ln|T - T_c| \sim |T - T_c|^{-\alpha} \tag{2.25}$$

Portanto, a energia livre de Gibbs não é analítica e não pode ser colocada na forma de uma expansão de Landau. Em 1950, C. N. Yang [42] verificou um resultado de Onsager para a magnetização espontânea da rede quadrada, obtendo o expoente crítico $\beta = 1/8$. Atualmente, embora ainda não haja solução exata para $H \neq 0$, pode-se afirmar seguramente que o expoente γ (relacionado à susceptibilidade $\chi(T,0) \sim |\tau|^{-\gamma}$) vale $7/4$. Todas as redes planas com interações de curto alcance possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos ($\alpha = 0, \beta = 1/8, \gamma = 7/4$).

[1] Com base no resultado obtido na análise unidimensional em 1924, Ising concluiu erroneamente que seu modelo não apresentaria a transição de fase entre as fases ferromagnética e paramagnética para nenhuma outra dimensão. Em 1943 Lars Onsager mostrou que o modelo de Ising bidimensional apresentava a transição de fase ferromagnética. Somente em 1949, 25 anos após o término de sua tese é que Ernest Ising tomou conhecimento da importância de seu modelo para a literatura científica.

A figura 2.5 apresenta a captura de imagens de forma a ilustrar a transição ferromagnética do modelo de Ising. O primeiro quadro mostra a configuração típica da rede para $T < T_c$, representando a fase ordenada que gera a magnetização espontânea. Para $T = T_c$, podemos observar a formação de aglomerados formados por spins de mesma orientação. O terceiro quadro ($T > T_c$) representa a fase paramagnética, onde os spins possuem orientações desordenadas e a magnetização espontânea global se anula.

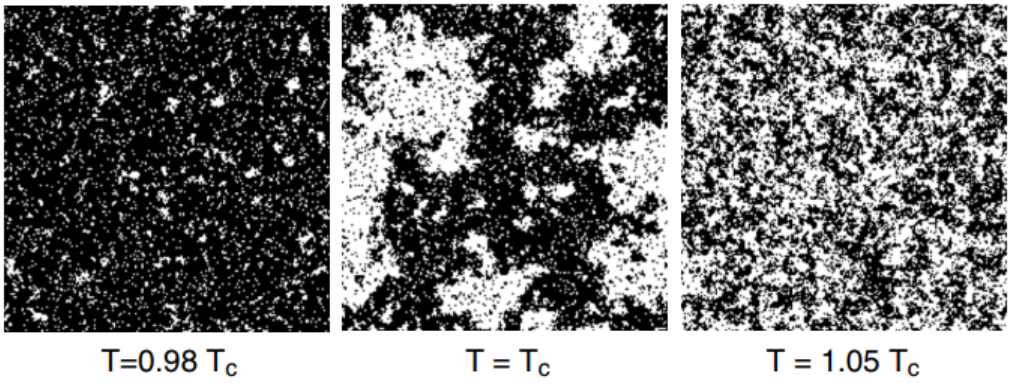


Figura 2.5: Configurações típicas do modelo de Ising bidimensional em equilíbrio térmico para os estados subcrítico, crítico e supercrítico. Figura retirada da referência [1].

Em três dimensões, a solução exata para o modelo de Ising ainda permanece como um problema em aberto. No entanto, desde a década de 60 vem surgindo excelentes expansões em séries de altas temperaturas de várias grandezas termodinâmicas que fornecem com segurança um conjunto de expoentes críticos dentro da faixa experimental para sistemas físicos em três dimensões. Esses expoentes e os outros expoentes críticos têm seus valores apresentados na tabela 2.1.

	Landau	Ising(d=2)	Ising(d=3)	Experiências
β	1/2	1/8	5/16	0,3 - 0,35
γ	1	7/4	5/4	1,2 - 1,4
δ	3	15	5	4,2 - 4,8
α	0	0(log)	1/8	0

Tabela 2.1: Tabela de expoentes críticos de maiores significados termodinâmicos [7].

Capítulo 3

Transições de fase para estados absorventes

3.1 O Processo de Contato (PC)

O processo de contato é um modelo estocástico utilizado para estudar e prover resultados que caracterizem sistemas de interação entre indivíduos em uma rede d-dimendional, sendo possivelmente o modelo mais simples de apenas um estado absorvente [11]. Define-se como estado absorvente o estado no qual o sistema atinge um estado irreversível, ou seja, a transição ocorre de um estado ativo para o estado inativo (absorvente) e não pode mais sair dele. Um exemplo seria a extinção de um vírus após uma epidemia.

Para explicar o modelo PC usa-se aqui a aplicação do mesmo na modelagem de espalhamento de epidemias, como introduzido pioneiramente por Harris [12]. Cada sítio i de uma rede pode conter um indivíduo infectado ($\sigma_i = 1$) ou sadio ($\sigma_i = 0$). Com uma taxa unitária, os indivíduos infectados podem se tornar sadios ($\sigma_i = 1 \rightarrow \sigma_i = 0$) sem depender das condições de seus vizinhos. Indivíduos sadios são infectados ($\sigma_i = 0 \rightarrow \sigma_i = 1$) com uma taxa $n\lambda/2d$, em que n representa o número de vizinhos infectados e d representa a dimensão do sistema. Para distinguir as fases ativa e inativa e analisar o comportamento desse sistema, um parâmetro de ordem ρ é introduzido para representar a densidade de indivíduos infectados na rede. Esse parâmetro de ordem se anula no estado absorvente, caracterizado pela ausência de indivíduos infectados. A medida que a taxa λ aumenta além de um determinado valor crítico λ_c, o sistema sofre uma transição de fase do estado absorvente para o estado estacionário ativo.

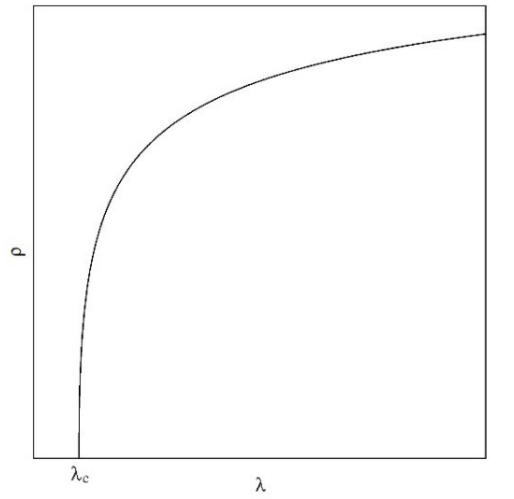


Figura 3.1: Parâmetro de ordem ρ indicando os limites entre o estado absorvente e o regime ativo, onde ocorre o início da epidemia ($\lambda = \lambda_c$). Figura retirada da ref. [13].

Nas proximidades do ponto crítico o parâmetro de ordem ρ decai rapidamente segundo uma lei de potências dada por

$$\overline{\rho} \sim (\lambda - \lambda_c)^{\beta}, \tag{3.1}$$

onde β é o expoente crítico associado ao parâmetro ρ e $\overline{\rho}$ corresponde ao parâmetro de ordem no limite termodinâmico ($t \to \infty$) . Modelos que possuem uma transição contínua para um único estado absorvente normalmente pertencem a classe de universalidade de percolação dirigida (DP, do inglês *directed percolation*- vide seção 3.5), como é o caso do próprio processo de contato [14, 15, 16, 17].

3.2 Teoria de campo médio para o processo de contato

A teoria de campo médio (TCM) provê aproximações bastante simplificadas que são capazes de fornecer informações utilizadas na compreensão do comportamento geral do modelo em estudo. Através de aproximações matemáticas, definem-se equações que fornecem uma estimativa das características

gerais do modelo. O principal problema da utilização dessa técnica está no fato de que a teoria de campo médio considera que os sítios da rede são descorrelacionados (o estado de um sítio não interfere no estado dos outros sítios), o que não é verdade, já que os estados dos sítios são altamente correlacionados. Por essa razão, em geral, essa teoria fornece resultados pobres no ponto de vista quantitativo, porém, são de boa aplicabilidade no ponto de vista qualitativo, servindo de guia para outras investigações [1].

Considerando o processo de contato unidimensional (seção anterior), a probabilidade de que um indivíduo escolhido ao acaso num instante t esteja ativo vale ρ. Complementarmente, a probabilidade de seleção de um sítio inativo vale $1-\rho$. A tabela 3.2 apresenta as taxas de transição para cada evento do processo de contato unidimensional.

processo	taxa (W_i)	ΔN_i
$\bullet\circ\bullet \rightarrow \bullet\bullet\bullet$	$\lambda\rho^2(1-\rho)$	$+1$
$\bullet\circ\circ \rightarrow \bullet\bullet\circ$	$\frac{\lambda}{2}\rho(1-\rho)^2$	$+1$
$\circ\circ\bullet \rightarrow \circ\bullet\bullet$	$\frac{\lambda}{2}\rho(1-\rho)^2$	$+1$
$\bullet \rightarrow \circ$	ρ	-1

Tabela 3.1: Taxas de transição para o processo de contato unidimensional. Tabela adaptada da referência [13].

A equação de evolução do parâmetro de ordem em relação ao tempo é formada pelo somatório do produto da taxa de transição pelo respectivo número de partículas criadas ΔN em cada um dos 4 casos possíveis:

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_i \Delta N_i W_i = (\lambda\rho^2(1-\rho))(1)+(\frac{\lambda}{2}\rho(1-\rho)^2)(1)+(\frac{\lambda}{2}\rho(1-\rho)^2)(1)+(\rho)(-1) \tag{3.2}$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho(\lambda-1) - \lambda\rho^2 \tag{3.3}$$

Considerando o estado estacionário:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \tag{3.4}$$

Assim, igualamos a equação 3.2 e obtemos após um tempo longo as soluções:

$$\begin{cases} \rho = 0, \quad se \quad \lambda < \lambda_c \\ \rho = \dfrac{\lambda - 1}{\lambda}, \quad se \quad \lambda > \lambda_c \end{cases} \tag{3.5}$$

definindo $\mu \equiv \lambda - 1$ e ρ_0 como sendo a densidade inicial da população. No ponto crítico $\mu = 0$ e a densidade populacional decai algebricamente:

$$\rho(t) = \frac{\rho_0}{1 + \rho_0 t} \tag{3.6}$$

Já nas proximidades do ponto crítico, o parâmetro de ordem geralmente segue a lei de potência

$$\rho \propto (\lambda - \lambda_c)^{\beta} \tag{3.7}$$

Através da equação 3.5, é possível verificar graficamente a variação da densidade ρ construindo a curva de ρ versus λ. O resultado para o caso mostrado aqui está representado na figura 3.1.

3.3 Simulações de Monte Carlo

Transições de fase fora do equilíbrio são frequentemente estudadas utilizando os métodos de Monte Carlo, já que os modelos podem ser considerados processos estocásticos com dependência temporal e esses podem ser simulados com relativa facilidade [1] utilizando tais métodos.

As simulações numéricas têm como objetivo principal a determinação de valores precisos para pontos críticos, expoentes críticos e funções de escala. Essas simulações são realizadas utilizando duas principais técnicas distintas: em uma, os estados iniciais são homogêneos e na segunda as simulações são inicializadas com uma única semente ativa.

3.3.1 Estados Iniciais Homogêneos

A primeira tarefa é encontrar o ponto crítico do sistema. Utilizando um sistema relativamente grande, tipicamente maior que $T^{\frac{1}{z}}$, onde T é o tempo total da simulação e $z = \nu_{||}/\nu_{\perp}$ é o expoente crítico dinâmico esperado, os resultados são protegidos dos efeitos presentes em sistemas de tamanhos finitos. As primeiras simulações geralmente partem de um sistema representado por uma rede completamente ocupada, onde a evolução da densidade de sítios ativos é medida em relação ao tempo. A utilização de um sistema de grandes

dimensões diminui a ocorrência de erros estatísticos, porém, se utilizados sistemas de tamanhos finitos, a densidade deve ser medida reiteradas vezes e a média após N interações deve ser tomada para evitar o mesmo tipo de erro.

O expoente $\alpha = \beta/\nu_{||}$ é determinado pela medida da inclinação da reta que apresenta a variação da densidade em função do tempo em escala logarítmica. Em seguida, o expoente $\nu_{||}$ é determinado pela análise de diversos conjuntos de dados medidos nas vizinhanças do ponto crítico, gerando o gráfico $\rho(t)t^{\alpha}$ versus $t(p-p_c)^{\nu_{||}}$ sendo p e p_c o parâmetro de controle e o valor crítico desse parâmetro considerando esse um processo relacionado a DP[1].

O terceiro expoente é determinado pela análise por escala de tamanhos finitos. Para tanto, é aconselhável que a dimensão linear do sistema seja incrementada em potências de 2 ($L = 2, 4, 8, 16, 32...$) e o decaimento da densidade $\rho(t)$ deve ser quantificado. Construindo a curva de $\rho(t)t^{\alpha}$ versus t/L^z o expoente dinâmico z deve ser ajustado de tal forma que todas as colapsem. Em sistemas finitos podem aparecer curvas que não cruzem com as outras, nesses casos os dados devem ser descartados [1].

3.3.2 Simulações por sementes

A técnica de geração de sementes para formação de aglomerados de indivíduos ou sítios ativos foi introduzida por Grassberger e de la Torre [18]. Na fase ativa existe uma probabilidade finita de se formar um aglomerado de dimensões infinitas na rede. Para caracterizar o crescimento desses aglomerados, costuma-se calcular a probabilidade de sobrevivência $P_{sob}(t)$ medida considerando-se a média de vários aglomerados, o número de sítios ativos $N_a(t)$ medido no tempo t considerando a média tomada em todos os aglomerados e o quadrado médio do espalhamento $R_s^2(t)$ também medido considerando a média de todos os aglomerados da rede. No ponto crítico, essas quantidades variam conforme as seguintes leis de potência:

$$P_{sob}(t) \sim t^{-\delta} \tag{3.8}$$

$$N_a(t) \sim t^{\Theta} \tag{3.9}$$

[1] p e p_c representam uma generalização relacionada a qualquer parâmetro de controle utilizado em sistemas que pertençam a classe DP (vide seção 3.5). Eles podem, por exemplo, representar a temperatura quando essa é utilizada para verificar o comportamento do parâmetro de ordem em relação a sua variação, como mostrado na seção 2.1.

$$R_s^2 \sim t^{\frac{2}{z}} \tag{3.10}$$

Sendo δ o expoente relacionado à variação do número médio de sítios ativos na rede e z um expoente dinâmico dado por $z = \nu_{||}/\nu_{\perp}$.

O processo é primeiramente simulado na criticalidade. Essas simulações permitem estimar os dois expoentes independentes ($\delta = \beta'/\nu_{||}$ e $z = \nu_{||}/\nu_{\perp}$) e Θ é obtido pela relação de hiperescala [1].

$$\Theta = d/z - \alpha - \delta \tag{3.11}$$

sendo d a dimensão do sistema.

O terceiro expoente $\nu_{||}$ pode ser determinado pelas simulações fora da criticalidade, plotando $N_a(t)t^{-\Theta}$ versus $t(p - p_c)^{\nu_{||}}$ e ajustando $\nu_{||}$ para que a curva colapse.

3.4 Efeitos da desordem

Os estudos realizados acerca de um sistema com desordem devem ter o objetivo de responder as seguintes questões:

1. A transição de fase continuará a mesma em relação ao sistema sem desordem?

2. Se a transição de fase permanece contínua, o sistema desordenado apresentará o mesmo comportamento crítico do sistema puro ou apresentará mudança de classe de universalidade?

3. Somente a transição de fase será influenciada ou a desordem provocará alguma alteração significativa em sua vizinhança?

A partir dessas considerações, faz-se válido lançar mão de alguns conceitos necessários para que essas questões sejam respondidas, como o critério de Harris e fases de Griffths, que são inerentes a quaisquer sistemas com desordem [19]. O critério de Harris consiste em uma relação que fornece o grau de relevância da desordem em um sistema. Além disso, a literatura mostra que o processo de contato com desordem apresenta mudança de classe de universalidade, deixando de pertencer a classe de universalidade DP para a classe de universalidade de Ising transverso [19]. Assim, espera-se que outros sistemas com as mesmas simetrias também apresentem tal variação. As linhas subsequentes apresentam uma breve abordagem desses conceitos.

