



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

RILDER DE SOUSA PIRES

DIFUSÃO SINGULAR EM UM SISTEMA CONFINADO

FORTALEZA

2013

RILDER DE SOUSA PIRES

**DIFUSÃO SINGULAR EM UM SISTEMA
CONFINADO**

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

FORTALEZA

2013

RILDER DE SOUSA PIRES

DIFUSÃO SINGULAR EM UM SISTEMA CONFINADO

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física

Aprovada em 15/03/2013

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. André Auto Moreira (Orientador)
Universidade de Federal do Ceará

Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona
Universidade de Federal do Ceará

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior
Universidade de Federal do Ceará

Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes
Universidade Estadual de Maringá

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Setorial de Física

A000p de Sousa Pires,Rilder.
Difusão Singular em um Sistema Confinado / Rilder de Sousa Pires. – 2013.
64 p.;il.

Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Centro de Ciências, Fortaleza, 2013.
Área de Concentração: Física
Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira

1. Sistemas Complexos. 2. Invariância de escala. 3. Criticalidade Auto-organizada. 4. . 5. . I.

CDD:000.0

*Dedico esse trabalho
aos meus pais:
Deuzimar Pires de
Araújo e Antônia
Juvani de Sousa
Pires.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos os meus familiares que me apoiaram durante minha vida acadêmica, em especial meus pais: Deuzimar Pires de Araújo e Antônia Juvani de Sousa Pires.

Ao meu Professor e Orientador Prof. Dr. André Auto Moreira pelo acompanhamento e orientação.

Ao Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior e Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona pelas enormes contribuições e discussões a respeito do trabalho.

Aos demais amigos que acreditaram no meu sucesso.

Aos demais integrantes do Departamento de Física e do Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará pelo apoio recebido.

E ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq pelo financiamento.

*“A natureza é o único livro que oferece um
conteúdo valioso em todas as suas folhas.”*

Goethe

RESUMO

Padrões de invariância de escala, associados à leis de potência, são frequentemente observados na natureza. Alguns exemplos são: flutuações em preços de itens de bolsa de valores e outros investimentos, além do espectro de energia em sistemas turbulentos. Esses dois sistemas e vários outros que exibem invariância de escala têm propriedades em comum: compõem-se de vários elementos que interagem de forma não linear, estão fora do equilíbrio e exibem auto-organização. Invariância de escala também é encontrada nas correlações observadas no ponto crítico de sistemas que apresentam transições de fase. O conceito de criticalidade auto-organizada sugere que as propriedades de invariância emergem espontaneamente em sistema complexos. Vários modelos exibem propriedades criticamente auto-organizadas, entre eles percolação invasiva, pilhas de areia e o modelo de desníveis, no entanto, não se sabe ao certo quais os ingredientes necessários para criticalidade emergir. Sabe-se que essa propriedade se manifesta em alguns sistemas difusivos não lineares. Nesse trabalho, introduzimos um potencial confinante em um modelo de difusão unidimensional com uma não linearidade singular no coeficiente de difusão e analisamos a influência dessa mudança no estado estacionário do sistema. Conseguimos, então, derivar uma equação de difusão do modelo e obtemos uma solução para o perfil de densidade. Nossa solução analítica concorda perfeitamente com os resultados numéricos. Fizemos, ainda, um estudo estatístico do perfil de avalanches do modelo, e obtemos perfis de avalanche em leis de potência, o que normalmente não é observado em outros sistemas unidimensionais. Analisamos, ainda, como esses perfis variam na medida que se aumenta o confinamento, e usando transformações de escala encontramos uma curva universal para os perfis de distribuição de tamanhos de avalanche. Nossos resultados demonstram que a ação do confinamento em um sistema unidimensional pode levar ao surgimento da invariância de escala.

Palavras-chave: Sistemas Complexos. Invariância de escala. Criticalidade Auto-organizada.

ABSTRACT

Patterns of scale invariance, associated with power laws, are often found in nature, for instance, in the fluctuations of prices of items in stock markets and in the energy spectrum of turbulent systems. These two systems and many others that exhibit scale invariance present some common properties: they are comprised of several elements that interact in a non-linear way, are not in equilibrium, and exhibit self-organization. Scale invariance is also found in the correlations observed in the critical state of systems that present phase transitions. The concept of self-organized criticality suggests that the properties of invariance spontaneously arise in complex systems. Several models exhibit properties of self-organized criticality, including invasion percolation, sand-piles and the trough model, however it is not clear what are the necessary ingredients for criticality to arise. It is known that this property appears in some non-linear diffusive systems. In this work, we introduce a confining potential in a one-dimensional diffusion model with a singular non-linearity on diffusion coefficient, and analyze how this affects in the steady state of the system. We then derive a diffusion equation and obtain a solution for stationary density profile. Our analytical solution is in good agreement with the numerical results. We also present a statistical study of the distribution of avalanches sizes in this model, and obtain profiles following power laws, what is not usually observed in other one-dimensional systems. We also investigated how these profiles vary when the confinement increases, and using finite size scaling we found a universal curve for the distribution of avalanche sizes. Our results show that the action of confinement in a one-dimensional system can yield scale invariance.

Keywords: Complex systems. Scale invariance. Self-organized criticality.

LISTA DE FIGURAS

- 1 Valores da suscetibilidade magnética, χ_0 , do Níquel obtidos experimentalmente para diferentes valores de temperatura. O valor de χ_0 foi medido em *emu/g*. Os resultados mostrados na figura acima foram obtidos em uma fonte externa [12]. p. 23
- 2 Valores da magnetização espontânea M do Níquel obtidos experimentalmente para diferentes valores de temperatura. O valor de M foi medido em função da magnetização inicial M_0 e os de temperatura em função da *Temperatura de Curie* T_c . Os resultados mostrados na figura acima foram obtidos em uma fonte externa [13]. Nesse sistema, M desempenha o papel do *parâmetro de ordem* Ψ p. 24
- 3 Esboço do modelo de Percolação. Os quadrados menores representam os sítios. Os pretos e os vermelhos são os ocupados e os brancos os desocupados. Os sítios vermelhos representam os sítios que pertencem ao maior aglomerado da rede (i.e., o que possui mais sítios). p. 25
- 4 Transição de fase do modelo de percolação. Na figura, os sítios pretos e os vermelhos são ocupados e os brancos desocupados. Os sítios vermelhos representam os sítios que pertencem ao maior aglomerado da rede. As figuras foram geradas a partir de uma simulação de uma rede 200×200 a medida que seus sítios eram ocupados aleatoriamente. As figuras correspondem a $p = 0.4$, $p = 0.5$, $p = 0.593$, $p = 0.7$ e $p = 0.8$ da esquerda para a direita. p. 25
- 5 Probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado da rede em função da probabilidade de ocupação da rede. O resultado foi obtido através de uma média de 1000, 100 e 10 amostras para $N = 20$, $N = 200$ e $N = 2000$, respectivamente. p. 26
- 6 Aglomerados de uma rede de percolação para $p = p_c$. Na figura aglomerados diferentes foram representados com cores diferentes. Para desenhar essa figura foi utilizada uma rede 200×200 p. 27

7	Número de aglomerados de uma rede no ponto crítico em função do tamanho do aglomerado. A figura interior mostra o mesmo gráfico em log-log. A linha tracejada é uma lei de potência com expoente -2.05	p. 28
8	Densidade de espectro de potência, em função da frequência, da corrente de um resistor: O gráfico superior corresponde a um resistor de filme espesso baseado em IrO_2 medido a $T = 557K$; o gráfico inferior corresponde a um resistor baseado em rutenato, medido a $T = 300K$. Os valores de S são medidos em V^2Hz^{-1} e os de f em Hz . Os resultados foram obtidos em [26].	p. 29
9	Percolação invasiva com aprisionamento em uma rede 300×600 . O fluido invasor (colorido) entra pelos sítios no lado esquerdo e o defensor (branco) escapa pelo lado direito. Durante o avanço, o invasor encontra o lado direito invadindo 31802 sítios. Diferentes cores indicam sítios adicionados em intervalos de tempo $t = 2121$ sucessivos. Os resultados foram extraídos de [28]	p. 31
10	Esboço do modelo de pilhas de areia em uma dimensão. No caso mostrado acima, a pilha correspondente a $n = 4$ excede o limiar $z_c = 1$ e uma unidade de areia é deslocada para a pilha inferior.	p. 32
11	O gráfico da esquerda representa a distribuição de tamanho de aglomerados de escorregamento. O resultado foi obtido fazendo uma média entre 500 redes de tamanho 50×50 . A linha tracejada é uma linha reta com inclinação -0.98 . O gráfico da direita representa a distribuição de tempos de vida pesados pela resposta média s/t . O resultado foi obtido fazendo uma média entre 500 redes de tamanho 50×50 . A linha tracejada é uma linha reta com inclinação -0.45 . Para gerar esses resultados foram utilizadas perturbações do tipo mostrado na Eq. (2.43).	p. 34
12	O gráfico a esquerda corresponde ao ruído gerado pela superposição incoerente da dissipação das avalanches e a direita a densidade de espectro de potência do gráfico da esquerda. O ruído mostrado no gráfico da esquerda é conhecido como <i>ruído rosa</i> ou <i>ruído $1/f$</i>	p. 35

13	Esboço do modelo de dois níveis. Os sítios com um círculo dentro representam os sítios ocupados e os vazios representam os desocupados. As unidades de areia “saltam” de um sítio até o próximo sítio desocupado à direita e a esquerda com taxa 1. Na figura acima, a curva $\rho(x)$ representa qualitativamente o perfil de densidade.	p. 36
14	Perfil de densidade numérico (linha sólida) e analítico (linha tracejada). O resultado analítico é obtido através da Eq. (2.53) com $\alpha = 1$, enquanto o resultado numérico foi obtido através da média temporal dos $h(i)$. Para gerar essa figura, foi utilizado $N_s = 10000$ e a média temporal foi feita em 1000000 passos de tempo.	p. 39
15	Perfil de densidade de saltos numérico para diferentes valores de N_s . O gráfico interno mostra a transformação de escala dos resultados numéricos. A transformação de escala utilizada corresponde a Eq. (2.55) com $\beta = \nu = 1/2$. A linha tracejada corresponde a curva universal apresentada na Eq. (2.56).	p. 40
16	Esboço do modelo de dois estados. Esse modelo é uma variação do modelo de Calrson no qual a partícula vai para direita ou para a esquerda e cujos saltos são aceitas se $U_i > U_j$ e quando $U_i < U_j$ as transições são aceitas com probabilidade $e^{-\beta(U_i - U_j)}$	p. 42
17	Perfis de densidade numérico para $K = 20$ e diferentes valores de N . Do gráfico de cima para o de baixo, mostramos a correspondência entre o modelo discreto e a aproximação do contínuo, onde $\rho(x) \approx \langle h_i \rangle$ e $x \approx (i - N_s/2)/N$	p. 46
18	Perfis de densidade numérico e semi-analítico do modelo descrito anteriormente. O resultado numérico (símbolos) foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para $N = 200$. As setas mostram a variação no comportamento dos gráficos quando se aumenta o valor de K . O resultado semi-analítico (linha sólida) foi obtido variando μ na Eq. (3.10) até que a Eq. (3.11) fosse satisfeita.	p. 47
19	Perfis de distribuição de saltos numérico para diferentes valores de K . O resultado foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para $N = 200$. As setas mostram a variação no comportamento dos gráficos quando se aumenta o valor de K	p. 48

20	Fração de saltos aceitos por unidade de tempo em função de K . Como é de se esperar \mathcal{N}_τ diminui na medida que K aumenta, uma vez que fica mais fácil saltos serem recusados.	p. 49
21	Derivada da fração de saltos recusados como função de K . Veja que a taxa com que os saltos são recusados possui um valor máximo que depende de N	p. 50
22	Perfis de distribuição de saltos numérico (linha sólida) e semi-analítico (linha tracejada). A simulação corresponde a $N = 200$ e $K = K_c$. O perfil semi-analítico foi obtido por meio das Eqs. (3.12) e (3.13) aplicadas nos valores de ρ_i obtidos numericamente.	p. 50
23	No gráfico da esquerda, temos os perfis de densidade em $K = K_c$ para diferentes valores de N . No gráfico da direita, temos os perfis de distribuição de saltos numérico para diferentes valores de K . O resultado foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para diferentes valores de N . Os valores de K foram escolhidos como o máximo da derivada do número de saltos recusados mostrados na Fig. 21.	p. 51
24	Transformação de escala para os perfis de distribuição de saltos encontrados na Fig. 23. A reta tracejada corresponde a uma lei de potência com expoente -1.	p. 51

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 15
2	FUNDAMENTOS	p. 16
2.1	Cadeias de Markov	p. 16
2.2	Equação Mestra	p. 18
2.3	Caminhante Aleatório Unidimensional	p. 19
2.4	Criticalidade	p. 21
2.4.1	A Teoria do Fenômeno Crítico	p. 21
2.4.2	Modelo de Percolação	p. 24
2.5	Criticalidade Auto-organizada	p. 28
2.5.1	Percolação Invasiva	p. 29
2.5.2	Modelo BTW	p. 31
2.5.3	Modelo dos Desníveis	p. 35
3	MODELO DOS DESNÍVEIS CONFINADO	p. 41
3.1	Descrição do Modelo	p. 41
3.2	Equação de Difusão	p. 42
3.3	Solução Estacionária	p. 44
3.4	Resultados e Discussões	p. 45
4	CONCLUSÃO	p. 52
	REFERÊNCIAS	p. 53

Apêndice A – Desenvolvimento da Equação de Difusão para o Modelo de Desníveis	p. 55
Apêndice B – Desenvolvimento da Equação de Difusão para o Modelo de Desníveis Confinado	p. 57
Apêndice C – Desenvolvimento Analítico dos Somatórios do Modelo de Desníveis com e sem Confinamento	p. 60
C.1 Produtório das Probabilidades Consecutivas.	p. 60
C.2 Somatórios da Matriz de Transição	p. 61
C.2.1 Somatório das Transições Difusivas	p. 62
C.2.2 Somatório das Transições de Arrastamento	p. 63
C.2.3 Somatório dos Termos Proporcionais à U''	p. 64

1 INTRODUÇÃO

Sabemos que alguns sistemas apresentam transições de fase, e que nesse ponto onde ocorre a transição de fase pode-se observar invariância de escala em algumas de suas propriedades. Esse ponto é conhecido como ponto crítico e a obtenção desse regime se dá por meio da variação cuidadosa de um parâmetro externo, que deve atingir um valor bem específico. Dessa forma, a ocorrência de sistemas no ponto crítico aconteceria apenas de forma acidental na natureza [1].

Contudo, sistemas fora do equilíbrio são também muito comuns na natureza e algumas vezes a dinâmica deles leva à formação de padrões de invariância de escala. Como explicar então a existência desses padrões na natureza? A resposta dessa pergunta é que a dinâmica desses sistemas possui o ponto crítico como o estado estacionário. Dessa forma, o sistema evolui naturalmente para um estado que apresenta invariância de escala. Esse comportamento é o que ficou conhecido como criticalidade auto-organizada.

Alguns modelos computacionais apresentam essa característica de evoluírem dinamicamente para um estado que apresenta propriedades que exibem invariância de escala. Um deles é o modelo de percolação invasiva, que foi desenvolvido com o propósito de entender como um fluido desloca outro fluido dentro de um meio poroso. Nesse modelo, a massa invadida pelo fluido no final do processo exibe invariância de escala. Outro modelo que reproduz esse aspecto da natureza é o *modelo BTW* (Bak, Tang e Wintefeld) [2]. Esse modelo pode ser estudado como um modelo de difusão não linear e apesar de ser um modelo simples do ponto de vista numérico, sua abordagem analítica é bastante complexa.

Outros modelos de difusão não linear mostraram características similares ao BTW. Um deles é o *Modelo de Desníveis* apresentado por Carson et al. [3]. Nesse estudo, faremos uma modificação desse modelo introduzindo um potencial externo confinante e analisaremos qual a influência disso na dinâmica do problema. Com isso, pretendemos ver se é possível encontrar uma situação onde o sistema apresenta invariância de escala no estado estacionário, bem como outras características interessantes que possam aparecer.

2 FUNDAMENTOS

Nesse capítulo, abordaremos alguns conceitos fundamentais para o desenvolvimento analítico do último capítulo. Na primeira seção, discutiremos as Cadeias de Markov que serão utilizadas para o desenvolvimento da equação mestra na seção seguinte. Na Seção 2.3, mostraremos como aplicar o método da *Equação Mestra* a um problema simples conhecido como *Caminhante Aleatório*, e além disso obtemos o limite contínuo desse problema com o intuito de tornar mais claro o desenvolvimento das equações mestras que aparecem na Seção 2.5.3 e no Cap. 3. Nas Seções 2.4 e 2.5, abordaremos os conceitos de criticalidade e criticalidade auto-organizada, além de alguns modelos que serão importantes para as discussões do último capítulo.