3.4.1 Critério de Harris

Um importante trabalho feito por Harris [12] aplicado inicialmente no modelo de spins resultou em uma relação capaz de mostrar a relevância da desordem no sistema, o chamado critério de Harris. Tal relação é dada por

$$d\nu < 2 \tag{3.12}$$

onde d é a dimensão do sistema e ν o expoente de comprimento de correlação. Segundo esse critério, se a condição 3.12 for obedecida, a desordem possui relevância considerável no sistema, podendo causar inclusive a alteração de classe de universalidade do sistema. Nos sistemas fora do equilíbrio, o tempo entra como um grau de liberdade adicional [2] e, dessa forma, o critério de Harris para esse contexto é semelhante ao utilizado nos estudos dos sistemas no equilíbrio, porém ν tem variação temporal e por isso utiliza-se $\nu = \nu_\perp$.

Para justificar tal expressão, é necessário analisar a importância da aleatoriedade das ligações δJ nas proximidades do ponto crítico. Essa análise é feita considerando-se as médias das flutuações calculadas sobre o volume de correlação $\xi(t)^d$. Considerando que as médias das interações J_{ij} entre sítios i e j dentro do volume de correlação são não-correlacionadas perto do ponto crítico e decaem com o quadrado desse volume de correlação: [20]

$$J_{ij} \sim \frac{1}{\xi(t)^{d/2}} \sim |T - T_c|^{\nu_\perp d/2}, \tag{3.13}$$

Desde que as ligações J_{ij} interfiram no valor de T_c, definimos $|t|$ como a distância entre os pontos T e T_c. Considerando T_c^{ij} como o ponto crítico relacionado à interação média J_{ij}, podemos definir a seguinte condição

$$T_c^{ij} \gg |T - \overline{T_c}| \leftrightarrow |T/\overline{T_c} - 1|^{\nu_\perp d/2} \gg |T/\overline{T_c} - 1| \tag{3.14}$$

$$|t|^{\nu_\perp d/2 - 1} \gg 1, t \to 0 \tag{3.15}$$

Ou seja, para que o comportamento crítico permaneça estável (ou seja, a desordem não provoca alterações relevantes),

$$\nu_\perp d > 2 \tag{3.16}$$

Note que, por considerar a média $\overline{T_c}$ o critério de Harris deve ser aplicado em sistemas de grandes dimensões. Efeitos provocados em sistemas de pequenas escalas e, consequentemente, com taxa de desordem finita, não são cobertos pelo critério.

O critério de Harris pode ser utilizado para classificação de pontos críticos em relação à intensidade de desordem e a variação do comprimento de correlação. A classificação se dá em três classes [21]: A primeira classe contém os pontos críticos que cumprem o critério de Harris. Nessas transições, a intensidade da desordem decresce e o sistema se torna homogêneo para grandes escalas. Consequentemente, o comportamento crítico do sistema desordenado é idêntico ao comportamento crítico do sistema originalmente puro. Na segunda classe, encontram-se os sistemas que mantêm o caráter não-homogêneo para qualquer escala com uma intensidade de desordem se aproximando de um valor finito para sistemas de grande escala. O parâmetro de ordem possui decaimento segundo lei de potências nas proximidades do ponto crítico, porém o sistema apresenta expoentes críticos diferentes dos expoentes do sistema original e, dessa forma, o sistema desordenado se enquadra em uma classe de universalidade diferente. Nos pontos críticos da terceira classe, a intensidade da desordem aumenta de forma ilimitada. Nesses pontos críticos denominados pontos críticos de desordem infinita, a variação do parâmetro de ordem com uma lei de potências é substituída por uma variação exponencial. Ao contrário da segunda classe que em uma análise macroscópica a largura da distribuição de probabilidades se anula no limite termodinâmico, os pontos críticos da terceira classe apresentam uma distribuição de probabilidades que diverge no limite termodinâmico.

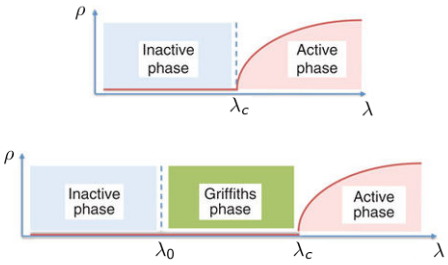
Essa classificação foi construída observando-se o valor médio de intensidade de desordem do sistema. A partir de uma análise local, vê-se que o comportamento em determinadas regiões pode variar, gerando regiões com alta intensidade de desordem e outras regiões com baixa intensidade de sítios excluídos, ocasionando o aparecimento das chamadas fases de Griffiths [22].

3.4.2 Fases de Griffiths

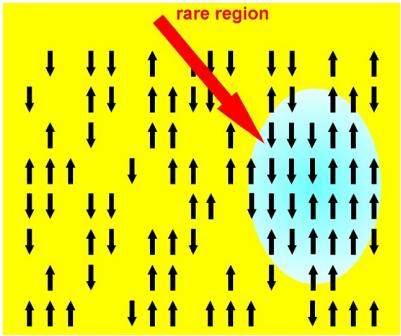
A desordem se apresenta nos sistemas como imperfeições, espaços vazios ou sítios inertes. Como se pode presumir, a desordem aparece distribuída de forma aleatória na rede que compõe os sistemas em análise. Por essa razão, a rede pode apresentar regiões contendo uma densidade maior de espaços vazios e também pode apresentar micro-regiões em que a desordem não alterou seu aspecto de forma relevante, são as chamadas regiões raras 3.2(b). Essa diferença de densidades locais altera a relação de variação do parâmetro de ordem em relação ao tempo, consequentemente, altera também o comportamento deste em relação ao parâmetro de controle, induzindo o aparecimento

das fases de Griffiths [22].

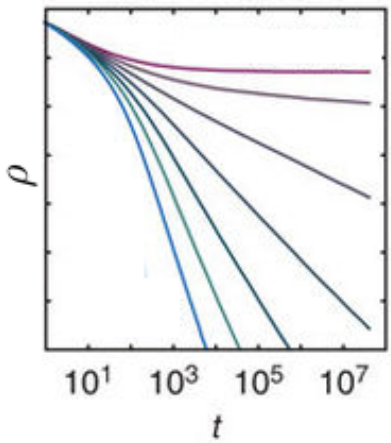
As fases de Griffiths representam uma região bem definida localizada entre as fases inativa e ativa de um diagrama de transição de fases. Ou seja, ela está compreendida em um região delimitada pelos valores críticos λ_0 e λ_c do parâmetro de controle, em que λ_0 indica a transição de fase entre a fases inativa e a região de Grifitths e λ_c indica o início da fase ativa propriamente dita 3.2(a). Tipicamente, um sistema sem desordem apresenta uma transição direta do estado absorvente (inativo) para a fase ativa.



(a) fases de Griffths.



(b) Regiões raras.



(c) Decaimento de ρ em função do tempo.

Figura 3.2: (a) Região de abrangência das fases de Griffths considerando a variação de λ; (b) Regiões raras; (c) Decaimento de ρ em função do tempo. Figura retirada da ref. [22].

A desordem aleatória diminui a capacidade de suporte da rede de forma heterogênea. Assim, as regiões mais penalizadas por este fenômeno tendem a ter uma taxa de ocupação muito menor do que a taxa de ocupação nas regiões raras. Assim, o sistema, de uma forma global, ainda se encontra em estado subcrítico, porém nas regiões raras o sistema se encontra no estado crítico. Em um sistema limpo (sem desordem) o decaimento do parâmetro de ordem segue a lei de potências $\rho(t) \sim t^{-\delta}$ nas proximidades do ponto crítico. No entanto, com a inserção de desordem, é possível perceber que esse tipo de decaimento é observado para uma gama muito maior de valores de λ, formando assim uma região de decaimento por lei de potências 3.2(c).

3.4.3 Classe de Universalidade de Ising Transverso com campo aleatório

A Classe de Universalidade Ising transverso é a classe que possui como um de seus principais modelos o processo de contato desordenado em rede bi-dmensional [19]. Apresenta-se aqui uma breve discussão em torno do modelo de Ising transverso (TIM do inglês, *Transverse Ising Model*) com campo aleatório e uma tabela (3.4.3) com os respectivos expoentes críticos que caracterizam tal classe.

O modelo TIM é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -\sum_i \Gamma_i \sigma_i^x - \sum_{<ij>} J_{ij} \sigma_i^Z \sigma_j^Z \tag{3.17}$$

em que o campo Γ_i e o acoplamento entre os primeiros vizinhos são variáveis aleatórias, os σ's representam as m matrizes de Pauli e os somatórios são realizados sobre os sítios de uma rede d-dimensional. Quando o campo não tem aleatoriedade ($\Gamma_i = \Gamma, J_{ij} = J$), o comportamento crítico modelado pelo Hamiltoniano 3.17 em temperaturas finitas é descrito pelos mesmos expoentes críticos do modelo de Ising d-dimensional, mas para $T = 0$ ocorre uma transição de fase no valor crítico de Γ/J com os mesmos expoentes do modelo de Ising em $(d+1)$- dimensões como analisado por Pfeuty e Elliot em 1971 [23]. Para o caso unidimensional existe uma transição no estado fundamental em que $g_c \equiv (\Gamma/J)_c = 1$ (Katsura [24] 1962, Pfeuty [25] 1970), sendo g_c a curva crítica do modelo. Em 1974 Harris [12] sugeriu a presença de um salto de descontinuidade na curva crítica $g_c(p)$, sendo p a concentração não-nula de constantes de acoplamento j. Considerando a temperatura zero, o salto de descontinuidade ocorre em $p = p_c$, em que p_c é o limiar de percolação:

abaixo de p_c não existe ordenamento de longo alcance na rede e $g_c(p_c) = 0$. Para o valor de p imediatamente maior que p_c, $g_c(p_c) = 1$, gerando o salto de descontinuidade (figura 3.4).

Em 1979, Pfeuty [26] determinou de forma exata as condições críticas de TIM na temperatura nula, mas ele se deparou com dificuldades relacionadas ao tratamento quântico feito pela teoria de grupo de renormalização e, dessa forma, os resultados para o modelo em uma dimensão foram obtidos para apenas alguns casos de aleatoriedade. As relações de recorrência são construídas aplicando-se o operador projeção no estado fundamental (3.19) enquanto todos os outros spins da rede são somados.

Considerando que o sistema original e o sistema após a transformação feita pela renormalização sejam representados pelas constantes de acoplamento j e j' respectivamente, essa transformação pode ser descrita por

$$\tilde{j}' = \tilde{j}'(j') \tag{3.18}$$

e é definida como a aplicação do operador projeção P de tal forma que

$$\langle m_1 m_3 | P'(\tilde{j}') | m_1 m_3 \rangle = \sum_{m_2 m_4} \langle m_1 m_2 m_3 m_4 | P(j) | m_1 m_2 m_3 m_4 \rangle \tag{3.19}$$

onde P e P' são os operadores projeção do estado fundamental para os clusters apresentados nas figuras 3.3(a) e 3.3(b), com $J_i = J, i = 1, 4$. Os estados $|m_i\rangle$ são autovalores de σ_i^Z.

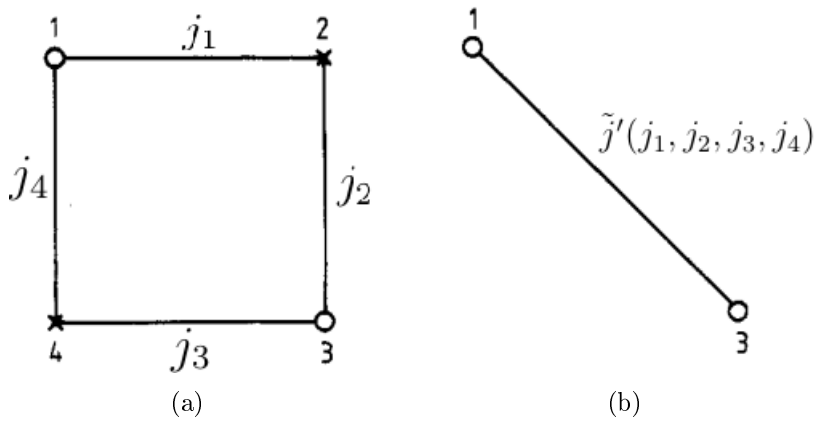


Figura 3.3: Clusters utilizados na transformação para o modelo TIM, onde $j_i = J_i/\Gamma$ pode assumir os valores 0 ou 1. A figura 3.3(b) apresenta o acoplamento $\tilde{j}_i$ entre os spins 1 e 3. Figura retirada da ref. [27].

Para esse modelo, as constantes de acoplamento $j \equiv 1/g \equiv J/\Gamma$ são variáveis aleatórias distribuídas de acordo com a distribuição de probabilidades $P(j_i) = (1-p)\delta(j_i)+p\delta(j_i-j)$. A figura 3.4 apresenta o diagrama de fluxos construído através da teoria de renormalização para o modelo TIM bidimensional. É possível observar o salto de descontinuidade no ponto crítico $p_c = 0,618$.

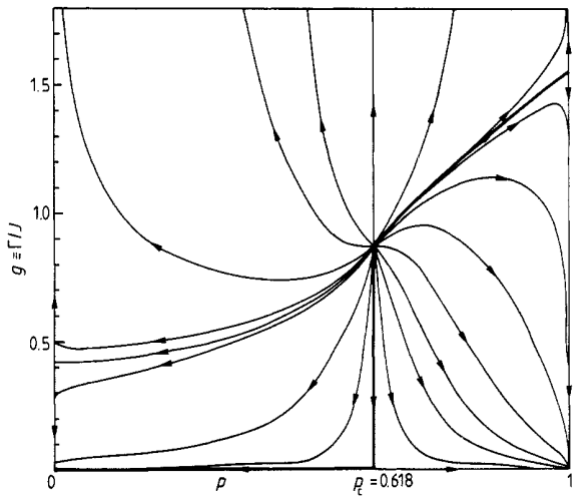


Figura 3.4: Diagrama de fluxos do modelo de Ising transverso bidmensional à temperatura zero mostrando o ponto fixo e as linhas de fluxo. Figura retirada da ref. [27].

A tabela 3.4.3 apresenta os valores dos expoentes críticos para a classe de universalidade Ising Transverso:

Expoente crítico	Valor (genérico)	Valor (percolação)
$\beta/\nu_\perp$	0,96(2)	5/48
β	1,15(15)	5/36
$\nu_\perp$	1,20(15)	4/3
ψ	0,51(6)	91/48
$\overline{\delta}$	1,9(2)	5/91
$\overline{\Theta}$	0,15(3)	

Tabela 3.2: Valores dos expoentes críticos da classe Ising Transverso [19]. Os valores da transição por percolação foram obtidos de [28].

3.5 Percolação Direcionada (DP)

A classe de percolação direcionda é uma das mais importantes classes de universalidade dos processos fora do equilíbrio com estados absorventes [13]. Tal classe pode ser definida como sendo um problema de ligação comum entre indivíduos de uma determinada rede, na qual as ligações são distribuídas aleatoriamente. Como analogia, pode-se citar o deslocamento da água através de um material poroso. À medida que a água flui pelo material, o fluxo tomado por ela é definido por uma probabilidade p, sendo que os sítios "molhados"podem ser interpretados como partículas e as localidades "secas"como sítios vazios da rede.

Existem dois tipos fundamentais de modelos de percolação:

1. **Percolação Isotrópica:** O fluxo das ligações não é direcionado, ou seja, as ligações são feitas em todas as direções.

2. **Percolação Direcionada:** Neste caso o fluxo de ligações possui uma direção preferencial no espaço. Como exemplo citamos um determinado líquido que adentra os poros de um certo material devido a atração gravitacional ou o percurso feito por um sinal elétrico aplicado na entrada de um circuito formado por diodos. Essa direção preferencial pode ainda ser interpretada como uma coordenada temporal na caracterização do sistema em estudo.

A figura 3.5 apresenta a esquematização dos possíveis processos relacionados à percolação direcionada quando essa é vista como uma reação de difusão. Considere que o fluxo tem direção descendente.

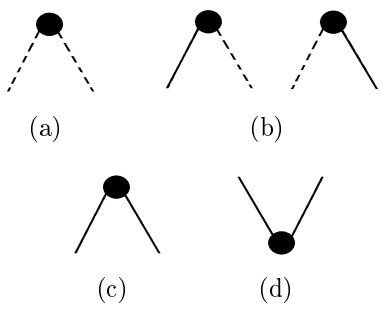


Figura 3.5: Interpretação dos processos de DP como um processo de reação de difusão:3.5(a) processo de morte, 3.5(b) e 3.5(c) processo de difusão, 3.5(d) processo de coagulação.

Supõe-se que cada sítio ativo representa uma partícula A. Se dois caminhos subsequentes encontram-se fechados, a partícula desaparece no próximo passo de tempo (figura 3.5(a)). Caso um dos dois caminhos estejam abertos, a partícula difunde de forma estocástica para um dos dois lados, como apresentado na figura 3.5(b). Caso os dois caminhos subsequentes estejam abertos, a partícula produz uma partícula descendente ($A \to 2A$) e cada uma delas difunde por um dos caminhos disponíveis (3.5(c)). Considerando que o sítio de destino pode se encontrar previamente ocupado, caso duas partículas atinjam o mesmo sítio elas sofrem um processo irreversível de coalescência ($2A \to A$), como mostra a figura 3.5(d).

A rede efetivamente sofre percolação é dado quando a probabilidade de ligação p excede um determinado valor de probabilidade crítica p_c, ou seja, nesse momento existe um número muito grande de ligações que conectam duas bordas da rede. Próximo a p_c o sistema apresenta comprimentos característicos de correlação espacial $\xi_{||}$ e temporal $\xi_{\perp}$:

$$\xi_{||} \propto (p_c - p)^{\nu_{||}} \tag{3.20}$$

$$\xi_{\perp} \propto (p_c - p)^{\nu_{\perp}} \tag{3.21}$$

A diferença de simetria faz com que os expoentes críticos relacionados $\nu_{||}$ e $\nu_{\perp}$ sejam diferentes. A razão $\nu_{||}/\nu_{\perp} = 1{,}7674$ é um importante expoente dinâmico (expoente z) e fornece uma relação entre esses expoentes na criticalidade.

A tabela 3.3 apresenta os valores típicos dos expoentes críticos da classe de universalidade DP:

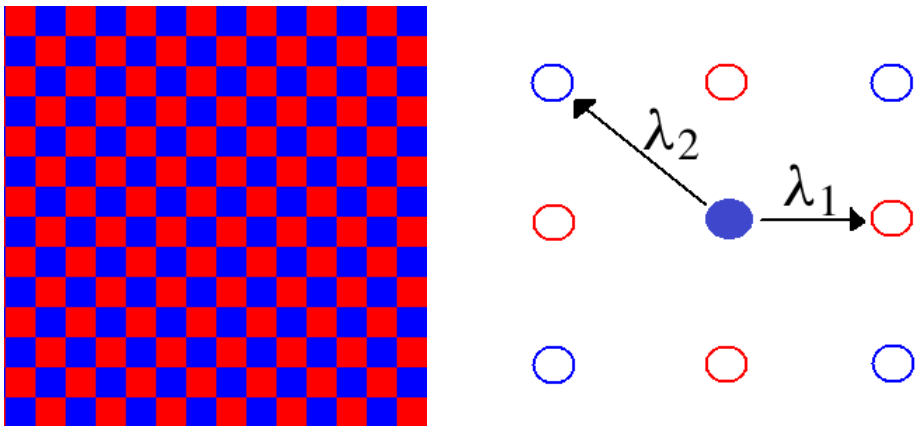
Dimensão:	α	β	γ	δ	ν	η
1	0,159464(6)	0,276486	2,277730(5)	0,159464(6)	1,096854	0,313686(8)
2	0,451	0,536	1,60	0,451	0,733	0,230
3	0,73	0,813	1,25	0,73	0,584	0,12
4+	1	1	1	1	0,5	0

Tabela 3.3: Valores dos expoentes críticos da classe DP. Tabela retirada da ref. [1].

Capítulo 4

Processo de Contato em sub-redes

O processo de contato em sub-redes, proposto e desenvolvido em [4], representa uma variação do processo de contato em duas dimensões. Tal modelagem foi feita objetivando a observação de como indivíduos interagentes se comportariam em uma rede dividida em duas sub-redes e, dessa forma, analisar as transições de fase inerentes ao sistema com apenas um estado absorvente (processo de contato padrão, por exemplo) e observar também as transições de fase por quebra de simetria entre as sub-redes.



(a) (b)

Figura 4.1: Configuração básica das sub-redes (a) e taxas de criação de novos indivíduos (b).

Uma rede quadrada de dimensões LxL foi dividida em duas sub-redes, como apresentado na figura 4.1. As sub-redes são definidas inicialmente formando

um padrão semelhante a um tabuleiro de xadrez. Como no processo de contato convencional, a rede é composta por sítios vazios ($\sigma_i = 0$) ou sítios ocupados ($\sigma_i = 1$), sendo que cada sítio pode conter no máximo uma partícula. Cada partícula cria uma nova partícula em um de seus primeiros vizinhos com taxa λ_1 e cria partículas nos segundos vizinhos com taxa λ_2. Considerando a forma na qual a rede foi dividida (figura 4.1(a)), fica claro que λ_1 representa a taxa de criação na sub-rede oposta e a taxa λ_2 representa a taxa de criação na mesma sub-rede da partícula criadora (figura 4.1(b)). Um sítio ocupado da rede se torna vazio com taxa unitária, sendo que essa taxa não depende do número de vizinhos. Em adição a essa taxa unitária, o modelo inclui um termo adicional de aniquilação μn_1^2, onde μ é uma constate relacionada a escala (não interfere no comportamento, mas permite uma melhor visualização dos resultados) e n_1 representa o número de vizinhos ocupados. Tal termo deve ser no mínimo quadrático para que as quebras de simetria sejam observadas. Esse termo adicional de aniquilação funciona como termo de inibição, em que uma densidade alta em uma sub-rede inibe (localmente) a atividade na outra sub-rede.

Nomeando as sub-redes como A e B, as densidades macroscópicas de partículas nas sub-redes são definidas como ρ_A e ρ_B respectivamente, sendo o único estado absorvente dado por $\rho_A = \rho_B = 0$. A densidade total de partículas na rede é dada por $\rho = \rho_A + \rho_B$ e a diferença entre as densidades é $\phi = |\rho_A - \rho_B|$. A partir dessas definições, pode-se inferir a existência de duas novas fases no diagrama de fases: A fases ativo-simétrico (AS) e a fase de ativo assimétrico (AA). A fase AS existe para taxas em que as densidades de ocupação nas duas sub-redes são as mesmas ($\rho_A = \rho_B$), resultando em $\phi = 0$. A fase AA, por sua vez, ocorre quando $\phi = |\rho_A - \rho_B| > 0$, resultando em $\phi \neq 0$. Dessa forma, ϕ é um parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fase pela quebra de simetria do sistema. Para valores muito baixos de λ_1 e λ_2 o sistema permanece no estado absorvente (ABS).

4.1 Teoria de Campo Médio para o PC em sub-redes

A teoria de campo médio (TCM) para esse modelo em uma rede de número de coordenação q é dado pelas seguintes equações acopladas:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_B^2)\rho_A + (\lambda_1 \rho_B + \lambda_2 \rho_A)(1 - \rho_A) \tag{4.1}$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_A^2)\rho_B + (\lambda_1 \rho_A + \lambda_2 \rho_B)(1 - \rho_B) \tag{4.2}$$

As equações de evolução 4.1 e 4.2 podem ser divididas em dois termos principais: o termo de aniquilação (parcela negativa) e o termo relacionado a criação de partículas (parcela positiva). No termo de aniquilação, nota-se, além da taxa unitária, um termo adicional de inibição μq^2. À medida que a densidade de partículas aumenta em uma sub-rede, a sub-rede oposta tem um decréscimo no seu número de sítios ativos.

O termo positivo apresenta a relação entre as taxas de criação λ_1 e λ_2 e as densidades das sub-redes, de forma a garantir que o aumento populacional em uma sub-rede provoque a redução de partículas na sub-rede oposta. A multiplicação pelos termos $1 - \rho_A$ e $1 - \rho_B$ garantem que a criação seja feita apenas nos sítios vazios.

A partir dessas duas equações, é possível definir as equações de evolução de ρ e ϕ:

$$\frac{d\rho}{dt} = (\Lambda - 1)\rho - \frac{\Lambda}{2}\rho^2 - \frac{\Delta}{2}\phi^2 - \frac{1}{4}\mu q^2(\rho^2 - \phi^2)\rho \tag{4.3}$$

$$\frac{d\phi}{dt} = (\Delta - 1 - \lambda_2 \rho)\phi - \frac{1}{4}\mu q^2(\rho^2 - \phi^2)\phi \tag{4.4}$$

Onde $\Delta \equiv \lambda_2 - \lambda_1$ e $\Lambda \equiv \lambda_2 + \lambda_1$.
Resolvendo essas equações considerando o regime estacionário ($d\rho/dt = d\phi/dt = 0$), a equação de variação de ρ em relação a λ_1 e λ_2 é dada por

$$\rho = \frac{1}{2\kappa}[\sqrt{(\Lambda/2)^2 + 4\kappa(\Lambda - 1)} - (\Lambda/2)] \tag{4.5}$$

com $\kappa \equiv \mu q^2/4$. Através da equação 4.4, nota-se que a solução é estável com $\phi \neq 0$, quando

$$a_\phi = \Delta - 1 - \lambda_2 \rho + \kappa \rho^2 < 0 \tag{4.6}$$

A transição para a fase assimétrica ocorre quando $a_\phi = 0$, o que implica

$$(2\lambda_2 + \Lambda)^2(\Lambda - 1) = 2(\lambda_2 - 1)[8\kappa(\lambda_2 - 1) + (2\lambda_2 + \Lambda)\Lambda]. \tag{4.7}$$

Utilizando as expressões 4.5 e 4.6, é possível construir um diagrama dos parâmetros ρ e ϕ em relação a λ_2 (figura 4.2). O diagrama apresenta o

comportamento de tais parâmetros de ordem e é possível verificar a transição da fase inativa para a fase AS (quando $\rho \neq 0$) e entre as fases AS-AA (quando $\phi \neq 0$).

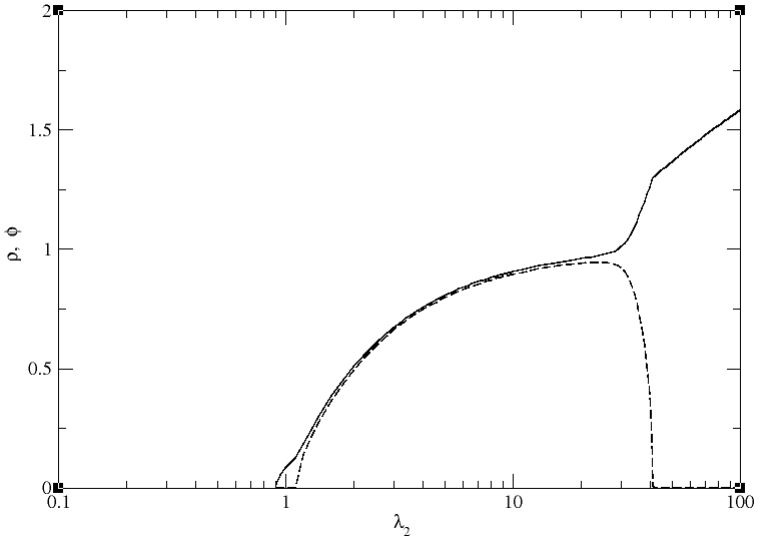


Figura 4.2: Comportamento dos parâmetros de ordem ρ (linha cheia) e ϕ (linha tracejada) em relação a variação de λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$.

A figura 4.3 apresenta o diagrama de fases construído a partir da equação 4.7. Note que a transição entre as fases ativa e ativo-assimétrico ocorre apenas para valores intermediários de λ_2, assim, com o aumento de λ_2 a partir de $\lambda_2 = 0,1$, ocorre a primeira transição da fase inativa para a fase ativo-simétrico. Mantendo a progressão de λ_2 ocorre transição entre as fases de ativo-simétrico e ativo-assimétrico, ocorrendo em seguida a transição inversa, da fase ativo assimétrico para ativo-simétrico. Diagramas com essa propriedade são classificados como diagramas de caráter reentrante. Observa-se ainda que a fase ativo-assimétrico não existe para $\lambda_1 > \lambda_1 * (\mu)$, sendo $\lambda_1^*(\mu) = 7,1443$ com $\mu = 2$. A figura 4.3 apresenta ainda os valores obtidos por meio de simulações utilizando o método de Monte Carlo, que geraram as curvas pontilhadas. Os resultados previstos pela TCM e pelas simulações estão qualitativamente em conformidade, mas, a TCM superestima as regiões das fases no diagrama. Em particular, os resultados obtidos pela TCM apresentam valores muito maiores de $\lambda_1^*(\mu)$ em relação aos resultados obtidos por simulação. Todas as transições ocorrem de forma contínua.

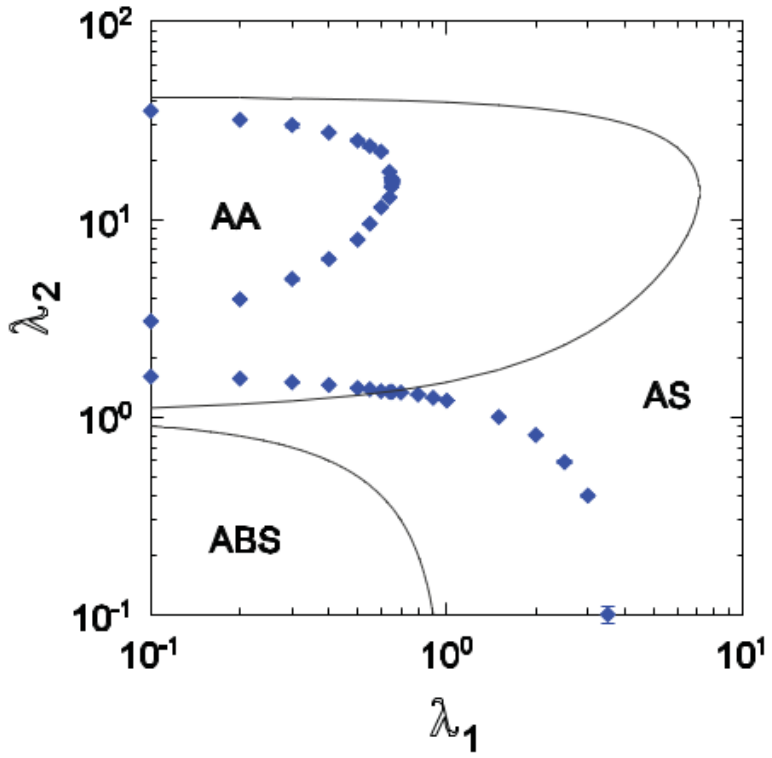


Figura 4.3: Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ para $\mu = 2$ mostrando as fases absorvente (ABS), ativo-simétrico (AS) e ativo-assimétrico (AA). As linhas foram obtidas através da teoria de campo médio e os símbolos através de simulação. Figura retirada da ref. [4].

4.2 Resultados obtidos por simulações

As simulações foram realizadas utilizando o Método de Monte Carlo aplicado às redes quadradas de dimensões lineares $L = 20, 40, ..., 320$ sítios, com condições de fronteiras periódicas. Primeiramente, um sítio é selecionado aleatoriamente. Se o sítio está ocupado é criada uma nova partícula em um dos seu vizinhos com probabilidade $p_1 = \lambda_1/W$ ou em um de seus segundos vizinhos com probabilidade $p_2 = \lambda_2/W$, sendo $W = 1 + \lambda_1 + \lambda_2 + \mu n_1^2$ a soma das taxas de todos os eventos possíveis. Em contrapartida, o sítio se torna vazio com probabilidade complementar $1 - (p_1 + p_2)$. Para aumentar a eficiência do algoritmo, os sítios são escolhidos de uma lista contendo N_{occ} ocupados. Por

consequência, o tempo é incrementado de $\Delta t = 1/N_{occ}$ depois de cada evento. Para as simulações nos regimes crítico e subcrítico, foi utilizado o método de simulação detalhado em [29].