2.1 Cadeias de Markov

Quando uma variável aleatória depende de um parâmetro t ela é chamada de função aleatória ou de variável estocástica se t representar o tempo. A partir de agora, iremos considerar processos estocásticos em que tanto o tempo quanto a variável estocástica possam ser discretizados. Nesse caso, quando a variável estocástica x_t assume valores inteiros e $t = 0, 1, 2, 3, \dots$, um processo estocástico fica definido completamente até o instante n pela distribuição de probabilidade conjunta [4]

$$P_n(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \tag{2.1}$$

de que x_t tome o valor x_0 no instante $t = 0$, o valor x_1 no instante $t = 1$, o valor x_2 no instante $t = 2$, ..., e o valor x_n no instante $t = n$ [4].

Agora, considere a probabilidade condicional

$$P_{n+1}(x_{n+1}|x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) \tag{2.2}$$

de que a variável estocástica x_t tome o valor x_{n+1} no instante $t = n+1$, dado que ela tenha

tomado o valor x_0 no instante $t = 0$, o valor x_1 no instante $t = 1$, o valor x_2 no instante $t = 2, \dots$, e o valor x_n no instante $t = n$. Se ela for igual à probabilidade condicional

$$P_{n+1}(x_{n+1}|x_n) \quad (2.3)$$

de que a variável estocástica x_t tome o valor x_{n+1} no instante $t = n + 1$, dado que ela tenha tomado o valor x_n no instante $t = n$, então o processo estocástico é um processo Markoviano. Ou seja, um processo Markoviano é aquele em que a probabilidade condicional de x_t tomar um determinado valor num determinado instante depende somente do valor que ela tenha tomado no instante anterior [4].

Dessa forma, usando a definição de probabilidade condicional [4], podemos obter a seguinte fórmula:

$$P_n(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) = P_n(x_n, x_{n-1}) \dots P_2(x_2, x_1) P_1(x_1, x_0) P_0(x_0). \quad (2.4)$$

Assim, o processo Markoviano fica completamente definido pelas probabilidades condicionais e pela probabilidade inicial $P_0(x_0)$.

Podemos definir agora a probabilidade $P_n(x_n)$ de que a variável x_t tome o valor x_n no instante $t = n$ independentemente de quais valores ela tenha tomado nos instantes anteriores

$$P_n(x_n) = \sum P_n(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (2.5)$$

onde o somatório ocorre em todos os x_0, x_1, \dots, x_{n-1} mas não sobre x_n [4]. Se usarmos a Eq. (2.4), obtemos a seguinte equação de recorrência:

$$P_n(x_n) = \sum_{x_{n-1}} P_n(x_n|x_{n-1}) P_{n-1}(x_{n-1}). \quad (2.6)$$

Dessa forma, dado $P_0(x_0)$ e $P_i(x_i|x_{i-1})$ com $i = 1, 2, \dots, n$, $P_n(x_n)$ pode ser obtido em qualquer instante [4].

A probabilidade condicional $P_{n+1}(x_{n+1}|x_n)$ é interpretada como a *probabilidade de transição* do estado x_n para o estado x_{n+1} . De forma geral, ela pode depender do instante considerado. Ou seja, a probabilidade de transição entre dois estados poderia ser diferente para cada instante de tempo. Contudo, considerando apenas processos Markovianos cujas probabilidades de transição não variam no tempo, podemos escrever

$$P_{n+1}(x_{n+1}|x_n) = T(x_{n+1}|x_n) \quad (2.7)$$

e então a Eq. (2.6) se torna

$$P_n(x_n) = \sum_{x_{n-1}} T(x_n|x_{n-1})P_{n-1}(x_{n-1}), \quad (2.8)$$

ou de uma forma mais simplificada [4]

$$P_n(i) = \sum_j T(i, j)P_{n-1}(j). \quad (2.9)$$

A matriz $T(i, j)$ é conhecida como *Matriz Estocástica* e a Eq. (2.9) como *Cadeia de Markov*. Essa expressão será utilizada na próxima seção para o desenvolvimento da *Equação Mestra*.

2.2 Equação Mestra

Considere a matriz estocástica $T(i, j)$ de uma cadeia de Markov. Suponha que as transições ocorram a cada intervalo de tempo τ e que a matriz estocástica seja dada por

$$T(i, j) = \tau W(i, j), \quad i \neq j \quad (2.10)$$

e

$$T(i, i) = 1 - \tau\Omega(i). \quad (2.11)$$

Nas equações acima, $W(i, j)$ é interpretada como a *probabilidade de transição de j para i por unidade de tempo*, ou ainda, *taxa de transição de j para i* [4]. Já $\Omega(i)$ representa uma probabilidade de não permanência em i por unidade de tempo. Suponha ainda que τ seja pequeno de modo que a probabilidade de permanência no mesmo estado seja muito próxima da unidade [4]. A probabilidade

$$\sum_j T(j, i) = 1 \quad (2.12)$$

implica

$$\Omega(i) = \sum_{j \neq i} W(j, i). \quad (2.13)$$

Vamos examinar em seguida a evolução da probabilidade $P_n(i)$ de o sistema estar no estado i no n -ésimo intervalo de tempo, que escrevemos na forma

$$P_{n+1}(i) = \sum_{j \neq i} T(i, j)P_n(j) + T(i, i)P_n(i) \quad (2.14)$$

ou ainda, usando as Eqs. (2.10) e (2.11) [4],

$$P_{n+1}(i) = \tau \sum_{j \neq i} W(i, j) P_n(j) + P_n(i) - \tau \Omega(i) P_n(i). \quad (2.15)$$

Definindo a probabilidade de estado i no instante $t = n\tau$ por $P(i, t) = P_n(i)$, então

$$\frac{P(i, t + \tau) - P(i, t)}{\tau} = \sum_{j \neq i} W(i, j) P(j, t) - \Omega(i) P(i, t). \quad (2.16)$$

No limite $\tau \rightarrow 0$, o lado esquerdo se torna a derivada temporal de $P(i, t)$ de modo que

$$\frac{dP(i, t)}{dt} = \sum_{j \neq i} W(i, j) P(j, t) - \Omega(i) P(i, t). \quad (2.17)$$

Usando a Eq. (2.13), podemos escrever ainda:

$$\frac{dP(i, t)}{dt} = \sum_{j \neq i} \{W(i, j) P(j, t) - W(j, i) P(i, t)\}. \quad (2.18)$$

que é conhecida como *Equação Mestre*. Veja que agora o tempo aparece de forma contínua na equação, contudo a variável espacial i permanece discreta.

2.3 Caminhante Aleatório Unidimensional

Na seção anterior, foi mostrada a derivação da *Equação Mestre*. Para isso, passamos de uma descrição discreta do tempo para uma descrição contínua. Nessa seção, escolhemos um problema simples conhecido como *Caminhante Aleatório Unidimensional* para ilustrar a passagem de uma descrição discreta do espaço para uma descrição contínua.

Suponha uma partícula vinculada a se mover sobre uma reta. Inicialmente ela se encontra na origem e então inicia seu movimento de tal forma que ela se move uma distância δ para a direita com probabilidade p e para a esquerda com probabilidade $q = 1 - p$ [4]. Se tomarmos $p = q = 1/2$, obtemos o caso do caminhante aleatório unidimensional isotrópico. Esse modelo é um bom exemplo, devido sua simplicidade, para aplicarmos a equação mestre. Vamos, então, escrever a probabilidade de transição do problema $W(i, j)$. Antes disso, podemos escrever a probabilidade de encontrar uma partícula no sítio i em um instante n como:

$$P_n(i) = \frac{1}{2} P_{n-1}(i+1) + \frac{1}{2} P_{n-1}(i-1). \quad (2.19)$$

Assim, a partir das Eqs. (2.9) e (2.10), podemos obter

$$W(i, j) = \frac{1}{2\tau} (\delta_{j,i+1} + \delta_{j,i-1}), \quad (2.20)$$

onde $\delta_{i,j}$ é definida de tal forma que:

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Dessa forma:

$$\frac{dP(i, t)}{dt} = \frac{1}{2\tau} [P(i+1, t) - 2P(i, t) + P(i-1, t)]. \quad (2.21)$$

Substituindo $x = i\delta$, obtemos:

$$\frac{dP(x, t)}{dt} = \frac{1}{2\tau} [P(x + \delta, t) - 2P(x, t) + P(x - \delta, t)], \quad (2.22)$$

No limite $\delta \rightarrow 0$, chegamos ao seguinte resultado

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.23)$$

Onde

$$D = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{2\tau}.$$

A Eq. (2.23) corresponde a equação tradicional de difusão em uma dimensão. Uma solução para essa equação pode ser obtida para o caso onde

$$\begin{aligned} P(x, t) &= 0 && \text{quando } x \rightarrow \pm\infty \\ \frac{P(x, t)}{dx} &= 0 && \text{quando } x \rightarrow \pm\infty \end{aligned}$$

e cuja condição inicial é $P(x, t) = \delta(x)$. Onde $\delta(x)$ é definido de tal forma que:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x = 0 \\ 0 & \text{se } x \neq 0 \end{cases}$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Nesse caso, podemos aplicar a transformada de Fourier em ambos os lados da Eq. (2.23) e obter

$$\frac{d\mathcal{F}\{P\}(k, t)}{dt} = -Dk^2 \mathcal{F}\{P\}(k, t). \quad (2.24)$$

Cuja solução é

$$\mathcal{F}\{P\}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-Dk^2 t}. \quad (2.25)$$

uma vez que $\mathcal{F}\{P\}(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} P(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Aplicando a transformada inversa obtemos:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-Dk^2 t} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt(k - \frac{ix}{2Dt})^2} dk. \quad (2.26)$$

Dessa forma,

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (2.27)$$

O desvio quadrático médio pode, então, ser calculado diretamente por

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx = 2Dt \quad (2.28)$$

que é um resultado familiar [5, 6].

2.4 Criticalidade

Nessa seção, iremos analisar como fenômenos críticos aparecem na natureza e como a física estatística tenta abordá-los. Na primeira subseção iremos fazer um breve resumo histórico e conceitual sobre a teoria do fenômeno crítico e como exemplo de um modelo que explica esses fenômenos abordaremos, na segunda subseção, o modelo de percolação.

2.4.1 A Teoria do Fenômeno Crítico

A teoria do fenômeno crítico tem uma longa história [7]. Desde muito tempo, as pessoas já se preocupavam em classificar diferentes materiais encontrados na natureza. Essa classificação era feita de acordo com suas propriedades. Elas observavam que gases, líquidos, e sólidos possuíam diferentes comportamentos. Atualmente, materiais normais e superfluidos são identificados como estando em fases distintas, assim como há uma distinção entre diferentes fases de materiais magnéticos, ferroelétricos entre outros [8].

Quando aumentamos a temperatura da água e mantemos sua pressão constante, ela entra em ebulição em uma temperatura bem definida. Para cada valor de pressão existe uma temperatura correspondente de transição. Assim, no diagrama temperatura-pressão existe uma linha que representa essa transição. Na medida que se aumenta a temperatura e a pressão ao longo dessa linha, a diferença entre a densidade do líquido e do vapor se torna cada vez menor até que vai a zero em um valor bem definido de temperatura e pressão [4]. É nesse valor de temperatura e pressão que temos o ponto crítico.

Vários outros fenômenos na natureza possuem um comportamento similar ao apresen-

tado anteriormente. Um deles é o fluxo de um líquido ou um gás dentro de um meio poroso. Esse fenômeno é conhecido como percolação e um modelo geométrico para estudá-lo será apresentado na Seç. 2.4.2.

Historicamente, a primeira observação de um ponto crítico ocorreu no século XIX quando Andrews [9] descobriu um ponto peculiar no plano temperatura-pressão do dióxido de carbono onde as características do líquido e do gás eram indistinguíveis. Trinta anos depois, Pierre Curie [10] descobriu a transição ferromagnética do ferro e percebeu a similaridade dos dois fenômenos [7]. Essa transição de fase pode ser observada quando uma substância ferromagnética é aquecida e perde sua magnetização numa temperatura bem definida. A partir dessa temperatura a substância se torna paramagnética [4].

Para estudar os fenômenos descritos acima, é interessante trazer a noção de *parâmetro de ordem*, cuja propriedade mais importante é assumir valor nulo na fase desordenada e valor não nulo na fase ordenada*. No caso da transição líquido-vapor, ele pode ser definido como a diferença entre as densidades do líquido e do vapor. No sistema ferromagnético, podemos defini-lo simplesmente como a magnetização espontânea do sistema. Em ambos os sistemas, o parâmetro de ordem se anula acima da temperatura crítica [4].

Apesar da teoria clássica das transições críticas de Landau não ter sido quantitativamente bem sucedida, ela introduziu vários conceitos importantes. Uma das consequências importantes da teoria de Landau é a existência de um parâmetro de ordem para qualquer transição de fase [11]. Na teoria de Landau, o sistema sofre uma quebra de simetria espontânea e uma consequente transição de fase associada a um parâmetro de ordem Ψ . A transição é induzida por um parâmetro de controle p tal que, acima de um valor crítico p_c , o estado estacionário é desordenado ($\Psi = 0$) e que abaixo desse valor o estado estacionário é ordenado ($\Psi \neq 0$) [4]. Em geral, nas vizinhanças da transição de fase, o *parâmetro de ordem* pode ser escrito em termos do parâmetro de controle da seguinte forma

$$\Psi \sim |p - p_c|^\beta \quad (2.29)$$

Além disso, a *suscetibilidade* χ se comporta também como uma lei de potência

$$\chi \sim (p - p_c)^{-\gamma} \quad (2.30)$$

Os expoentes β e γ são denominados *expoentes críticos*, contudo os valores de β e γ , extraídos por meio da teoria de Landau não coincidem com os valores obtidos experimentalmente. Isso é explicado analisando a teoria de Landau como uma descrição aproximada

*As vezes o parâmetro de ordem é definido como o contrário.

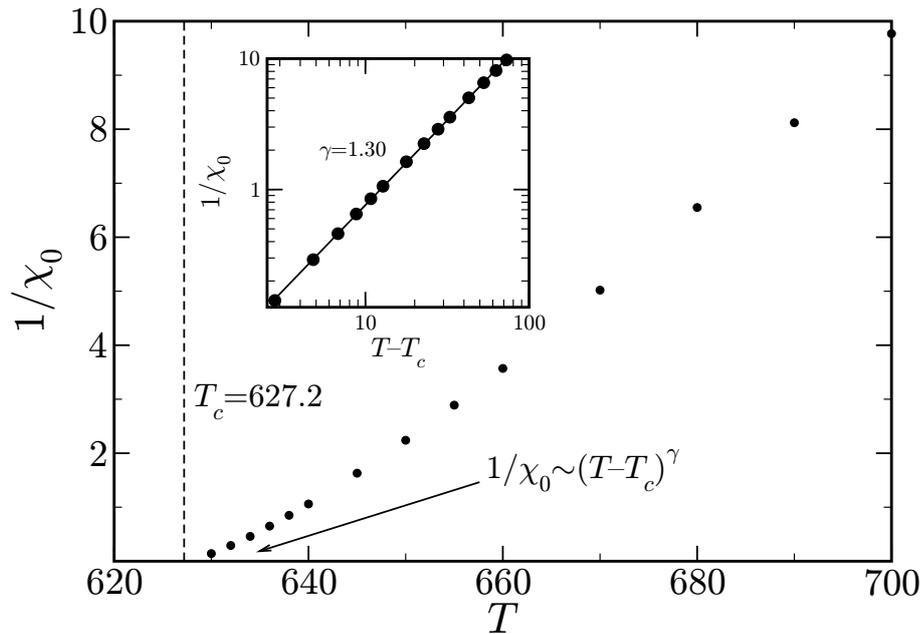


Figura 1: Valores da suscetibilidade magnética, χ_0 , do Níquel obtidos experimentalmente para diferentes valores de temperatura. O valor de χ_0 foi medido em emu/g . Os resultados mostrados na figura acima foram obtidos em uma fonte externa [12].

dos *fenômenos críticos* [4].

Além dos expoentes relacionados a Ψ e χ é possível, ainda, definir outros expoentes críticos. Um deles vem da expressão para o *comprimento de correlação espacial* que se comporta da seguinte forma

$$\xi \sim (p - p_c)^{-\eta}, \quad (2.31)$$

Experimentalmente, se observa um comportamento para a *suscetibilidade magnética* da seguinte forma forma [12]:

$$\chi_0^{-1} \sim (T - T_c)^\gamma \quad T > T_c \quad (2.32)$$

ou seja, similar ao descrito anteriormente na Eq. (2.30), para $T = p$ e $T_c = p_c$. Onde T é a temperatura do ímã e T_c é a temperatura crítica onde o ímã perde sua imantação. Essa temperatura é conhecida como *Temperatura de Curie*. A Fig. 1 expressa essa dependência observada experimentalmente para o Níquel, já a Fig. 2 mostra a dependência da *magnetização* para o mesmo metal.