Uma série de estudos utilizando $\mu = 2$ possibilitou confirmar que para baixos valores de λ_1 e λ_2 o sistema permanece no estado absorvente. O aumento de λ_2 para um valor fixo de λ_1 (por exemplo $\lambda_1 = 0,2$) culmina na transição da fase absorvente para a fase ativa quando $\lambda_2 = 1,5620$, gerando um valor crítico $\lambda_c = \lambda_1 + \lambda_2 = 1,7620$. A transição para a fase ativa ocorre para $\lambda_c = \lambda_1 + \lambda_2$ pois, para essa transição o sistema é visto de forma global, ou seja, não há distinção por diferenciação de λ_1 e λ_2.

No ponto crítico, é esperado que o parâmetro de ordem no regime quase estacionário decaia segundo a lei de potências $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$. A figura 4.4 apresenta os resultados que confirmam essa afirmação também para esse modelo em particular, mostrando o decaimento de ρ com $\beta/\nu_\perp = 0,79(1)$. Esse valor é bem próximo do valor da classe DP $\beta/\nu_\perp = 0,797(3)$. O valor encontrado para o tempo $\tau \sim \nu_{||}/\nu_\perp$ na criticalidade foi $\nu_{||}/\nu_\perp = 1.75(2)$, também em boa conformidade com o valor de DP de $\nu_{||}/\nu_\perp = 1.7674(6)$.

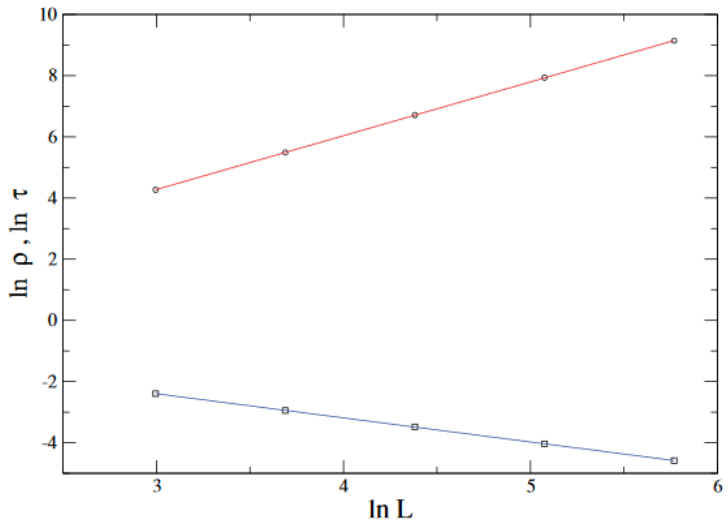


Figura 4.4: ln da densidade crítica quase-estacionária (QS) de sítios ativos ρ (reta inferior) e ln do tempo de vida τ do estado QS (linha superior) versus $\ln L$. Parâmetros: $\mu = 2$, $\lambda_1 = 0,2$ e $\lambda_2 = 1,5620$. Figura retirada da ref. [4].

A razão de momentos $m = \langle\rho^2\rangle/\langle\rho\rangle^2$ assume um valor crítico m_c no ponto crítico. Para esse modelo, os autores encontraram $m_c = 1,324(5)$, bem pró-

ximo do valor conhecido de DP $m_c = 1,3264(5)$. Esses resultados permitem constatar que esse modelo pertence à classe de universalidade de percolação dirigida. A figura 4.5 mostra a variação de m em função de λ_2 para diferentes valores de L. O ponto de interseção das curvas fornece o valor de m_c.

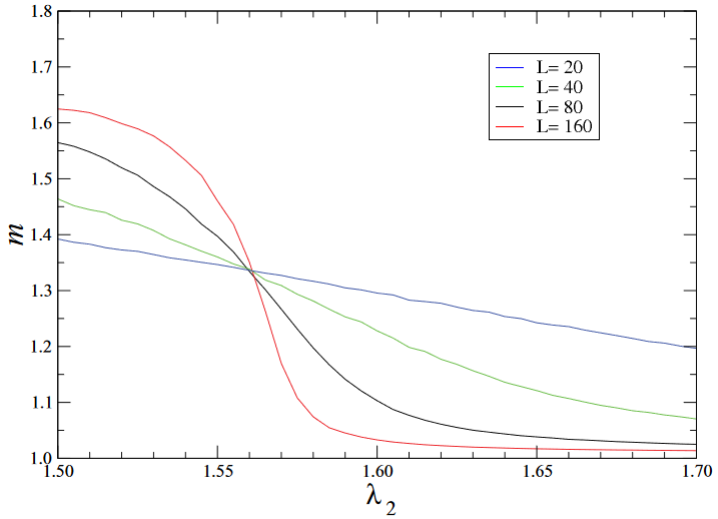


Figura 4.5: Razão de momentos m versus λ_2 para sistemas de tamanhos $L = 20, 40, 80$ e 160 na transição ABS-AS. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,2$. Figura retirada da ref. [4].

Como previsto pela TCM, o aumento de λ_2 para um valor fixo de λ_1 leva o sistema à fase ativo-assimétrica (AA) onde $\phi \neq 0$. A observação de uma distribuição bimodal de probabilidades do parâmetro ϕ (figura 4.6) confirma a existência da fase AA. A quebra de simetria pode ser observada pela mudança na distribuição de probabilidades, já que para $\lambda_2 = 2,0$ e $\lambda_2 = 40,0$, a distribuição de probabilidades é do tipo normal e para um valor intermediário de λ_2, por exemplo, $\lambda_2 = 10,0$ a distribuição é do tipo bimodal. Note que isso também confirma o caráter reentrante do diagrama de fases.

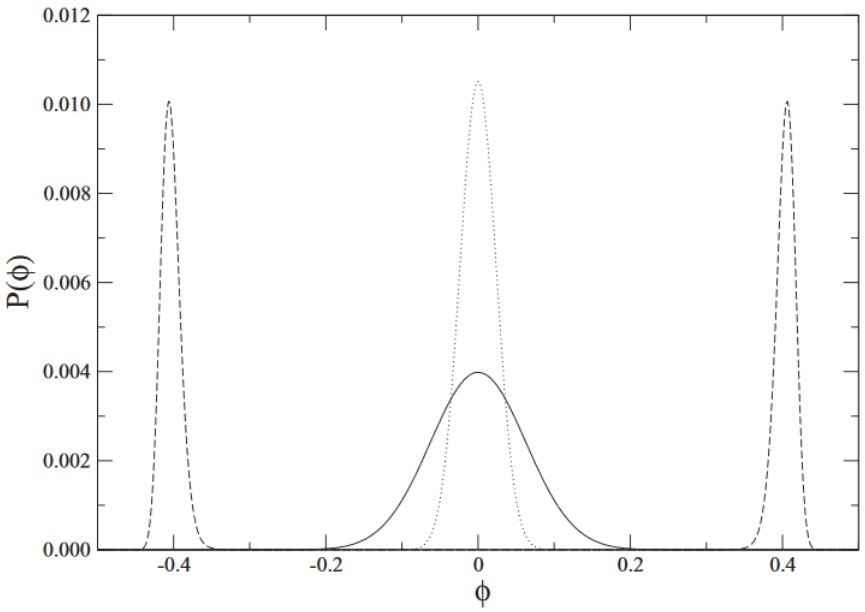


Figura 4.6: Distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem ϕ. Parâmetros: $\lambda_1 = 0{,}2$, $\lambda_2 = 2{,}0$ (curva pontilhada), $\lambda_2 = 10{,}0$ (curva tracejada) e $\lambda_2 = 40{,}0$ (curva sólida). Figura retirada da ref. [4].

Para determinar quantitativamente os pontos que delimitam a transição AA-AS, foi realizada uma investigação do comportamento do cumulante Binder reduzido [30], dado por

$$U_4 = 1 - \frac{\langle \phi^4 \rangle}{\langle \phi^2 \rangle^2} \tag{4.8}$$

A interseção das curvas geradas pela variação do cumulante Binder considerando sistemas de variados tamanhos fornece uma boa estimativa para o valor do ponto crítico da transição. O valor do cumulante no ponto crítico se aproxima de um valor universal quando $L \to \infty$. A figura 4.7 apresenta as curvas para o cumulante Binder de sistemas de tamanhos $L = 20, 40, 80$ e 160. As curvas para os diferentes tamanhos se cruzam em $\lambda_2 = 3,940(5)$ e novamente em $\lambda_2 = 31,92(6)$ quando $L \to \infty$.

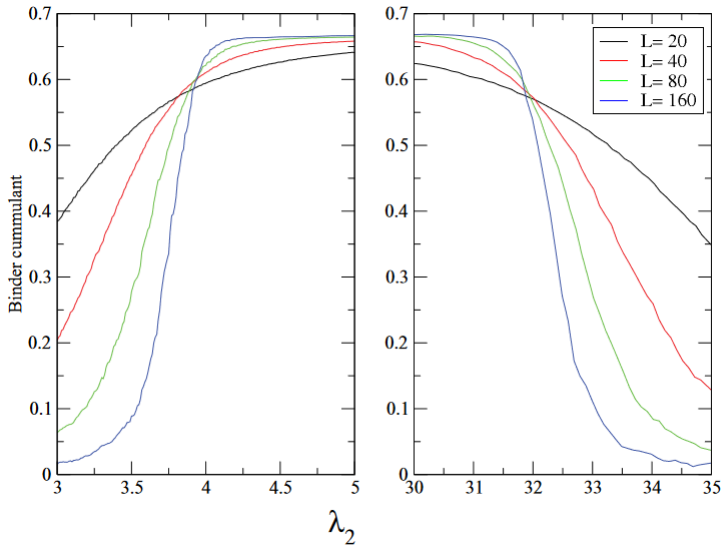


Figura 4.7: Cumulante Binder versus λ_2 para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}2$ considerando $L = 20, 40, 80$ e 160. Figura retirada da ref. [4].

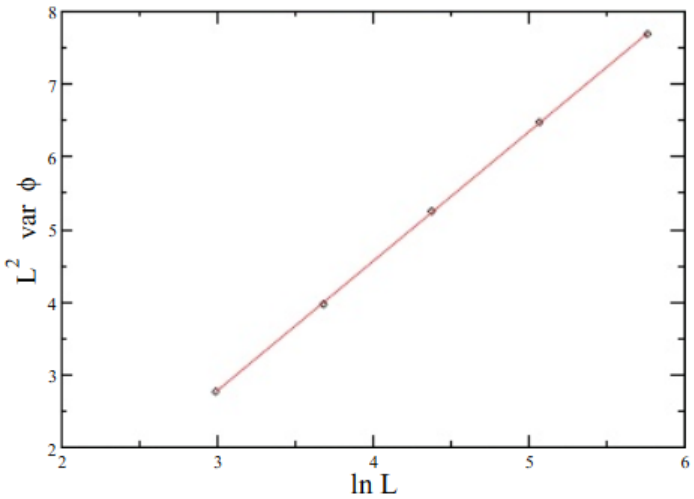


Figura 4.8: ln da variância do parâmetro de ordem versus $\ln L$ na transição AS-AA e razão de momentos m dessa mesma transição para sistemas de tamanhos $L = 20, 40..., 320$. Parâmetros: $\mu = 2$, $\lambda_1 = 0,2$, $\lambda_2 = 3,94$. A inclinação da linha de regressão é de 1,76. Figura retirada da ref. [4].

A análise feita em torno da variância do parâmetro de ordem fornece os dados necessários para evidenciar o comportamento semelhante ao comportamento do modelo de Ising na criticalidade. No ponto crítico, a variância $\mathrm{var}(\phi) = \langle\phi^2\rangle - \langle\phi\rangle^2$ deve variar como uma função de escala da forma $L^2\mathrm{var}(\phi) \propto L^{\frac{\gamma}{\nu}}$. A variância $\mathrm{var}(\phi)$ para esse modelo é mostrada na figura 4.8. O tratamento desses dados fornece a razão de expoentes $\gamma/\nu = 1,76(5)$, valor muito próximo do valor apresentado pelo modelo de Ising em duas dimensões de $\gamma/\nu = 7/4$.

4.3 Extensões do modelo: Efeito da Difusão e de interações distintas

A partir do modelo inicial do processo de contato em sub-redes, novas pesquisas vem sendo realizadas com o intuito de investigar os efeitos causados por modificações no modelo original ou quando o sistema é acometido por fenômenos como desordem ou difusão. Nessa seção, apresentamos uma ideia geral relacionada aos dois trabalhos gerados a partir do modelo desenvolvido em [4]. Em [31], Pianegonda e Fiore analisam os efeitos causados pela modificação das condições de criação nos primeiros e segundos vizinhos da rede sendo que cada taxa de criação pode possuir restrições distintas na criação de novas partículas. Já em [32], de Oliveira e Fiore analisam o efeito da inserção de difusão dinâmica de criação de novas partículas na rede.

4.3.1 Processo de contato com dinâmica competitiva em redes bipartidas: Efeitos de distintas interações

Considere um sistema formado pela interação de partículas em uma rede quadrada de dimensão linear L em que os sítios podem ter dois estados possíveis: o sítio pode estar vazio ou ocupado, como no processo de contato usual. A rede é dividida em duas sub-redes A e B e a dinâmica do processo se dá da seguinte forma: partículas em um determinado sítio i de uma das duas sub-redes são criadas com taxa de criação nos primeiros vizinhos dada por $\lambda_1 n_{1i}/q$ e nos segundos vizinhos com taxa $\lambda_2 n_{2i}/q$, em que n_{1i} e n_{2i} são os números de primeiros e segundos vizinhos do sítio i e q o número de coordenação ($q = 4$ para redes quadradas). A análise é feita considerando-se dois modelos de interações: no primeiro modelo, a interação com os primeiros vizinhos é considerada se $n_{1i} \geq 2$. Em contraste, a interação com os segundos vizinhos ocorre se $n_{2i} \geq 1$, como no processo de contato usual. O segundo modelo é o

oposto do primeiro modelo: a interação com os primeiros vizinhos ocorre para $n_{1i} \geq 1$ enquanto a interação com os segundos vizinhos requer que $n_{2i} \geq 2$. Como feito em [4], um termo adicional não-linear μn_1^2 é adicionado à taxa de aniquilação. Caso $\mu = 0$, o sistema retorna ao caso usual em que as partículas são espontaneamente aniquiladas com taxa unitária.

Considerando ρ_A e ρ_B as densidades de ocupação de sítios nas sub-redes A e B respectivamente, as regras de dinâmica do modelo fornecem as seguintes equações de campo médio para a evolução temporal [1]:

- Para o modelo 1:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = \lambda_1\rho_B^2(1-\rho_A)[3-3\rho_B+\rho_B^2]+\lambda_2(1-\rho_A)\rho_A-(1+q^2\mu\rho_B^2)\rho_A \quad (4.9)$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = \lambda_1\rho_A^2(1-\rho_B)[3-3\rho_A+\rho_A^2]+\lambda_2(1-\rho_B)\rho_B-(1+q^2\mu\rho_A^2)\rho_B \quad (4.10)$$

- Para o modelo 2:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = \lambda_1(1-\rho_A)\rho_B+\lambda_2\rho_A^2(1-\rho_A)[3-3\rho_A+\rho_A^2]-(1+q^2\mu\rho_B^2)\rho_A \quad (4.11)$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = \lambda_1(1-\rho_B)\rho_A+\lambda_2\rho_B^2(1-\rho_B)[3-3\rho_B+\rho_B^2]-(1+q^2\mu\rho_A^2)\rho_B \quad (4.12)$$

[1] Aqui são apresentados os resultados finais do que foi desenvolvido utilizando a aproximação pela teoria de campo médio. Os detalhes sobre as probabilidades de ocorrência de cada processo são encontrados em [31].

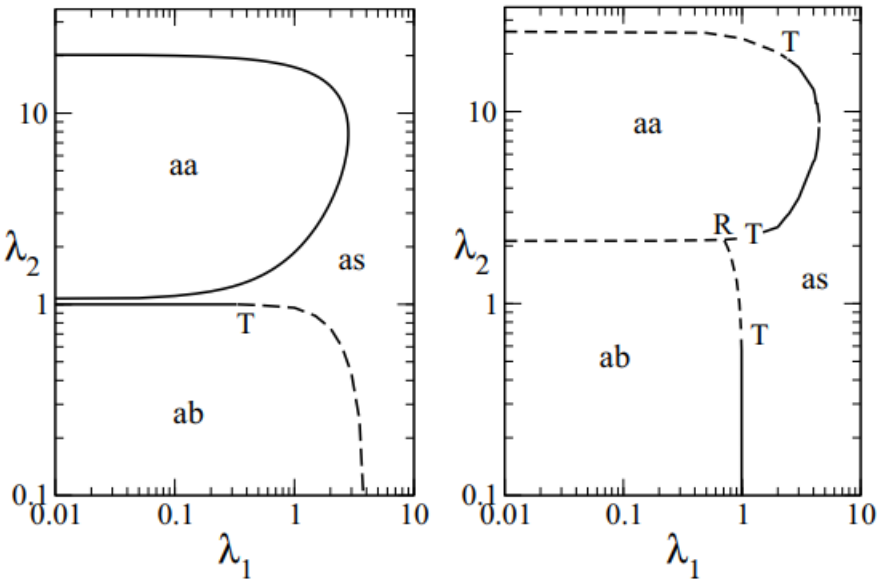


Figura 4.9: Diagrama de fases para os modelos 1 (esquerda) e 2 (direita) com $\mu = 1$. As fases absorvente, ativo-simétrico, ativo-assimétrico, o ponto crítico e o ponto tricrítico são representados por ab, as, aa, R e T respectivamente. Figura retirada da ref. [31].

Os resultados mostram que a TCM para o modelo 1 apresenta um comportamento semelhante ao observado pelo modelo proposto em [4], porém a inclusão da distinção das interações entre os vizinhos provocam expressivas mudanças qualitativas na linha de transição das fases $ab - as$. Já o modelo 2 apresentou diferenças mais substanciais quando comparado ao modelo original [4]. Não existe a fase ativo-simétrico para baixos valores de λ_1, de tal forma que as linhas de transição $ab - as$ e $as - aa$ dão lugar à linha de coexistência e o encontro das linhas $ab - as$ e $as - aa$ se dá no ponto triplo R. O ponto tricrítico T separa a coexistência das linhas de transição das fases $ab - as$.

4.3.2 Efeitos da difusão no processo de contato competitivo em sub-redes

Os efeitos de difusão de partículas pode ser uma pertubação de bastante relevância, afetando drasticamente o comportamento crítico ou mesmo modi-

ficando os cenários das transições de fase descontínuas, como é mostrado em vários trabalhos da literatura [32]. Motivados por tal relevância, de Oliveira e Fiore [32] analisaram o efeito da difusão de partículas no processo de contato em sub-redes, como será sumariamente descrito abaixo.

Considere um sistema definido pela interação de partículas em uma rede quadrada dividida em duas sub-redes A e B em que as partículas criam uma nova partícula em um de seus primeiros vizinhos com taxa λ_1 e nos segundos vizinhos com taxa λ_2. Considerando essa configuração, como no modelo original, λ_2 é a taxa de criação na mesma sub-rede e λ_1 a taxa de criação na sub-rede oposta. Além da taxa de aniquilação unitária, foi inserido um termo adicional de inibição μn^2, como no caso apresentado na subseção anterior. A partir dessas considerações define-se $\rho = \rho_A + \rho_B$ como a soma da densidade de sítios ocupados nas sub-redes A e B e $\phi = |\rho_A - \rho_B|$ como a diferença entre as mesmas densidades. Tais parâmetros serão utilizados para analisar a influência da difusão de partículas no processo de contato competitivo nas sub-redes. Considerando essa dinâmica, a TCM fornece as seguintes equações de evolução temporal:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -[1 + \mu q^2 \rho_B^2 + D\rho_B^*]\rho_A + [(\lambda_1 + D)\rho_B + \lambda_2 \rho_A]\rho_A^* \tag{4.13}$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -[1 + \mu q^2 \rho_A^2 + D\rho_A^*]\rho_B + [(\lambda_1 + D)\rho_A + \lambda_2 \rho_B]\rho_B^* \tag{4.14}$$

onde D representa a taxa de difusão na rede, $\rho_A^* = 1 - \rho_A$, $\rho_B^* = 1 - \rho_B$ e $q = 4$ (número de coordenação da rede quadrada).

Usando as definições de ρ e ϕ, obtêm-se:

$$\frac{d\rho}{dt} = (\Lambda - 1)\rho - \frac{\Lambda}{2}\rho^2 - \frac{\Delta}{2}\phi^2 - \frac{1}{4}\mu q^2(\rho^2 - \phi^2)\rho \tag{4.15}$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \left[\Delta - 1 - 2D - \lambda_2 \rho - \frac{1}{4}\mu q^2(\rho^2 - \phi^2)\right]\phi \tag{4.16}$$

onde $\Lambda \equiv \lambda_1 + \lambda_2$ e $\Delta = \lambda_2 - \lambda_1$.

Resolvendo as equações 4.15 e 4.16 no estado estacionário ($d\rho_A/dt = d\rho_B dt = 0$, obtêm-se a equação 4.17 que fornece o comportamento do parâmetro de ordem ρ:

$$\rho = \frac{1}{2\kappa} = \left[\sqrt{\frac{(\Lambda)^2}{4} + 4\kappa(\Lambda - 1)} - \frac{\Lambda}{2}\right], \quad \kappa \equiv \mu q^2/4 \tag{4.17}$$

Essa solução é estável quando

$$a_\phi = \Delta - 1 - 2D - \lambda_2\rho + \kappa\rho^2 < 0 \tag{4.18}$$

Soluções numéricas executadas da forma mostrada na seção 3.3 possibilitam a análise da variação de ρ e ϕ em relação à variação da taxa de difusão. A figura 4.10 apresenta o comportamento de ρ em relação ao aumento da taxa de difusão na rede. Note que a medida que D aumenta, a curva de ρ em relação à variação de λ_2 se torna cada vez menos sinuosa.

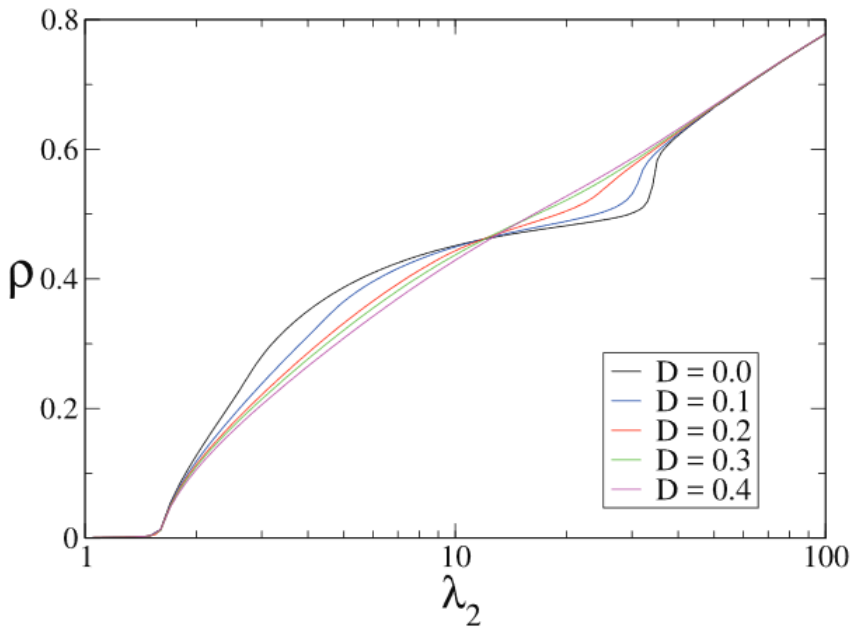


Figura 4.10: Densidade de sítios ativos ρ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Dimensão do sistema $L = 160$. Figura retirada da ref. [32].

A alteração em ϕ é mais expressiva, como mostra a figura 4.11. O aumento da difusão na rede aumenta a supressão da região de ativo-assimétrico do diagrama, sendo que, para $D > 4$, essa região desaparece totalmente e assim não existe mais a transição de fase por quebra de simetria.

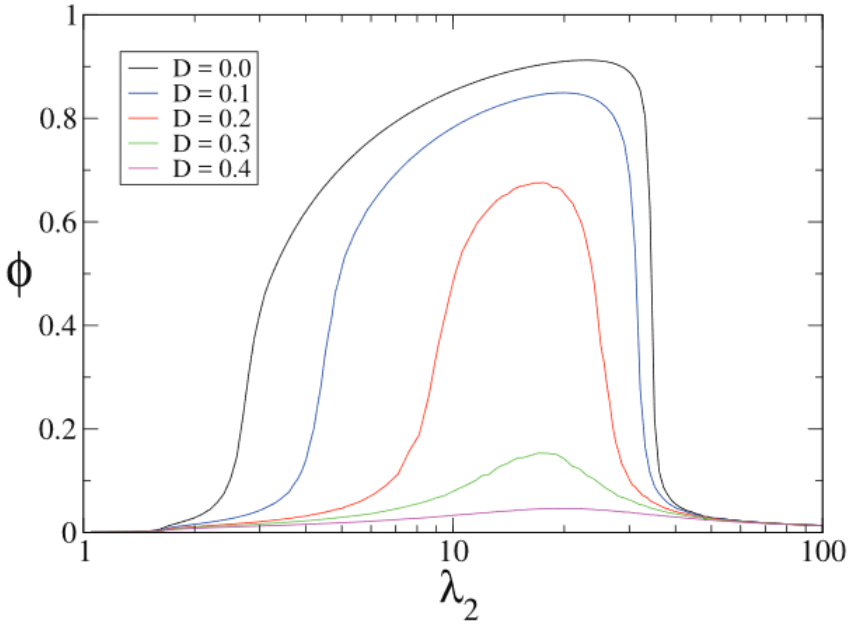


Figura 4.11: Densidade do parâmetro ϕ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Dimensão do sistema $L = 160$. Figura retirada da ref. [32].

Através do diagrama de fases no plano $D - \lambda_2$ (4.12) é possível comparar os resultados previstos pela teoria de campo médio e os obtidos através das simulações. A curva representada pelas linhas cheias são obtidas através de TCM, enquanto que as curvas representadas pelos círculos e quadrados foram obtidas por simulação, sendo que a curva marcada por círculos representa a transição para a fase absorvente e a marcada pelos quadrados delimita a fase de ativo-assimétrico. Ambos os casos deixam claro o caráter reentrante do diagrama de fases e a principal diferença se encontra no valor crítico de taxa de desordem para o qual a fase ativo-assimétrico deixa de existir. O valor obtido através da TCM foi $D*_{tcm} = 3.47$, quase dez vezes maior que o valor obtido nas simulações $D*_n = 0.382$ [32].

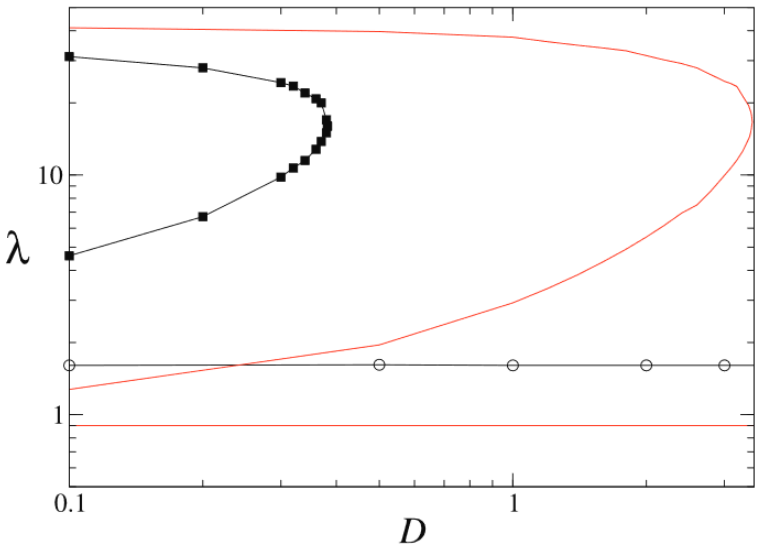


Figura 4.12: Diagrama de fases no plano $D - \lambda_2$ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$, mostrando as fases absorvente (ABS), ativo-assimétrico (AA) e ativo-simétrico (AS). Linhas sólidas (em vermelho): resultado da TCM. Círculos: Resultados de simulações para os pontos críticos da transição da fase absorvente. Quadrados: Resultados das simulações para os pontos críticos nas fronteiras de AA-AS. Nas simulações, os pontos críticos são obtidos pela extrapolação $L \to \infty$ de sistemas com dimensões lineares superiores a $L = 320$. Figura retirada da ref. [4].

Capítulo 5

Processo de Contato em sub-redes com desordem

De forma a complementar os resultados obtidos em [4], foi aplicado o Processo de Contato em sub-redes considerando-se a inserção de desordem. A desordem pode ser interpretada como falhas, imperfeições ou sítios inertes da rede, sendo a inserção dessa feita de forma isotrópica ou anisotrópica. Com desordem isotrópica, as duas sub-redes apresentam a mesma fração Γ de exclusão de sítios em ambas as sub-redes. Já com a desordem anisotrópica, uma das sub-redes é penalizada com a exclusão de sítios enquanto a outra permanece inalterada ou as duas podem apresentar uma quantidade diferente de sítios inertes.

Os métodos utilizados para análise foram a construção da teoria de campo médio para esse modelo e simulações utilizando o método de Monte Carlo. A aplicação de tais métodos e os resultados obtidos são apresentados nas páginas seguintes.

5.1 TCM aplicada ao modelo

A teoria de campo médio para esse modelo é descrita pelas equações acopladas 5.1 e 5.2, onde ρ_A e ρ_B representam as densidades de sítios ativos nas sub-redes A e B formadas conforme representado na figura 4.1.

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_B^2)\rho_A + (\lambda_1 \rho_B + \lambda_2 \rho_A)(1 - \Gamma_A - \rho_A) \tag{5.1}$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_A^2)\rho_B + (\lambda_1 \rho_A + \lambda_2 \rho_B)(1 - \Gamma_B - \rho_B) \tag{5.2}$$

Analogamente ao modelo apresentado no capítulo 4, as equações de evolução são divididas em dois termos principais: o termo negativo representa o termo de aniquilação e por isso contribui negativamente com as densidades das sub-redes. Além da taxa de aniquilação unitária, o termo quadrático de inibição μq^2 foi mantido, lembrando que μ consiste em uma constante relacionada à escala e q o número de coordenação (nesse caso, $q = 4$ que é o valor correspondente à rede quadrada). O segundo termo é dividido em um produto de dois termos: O primeiro termo do produto faz menção às taxas de criação nas sub-redes. O segundo termo do produto relaciona-se com os sítios disponíveis para a criação de partículas, sendo necessário deduzir do total disponível todos os sítios já ocupados (representados no termo como os próprios valores das densidades) e todos os sítios inertes, representados por Γ_A e Γ_B. Ou seja, nesse contexto, a desordem entra como um limitante da capacidade espacial do sistema na teoria de campo médio.

A desordem é inserida como agente limitador da criação de novas partículas, de forma que, além dos sítios ocupados, o último termo garante que a criação não ocorra em sítios inertes (com desordem). O parâmetro Γ_A representa a fração de sítios excluídos da sub-rede A e Γ_B representa a fração de sítios excluídos da sub-rede B. A variação da desordem se dá no intervalo $0 \leq \Gamma_x \geq 0,3$, com $\Gamma_x = \Gamma_A, \Gamma_x = \Gamma_B$ ou $\Gamma_x = \Gamma$ da isotropia. Para $\Gamma_x \geq 0,4$, o coeficiente de percolação é atingido e a rede sofre uma quebra, não representando mais duas sub-redes, mas várias sub-redes descorrelacionadas.

A figura 5.1 apresenta a configuração típica de uma rede sem desordem e com desordem isotrópica de $\Gamma = 0,2$ para a fase ativo-assimétrico. Os sítios azuis representam os sítios ocupados, os pretos os sítios vazios e os sítios verdes representam os sítios inertes.