O interessante desses sistemas é que eles não possuem uma escala característica, ao contrário de outros sistemas encontrados na natureza. Ou seja, flutuações de todas as escalas de tamanho são importantes [14]. Essa característica é manifestada sob a forma de *leis de potência* como a mostrada nas Eqs. (2.29) e (2.30), que são “assinaturas” de

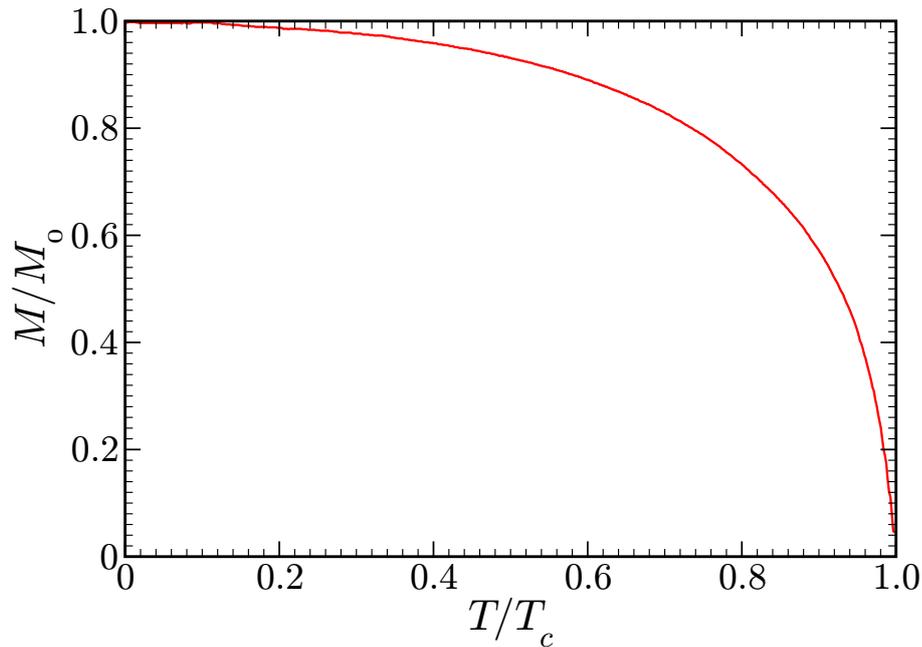


Figura 2: Valores da magnetização espontânea M do Níquel obtidos experimentalmente para diferentes valores de temperatura. O valor de M foi medido em função da magnetização inicial M_0 e os de temperatura em função da *Temperatura de Curie* T_c . Os resultados mostrados na figura acima foram obtidos em uma fonte externa [13]. Nesse sistema, M desempenha o papel do *parâmetro de ordem* Ψ .

um fenômeno crítico. Outro fator interessante, é que empiricamente pode-se classificar todos os sistemas críticos em *classes de universalidades*, onde seus integrantes possuem os mesmos *expoentes críticos* [15].

2.4.2 Modelo de Percolação

Suponha um modelo bidimensional para estudar o fluxo em um meio poroso. Para isso, imagine um quadrado subdividido em vários quadrados menores, como o mostrado na Fig. 3. Isso é o que chamamos de rede quadrada e cada quadrado menor é o que chamamos de sítio. Um sítio possui dois estados distintos, ocupado ou desocupado e dois sítios são classificados como vizinhos quando eles compartilham um mesmo lado. Quando observamos vários sítios vizinhos entre si dizemos que eles pertencem ao mesmo aglomerado. O que mostramos na Fig. 3 é apenas uma representação do modelo de percolação[†]. Na realidade, estamos interessados nas características desse modelo quando o tamanho da rede é grande o suficiente para desprezarmos os efeitos provocados pelos sítios da fronteira, os chamados *efeitos de borda* [16] e outros efeitos de tamanho finito.

[†]Por questões práticas, tratamos aqui apenas do modelo de percolação de sítio. Para um tratamento mais aprofundado sobre percolação veja [16].

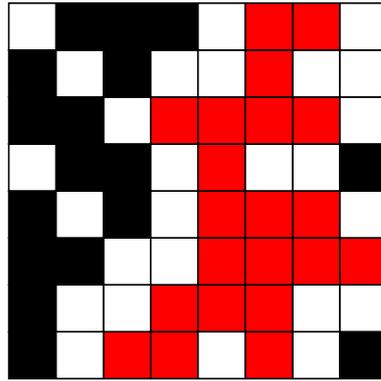


Figura 3: Esboço do modelo de Percolação. Os quadrados menores representam os sítios. Os pretos e os vermelhos são os ocupados e os brancos os desocupados. Os sítios vermelhos representam os sítios que pertencem ao maior aglomerado da rede (i.e., o que possui mais sítios).

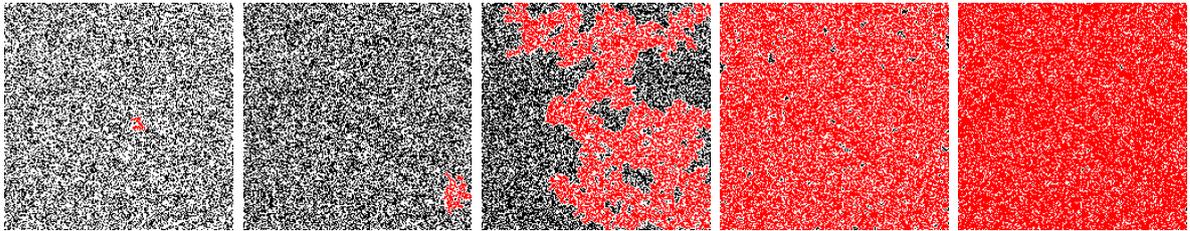


Figura 4: Transição de fase do modelo de percolação. Na figura, os sítios pretos e os vermelhos são ocupados e os brancos desocupados. Os sítios vermelhos representam os sítios que pertencem ao maior aglomerado da rede. As figuras foram geradas a partir de uma simulação de uma rede 200×200 a medida que seus sítios eram ocupados aleatoriamente. As figuras correspondem a $p = 0.4$, $p = 0.5$, $p = 0.593$, $p = 0.7$ e $p = 0.8$ da esquerda para a direita.

Esse modelo possui duas fases distintas, uma onde existem vários aglomerados pequenos e uma onde existe na rede um aglomerado cujo tamanho é da ordem do tamanho do sistema, como mostra a Fig. 4.

A transição dessas duas fases pode ser observada se estudarmos a probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado da rede, Ψ , em função da fração de sítios ocupados, p . Isso pode ser observado na Fig. 5.

Veja que, a medida que se aumenta o tamanho da rede, o curva se torna cada vez mais descontínua por volta de $p \approx 0.593$, valor o qual é conhecido como *ponto crítico*[‡] de percolação para essa rede [16].

De um modo geral, toda quantidade relacionada ao modelo de percolação é função

[‡]O ponto crítico na realidade depende de características geométricas da rede. O valor apresentado aqui corresponde ao ponto crítico de percolação de sítios em uma rede quadrada. Para um tratamento mais aprofundado sobre isso veja [16].

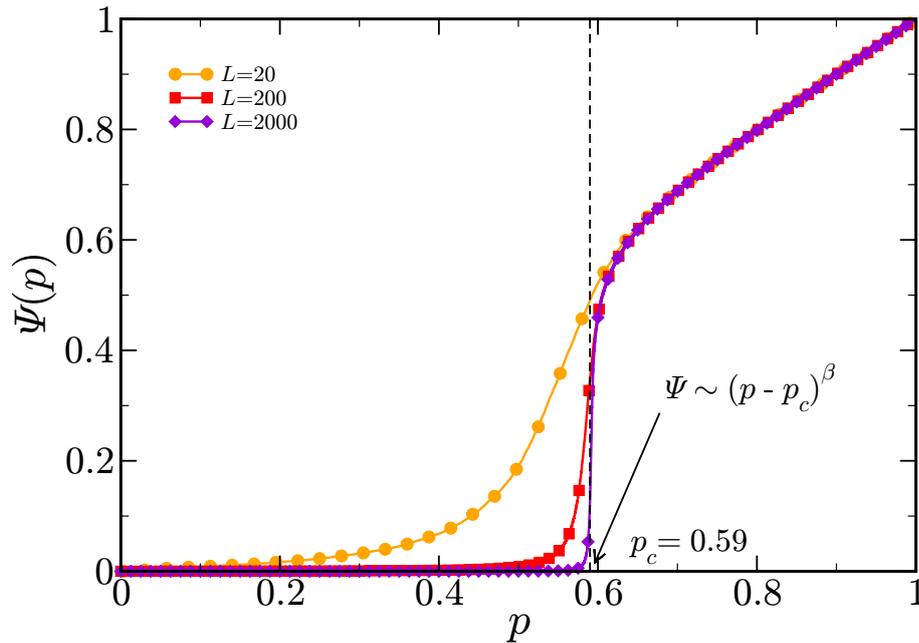


Figura 5: Probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado da rede em função da probabilidade de ocupação da rede. O resultado foi obtido através de uma média de 1000, 100 e 10 amostras para $N = 20$, $N = 200$ e $N = 2000$, respectivamente.

de p e depende de detalhes microscópicos do sistema, por exemplo, o número vizinhos do sítio. Contudo, a maioria delas obedece leis de escala, próximo ao ponto crítico, que são insensíveis à estrutura da rede e aos detalhes microscópicos. Dessa forma, podemos escrever as principais leis de escala da seguinte forma [17]

$$\Psi(p) \sim (p - p_c)^\beta, \quad (2.33)$$

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^\eta, \quad (2.34)$$

$$X(p) \sim (p - p_c)^{\beta_{BB}}. \quad (2.35)$$

Ψ é o parâmetro de ordem, que já foi definido anteriormente, ξ é o comprimento de correlação, e X que é a fração de sítios da *espinha dorsal*[§] [17]. Apesar dos expoentes clássicos de percolação serem diferentes dos apresentados na seção anterior, esse modelo pode ser comparado com o problema de transição de fase ferromagnética-paramagnética apresentado anteriormente.

Devemos, porém, tomar alguns cuidados quando comparamos os *parâmetros de ordem* nos dois casos. No caso apresentado na seção anterior, temos que para temperaturas acima de uma certa temperatura crítica T_c , o parâmetro de ordem é zero e para baixas temperaturas ele é não nulo. O parâmetro de ordem para percolação, por outro lado é

[§]Essa quantidade corresponde a fração de sítios ocupados no aglomerado infinito por onde o fluxo ou a corrente passa efetivamente.

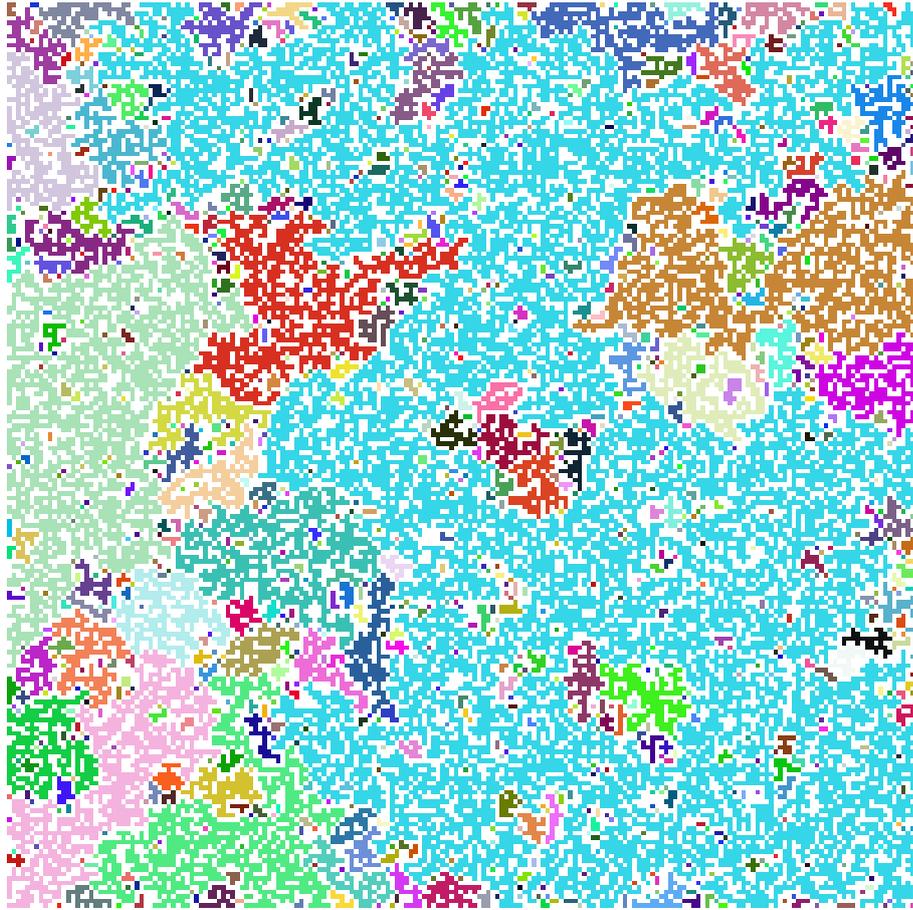


Figura 6: Aglomerados de uma rede de percolação para $p = p_c$. Na figura aglomerados diferentes foram representados com cores diferentes. Para desenhar essa figura foi utilizada uma rede 200×200 .

identificado como a probabilidade do sítio pertencer ao maior agregado da rede, que é zero para $p < p_c$ e não nulo para $p > p_c$. Assim, em analogia com transições térmicas devemos tomar cuidado com o sinal, $p - p_c$ corresponde à $T_c - T$ e não à $T - T_c$. Além disso, o *parâmetro de ordem* no ferromagnetismo pode ter pelo menos duas direções, entretanto a probabilidade Ψ tem uma direção única [16].

Outro fato interessante a respeito desse modelo é que no *ponto crítico* a rede possui aglomerados de todos os tamanhos, como mostra a Fig. 6.

Na verdade, o número de aglomerados depende do tamanho do aglomerado, também, de acordo com uma lei de potência [16]

$$N(s)_{p=p_c} \sim s^{-\tau}, \quad (2.36)$$

conforme mostra a Fig. 7. Onde s é o tamanho do aglomerado e τ é conhecido como *expoente de Fisher*.

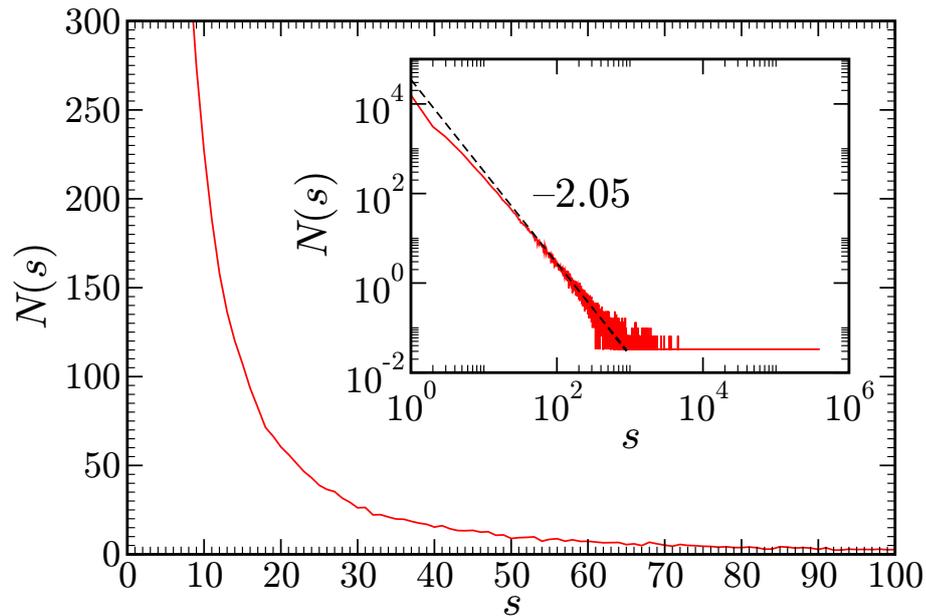


Figura 7: Número de aglomerados de uma rede no ponto crítico em função do tamanho do aglomerado. A figura interior mostra o mesmo gráfico em log-log. A linha tracejada é uma lei de potência com expoente -2.05 .

Historicamente, o modelo de percolação foi primeiro estudado por Flory e Stockmayer durante a segunda guerra mundial, quando eles estudavam um modelo pra descrever a transição de solvente para gel [16]. Contudo, o início da teoria de percolação é normalmente associado às publicações de Broadbent e Hammersley em 1957 [18]. Apesar mais de cinquenta anos desde a criação do modelo de percolação, esse assunto ainda é alvo de publicações recentes [19, 20, 21].

2.5 Criticalidade Auto-organizada

É importante ressaltar que os sistemas descritos na seção anterior se tratam de processos no equilíbrio. Contudo, processos fora do equilíbrio são bastante comuns na natureza. Um fato interessante sobre esses sistemas é a ocorrência comum de dois fenômenos. O primeiro é um efeito espaço temporal conhecido com ruído $1/f$; o segundo está relacionado à evolução de estruturas com propriedades auto-similares [1].