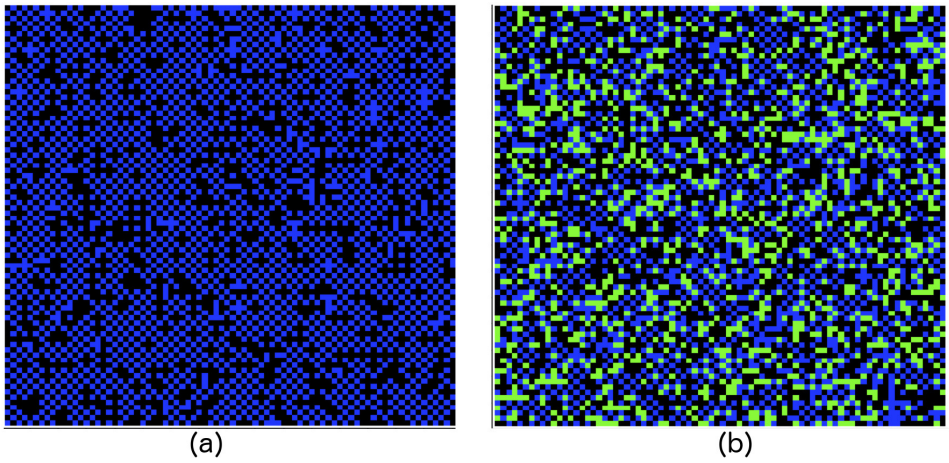


Figura 5.1: Configuração típica observada na rede bipartida para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0,1$ considerando o sistema limpo ($\Gamma = 0$) e sistema com desordem isotrópica de ($\Gamma = 0,2$).

5.1.1 Desordem isotrópica

A desordem isotrópica é caracterizada por $\Gamma_A = \Gamma_B = \Gamma$, dessa forma, as equações de evolução são:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_B^2)\rho_A + (\lambda_1 \rho_B + \lambda_2 \rho_A)(1 - \Gamma - \rho_A) \tag{5.3}$$

e

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_A^2)\rho_B + (\lambda_1 \rho_A + \lambda_2 \rho_B)(1 - \Gamma - \rho_B) \tag{5.4}$$

Considerando o regime quase estacionário, é possível encontrar as expressões que modelem o comportamento dos parâmetros de ordem ρ e ϕ:

$$\rho = \frac{1}{2\kappa}[\sqrt{(\Lambda/2)^2 + 4\kappa[\Lambda(1-\Gamma) - 1]} - (\Lambda/2)], \quad \kappa \equiv \mu q^2/4 \tag{5.5}$$

$$\phi = \sqrt{-\frac{1}{\kappa}[\Delta(1-\Gamma) - 1 - \lambda_2 \rho - \kappa \rho^2]} \tag{5.6}$$

pelo seu argumento, ϕ é condicionado a

$$a_\phi \equiv \Delta(1-\Gamma) - 1 - \lambda_2 \rho - \kappa \rho^2 < 0 \tag{5.7}$$

com $\Delta \equiv \lambda_2 - \lambda_1$ e $\Lambda \equiv \lambda_2 + \lambda_1$.

De forma semelhante ao apresentado pelo sistema limpo, à medida que o os parâmetros λ_1 e λ_2 são incrementados, o sistema sofre uma transição da fase absorvente para a fase ativo-simétrico caracterizada por $\rho > 0$. O sistema sofre ainda uma transição da fase ativo-simétrico para ativo-assimétrico caracterizada por $\phi \neq 0$, retornando após determinado valor de λ_2 para a fase ativo-simétrico. Dessa forma, é possível perceber que o diagrama não perde seu caráter reentrante (figura 5.2).

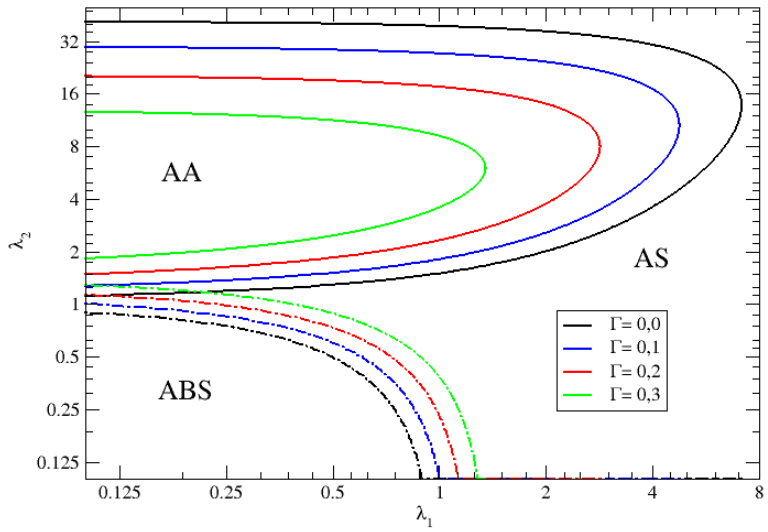


Figura 5.2: Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ mostrando as fases ativo-simétrico (AS), ativo-assimétrico (AA) e absorvente (ABS).

A inserção de desordem isotrópica provoca uma redução gradual da região ativo-assimétrico ($\phi \neq 0$) e a região da fase absorvente aumenta conforme o valor de Γ é incrementado.

Através da construção do diagrama 5.3 contendo a variação de ρ e ϕ em função da variação de λ_2 e mantendo $\lambda_1 = 0,1$, é possível observar as transições de fase e a influência da desordem na rede. Nota-se que a região assimétrica diminui com o aumento de Γ e ocorre um aumento da região absorvente, como previsto pelo diagrama 5.2. Adicionalmente, as transições de fases ocorrem para valores cada vez maiores de λ_c, sendo $\lambda_c = \lambda_1 + \lambda_2$.

Considerando como valor crítico de transição de fase inativo-ativo $\lambda_{c,AS}$ e da transição de fase simétrico-assimétrico $\lambda_{c,AA}$, a tabela 5.1 apresenta tais valores frente a variação de Γ:

Inserção	Isotrópica		Anisotrópica
Γ	$\lambda_{c,AS}$	$\lambda_{c,AA}$	λ_c
0,0	1,00	1,10	1,00
0,1	1,10	1,30	1,04
0,2	1,26	1,31	1,06
0,3	1,44	1,61	1,08

Tabela 5.1: Valores críticos dos parâmetros de controle $\lambda_{c,AS}$, $\lambda_{c,AA}$ e λ_c frente a variação de Γ.

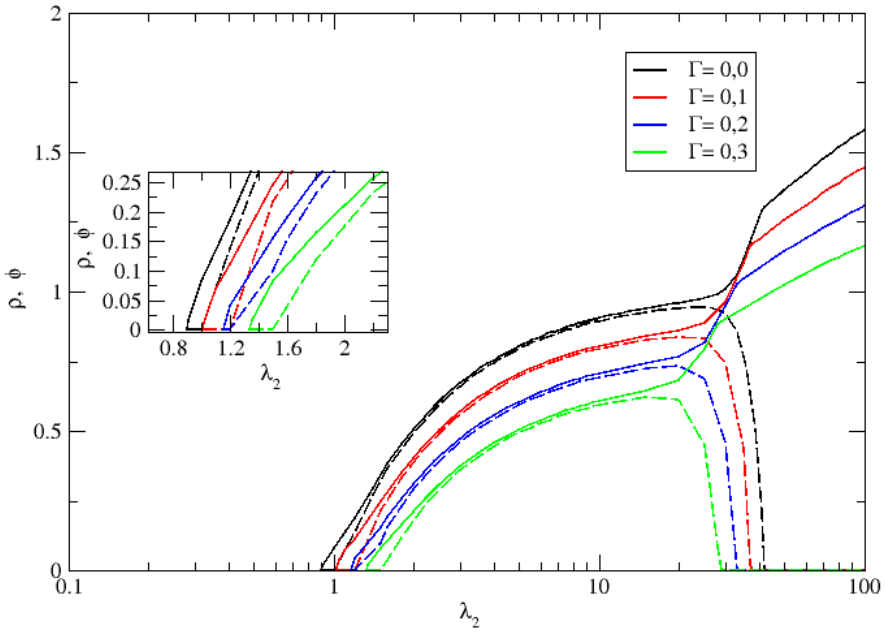


Figura 5.3: Comportamento médio de ρ (linhas cheias) e ϕ (linhas pontilhadas) para $\Gamma_A = \Gamma_B = \Gamma$.

5.1.2 Desordem Anisotrópica

Considere agora que a desordem seja inserida de forma anisotrópica ($\Gamma_A \neq \Gamma_B$) nas sub-redes A e B. Dessa forma, as equações de evolução são dadas pelas equações acopladas 5.8 e 5.9:

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_B^2)\rho_A + (\lambda_1 \rho_B + \lambda_2 \rho_A)(1 - \Gamma_A - \rho_A) \tag{5.8}$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -(1 + \mu q^2 \rho_A^2)\rho_B + (\lambda_1 \rho_A + \lambda_2 \rho_B)(1 - \Gamma_B - \rho_B) \tag{5.9}$$

A construção de um diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ (figura 5.4) mostra a presença de duas fases: a fase absorvente (ABS) e a fase ativo-assimétrico (AA), indicando a extinção da fase de ativo-simétrico (AS) apresentada no caso sem desordem e no caso de desordem isotrópica (figura 5.2). O diagrama apresentado na figura 5.4 indica que o aumento da desordem na sub-rede afetada provoca um aumento da região correspondente a fase absorvente e, consequentemente, uma redução na fase AA.

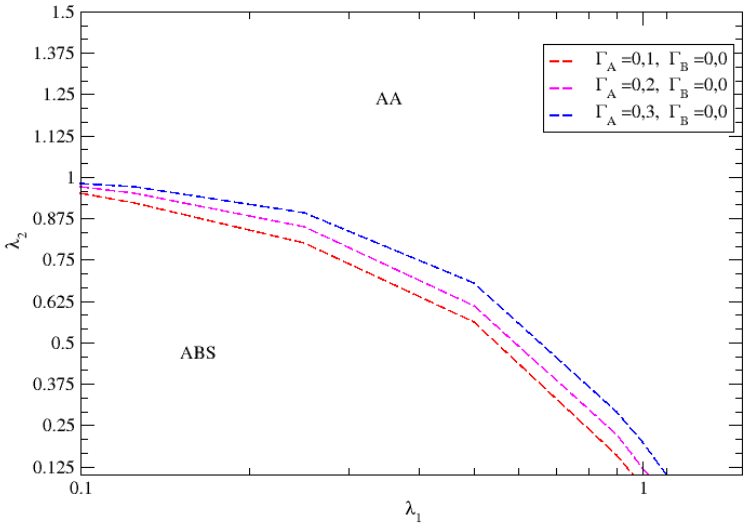


Figura 5.4: Diagrama de fases no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ contendo as fases absorvente (ABS) e ativo-assimétrico (AA). Note que a transição ocorre da fase inativa diretamente para a fase ativo-assimétrico.

Diferentemente do caso onde a inserção de desordem foi feita isotropicamente, o fato de considerarmos ($\Gamma_A \neq \Gamma_B$) impossibilita a determinação de uma fórmula fechada para análise da variação de ρ e de ϕ. Dessa forma, os resultados apresentados aqui são fruto da técnica numérica de análise gráfica de sistema de equações transcendentais (bisseção). A resolução desse sistema constituído pelas equações 5.8 e 5.9 considerando o estado estacionário ($d\rho_A/dt = d\rho_B/dt = 0$) fornece os valores das raízes ρ_A e ρ_B em função de λ_2. Os valores dessas raízes em função de λ_2 são apresentados na figura 5.5. A figura apresenta os valores calculados para $\Gamma_A = 0,1$ e $\Gamma_B = 0,0$, mas o aspecto se repete para os demais valores de desordem apresentados aqui ($\Gamma_A = 0,2$ e $\Gamma_A = 0,3$ com $\Gamma_B = 0,0$.)

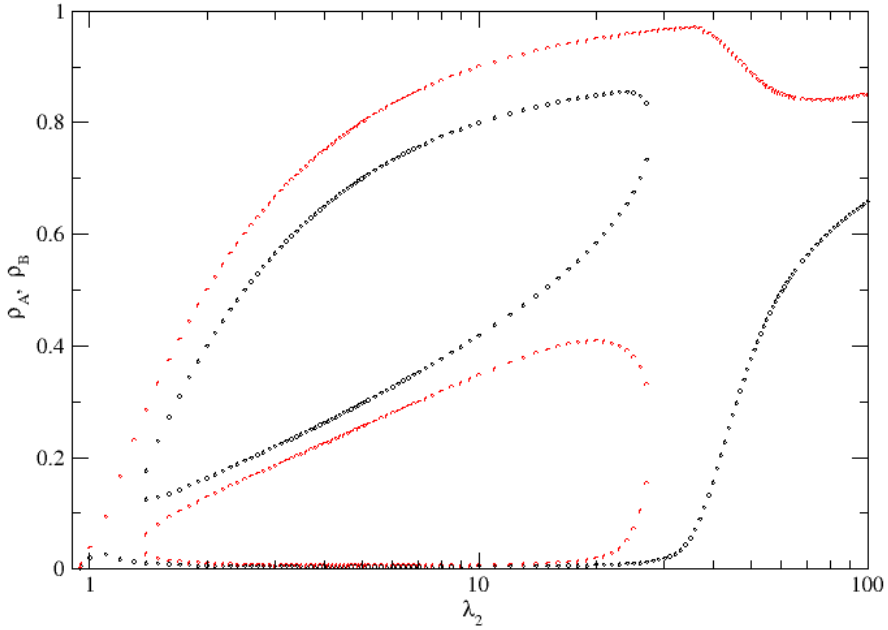


Figura 5.5: Raízes ρ_A (pontos vermelhos) e ρ_B (pontos pretos) versus λ_2.

A figura 5.5 mostra que, para vários casos um mesmo valor de $\lambda 2$ está relacionado à três valores diferentes de ρ_A e ρ_B. Porém, os casos em que ρ_A são maiores que ρ_B foram descartados. Isso se justifica pelo fato de que a

sub-rede A possui desordem e a sub-rede B não, então o caso $\rho_A > \rho_B$ não possui sentido físico já que a desordem diminui os sítios disponíveis para a criação de novas partículas e a não-linearidade do termo de inibição diminui ainda mais a criação na sub-rede desordenada.

Semelhantemente a desordem isotrópica, a desordem anisotrópica também faz os valores de λ_c aumentarem (de forma menos expressiva) em relação a Γ, porém, a transição de fase simétrico-assimétrico deixa de existir (λ_c=$\lambda_{c,SS} = \lambda_{c,AS}$) e o sistema passa diretamente da fase inativa para a fase ativo-assimétrico. A transição de fase inativo-ativo ocorre para menores valores de λ_2 quando o sistema contém a desordem anisotrópica e um pouco maiores quando a desordem é distribuída com isonomia nas duas sub-redes. Isso leva a constatação de que a transição de fase é ditada pela rede que possui menor quantidade de sítios inertes, ou seja, a rede com menor índice de desordem. Além disso, o sistema perde seu caráter reentrante, já que a fase ativo-assimétrico deixa de existir somente para valores intermediários de λ_2 e passa a existir para valores mais altos de tal taxa (figura 5.6).

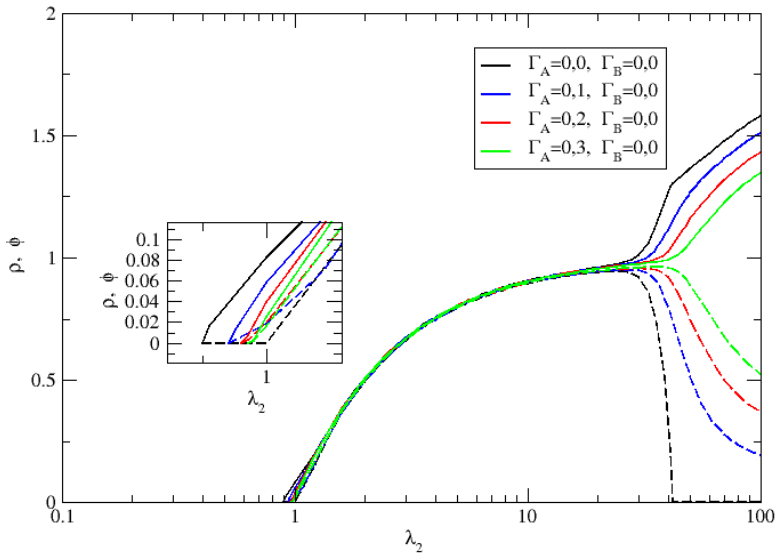


Figura 5.6: Comportamento médio de ρ (linhas cheias) e ϕ (linhas pontilhadas) para $\Gamma_A \neq \Gamma_B$. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$.

5.2 Resultados obtidos por simulações

As simulações foram realizadas utilizando as ideias apresentadas na seção 3.3, mas com uma diferenciação na determinação dos sítios. Além dos sítios ocupados ($\sigma_i = 1$) e dos sítios vazios ($\sigma_i = 0$), um índice adicional $\sigma_i = 2$ é utilizado para representar os sítios inertes na rede. A desordem é distribuída de forma aleatória na rede, considerando isotropia e anisotropia para tanto.

5.2.1 Desordem Isotrópica

Como esperado, independentemente do valor de Γ o sistema direciona-se ao estado absorvente para pequenos valores de λ_1 e λ_2. O aumento das taxas λ_1 e λ_2 leva o sistema a sofrer uma transição de fase do estado inativo para a fase ativo- simétrico (AS) e posteriormente uma segunda transição da fase de ativo-simétrico para ativo-assimétrico (AA). O incremento de λ_2 causa no sistema uma transição de fase da fase AA de volta para a fase AS, mostrando que o caráter reentrante do diagrama é mantido com a inserção de desordem isotrópica e isso confirma a predição feita pela TCM. Todos os resultados apresentados nessa seção foram obtidos utilizando $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$.

A figura 5.7 apresenta o comportamento das densidades ρ e ϕ em uma rede quadrada considerando a inserção de desordem isotrópica com Γ= 0,0, 0,1, 0,2 e 0,3.

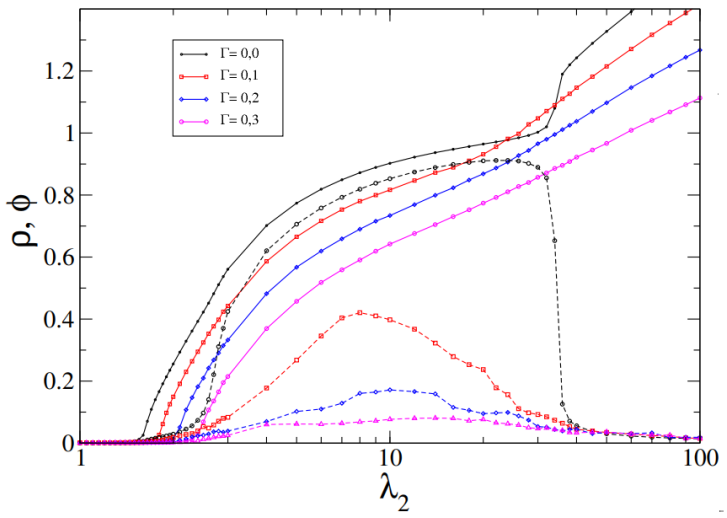


Figura 5.7: Densidades ρ e ϕ em uma rede quadrada, para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. Tamanho linear do sistema $L = 80$.

Como esperado, a transição para a fase absorvente ocorre para valores cada vez maiores de λ_2 conforme o valor de Γ é incrementado. A teoria de campo médio mostra que a fase de ativo-assimétrico sofre uma redução gradual em relação ao aumento da desordem na rede. Porém, a figura 5.7 mostra que, na realidade, a desordem é muito mais devastadora e provoca a destruição completa dessa fase quando Γ é ligeiramente maior que 0,3.

A desordem distribuída aleatoriamente nas sub-redes induz o aparecimento das chamadas fases de Griffiths, melhor definidas na seção 3.4.2 desse texto. A fim de analisar o aparecimento das fases de Griffiths para esse modelo, construiu-se o diagrama de decaimento 5.8 contendo a variação de ρ em função do tempo, variando-se o valor do parâmetro de controle (no caso λ_2, com λ_1 fixado em 0,1) nas proximidades do ponto crítico.

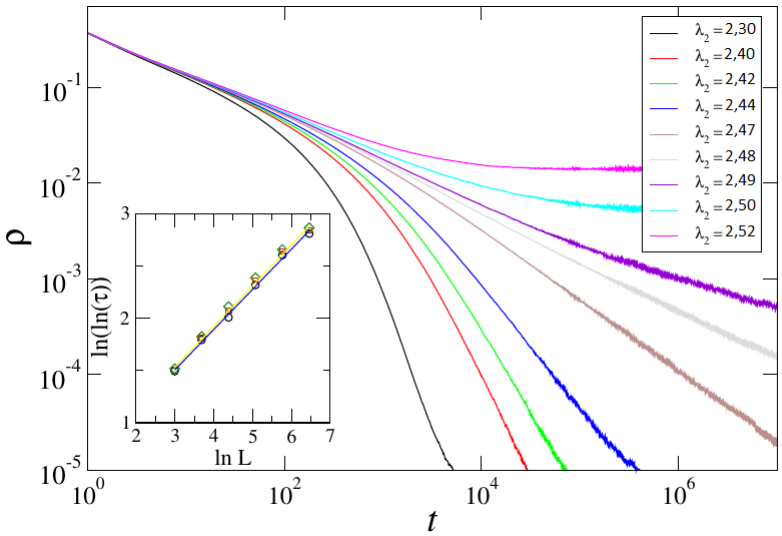


Figura 5.8: (a) Decaimento de sítios ativos em função do tempo. (b) Probabilidade de sobrevivência em função do tempo. Parâmetros: $L = 2000$ e $\mu = 2$.

A rede é inicializada com todos os sítios ativos. Para $\lambda_2 < \lambda_c$, como é o caso de $\lambda_2 = 2,40$, representado pela curva de cor vermelha, o sistema se encontra no estado subcrítico e a densidade de indivíduos decai até que a rede se esvazia após certo tempo (medido em passos de Monte Carlo). Para $\lambda_2 > \lambda_c$, como é o caso de $\lambda_2 = 2,52$, o sistema encontra-se no estado supercrítico e a densidade de indivíduos converge para um valor finito e não-nulo. Entre $\lambda_2 = 2,40$ (subcrítico) e $\lambda_2 = 2,50$ (supercrítico) observamos o

comportamento de quatro curvas com decaimento seguindo lei de potências e que compõem a região de fases de Griffthis.

No cenário em que o sistema se encontra na fase ativa, o tempo de vida do processo segue a relação $ln\tau \sim L^{\psi}$, onde ψ é um expoente universal. Os dados apresentados na figura 5.8 forneceram $\psi = 0,44(3)$, valor muito próximo de $\psi = 0,51(6)$ obtido do processo de contato diluído [19].

De forma análoga ao processo de contato diluído, o comportamento crítico possui probabilidade de sobrevivência $P_s \sim ln(t)^{-\delta}$, como mostrado também na figura 5.8. O valor obtido para o expoente dinâmico foi $\delta = 2,1(3)$, valor muito próximo do valor $\delta = 1,9(2)$ no PC com diluição aleatória [19], indicando que o comportamento crítico do processo de contato desordenado também está relacionado ao modelo de Ising Transverso com campo aleatório. Os resultados obtidos estão de acordo com as predições do critério de Harris (ver seção 3.4.1), onde $\nu_{\perp} = 0,734(4)$, confirmando a relevância da desordem nas transições de fase para estado absorvente.

Uma outra análise em torno do ponto crítico consiste na observação da variação do número de sítios ativos $n(t)$ via espalhamento (as simulações foram inicializadas com um par de sítios vizinhos ativos, um sítio em cada sub-rede). O valor crítico da taxa de transição λ_c é então definido como a menor taxa λ relacionada ao crescimento assintótico do número de partículas na rede. Esse processo é ilustrado na figura 5.9, fornecendo $\lambda_c = 2,491(1)$ para $\Gamma = 0,3$.

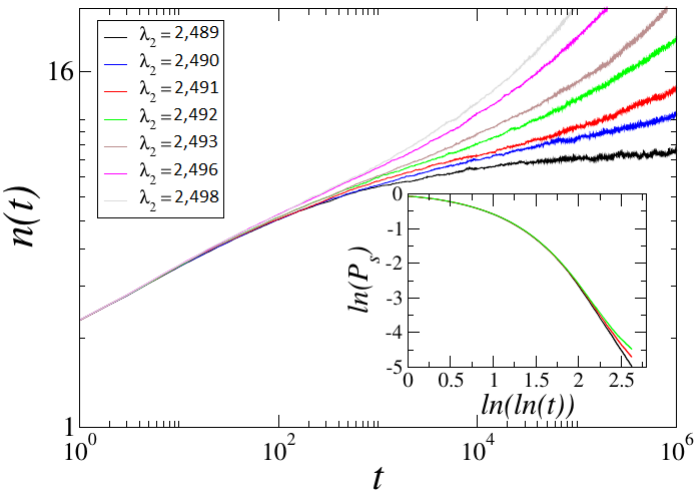


Figura 5.9: Espalhamento de ρ com desordem $\Gamma = 0,3$ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$.

Uma análise importante consiste na observação do sistema quando ele se aproxima do limite termodinâmico, onde $L \to \infty$. A figura 5.10 apresenta quatro gráficos: os dois gráficos da esquerda ((a) e (c)) são referentes ao modelo do processo de contato em sub-redes sem desordem apresentado no capítulo anterior, enquanto os dois gráficos da direita ((b) e (d)) mostram dados relacionados ao modelo de processo de contato em sub-redes com desordem de $\Gamma = 0,1$.

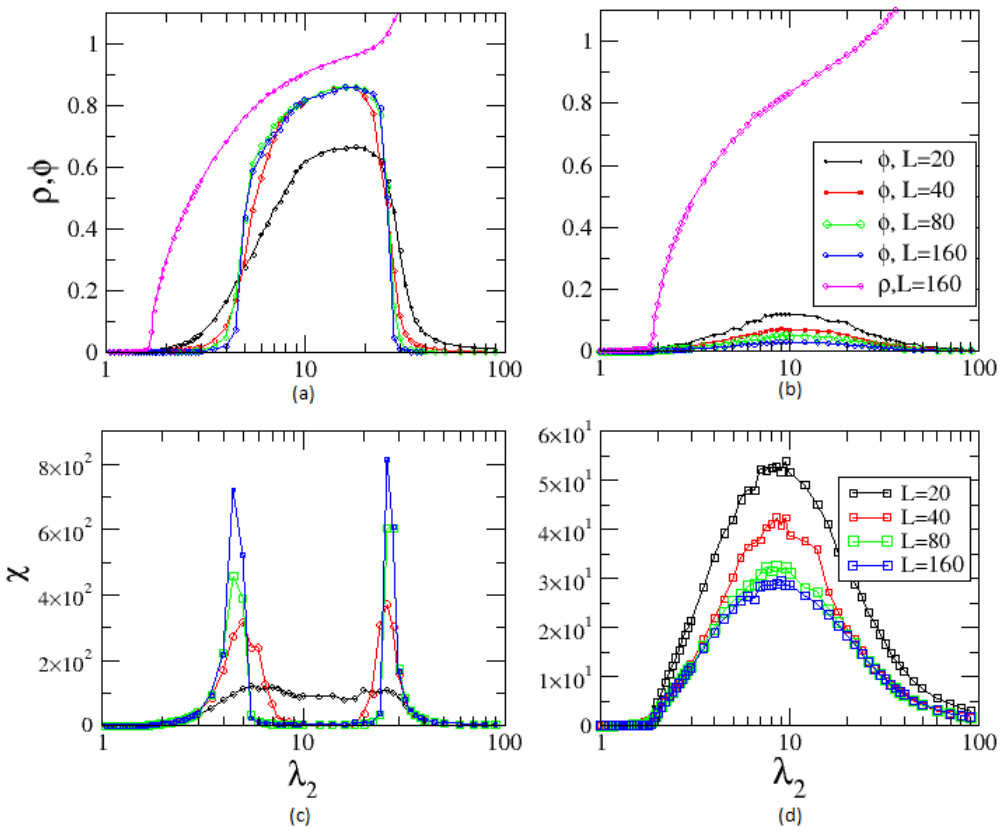


Figura 5.10: Densidades ρ e ϕ e variância de ϕ em uma rede quadrada, com $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$. A presença de picos em χ (figura (c)) indica os pontos onde ocorrem as transições AS-AA e a ausência desses pontos de descontinuidade em χ no sistema desordenado (gráfico (d)) confirma que a desordem destrói as transições AS-AA.

As figuras (a) e (b) apresentam o comportamento dos parâmetros de ordem ρ e ϕ para vários tamanhos de rede. A figura (a) mostra que, no sistema limpo (sem desordem) o diagrama continua reentrante e a região AA tende a um valor constante à medida que o tamanho do sistema é incremento. Já a figura (b) mostra o comportamento de ρ e ϕ no sistema desordenado com $\Gamma = 0,1$. Pode-se perceber que, à medida que o sistema tende ao limite termodinâmico, a região AA desaparece, ou seja, a transição AS-AA é totalmente destruída e o sistema passa a ter apenas a transição da fase inativa (absorvente) para a fase AS.

As figuras (c) e (d) mostram o comportamento da variância escalada $\chi = L^2(\langle\phi^2\rangle - \langle\phi\rangle^2)$ do parâmetro ϕ para um sistema sem e com desordem. A figura (c) mostra claramente dois picos em dois valores específicos de λ_2, sendo importante notar que, à medida que o tamanho do sistema é incrementado, os picos ficam cada vez mais estreitos e com maiores amplitudes, tendendo a uma descontinuidade nesses pontos quando $L \to \infty$. A presença desse tipo de descontinuidade em χ mostra exatamente o ponto de ocorrência de uma transição de fase. Em contrapartida, no sistema com desordem (figura (d)), A variância é bem comportada e o aumento de L faz com que ela convirja para valores específicos, ou seja, χ não diverge e isso reitera a afirmação de que a desordem destrói a transição AS-AA.

5.2.2 Desordem Anisotrópica

Variando a quantidade de sítios inativos em cada sub-rede de forma que a quantidade de sítios inertes na sub-rede A seja diferente da quantidade de sítios inertes da sub-rede B, é possível verificar computacionalmente os efeitos provocados pela desordem anisotrópica. Analisando a figura 5.11 pode-se perceber que mesmo um valor muito pequeno de Γ destrói a fase ativo-simétrico. Diferentemente da desordem isotrópica, a desordem anisotrópica provoca uma transição de fase do estado absorvente diretamente para a fase ativo-assimétrico. Corroborando com as predições da teoria de campo médio, pode-se perceber também que o diagrama perde seu caráter reentrante, já que não ocorre regresso à fase AS.

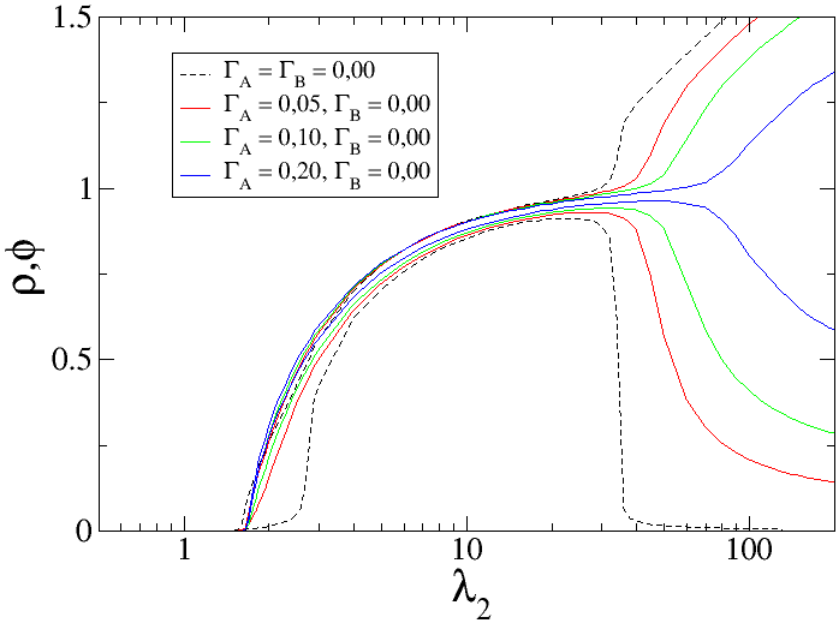


Figura 5.11: Desordem anisotrópica: densidades ρ e ϕ para $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0,1$ e $L = 80$.