O ruído $1/f$ tem sido observado, por exemplo, na luz dos quasars [22], na intensidade das manchas solares, na corrente através de resistores [23], no fluxo de areia de uma ampulheta [24], no fluxo de rios como o Nilo [1] e até mesmo nos índices de preço de bolsas de valores [25]. A Fig. 8 mostra a densidade de espectro de potência de um resistor.

Como vimos na Seç. 2.4.1, a presença de flutuações em lei de potência é observada na

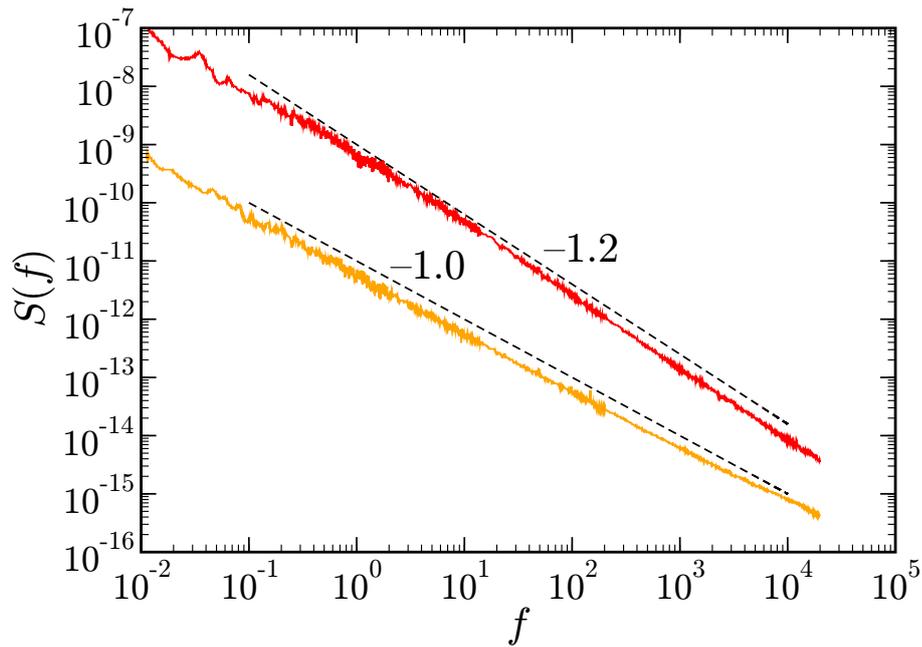


Figura 8: Densidade de espectro de potência, em função da frequência, da corrente de um resistor: O gráfico superior corresponde a um resistor de filme espesso baseado em IrO_2 medido a $T = 557K$; o gráfico inferior corresponde a um resistor baseado em rutenato, medido a $T = 300K$. Os valores de S são medidos em V^2Hz^{-1} e os de f em Hz . Os resultados foram obtidos em [26].

criticalidade. Ou seja, o sistema que apresenta essas flutuações provavelmente se encontra no *ponto crítico*. Então a pergunta geral sobre esses sistemas é: Porque esses sistemas se encontram naturalmente no ponto crítico? O que foi proposto por Bak, Tang e Wiesenfeld [2] foi que existe um mecanismo natural que leva alguns sistemas dinamicamente para o ponto crítico. Esse tipo de comportamento é o que ficou conhecido como criticalidade auto-organizada. Para explicar esse comportamento, eles propuseram um modelo chamado *pilhas de areia*, que posteriormente ficou conhecido como *modelo BTW* que será discutido na Seq. 2.5.2. Anteriormente, vamos discutir o modelo de *Percolação Invasiva* por questões cronológicas.

2.5.1 Percolação Invasiva

Percolação invasiva se trata de um modelo criado para estudar o deslocamento de um fluido por outro fluido em um meio poroso. Quando foi introduzido em 1983 por Wilkinson e Willemsen [27], esse modelo contribuiu para a compreensão do processo de deslocamento na produção de petróleo uma vez que se trata do modelo mais simples cuja a frente de deslocamento do fluido não possui nem a forma nem sua dinâmica triviais [28].

Tanto o modelo de percolação tradicional quanto o modelo de percolação invasiva

possuem características similares, uma delas é que ambos levam a formação de padrões de auto-similares. No processo, existem dois fluidos, o *fluido invasor* que é injetado no sistema e o *fluido defensor* que é extraído do sistema, de tal forma que o entendimento da dinâmica das frentes de deslocamento é essencial para a compreensão do problema.

A dinâmica de um processo no qual um fluido como a água é injetado dentro de um meio poroso pode ser bem complicada, porém se analisarmos apenas o caso onde o fluido é injetado lentamente dentro do meio, podemos desprezar as forças viscosas e considerar apenas as forças de capilaridade. Essas forças são maiores nos poros que possuem canais mais estreitos, logo a dinâmica do processo é determinada pelo raio r do poro. É interessante tanto do ponto de vista de um modelo teórico simples como do ponto de vista experimental representar os deslocamentos como uma série de avanços discretos nos quais a cada passo de tempo a água desloca petróleo do menor poro disponível [28].

No modelo de Wilkinson e Willemsen [27], uma rede regular era simulada de tal forma que os sítios e ligações representavam poros e canais que recebiam raios aleatórios. Convencionalmente, os valores dos raios dos poros são estipulados de forma aleatória dentro de um intervalo contínuo entre 0 e 1, e os canais mais propícios à invasão são invadidos instantaneamente. Após isso, identificam-se os *sítios de crescimento* que são os sítios que pertencem ao fluido defensor e fazem fronteira com o fluido invasor. A cada passo de tempo, o sítio de crescimento de menor raio é invadido [28].

Outro fato que deve ser levado em consideração é o aprisionamento do fluido defensor pelo fluido invasor. Isso ocorre quando o fluido invasor avança e cerca completamente o fluido defensor. Como o petróleo é incompressível, o modelo de Wilkinson e Willemsen [27] possui uma regra que remove os sítios de crescimento da região completamente cercada por fluido invasor da lista de sítios de crescimento. Essa regra proíbe a invasão de regiões aprisionada de petróleo pela água, esse processo ocorre também no processo real de extração de petróleo e dá origem do que é conhecido como “petróleo residual”, um grande problema da indústria de petróleo [28].

Na Fig. 9, encontram-se os resultados de uma simulação de percolação invasiva retirados de [28]. Como é indicado na legenda abaixo da figura, cada cor representa sítios adicionados em um intervalo de tempo $t = 2121$. O número de sítios do agregado final, $M(L)$, que pertencem a parte central $L \times L$ de uma rede $L \times 2L$, escala com o tamanho da rede [28] da seguinte forma:

$$M(L) \sim L^D, \quad D \approx 1.82, \quad (2.37)$$

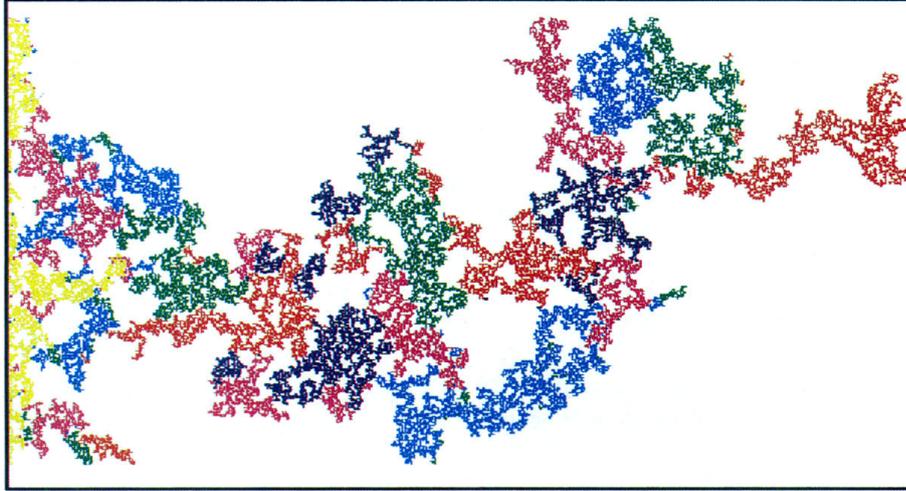


Figura 9: Percolação invasiva com aprisionamento em uma rede 300×600 . O fluido invasor (colorido) entra pelos sítios no lado esquerdo e o defensor (branco) escapa pelo lado direito. Durante o avanço, o invasor encontra o lado direito invadindo 31802 sítios. Diferentes cores indicam sítios adicionados em intervalos de tempo $t = 2121$ sucessivos. Os resultados foram extraídos de [28]

onde D é a dimensão fractal de M .

Podemos comparar esses resultados como os de percolação tradicional. Se fizermos isso, vemos que os dois possuem algumas diferenças, a primeira é que nesse processo, não existe análogo para probabilidade de ocupação e a segunda, é que percolação invasiva é um processo dinâmico com uma sequência definida de sítios invadidos. Contudo, em percolação tradicional, quando $p = p_c$, o maior aglomerado também obedece a Eq. (2.37), mas com uma dimensão fractal maior $D = 91/48 \approx 1.895$ [28]. Caso a restrição da incompressibilidade do fluido defensor seja removida, o valor de D para o processo de percolação invasiva adquire o mesmo valor da dimensão fractal do maior agregado no ponto crítico em Percolação tradicional. Dessa forma, o processo de percolação invasiva pode ser compreendido como um processo dinâmico que leva o sistema a um estado que possui características críticas. Essa seria, então, a primeira aparição de um modelo que apresenta *criticalidade auto-organizada*.

2.5.2 Modelo BTW

O Modelo BTW, também conhecido como *modelo de pilhas de areia*, foi um modelo criado para simular criticalidade auto-organizada proposto por Bak, Tang e Wintefeld [2] em 1987. Para entender esse modelo vamos considerar o caso unidimensional onde $h(n)$ é um valor inteiro que representa a altura do n -ésimo sítio da pilha. Podemos definir um

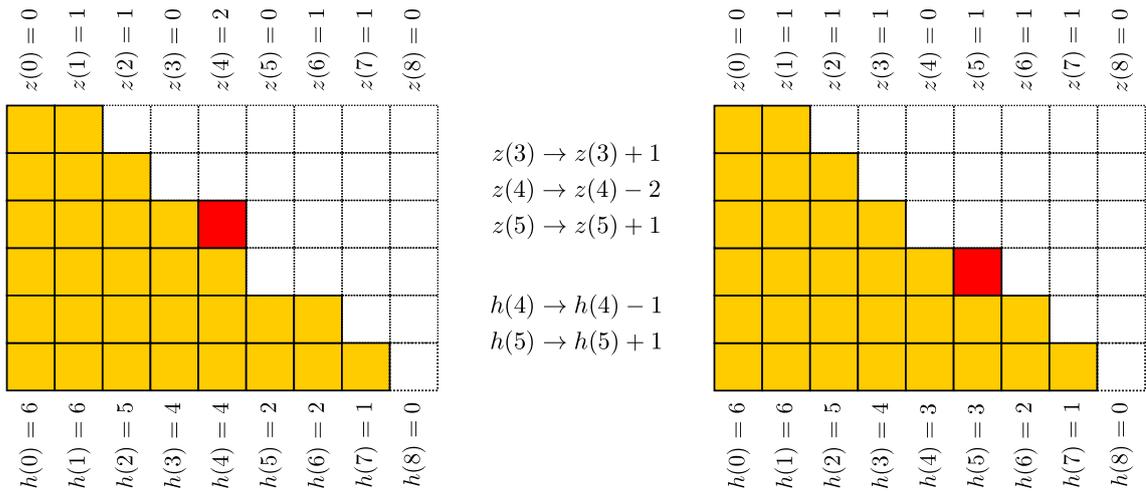


Figura 10: Esboço do modelo de pilhas de areia em uma dimensão. No caso mostrado acima, a pilha correspondente a $n = 4$ excede o limiar $z_c = 1$ e uma unidade de areia é deslocada para a pilha inferior.

valor $z(n) = h(n) - h(n + 1)$ como sendo a inclinação local da pilha. O sistema segue, então, uma dinâmica que modela a metade de uma pilha de areia simétrica. A variável $z(n)$ evolui da seguinte forma:

$$\begin{aligned} z(n) &\rightarrow z(n) - 2, \\ z(n \pm 1) &\rightarrow z(n \pm 1) + 1, \end{aligned} \quad (2.38)$$

quando $z(n) > z_c$. Isso corresponde a transferência de uma unidade de areia para a pilha inferior, uma vez que

$$\begin{aligned} h(n) &\rightarrow h(n) - 1, \\ h(n + 1) &\rightarrow h(n + 1) + 1. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Veja que o limiar z_c corresponde ao que seria a tangente do ângulo crítico em uma pilha real. Inicialmente, o sistema é colocado em uma estado onde $z(n) \gg z_c$ e então evolui de acordo com a Eq. (2.38) até que o sistema esteja em equilíbrio. Um esboço do modelo é mostrado na Fig. 10. O sistema tem então sua condição de equilíbrio testada e uma série de análises é feita a respeito da resposta do sistema ao teste realizado. Segundo Bak [1], o modelo unidimensional é interessante do ponto de vista conceitual, contudo o estado estacionário é crítico apenas em um sentido restrito. Um comportamento bem mais interessante é observado em duas dimensões.

O modelo bidimensional de pilhas de areia é semelhante apresentado anteriormente,

e a inclinação local da pilha segue a seguinte dinâmica:

$$\begin{aligned} z(x, y) &\rightarrow z(x, y) - 4, \\ z(x, y + -1) &\rightarrow z(x, y + -1) + 1, \\ z(x + -1, y) &\rightarrow z(x + -1, y) + 1, \end{aligned} \tag{2.40}$$

quando $z(x, y) > z_c$. Aqui z representa a soma da diferença entre as alturas das pilhas nas duas direções [1]. Partindo de uma configuração $z(x, y) \gg z_c$ análoga ao modelo unidimensional com as seguintes condições de contorno:

$$z(0, y) = z(x, 0) = z(N, y) = z(x, N) = 0 \tag{2.41}$$

e perturbando o sistema através da adição de unidades de areia ao sistema

$$\begin{aligned} z(x - 1, y) &\rightarrow z(x - 1, y) - 1, \\ z(x, y - 1) &\rightarrow z(x, y - 1) - 1, \\ z(x, y) &\rightarrow z(x, y) + 2, \end{aligned} \tag{2.42}$$

o sistema atinge uma dinâmica estacionária equivalente a partir de uma superfície reta $z = 0$ perturbando o sistema através da adição de uma unidade de inclinação ao sistema [1]

$$z(x, y) \rightarrow z(x, y) + 1. \tag{2.43}$$

O modelo descrito pela dinâmica mostrada nas Eqs. (2.40) e (2.43) evolui de tal forma que no estado de equilíbrio várias leis de potência se manifestam. Os gráficos mostrados na Fig. 11 mostram a *distribuição de tamanhos de avalanches* e a *distribuição de tempos de vida das avalanches* para esse caso.

Pode-se também analisar o espectro de potência do modelo, que é obtido a partir do ruído gerado pela superposição incoerente das dissipações de todas as avalanches [1]. A *densidade de espectro* apresenta uma dependência do tipo $1/f^\alpha$ que de acordo com Per Bak et al. é consequência das leis de potência mostradas na Fig. 11. De acordo com Bak et al. [2], seu modelo de pilhas de areia mostra a relação estreita entre a emergência de um *ruído rosa*, um outro nome para o ruído $1/f$ falado na Seq. 2.5, e a formação de estruturas *fractais*. O espectro de potência para o modelo é mostrado na Fig. 12.

Outro fato interessante é que o modelo BTW, na realidade, pode ser visto como um modelo de difusão não linear. Observe que a Eq. (2.40) define como a inclinação se difunde ao longo da pilha de areia, e que essa difusão depende do grau de inclinação local da pilha

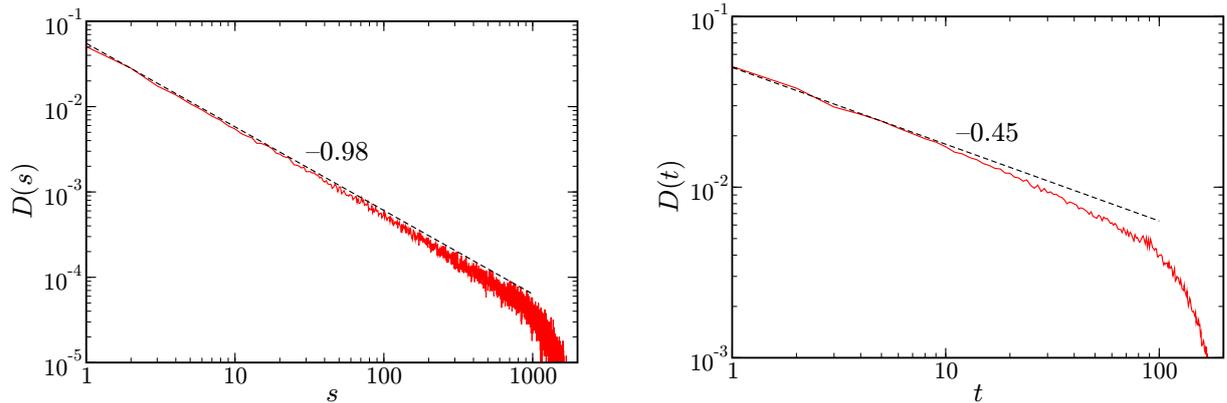


Figura 11: O gráfico da esquerda representa a distribuição de tamanho de aglomerados de escorregamento. O resultado foi obtido fazendo uma média entre 500 redes de tamanho 50×50 . A linha tracejada é uma linha reta com inclinação -0.98 . O gráfico da direita representa a distribuição de tempos de vida pesados pela resposta média s/t . O resultado foi obtido fazendo uma média entre 500 redes de tamanho 50×50 . A linha tracejada é uma linha reta com inclinação -0.45 . Para gerar esses resultados foram utilizadas perturbações do tipo mostrado na Eq. (2.43).

de uma forma não linear. Embora essa análise qualitativa seja fácil, a obtenção de uma equação de difusão para o modelo não é nada simples. Na seção seguinte, veremos que existem modelos onde isso é possível.