Ainda nesse cenário, observa-se na criticalidade que a densidade ρ e o tempo de vida τ seguem as relações $\rho \sim L^{-\beta/\nu_\perp}$ e $\tau \sim L^z$ respectivamente. A figura 5.12 fornece $\beta/\nu_\perp$= 0,78(3) e z = 1,76(2),valores muito próximos dos valores de DP $\beta/\nu_\perp$= 0,797(3) e z = 1,7674(6) quando Γ_A = 0,1. Para Γ_A= 0,2, como mostrado na figura 5.13, obteve-se $\beta/\nu_\perp$= 0,81(2) e z = 1,75(3), valores que também estão em concordância com os valores desses expoentes da classe DP.

A razão de momentos do parâmetro de ordem $m = \langle\rho\rangle^2/\langle\rho^2\rangle$ vai para o valor universal m_c = 1,33(1) na criticalidade, novamente em conformidade com o valor de m_c = 1,3264(5) da classe DP.

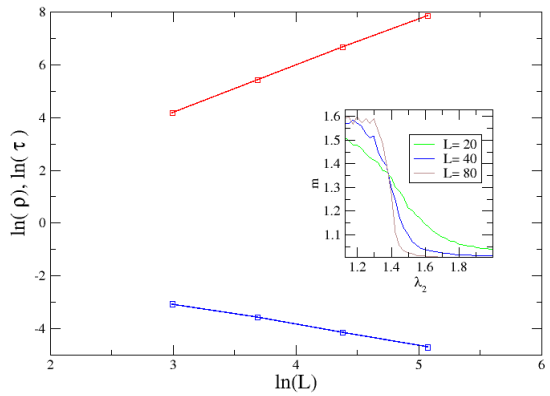


Figura 5.12: Desordem assimétrica, com $\Gamma_A = 0{,}1$ e $\Gamma_B = 0{,}0$: (a) Densidade quase estacionária (QS) de sítios ativos $\ln \rho$ (reta inferior) e tempo de vida $\ln \tau$ (reta superior) para o estado QS versus $\ln L$. (b) Razão de momentos m versus λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}1$.

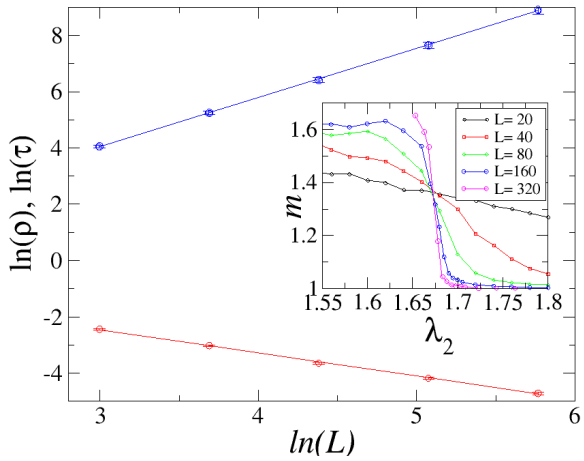


Figura 5.13: Desordem assimétrica, com $\Gamma_A = 0{,}2$ e $\Gamma_B = 0{,}0$: (a) Densidade quase estacionária (QS) de sítios ativos $\ln \rho$ (reta inferior) e tempo de vida $\ln \tau$ (reta superior) para o estado QS versus $\ln L$. (b) Razão de momentos m versus λ_2. Parâmetros: $\mu = 2$ e $\lambda_1 = 0{,}1$.

Capítulo 6

Conclusões

O presente trabalho foi desenvolvido com o intuito de analisar a influência da desordem congelada inserida em uma rede dividida em duas sub-redes A e B, de forma que as duas sub-redes sobrepostas formassem uma figura pictórica do tipo tabuleiro de xadrez. Para tanto, utilizou-se aqui duas vertentes principais: análise numérica utilizando a teoria de campo médio (TCM) e simulações utilizando o método de Monte Carlo.

As análises foram feitas considerando a inserção da desordem congelada de forma aleatória e de duas maneiras distintas: inserção isotrópica, com as sub-redes submetidas à mesma intensidade de desordem e a inserção anisotrópica, onde uma delas foi acometida pela desordem e a outra permaneceu inalterada.

A teoria de campo médio forneceu resultados qualitativos contundentes e a grande maioria deles foi confirmada pelos resultados simulacionais.

Na construção da teoria de campo médio do modelo, a desordem foi inserida de forma a diminuir a quantidade de sítios disponíveis para a criação de novas partículas, sendo analisada a influência da desordem para exclusão de sítios que variou de 0 a 30% do total de sítios da rede ou das sub-redes no caso da desordem anisotrópica.

Em consonância com o modelo original do processo de contato em sub-redes, o modelo proposto contendo a inclusão da desordem foi analisado através da construção de diagramas de fases e observação do comportamento dos parâmetros de ordem ρ e ϕ, que indicam o início da fase ativa e a transição por quebra de simetria, respectivamente.

Para a desordem inserida isotropicamente, o diagrama de fases plotado no plano $\lambda_1 - \lambda_2$ mostra que o diagrama permanece com seu caráter reentrante independentemente da quantidade de sítios inertes. Porém, à medida que Γ é incrementado e a região de ativo-assimétrico diminui gradualmente a

região absorvente aumenta. Apesar dessas características, percebe-se que o diagrama de fases mantêm o aspécto inerente ao diagrama de fases de um sistema limpo, com as regiões de ativo-assimétrico (AA), ativo-simétrico (AS) e absorvente (ABS) muito bem definidas.

Analisando a variação de ρ em função da taxa de criação λ_2, confirmou-se a reentrância do diagrama em relação às transições e foram definidos os valores críticos dessa taxa relacionados às transições. O aumento da desordem na rede provoca um aumento também no valor de λ_c, variando de $\lambda_c = 1$ para o sistema limpo a $\lambda_c = 1,44$ para a rede com 30 % dos sítios inertes.

Considerando a inserção anisotrópica da desordem, verificou-se que o diagrama de fases modifica radicalmente seu formato:ao invés de três regiões e três transições possíveis (ABS-AS, AS-AA, AA-AS), o diagrama apresenta somente a fase absorvente (ainda existente para valores pequenos de λ_1 e λ_2) e a fase ativo-assimétrico, ocorrendo transição direta entre essas duas fases, sem passar pela região de ativo-simétrico como no modelo original. Analisando o gráfico de ρ e ϕ em função de λ_2 percebe-se que o término da fase inativa coincide com o início da fase ativo-assimétrico, sendo que o valor crítico do parâmetro de controle varia de $\lambda_c = 1,0$ para o sistema limpo e $\lambda_c = 1,44$ para uma rede com $\Gamma_A = 0,3$.

Para corroborar ou retificar os resultados fornecidos pela teoria de campo médio, foram simulados vários cenários utilizando método de Monte Carlo. Através do gráfico ρ, ϕ versus λ_2 para desordem isotrópica percebeu-se que o diagrama permanece reentrante, porém, o aumento da desordem provoca uma redução muito expressiva da região de ativo-assimétrico. A teoria de campo médio prevê uma redução gradual dessa região. Porém, as simulações mostraram que essa redução não é nada desprezível, chegando ao total desaparecimento da fase em Γ pouco maior que 0,3. Além disso, as simulações mostraram que λ_c para a transição ABS-AA gira em torno de 2,46, valor confirmado por meio da análise da variação das razões de momentos.

Outra análise importante foi a medição da fase de Griffthis. Entre $\lambda_2 = 2,40$ (subcrítico) e $\lambda_2 = 2,50$ (supercrítico) observamos o comportamento de quatro curvas com decaimento seguindo lei de potências e que compõem a região de fases de Griffthis.

Analisando o modelo quando o sistema se aproxima do limite termodinâmico $L \to \infty$ (na simulação modelou-se ∞ como $L = 320$) obteve-se informações muito importantes. À medida que aumentamos o tamanho da rede, a região de ativo-assimétrico desparece, ou seja, a desordem destrói a transição por quebra de simetria (parâmetro ϕ). Plotando a variância χ de ϕ em função de

λ_2, observou-se claramente os picos referentes às transições ABS-AS, AS-AA e AA-AS para um sistema sem desordem. A variância no cenário desordenado converge para um valor médio à medida que aumentamos o tamanho da rede, sem picos. Isso confirma que a desordem realmente destrói a região de ativo-assimétrico.

Considerando a desordem inserida de forma anisotrópica, o gráfico ρ, ϕ versus λ_2 confirma as predições qualitativas da TCM. Os resultados simulacionais mostraram que a transição ocorre diretamente da fase inativa para a região de ativo-assimétrico e o diagrama já não possui mais a reentrância. Porém, os resultados quantitativos são bem diferentes, sendo obtido pelas simulações $\lambda_c = 1,7$, valor diferente de $\lambda = 1,08$ fornecido pela TCM para a mesma transição.

Outra conclusão muito importante é fornecida pela análise do comportamento da probabilidade de sobrevivência P_s em relação ao tempo. Obteve-se o valor do expoente crítico $\delta = 2{,}4$ próximo do valor $\delta = 1{,}9$ do PC com diluição, o que comprova que o sistema muda de classe de universalidade (de DP para Ising transverso com campo aleatório) na presença da desordem Isotrópica. Já no caso da desordem anisotrópica, obteve-se os expoentes $\beta/\nu_\perp = 0{,}81(2)$ e $z = 1{,}75(3)$, em concordância com os valores de DP $\beta/\nu_\perp = 0{,}797(3)$ e $z = 1{,}7674(6)$, o que mostra que a desordem anisotrópica não altera a classe de universalidade do sistema e isso comprova a previsão da TCM que o comportamento do sistema na criticalidade é ditado pela sub-rede com menor desordem quando $\Gamma_A \neq \Gamma_B$. Os resultados obtidos estão de acordo com as predições do critério de Harris, onde $\nu_\perp = 0,734(4)$, confirmando a relevância da desordem nas transições de fase para estado absorvente.

Alguns dos resultados deste trabalho estão condensados em um artigo, "*Quenched disorder in the contact process on sublattices*", em preparação para publicação na presente data. Como perspectivas futuras, espera-se também analisar a influência da inserção da desordem temporal nas sub-redes, onde a taxa de desordem Γ varia com o tempo.

Bibliografia

[1] Malte Henkel, Haye Hinrichsen e Sven Lübeck, *Non-equilibrium phase transitions*, Springer Science & Business Media B.V, vol.1, (2008).

[2] Haye Hinrichsen, *Non-equilibrium phase transitions*, Physica A, 369, p. 1-28, (2006).

[3] E. Salje, U. Bismayer, B. Wruck e J.Hensler, *Influence of lattice imperfections on the transition temperatures of structural phase transitions: the Plateau effect*, v.35, pp. 61-74, (1991).

[4] M. M. de Oliveira e R. Dickman, *Contact Process with sublattice symmetry breaking*, Phys. Rev. E. **84**, 011125 (2011).

[5] Gregg Jaeger, *Archive for history of exact sciences*, v. 53, p. 51-81, (1998).

[6] Gregg Jaeger, Archive for history of exact sciences, v. 53, p. 51-81, (1998).

[7] S. R. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (EdUSP, São Paulo, (1999)).

[8] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* , Parte 1, 3a edição, Pergamon Press, (1980).

[9] Rafael Zadorosny, Alice Presotto, Elwis C. S. Duarte e Edson Sardella, *Fenomenologia da Supercondutividade e Supercondutores Mesoscópicos*, UNESP-SP (2014).

[10] Stephanie Devlin e E. Roger Cowley, *Monte Carlo simulations of small model systems with phase transitions* (The Rutgers Scholar, vol.5, (2003)).

[11] D'Angeles Lé Pereira de Lima, *Simulação de comportamento crítico de um modelo de atividade neuronal em uma rede modular hierárquica*, dissertação de mestrado-UFMG (2016).

[12] A. B. Harris, *Contact Interations on a Lattice*, 1974 J. Phys. C 7, (1671).

[13] Adriana G. Dickman, Ronald Dickman e Fabrício Almeida Barbosa, *Transições de fase sem termodinâmica*, Revista brasileira de ensino de física, v. 28, n.1, p. 23-33, (2006).

[14] H. K. Janssen, *On the Non-Equilibrium Phase-Transition in Reaction-Diffusion Systems with an Absorbing Stationary State*, Z. Physik B, **42**, 151 (1981).

[15] P. Grassberger, *On Phase Transitions in Schliigl's Second Model* , Z. Physik B, **47**, 365 (1982).

[16] G. Grinstein, Z.W Lai and Dana A. Browne, *Conservation laws and universality in branching annihilating random walks*, Phys. Rev. A **40**, 4820 (1989).

[17] P. Grassberger, *Are damage spreading transitions generically in the universality class of directed percolation?*, J. Stat. Phys. **79**,13 (1995).

[18] P. Grassberger and A. de la Torre. *Reggeon field-theory (Schögl's first model) on a lattice: Monte Carlo calculation of critical behaviour.* Ann. of Phys., 122:373, (1979).

[19] T. Vojta, A. Farquhar and M. Mast, *Infinite-randomness critical point in the two-dimensional disordered contact process*, Phys. Rev. E **79**, 011111 (2009).

[20] Leo Radzihovsky, *Introduction to Quenched Disorder*, Department of Physics, University of Colorado, Boulder, CO 80309, USA, (2015).

[21] Kenny B. Lipkowitz, Thomas R. Cundari, Donald B. Boyd, *Reviews in Computational Chemistry*, vol.51, ed. Science (2008).

[22] Paolo Moretti e Miguel A. Muñoz, *Griffiths phases and the stretching of criticality in brain networks*,Nature comunications, 2521 (2013)).

[23] Pfeuty P. e Elliott R. J., *The Ising model with a transverse field. II. Ground state*, Phys. C: Solid State Phys. 4 2370 (1971).

[24] Shigetoshi Katsura, *Statistical Mechanics of the Anisotropic Linear Heisenberg Model*, Phys. Rev. 127, 1508 (1952).

[25] Pfeuty P., *The One-Dimensional king Model with a Transverse Field*, Annals of physics: 57, 79-90 (1970).

[26] Pfeuty P., *An exact result for the 1D random Ising model in a transverse field*, Physics Letters A, Volume 72, Issue 3, p. 245-246 (1979).

[27] R.R. dos Santos, *The two-dimensional bond-diluted transverse Ising Model at the zero temperature*, J. Phys. A: Math. Gen. 14 (1981) L179-L183.

[28] T. Vojta and M. Y. Lee, *Nonequilibrium phase transition on a randomly diluted lattice*, Phys. Rev. Lett. 96, 035701 (2006).

[29] NEWMAN, E. J.; BARKEMA, G. T. Monte Carlo methods in Statistic al Physics. Oxford:Claredon Press (1999).

[30] K. Binder, *Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization*, Phys. Rev. Lett. 47, 693 (1981).

[31] Salete Pianegonda e Carlos E. Fiore, *Contact processes with competitive dynamics in bipartite lattices: Effects of distinct interactions*, J. Stat. Mech. P05008, (2014).

[32] M.M. de Oliveira e C.E. Fiore, *Effects of diffusion in competitive contact processes on bipartite lattices*, J. Stat. Mech. 053211 (2017).

[33] J. Marro e R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, (1999)).

[34] W. Ytto , *From Computer to Brain*, Springer-Verlag, New York, (2002).

[35] S. Pianegonda e C.E. Fiore, J. Stat. Mech, *Order–disorder transition in the two-dimensional interacting monomer-dimer model: Ising criticality Su-Chan Park.* 2015,p08018 (2015).

[36] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, (1992)).

[37] Kazuo Hida, *New Universality Class in the S=1/2 Fibonacci Heisenberg Chains* (Faculty of Science, Saitama University, JAPAN, (2017)).

[38] M. M. de Oliveira and S. C. Ferreira, *Universality of the contact process with random dilution*, J. Stat. Mech P11001 (2008).

[39] Gerd Gigerenzer and Wolfgang Gaissmaier, *Heuristic Decision Making*,Center for Adaptive Behavior and Cognition, Max Planck Institute for Human Development, 14195 Berlin, Germany (2011).

[40] L. Hromkovic, *Algorithms for hand problems: introduction to combinational optimization, ramdomization, approximation and heuristics.* [S.I]; Springer-Verlag, London-Berlin-Heidelberg-New York (2001).

[41] Lars Onsager, *Crystal Statistics I. A two dimensional model with an order-disorder transition*, Physical Review, vol.65, (1944).

[42] C. N. Yang, *The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model* ,Phys. Rev. 85, 808 (1952).