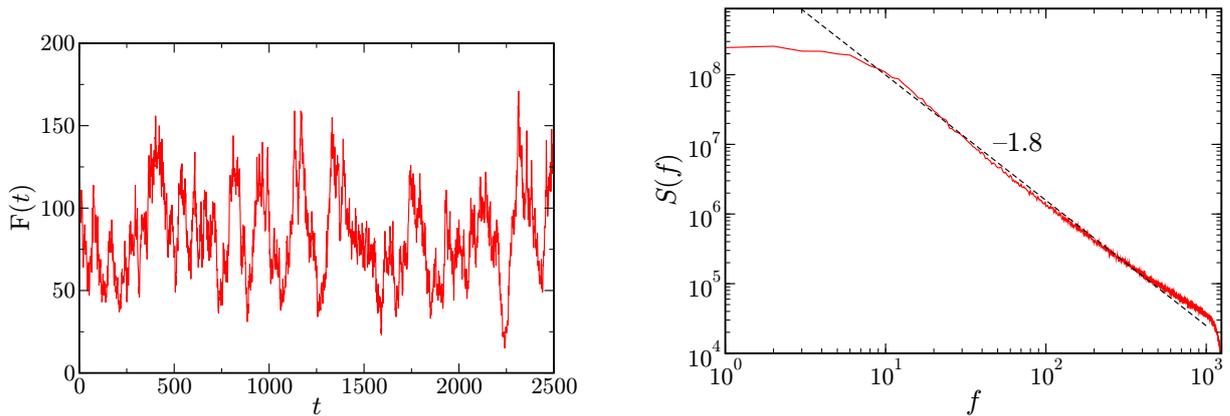


Figura 12: O gráfico a esquerda corresponde ao ruído gerado pela superposição incoerente da dissipação das avalanches e a direita a densidade de espectro de potência do gráfico da esquerda. O ruído mostrado no gráfico da esquerda é conhecido como *ruído rosa* ou *ruído $1/f$* .

2.5.3 Modelo dos Desníveis

O *Modelo dos Desníveis* é um modelo baseado no *Modelo BTW* apresentado na Seção 2.5.2. Nesse modelo, um desnível é definido como qualquer sítio i onde a inclinação é inferior a um certo limiar. Carlson et al. [29] mostraram que as avalanches são aniquiladas nos desníveis, e esses acabam funcionando como paredes de domínio para o sistema. A dinâmica desses desníveis é governada por um conjunto simples de regras que reproduzem qualitativamente características do *Modelo BTW* [29].

Um caso interessante do Modelo de Desníveis foi apresentado por Carlson et al. em [3]. Esse modelo consiste em uma rede unidimensional de N_s sítios, onde cada sítio possui valor de altura $h(i)$ inteiro não negativo. Uma vez definido um valor positivo fixo h_c , o sistema então evolui com a seguinte dinâmica: Se $h(i) \geq h_c$ então, com taxa 1, $h(i) \rightarrow h(i) - 1$ e $h(j) \rightarrow h(j) + 1$, onde j é o próximo sítio $j > i$ com $h(j) < h_c$. O mesmo ocorre, com a mesma taxa de transição, para $j < i$ [3].

As condições de contorno do problema são impostas de tal forma que o sistema é aberto do lado direito e fechado do lado esquerdo. Além disso, grãos são injetados na borda direita com taxa α e instantaneamente saltam para o primeiro sítio j com $h(j) < h_c$. Como configurações com $h(i) < h_c - 1$ ou $h(i) > h_c$ são transientes para qualquer i , cada sítio pode estar em apenas dois estados: $h(i) = h_c$ e $h(i) = h_c - 1$. Fazendo $h_c = 1$ obtemos um modelo de dois estados, onde só temos dois valores para os sítios 1 (ocupado) e 0 (vazio) [3]. Nesse caso, a dinâmica do sistema é seguinte: Os 1s saltam com taxa 1 para o primeiro 0 à direita ou à esquerda. Os 1s caem na lateral

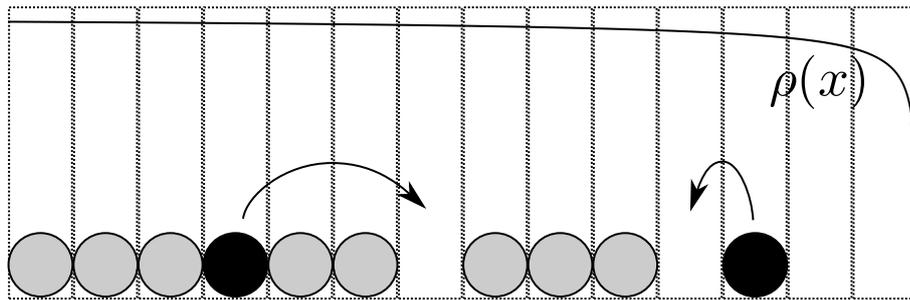


Figura 13: Esboço do modelo de dois níveis. Os sítios com um círculo dentro representam os sítios ocupados e os vazios representam os desocupados. As unidades de areia “saltam” de um sítio até o próximo sítio desocupado à direita e a esquerda com taxa 1. Na figura acima, a curva $\rho(x)$ representa qualitativamente o perfil de densidade.

direita e são bloqueados na lateral esquerda. Além disso, areia é injetada no primeiro sítio com taxa α e é instantaneamente transmitida até o próximo sítio vazio à direita [3]. Um esboço desse modelo é mostrado na Fig. 13.

A vantagem de trabalhar com o modelo descrito acima é que um limite contínuo pode ser obtido [3]. Para isso, vamos inicialmente escrever a probabilidade de um sítio está ocupado que é dado por:

$$P_{n+1}(i) = \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} P_n(j) [1 - P_n(i)] + P_n(i) - \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} P_n(i) [1 - P_n(j)]. \quad (2.44)$$

Onde $\mathcal{P}_{i,j}$ está relacionado com a probabilidade de vários sítios consecutivos estarem ocupados e pode ser escrita da seguinte forma

$$\mathcal{P}_{i,j} = \begin{cases} \prod_{k=i+1}^j P_n(k) & \text{se } j > i, \\ \prod_{k=i-1}^j P_n(k) & \text{se } j < i, \\ 1 & \text{se } j = i. \end{cases} \quad (2.45)$$

Veja que a probabilidade do sistema se encontrar em um determinado estado no instante $n + 1$ só depende do estado do sistema no instante n . Nesse caso, estamos lidando com um processo Markoviano. Assim, comparando as Eqs. (2.44) e (2.9) obtemos

$$T(i, j) = \begin{cases} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(i)] & \text{se } j \neq i, \\ 1 - \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(j)] & \text{se } j = i. \end{cases} \quad (2.46)$$

e então a partir da Eq. (2.10) obtemos

$$W(i, j) = \frac{T(i, j)}{\tau} = \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(i)], \quad i \neq j \quad (2.47)$$

Considerando a densidade média de partículas $\rho_i(t)$ numericamente igual a probabilidade $P_n(i)$ de encontrar uma partícula em um sítio i no instante $t = n\tau$, podemos obter equação mestra para o modelo através das Eqs. (2.47) e (2.18)[¶],

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{i,j-1} (1 - \rho_i) \rho_j - \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{j,i-1} (1 - \rho_j) \rho_i \right\}, \quad (2.48)$$

onde $\mathcal{P}_{i,j-1}$ é escrito agora em termos ρ em vez de P . A equação acima pode, ainda, ser escrita de forma mais explícita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = & \frac{1}{2\tau} \underbrace{(1 - \rho_i)}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{do sítio está} \\ \text{vazio}}} \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k \rho_{i+j}}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{de vir da} \\ \text{direita}}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k \rho_{i-j}}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{de vir da} \\ \text{esquerda}}} \right] \\ & - \frac{1}{2\tau} \underbrace{\rho_i}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{do sítio está} \\ \text{ocupado}}} \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i+k}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j}}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{de ir para a} \\ \text{direita}}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i-k}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j}}_{\substack{\text{Probabilidade} \\ \text{de ir para a} \\ \text{esquerda}}} \right]. \quad (2.49) \end{aligned}$$

Os dois primeiros somatórios mostrados na equação acima estão relacionados à probabilidade de uma partícula saltar de um sítio a direita e a esquerda respectivamente para a sítio i , já os dois últimos estão relacionados à probabilidade de uma partícula no sítio i saltar para a direita ou para a esquerda respectivamente. Veja que os produtórios aparecem devido a probabilidade da ocorrência dos saltos estar relacionada com a probabilidade de vários sítios estarem ocupados consecutivamente, e os somatórios devido aos diversos tamanhos de saltos possíveis. Os somatórios da Eq. (2.49) podem ser desenvolvidos e podemos, então, obter a equação de difusão para o modelo de forma similar ao que foi feito na Seq. 2.3. A equação que obtemos^{||} é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right]. \quad (2.50)$$

[¶]Observe que em [3] a forma como se obtém Eq. (2.50) é diferente.

^{||}O desenvolvimento dessa equação se encontra no Apêndice A.

O limite entre o caso discreto e o contínuo é feito considerando o espaçamento $\delta = 1/N_s$ e $x = i\delta$. Definimos também D de forma análoga ao que foi feito na Seq. 2.3:

$$D = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{2\tau}.$$

No caso estacionário, temos

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dx} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dx} = C_1.$$

Definindo

$$I(\rho) = \int_0^\rho \frac{1 + u}{(1 - u)^3} = \frac{\rho}{(\rho - 1)^2},$$

temos

$$\frac{dI}{d\rho} \frac{d\rho}{dx} = C_1 \quad \Rightarrow \quad \frac{dI}{dx} = C_1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\rho}{(\rho - 1)^2} = C_1 x + C_2.$$

Assim,

$$(C_1 x + C_2)\rho^2 - [2(C_1 x + C_2) - 1]\rho + (C_1 x + C_2) = 0.$$

Cuja solução é dada por:

$$\rho(x) = 1 + \frac{1 \pm \sqrt{4(C_1 x + C_2) + 1}}{2(C_1 x + C_2)}. \quad (2.51)$$

Para N_s grande, podemos escrever as condições de contorno descritas anteriormente da seguinte forma [3],

$$\begin{aligned} \rho(1) &= 0 && \text{(sistema aberto),} \\ \rho'(0)\mathcal{D}(\rho(0)) &= -\alpha N_s && \text{(fluxo constante em } x=0\text{).} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Onde

$$\mathcal{D}(\rho) = D \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3}.$$

Aplicando as condições do contorno mostradas na Eq. (2.52) na Eq. (2.51), obtemos uma solução estacionária para o problema:

$$\rho_{N_s}(x) = 1 + \frac{1 - \sqrt{4\alpha N_s(1 - x) + 1}}{2\alpha N_s(1 - x)}. \quad (2.53)$$

Apesar da Eq. (2.50) ter sido deduzida para um sistema infinito, ela concorda muito bem com os resultados numéricos, conforme mostra a Fig. 14.

As relações de escala podem ser obtidas a partir de algumas considerações: O espaçamento entre dois sítios δ escala como $\delta \sim N_s^{-1}$. A densidade média $\langle \rho_{N_s} \rangle = \int_0^1 \rho_{N_s}(x) dx$

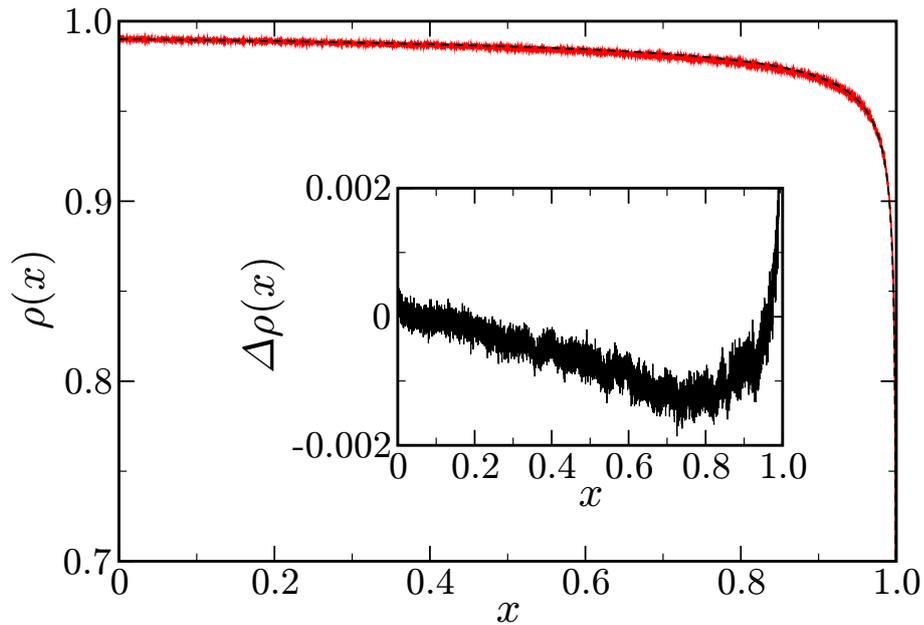


Figura 14: Perfil de densidade numérico (linha sólida) e analítico (linha tracejada). O resultado analítico é obtido através da Eq. (2.53) com $\alpha = 1$, enquanto o resultado numérico foi obtido através da média temporal dos $h(i)$. Para gerar essa figura, foi utilizado $N_s = 10000$ e a média temporal foi feita em 1000000 passos de tempo.

converge para o ponto $\rho = 1$ uma vez que $\langle \rho_{N_s} \rangle \sim 1 - 2/\sqrt{\alpha N_s}$ no limite onde N_s muito grande. Assim, a densidade média de zeros $\rho_0(N_s) = 1 - \langle \rho_{N_s} \rangle$ escala como $\rho_0(N_s) \sim 2/\sqrt{\alpha N_s}$ [3]. Dessa forma, a densidade de saltos pode ser aproximada assumindo o produto medido localmente. No sistema descrito anteriormente, a probabilidade de uma partícula saltar $k < N_s$ sítios em um evento é [3]

$$P(k, N_s) = [1 - \rho_0(N_s)]^{k-1} \rho_0(N_s). \quad (2.54)$$

Como $\rho_0(N_s) = 2/\sqrt{\alpha N_s}$, a distribuição de eventos irá escalar com o número de sítios. Assim, da Eq. (2.54), obtemos:

$$P(k, N_s) = N_s^{-\beta} g(k/N_s^\nu), \quad (2.55)$$

onde

$$g(z) = \frac{2}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{2}{\sqrt{\alpha}} z} \quad (2.56)$$

e $\beta = \nu = 1/2$ [3]. Veja que a expressão está aproximadamente de acordo com o que é encontrado numericamente [3], conforme mostra Fig. 15.

Observe que, nesse modelo, os saltos são como uma perturbações que se propagam por todos os sítios desde o ponto de origem até o ponto de destino do salto. Dessa forma, um salto corresponde a uma avalanche. Apesar da distribuição de saltos não ser uma lei

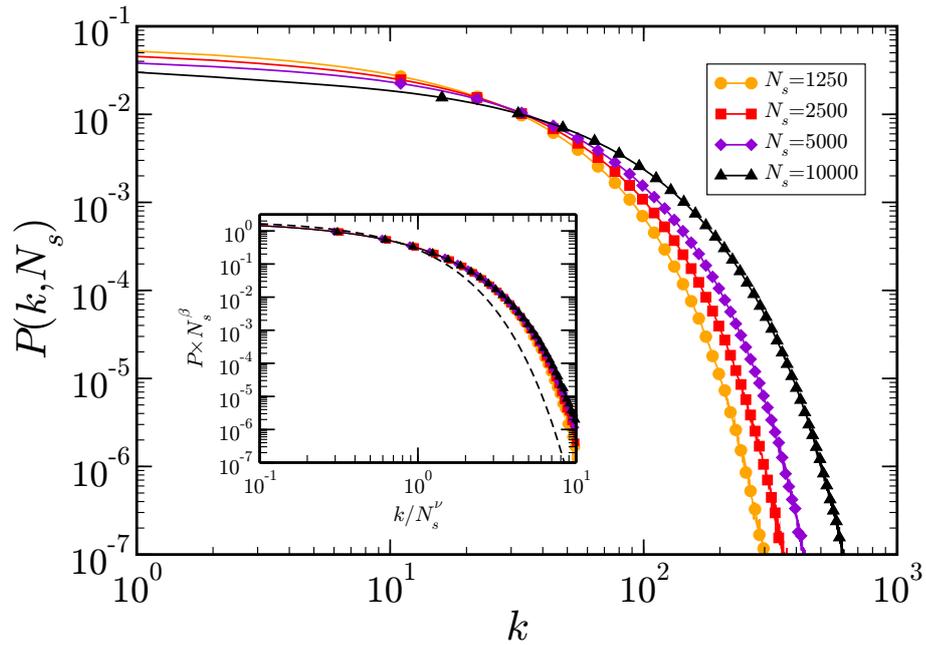


Figura 15: Perfil de densidade de saltos numérico para diferentes valores de N_s . O gráfico interno mostra a transformação de escala dos resultados numéricos. A transformação de escala utilizada corresponde a Eq. (2.55) com $\beta = \nu = 1/2$. A linha tracejada corresponde a curva universal apresentada na Eq. (2.56).

de potência, Carlson et al. utiliza o fato de seu modelo apresentar invariância de escala observada por meio da transformação de escala Eq. (2.55) no estado estacionário para concluir que seu modelo é criticamente auto-organizado.

3 MODELO DOS DESNÍVEIS CONFINADO

Nesse capítulo, iremos discutir uma variação do modelo mostrado na Seç. 2.5.3 com inclusão de um confinamento devido a um potencial externo. Posteriormente, iremos fazer uma série de análises sobre esse novo modelo.

3.1 Descrição do Modelo

O modelo consiste em uma rede unidimensional onde cada sítio possui valor de altura $h(i)$, que só pode assumir valores 0 ou 1, e um potencial U_i que assume valores reais. A dinâmica do modelo é semelhante ao caso mostrado anteriormente. A cada passo de tempo, as partículas se movem para a direita ou para a esquerda até o primeiro sítio vazio.

O sistema inicialmente parte de uma configuração onde N partículas são injetadas aleatoriamente numa rede de tamanho $N_s \gg N$. Após isso, a dinâmica do sistema segue conforme foi descrito anteriormente sem que nenhuma outra partícula seja injetada no sistema. A influência do potencial externo é introduzida nesse modelo de forma análoga ao que ocorre no algoritmo de Metropolis. Ou seja, transições de um sítio i para um sítio j são aceitas se $U_i > U_j$ e quando $U_i < U_j$ as transições são aceitas com probabilidade $e^{-\beta(U_j - U_i)}$, conforme mostra a Fig. 16:

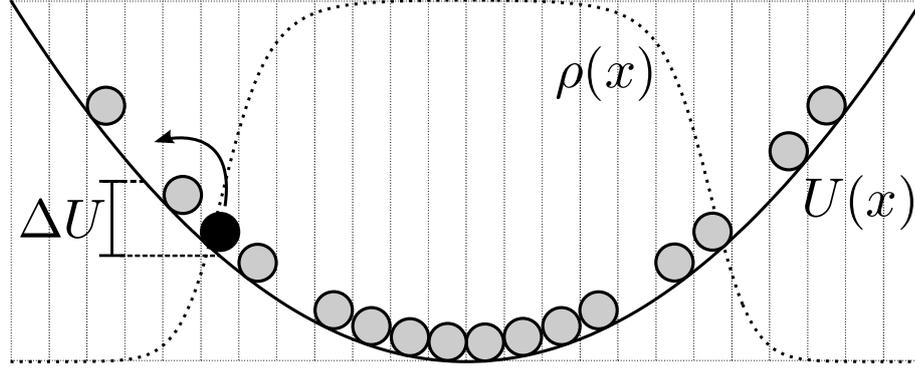


Figura 16: Esboço do modelo de dois estados. Esse modelo é uma variação do modelo de Carlson no qual a partícula vai para direita ou para a esquerda e cujos saltos são aceitas se $U_i > U_j$ e quando $U_i < U_j$ as transições são aceitas com probabilidade $e^{-\beta(U_i - U_j)}$.

3.2 Equação de Difusão

De forma análoga ao que foi visto na Sec. 2.5.3, vamos inicialmente escrever a probabilidade de um sítio está ocupado num tempo $n + 1$ que é dado por:

$$P_{n+1}(i) = \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} P_n(j) [1 - P_n(i)] \min(1, e^{-\beta(U_i - U_j)}), \\ + P_n(i) - \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} P_n(i) [1 - P_n(j)] \min(1, e^{-\beta(U_j - U_i)}). \quad (3.1)$$

Onde $\mathcal{P}_{i,j}$ está relacionado com a probabilidade de vários sítios consecutivos estarem ocupados e pode ser escrita da seguinte forma

$$\mathcal{P}_{i,j} = \begin{cases} \prod_{k=i+1}^j P_n(k) & \text{se } j > i, \\ \prod_{k=i-1}^j P_n(k) & \text{se } j < i, \\ 1 & \text{se } j = i. \end{cases} \quad (3.2)$$

Comparando as Eqs. (3.1) e (2.9) obtemos

$$T(i, j) = \begin{cases} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(i)] \min(1, e^{-\beta(U_i - U_j)}) & \text{se } j \neq i, \\ 1 - \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(j)] \min(1, e^{-\beta(U_j - U_i)}) & \text{se } j = i. \end{cases} \quad (3.3)$$

e então a partir da Eq. (2.10) obtemos

$$W(i, j) = \frac{T(i, j)}{\tau} = \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{i,j-1} [1 - P_n(i)] \min(1, e^{-\beta(U_i - U_j)}), \quad i \neq j. \quad (3.4)$$

Considerando a densidade média de partículas $\rho_i(t)$ numericamente igual a probabilidade $P_n(i)$ de encontrar uma partícula em um sítio i no instante $t = n\tau$, podemos obter equação mestra para o modelo através das Eqs. (3.4) e (2.18),

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{i,j-1} (1 - \rho_i) \min(1, e^{-\beta(U_i - U_j)}) \rho_j - \frac{1}{2\tau} \mathcal{P}_{j,i-1} (1 - \rho_j) \min(1, e^{-\beta(U_j - U_i)}) \rho_i \right\}, \quad (3.5)$$

onde $\mathcal{P}_{i,j-1}$ é escrito agora em termos ρ em vez de P . A equação acima pode, ainda, ser escrita de forma mais explícita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} = & \frac{1}{2\tau} \underbrace{(1 - \rho_i)}_{\text{Probabilidade do sítio está vazio}} \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} \min(1, e^{-\beta(U_i - U_{i+k})) \prod_{j=1}^k \rho_{i+j}}}_{\text{Probabilidade de vir da direita}} \right. \\ & + \left. \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} \min(1, e^{-\beta(U_i - U_{i-k})) \prod_{j=1}^k \rho_{i-j}}}_{\text{Probabilidade de vir da esquerda}} \right] \underbrace{\left. \right\}}_{\text{Probabilidade de uma partícula saltar para um sítio } i} \\ & - \frac{1}{2\tau} \underbrace{\rho_i}_{\text{Probabilidade do sítio está ocupado}} \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i+k}) \min(1, e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j}}_{\text{Probabilidade de ir para a direita}} \right. \\ & + \left. \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i-k}) \min(1, e^{-\beta(U_{i-k} - U_i)}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j}}_{\text{Probabilidade de ir para a esquerda}} \right] \underbrace{\left. \right\}}_{\text{Probabilidade de uma partícula em } i \text{ saltar para outro sítio}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Os dois primeiros somatórios mostrados na equação acima estão relacionados a probabilidade de uma partícula saltar de um sítio a direita e a esquerda respectivamente para a sítio i , já os dois últimos estão relacionados a probabilidade de uma partícula no sítio i saltar para a direita ou para a esquerda respectivamente. Veja que os produtórios aparecem devido a probabilidade da ocorrência dos saltos estar relacionada com a probabilidade de vários sítios estarem ocupados consecutivamente, e os somatórios devido aos diversos tamanhos de saltos possíveis. O termo $\min(1, e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)})$ multiplicando os produtórios representam a probabilidade do salto ser aceito. Os somatórios da Eq. (3.6) podem ser desenvolvidos e podemos, então, obter a equação de difusão para o modelo de

forma similar ao que foi feito na Seç. 2.3. A equação que obtemos* é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{dU}{dx} \right). \quad (3.7)$$

onde definimos D de forma análoga ao que foi feito nas Seçs. 2.3 e 2.5.3:

$$D = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{2\tau}.$$

Veja que fazendo $U(x) = cte$ na Eq. (3.7) chegamos a Eq. (2.50) da Seç. 2.5.3, como era de se esperar.

3.3 Solução Estacionária

A partir da equação de difusão do modelo podemos escrever uma solução para o caso estacionário. Nesse caso, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ e a equação acima pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dx} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{dU}{dx} \right) &= 0, \\ \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dx} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{dU}{dx} &= C, \end{aligned}$$

onde C é uma constante a ser definida pelas condições de contorno do problema. Se considerarmos que não há partículas nem fluxo no infinito, temos,

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \infty} = 0; \quad \rho(x \rightarrow \infty) = 0. \quad (3.8)$$

Nesse caso, $C = 0$. Dessa forma, chegamos a seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dx} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{dU}{dx} &= 0, \\ \frac{1}{\rho(1 - \rho)} \frac{d\rho}{dx} &= -\beta \frac{dU}{dx}. \end{aligned}$$

Definindo

$$I(\rho) = \int_{1/2}^{\rho} \frac{1}{u(1 - u)} du = \ln \left(\frac{u}{u - 1} \right) \Big|_{1/2}^{\rho} = \ln \left(\frac{\rho}{1 - \rho} \right), \quad (3.9)$$

*O desenvolvimento dessa equação se encontra no Apêndice B.

temos

$$\begin{aligned}\frac{dI}{d\rho} \frac{d\rho}{dx} &= \frac{dI}{dx} = -\beta \frac{dU}{dx}, \\ I &= -\beta(U(x) + \mu), \\ \ln\left(\frac{\rho}{1-\rho}\right) &= -\beta(U(x) + \mu), \\ \frac{1-\rho}{\rho} &= e^{\beta(U(x)+\mu)}\end{aligned}$$

e então podemos escrever

$$\rho(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta(U(x)+\mu)}}, \quad (3.10)$$

onde μ é uma constante de integração.

3.4 Resultados e Discussões

No caso de um potencial $U(x)$ simétrico, é de se esperar que a Eq. (3.10) seja válida também. Dessa forma, em um sistema onde não há acréscimo de partículas o valor de μ seria determinado pelo número total de partículas N .

Uma forma de comparar o caso discreto com o contínuo é considerar $\delta = 1/N$. Nesse caso, μ pode ser obtido pela seguinte equação transcendental

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x)}{\delta} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\delta} \frac{1}{1 + e^{\beta(U(x)+\mu)}} dx = N \quad (3.11)$$

Assim como na seção anterior, a solução contínua corresponde a média temporal do modelo discreto. Para uma análise dos resultados, resolvemos considerar por hora um potencial $U(x) = Kx^2$ e $\beta = 1$. A Fig. 17 mostra os resultados numéricos do modelo descrito nessa seção quando consideramos $\delta = 1/N$.

Na Fig. 17, o valor de K foi mantido constante. Veja que não há variação muito grande dos perfis de densidade para esse caso. A Fig. 18 mostra a concordância entre o resultado analítico e o numérico para os perfis de densidade e a dependência ρ com relação a K . Veja que, na medida que se aumenta o confinamento K a densidade tende a aumentar na região central do gráfico e diminuir na região periférica. Esse comportamento é esperado, contudo isso deve trazer consequências interessantes, uma vez que a Eq. (3.7) possui singularidades em $\rho = 1$.

Algo notável que se observa é a distribuição de saltos $\mathcal{N}(s)$, definida como a probabilidade de se ter um salto de tamanho s num passo de tempo. O comportamento de $\mathcal{N}(s)$

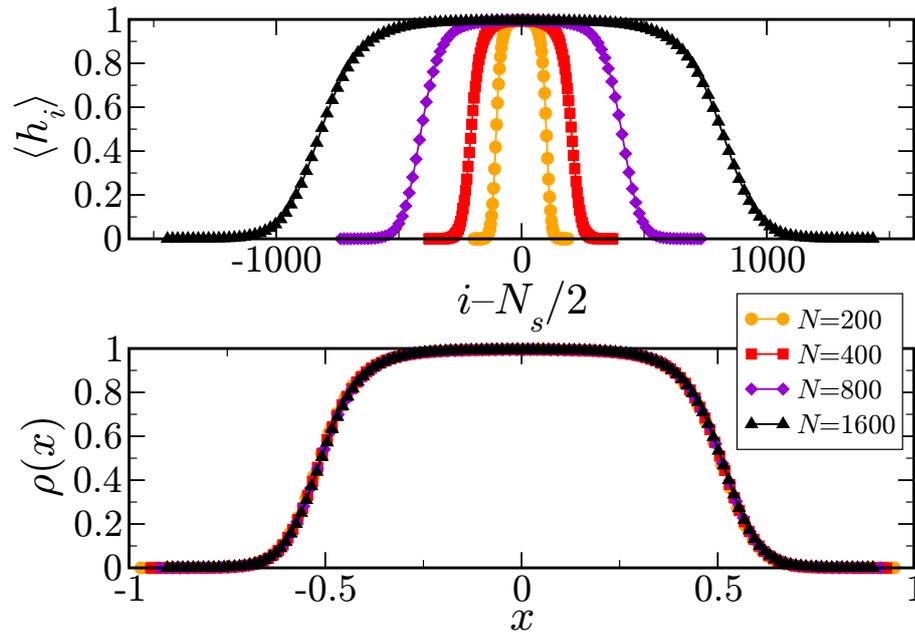


Figura 17: Perfis de densidade numérico para $K = 20$ e diferentes valores de N . Do gráfico de cima para o de baixo, mostramos a correspondência entre o modelo discreto e a aproximação do contínuo, onde $\rho(x) \approx \langle h_i \rangle$ e $x \approx (i - N_s/2)/N$.

é mostrado na Fig. 19.

O que se observa é uma variação bastante drástica no comportamento de $\mathcal{N}(s)$ quando se muda a intensidade do confinamento K . Quando K é pequeno, a dinâmica do processo leva a uma distribuição exponencial de saltos assim como no caso mostrado na Fig. 15 da Seç. 2.5.3. Quando se aumenta o potencial, é esperada uma diminuição no número total de saltos aceitos por unidade de tempo, uma vez que isso reduz o fator de Boltzmann, contudo a probabilidade de se ter saltos maiores aumenta, conforme mostra a Fig. 19. Outro fato interessante é que o perfil de densidade não sofre uma alteração muito grande quando mantemos o K constante e variamos N , conforme mostra a Fig. 17, contudo $\mathcal{N}(s)$ parece depender de N fortemente.

Vamos, agora, analisar o problema da seguinte forma: Se levarmos em conta apenas a contribuição de ρ na distribuição de tamanhos de saltos, chegaremos a conclusão de que um aumento no valor de K leva ao favorecimento de saltos maiores, uma vez que aglomeramos as partículas. Contudo, isso não é de todo verdade, uma vez que saltos de tamanho intermediário são recusados com mais facilidade, além de existir um limite para o tamanho do salto que não pode exceder o número de partículas. Agregados a esses dois fatores, temos ainda que o número total de saltos aceitos por unidade de tempo, \mathcal{N}_τ , tem que diminuir uma vez que aumentando K diminuimos a probabilidade de saltos serem aceitos, conforme mostra a Fig. 20.

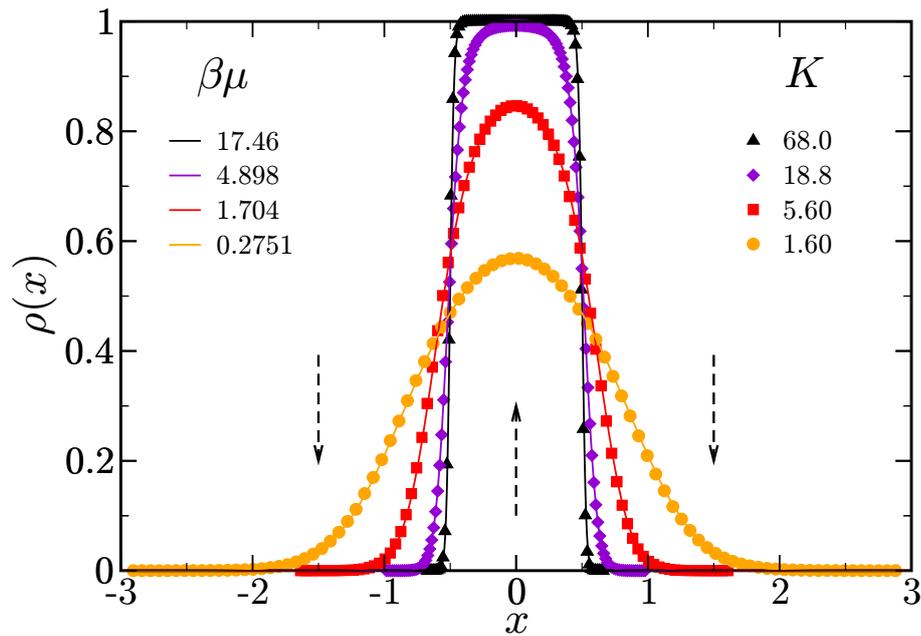


Figura 18: Perfis de densidade numérico e semi-analítico do modelo descrito anteriormente. O resultado numérico (símbolos) foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para $N = 200$. As setas mostram a variação no comportamento dos gráficos quando se aumenta o valor de K . O resultado semi-analítico (linha sólida) foi obtido variando μ na Eq. (3.10) até que a Eq. (3.11) fosse satisfeita.

Podemos, então, observar dois comportamentos. O primeiro ocorre quando aumentar K corresponde a aglomerar partículas, favorecer saltos maiores e diminuir o número total de saltos aceitos. O segundo corresponde a proibir os saltos de tamanhos intermediários e diminuir o número total de saltos aceitos. O primeiro comportamento é predominante quando K é pequeno, uma vez que é mais fácil aglomerar partículas. Já o segundo é predominante quando K é grande, as partículas estão muito aglomeradas e se torna difícil aglomerá-las mais ainda.

É então de se esperar que exista um K_c intermediário onde os dois comportamentos aparecem e se somam de uma forma ótima, de tal forma que os saltos que são favorecidos pelo primeiro comportamento são recusados pelo segundo. Isso faz com que a taxa com que os saltos são recusados seja máxima em K_c . Podemos então obter K_c através do gráfico mostrado na Fig. 21.

Como foi visto, a distribuição de saltos não tem um comportamento trivial com relação ao confinamento, de tal forma que a obtenção de uma expressão para ela é uma tarefa não menos complicada. Podemos em primeira análise escrever a probabilidade de uma

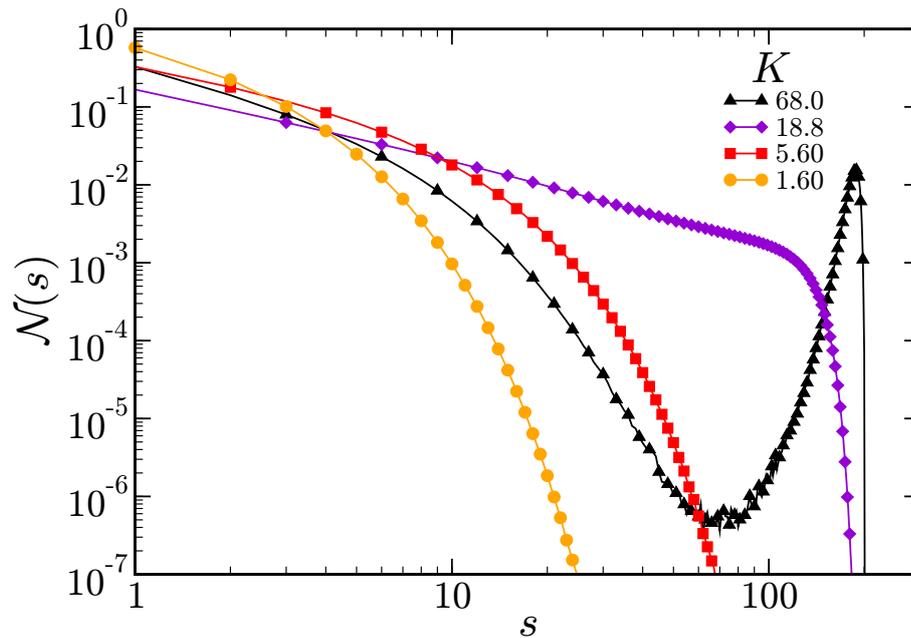


Figura 19: Perfis de distribuição de saltos numérico para diferentes valores de K . O resultado foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para $N = 200$. As setas mostram a variação no comportamento dos gráficos quando se aumenta o valor de K .

partícula no sítio i dar um salto de tamanho s como:

$$P(i, s) = \frac{1}{2}\rho_i \left[(1 - \rho_{i+s}) \min(1, e^{-\beta(U_{i+s}-U_i)}) \prod_{j=1}^{s-1} \rho_{i+j} + (1 - \rho_{i-s}) \min(1, e^{-\beta(U_{i-s}-U_i)}) \prod_{j=1}^{s-1} \rho_{i-j} \right], \quad (3.12)$$

e então a distribuição de tamanhos de saltos seria:

$$\mathcal{N}(s) = \sum_i P(i, s), \quad (3.13)$$

onde o somatório em i é feito em todos os sítios. Veja que a forma como o potencial interfere no cálculo de $\mathcal{N}(s)$ não é clara. Contudo, a Fig. 19 mostra um caso onde $\mathcal{N}(s)$ se comporta de forma similar a uma lei de potência para $K = K_c$. Ou seja, esse K_c é um valor específico de K onde o sistema atinge o regime invariante de escala. A Fig. 22 mostra esse mesmo caso e a concordância entre o resultado numérico e semi-analítico obtido por meio das Eqs. (3.12) e (3.13) aplicadas nos valores de ρ_i obtidos numericamente.

Se obtermos os valores de K_c para diferentes valores de N através do gráfico mostrado na Fig. 21, podemos observar o comportamento em lei de potência falado anteriormente, para diferentes valores de N , conforme mostra a Fig. 23. Apesar do formato das distribuições de saltos serem parecidos quando $K = K_c$ os perfis de densidade são um pouco diferentes conforme mostra a Fig. 23. Os perfis de densidade concordam melhor quando

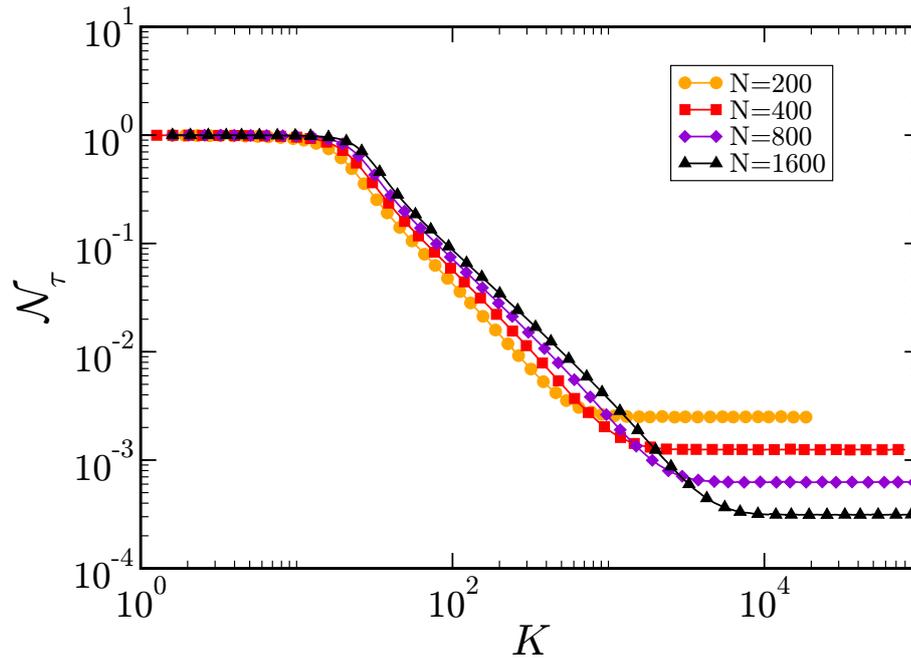


Figura 20: Fração de saltos aceitos por unidade de tempo em função de K . Como é de se esperar \mathcal{N}_τ diminui na medida que K aumenta, uma vez que fica mais fácil saltos serem recusados.

o valor de K é fixo, mostrado na Fig. 17, o que não é o caso uma vez que K_c depende de N .

O gráfico da Fig. 24 mostra uma transformação de escala que leva ao colapso das curvas apresentadas na Fig. 23 em uma curva que se assemelha muito com uma lei de potência de expoente -1. Isso nos leva a concluir que nosso modelo apresenta invariância de escala. Esse modelo, contudo, não é criticamente organizado, uma vez que o regime invariante de escala só é atingido a partir do ajuste do parâmetro K .

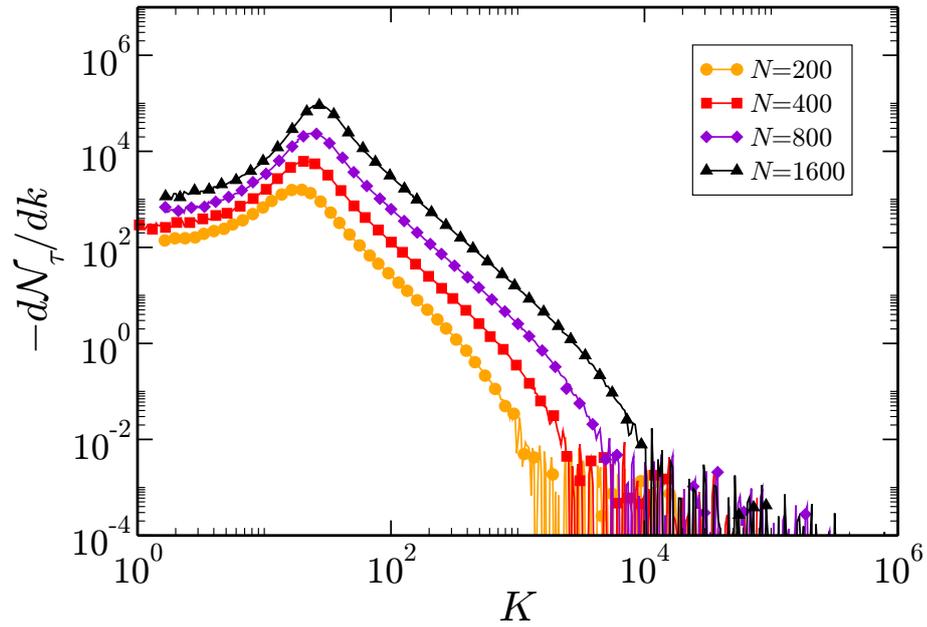


Figura 21: Derivada da fração de saltos recusados como função de K . Veja que a taxa com que os saltos são recusados possui um valor máximo que depende de N .

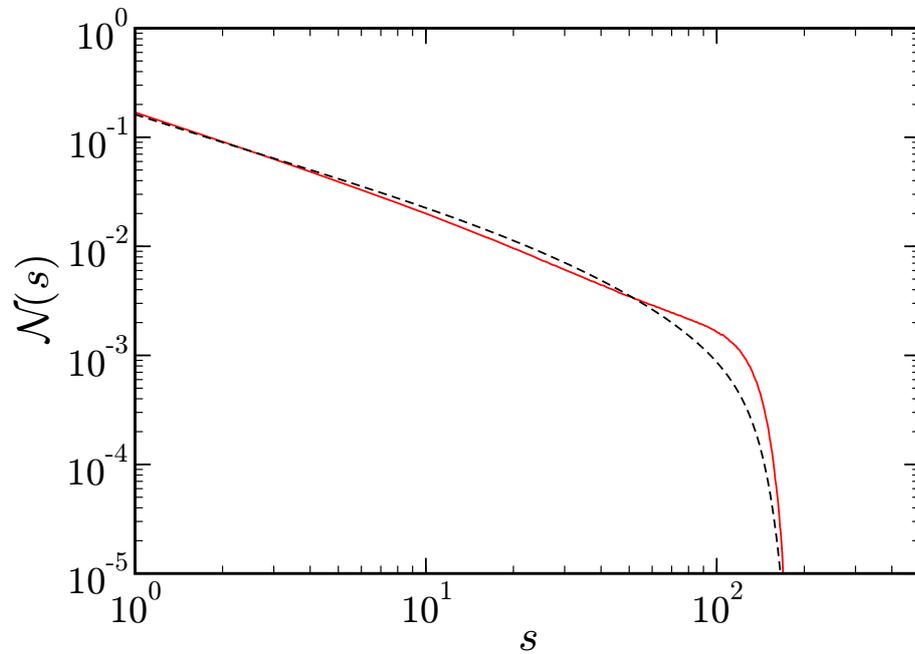


Figura 22: Perfis de distribuição de saltos numérico (linha sólida) e semi-analítico (linha tracejada). A simulação corresponde a $N = 200$ e $K = K_c$. O perfil semi-analítico foi obtido por meio das Eqs. (3.12) e (3.13) aplicadas nos valores de ρ_i obtidos numericamente.

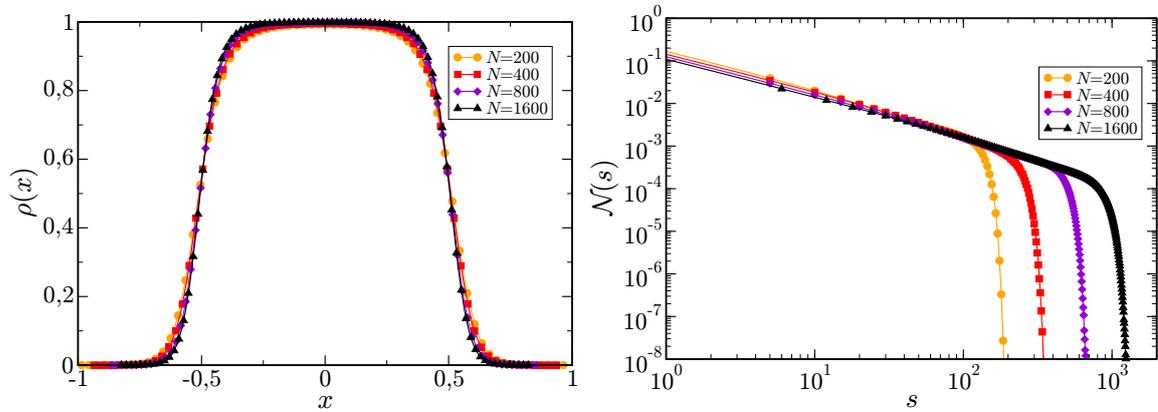


Figura 23: No gráfico da esquerda, temos os perfis de densidade em $K = K_c$ para diferentes valores de N . No gráfico da direita, temos os perfis de distribuição de saltos numérico para diferentes valores de K . O resultado foi obtido através da média temporal do modelo de dois estados para diferentes valores de N . Os valores de K foram escolhidos como o máximo da derivada do número de saltos recusados mostrados na Fig. 21.

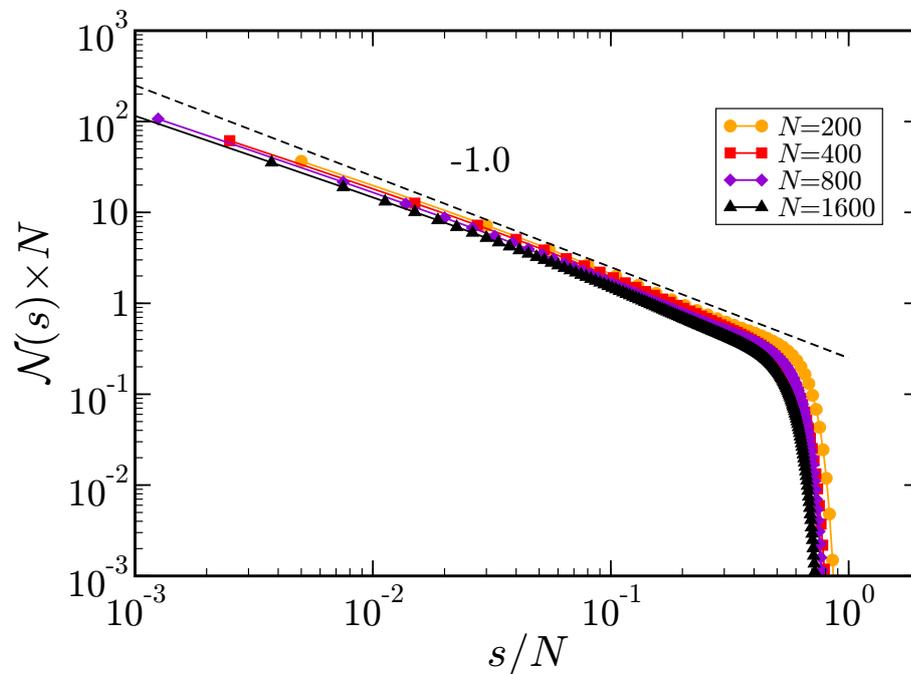


Figura 24: Transformação de escala para os perfis de distribuição de saltos encontrados na Fig. 23. A reta tracejada corresponde a uma lei de potência com expoente -1.

4 CONCLUSÃO

Nesse trabalho, estudamos como a introdução de um potencial confinante no Modelo de Desníveis altera a dinâmica do problema. A equação de difusão que encontramos para o nosso modelo é similar a encontrada para o Modelo de Desníveis tradicional adicionada de um termo proporcional à força devido ao confinamento.

A solução estacionária para o perfil de densidade que encontramos concorda fielmente com as simulações computacionais, o que nos dá indícios de que as aproximações que tomamos valem para o caso estudado. Além disso, os perfis de distribuição de tamanhos de saltos mostram que existem valores de confinamento dependentes do número de partículas, os quais a distribuição de tamanhos de saltos parecem seguir uma lei de potência com expoente aproximadamente igual a -1.

Transformações de escala nos mostram que essas curvas podem ser colapsadas em uma curva universal. Isso nos leva a crer que nosso modelo apresenta invariância de escala. Apesar de possuir características similares ao modelo de Desníveis tradicional, o nosso modelo necessita de um parâmetro externo para atingir um regime invariante de escala.

Como perspectivas desse trabalho, podemos destacar o desenvolvimento da expressão analítica para o perfil de densidade de saltos, que pode nos dar um melhor entendimento do porquê da emergência desse estado invariante de escala. Além disso, seria interessante estendermos nosso modelo para duas dimensões. Uma outra perspectiva seria analisar cuidadosamente se o modelo apresentado possui transição de fase. Caso ele apresente, poderíamos encontrar um parâmetro de ordem adequado.

REFERÊNCIAS

- [1] BAK, P. et al. Self-organized criticality. *Physical review A*, APS, v. 38, n. 1, p. 364–374, 1988.
- [2] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise. *Physical Review Letters*, APS, v. 59, n. 4, p. 381–384, 1987.
- [3] CARLSON, J. et al. Self-organized criticality and singular diffusion. *Physical Review Letters*, APS, v. 65, n. 20, p. 2547–2550, 1990.
- [4] OLIVEIRA, M. de; TOMÉ, M. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. São Paulo: Edusp, 2001.
- [5] EINSTEIN, A. Investigations on the theory of the brownian movement. *Ann. der Physik*, 1905.
- [6] HENRY, B.; LANGLANDS, T.; STRAKA, P. An introduction to fractional diffusion. In: DEWAR, R.; DETERING, F. (Ed.). *Complex Physical, Biophysical and Econophysical Systems*. Singapore: World Scientific Publishing Company, Incorporated, 2010, (World Scientific lecture notes in complex systems, v. 1). p. 37–89.
- [7] PELISSETTO, A.; VICARI, E. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, Elsevier, v. 368, n. 6, p. 549–727, 2002.
- [8] KADANOFF, L. *Statics, Dynamics and Renormalization*. Singapore: World Scientific, 2000.
- [9] ANDREWS, T. The bakerian lecture.—on the continuity of the gaseous and liquid states of matter. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, JSTOR, v. 159, p. 575–590, 1869.
- [10] CURIE, P. *Propriétés magnétiques des corps a diverses températures*. Paris: Gauthier-Villars et fils, 1895.
- [11] CALLEN, H. *Thermodynamics and an introduction to thermostatics*. [S.l.]: Wiley, 1985.
- [12] KOUVEL, J.; FISHER, M. Detailed magnetic behavior of nickel near its curie point. *Physical Review*, APS, v. 136, n. 6A, p. A1626, 1964.
- [13] AHERN, S. et al. The spontaneous magnetization of nickel + copper alloys. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society, v. 248, n. 1253, p. 145–152, 1958.
- [14] WILSON, K. The renormalization group and critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, v. 55, n. 3, p. 583–600, 1983.

- [15] STANLEY, H. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 71, n. 2, p. 358–366, 1999.
- [16] STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to Percolation Theory*. [S.l.]: Taylor & Francis, 1992.
- [17] SAHIMI, M. *Applications of Percolation Theory*. [S.l.]: Taylor & Francis Group, 1994.
- [18] BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes i. crystals and mazes. In: *Proceedings of the Cambridge philosophical society*. [S.l.: s.n.], 1957. v. 53, n. 3, p. 629–641.
- [19] ACHLIOPTAS, D.; D’SOUZA, R.; SPENCER, J. Explosive percolation in random networks. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 323, n. 5920, p. 1453–1455, 2009.
- [20] RADICCHI, F.; FORTUNATO, S. Explosive percolation in scale-free networks. *Physical Review Letters*, APS, v. 103, n. 16, p. 168701, 2009.
- [21] COSTA, R. da et al. Explosive percolation transition is actually continuous. *Physical Review Letters*, APS, v. 105, n. 25, p. 255701, 2010.
- [22] NOLAN, P. et al. Rapid variability of 10-140 keV x-rays from cygnus x-1. *Astrophysical Journal*, v. 246, p. 494–501, 1981.
- [23] VOSS, R.; CLARKE, J. Flicker ($1/f$) noise: Equilibrium temperature and resistance fluctuations. *Physical Review B*, APS, v. 13, n. 2, p. 556, 1976.
- [24] SCHICK, K.; VERVEEN, A. $1/f$ noise with a low frequency white noise limit. *Nature*, v. 251, p. 599–601, 1974.
- [25] MANDELBROT, B.; NESS, J. V. Fractional brownian motions, fractional noises and applications. *SIAM Review*, SIAM, v. 10, n. 4, p. 422–437, 1968.
- [26] PELLEGRINI, B. et al. $1/f^{\gamma}$ noise in thick-film resistors as an effect of tunnel and thermally activated emissions, from measures versus frequency and temperature. *Physical Review B*, APS, v. 27, n. 2, p. 1233, 1983.
- [27] WILKINSON, D.; WILLEMSSEN, J. F. Invasion percolation: a new form of percolation theory. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 16, n. 14, p. 3365, 1983.
- [28] FURUBERG, L. et al. Dynamics of invasion percolation. *Physical Review Letters*, APS, v. 61, n. 18, p. 2117–2120, 1988.
- [29] CARLSON, J. et al. Self-organized criticality in sandpiles: nature of the critical phenomenon. *Physical Review A*, APS, v. 42, n. 4, p. 2467, 1990.

APÊNDICE A - Desenvolvimento da Equação de Difusão para o Modelo de Desníveis

Iremos agora desenvolver a equação de difusão para o *Modelo de Desníveis*. Conforme vimos na Seç. 2.5.3, a equação mestra do modelo é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} &= \frac{1}{2\tau}(1 - \rho_i) \left[\sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k \rho_{i+j} + \sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k \rho_{i-j} \right] \\ &- \frac{1}{2\tau} \rho_i \left[\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i+k}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j} + \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i-k}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Se agruparmos os termos semelhantes,

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \frac{1}{2\tau} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^k \rho_{i+j} + \prod_{j=1}^k \rho_{i-j} - \rho_i \left[\prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j} + \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j} \right] \right], \quad (\text{A.2})$$

onde o primeiro termo corresponde a probabilidade de uma partícula chegar no sítio i e o segundo a probabilidade de uma partícula sair do sítio i . Para facilitar podemos definir

$$S_k^{\pm} = \prod_{j=1}^k \rho_{i \pm j}. \quad (\text{A.3})$$

Agrupando os termos na Eq. (A.2), obtemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{D}{\delta^2} \sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho [S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-]]. \quad (\text{A.4})$$

onde definimos D de forma análoga ao que foi feito nas Seçs. 2.3 e 2.5.3:

$$D = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{2\tau}.$$

Agora, podemos expandir $\rho_{i\pm k}$ em torno de $\rho(x) = \rho_i$, obtendo:

$$\rho_{i\pm k} = \rho \pm k\delta \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k^2 \delta^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\delta^3), \quad (\text{A.5})$$

onde δ é o espaçamento entre dois sítios. Dessa forma, podemos substituir a equação acima em Eq. (A.3) e encontrar que*

$$\begin{aligned} S_k^\pm &= \rho^k + \rho^{k-1} \left(\pm \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \\ &+ \rho^{k-2} \left(\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) + O(\delta^3). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

onde $\rho' = \frac{\partial \rho}{\partial x}$ e $\rho'' = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$.

Substituindo a expressão acima na expressão encontrada do lado esquerdo da Eq. (A.4), obtemos[†]

$$\sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho [S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-]] = \delta^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + O(\delta^3). \quad (\text{A.7})$$

Substituindo, então, a equação acima em Eq. (A.4), obtemos o limite contínuo do modelo,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right]. \quad (\text{A.8})$$

*Veja Anexo C para mais detalhes.

†O desenvolvimento dessa expressão também se encontra no Anexo C.

APÊNDICE B - Desenvolvimento da Equação de Difusão para o Modelo de Desníveis Confinado

Iremos agora desenvolver a equação de difusão para o *Modelo de Desníveis Confinado*. Conforme vimos no Cap. 3 a equação mestra do modelo é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= \frac{1}{2\tau}(1 - \rho_i) \left[\sum_{k=1}^{\infty} \min(1, e^{-\beta(U_i - U_{i+k})}) \prod_{j=1}^k \rho_{i+j} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \min(1, e^{-\beta(U_i - U_{i-k})}) \prod_{j=1}^k \rho_{i-j} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \rho_i \left[\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i+k}) \min(1, e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i-k}) \min(1, e^{-\beta(U_{i-k} - U_i)}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j} \right]. \end{aligned}$$

Se supormos que $dU/dx > 0$, podemos escrever a equação acima da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= \frac{1}{2\tau}(1 - \rho_i) \sum_{k=1}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^k \rho_{i+j} + e^{-\beta(U_i - U_{i-k})} \prod_{j=1}^k \rho_{i-j} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \rho_i \sum_{k=1}^{\infty} \left[(1 - \rho_{i+k}) e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)} \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i+j} + (1 - \rho_{i-k}) \prod_{j=1}^{k-1} \rho_{i-j} \right]. \end{aligned}$$

Veja que $e^{\beta U_{i\pm k}}$ pode ser expandido do seguinte modo

$$e^{\beta U_{i\pm k}} = e^{\beta U} \left[1 \pm \beta U' k \delta + \frac{\beta U'' + \beta^2 (U')^2}{2} (k\delta)^2 \right] + O(\delta^3). \quad (\text{B.1})$$

Fazendo $\rho_i = \rho(x)$ e definindo

$$D = \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{2\tau}.$$

obtemos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{D}{\delta^2} (1 - \rho) \sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + e^{-\beta(U_i - U_{i-k})} S_k^-] \\ &- \frac{D}{\delta^2} \rho \sum_{k=1}^{\infty} [(1 - \rho_{i+k}) e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)} S_{k-1}^+ + (1 - \rho_{i-k}) S_{k-1}^-], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

com $\delta \rightarrow 0$. Na equação acima, S_k^\pm é definido de forma análoga ao que foi feito no Apêndice A,

$$S_k^\pm = \prod_{j=1}^k \rho_{i \pm j}.$$

Substituindo

$$\begin{aligned} e^{-\beta(U_i - U_{i-k})} &= 1 - \beta U' k \delta + \frac{\beta U'' + \beta^2 (U')^2}{2} (k \delta)^2, \\ e^{-\beta(U_{i+k} - U_i)} &= 1 - \beta U' k \delta + \frac{-\beta U'' + \beta^2 (U')^2}{2} (k \delta)^2, \end{aligned}$$

obtidos a partir da Eq. B.1, na Eq. B.2, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{D}{\delta^2} \sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-)] \\ &- \frac{D \beta U'}{\delta} \sum_{k=1}^{\infty} k [S_k^- - \rho_i S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] \\ &+ \frac{D \beta U''}{2} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 [S_k^- - \rho S_k^- + \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] \\ &+ \frac{D \beta^2 (U')^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 [S_k^- - \rho S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Os termos em S_k^\pm mostrados na equação acima podem ser escritos da seguinte forma*:

$$\sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-)] = \delta^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + O(\delta^3), \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k [S_k^- - \rho S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] &= -\delta \rho' \left(\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} \right. \\ &\left. - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right) + O(\delta^2), \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} [S_k^- - \rho S_k^- + \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] = 2 \left(\frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} - \frac{\rho^2(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \right) + O(\delta). \quad (\text{B.6})$$

*O desenvolvimento desses termos se encontra no Anexo C.

Substituindo Eqs. B.4, B.5 e B.6 na Eq.B.3, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + D\beta U' \rho' \left(\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho-1)^4} - \frac{2\rho(2\rho+1)}{(\rho-1)^4} \right) \\
&+ D\beta U'' \left(\frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^3} - \frac{\rho^2(1+\rho)}{(1-\rho)^3} \right) \\
&= D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + D\beta U' \rho' \left(\frac{\rho^2 + 4\rho + 1 - 4\rho^2 - 2\rho}{(\rho-1)^4} \right) + D\beta U'' \frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^2}, \\
&= D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + D\beta U' \rho' \left(\frac{1+3\rho}{(1-\rho)^3} \right) + D\beta U'' \frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^2}.
\end{aligned}$$

Sabendo que

$$D\beta U' \rho' \left(\frac{1+3\rho}{(1-\rho)^3} \right) = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho U' \right] - D\beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho U'', \quad (\text{B.7})$$

temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho U' \right) - D\beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho U'' \\
&+ D\beta U'' \frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^2}
\end{aligned}$$

e então,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho \frac{dU}{dx} \right). \quad (\text{B.8})$$

APÊNDICE C – Desenvolvimento Analítico dos Somatórios do Modelo de Desníveis com e sem Confinamento

Anteriormente, poupamos por questões práticas alguns detalhes no desenvolvimento de alguns produtórios e somatórios. Contudo, nesse momento iremos mostrar com mais detalhes como podemos desenvolvê-los.

C.1 Produtório das Probabilidades Consecutivas.

Nos Apêndices A e B definimos

$$S_k^\pm = \prod_{j=1}^k \rho_{i\pm j} \quad (\text{C.1})$$

onde

$$\rho_{i\pm k} = \rho \pm k\delta \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k^2 \delta^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\delta^3), \quad (\text{C.2})$$

Nesse caso, agrupando termos de mesma ordem em δ , podemos transformar os produtórios acima em somatórios,

$$\begin{aligned} S_k^\pm &= \rho^k + \rho^{k-1} \sum_{j=1}^k \left(\pm j \delta \rho' + \frac{j^2 \delta^2}{2} \rho'' \right) \\ &+ \rho^{k-2} \sum_{j=1}^k \sum_{m=j+1}^k \left(\pm j \delta \rho' + \frac{j^2 \delta^2}{2} \rho'' \right) \left(\pm m \delta \rho' + \frac{m^2 \delta^2}{2} \rho'' \right) + O(\delta^3), \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \rho^k + \rho^{k-1} \left(\pm \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \\ &+ \rho^{k-2} \left(\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) + O(\delta^3). \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

C.2 Somatórios da Matriz de Transição

Os somatórios dessa seção aparecem no desenvolvimento da matriz de transição da equação mestra. Antes de obtermos as expressões para esses somatórios, é interessante encontrar a expressão para a soma de algumas séries que serão úteis adiante. São eles:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k = \rho + \sum_{k=2}^{\infty} \rho^k = \rho + \rho \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k = \frac{\rho}{1-\rho}, \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k-1} &= \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k \rho^k \right) = \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \right) \right] = \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{1-\rho} \right) \right] \\ &= \frac{1+\rho}{(1-\rho)^3}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k^3 \rho^{k-1} &= \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^k \right) = \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k \rho^k \right) \right] = \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \right) \right] \right\} \\ &= \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{1-\rho} \right) \right] \right\} = \frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(1-\rho)^4}, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k^2(k+1)\rho^k &= \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k+1} \right) = \frac{d}{d\rho} \left(\rho \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^k \right) = \frac{d}{d\rho} \left[\rho^2 \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k \rho^k \right) \right] \\ &= \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \right) \right] \right\} = \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{1-\rho} \right) \right] \right\} \\ &= \frac{2\rho(2\rho+1)}{(\rho-1)^4}, \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^k = \rho \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k-1} = \frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^3}, \quad (\text{C.9})$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k+1} = \rho \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^k = \frac{\rho^2(1+\rho)}{(1-\rho)^3}. \quad (\text{C.10})$$

C.2.1 Somatório das Transições Difusivas

Esse somatório acompanha o termo D/δ^2 nas Eqs. (A.4) e (B.3) e pode ser desenvolvido da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho [S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-]] &= \sum_{k=1}^{\infty} \left[\rho^k + \rho^{k-1} \left(+\frac{k(k+1)}{2} \delta \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \right. \\
&+ \rho^{k-2} \left(\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) + \\
&+ \rho^k + \rho^{k-1} \left(-\frac{k(k+1)}{2} \delta \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \\
&+ \rho^{k-2} \left(\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) + \\
&- \rho \left[\rho^{k-1} + \rho^{k-2} \left(+\frac{(k-1)k}{2} \delta \rho' + \frac{(k-1)k(2k-1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \right. \\
&+ \rho^{k-3} \left(\frac{1}{24} (k-1)k(3(k-1)^2 - (k-1) - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) + \\
&+ \rho^{k-1} + \rho^{k-2} \left(-\frac{(k-1)k}{2} \delta \rho' + \frac{(k-1)k(2k-1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right) \\
&\left. \left. + \rho^{k-3} \left(\frac{1}{24} (k-1)k(3(k-1)^2 - (k-1) - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right) \right] \right] \\
&= \delta^2 \sum_{k=1}^{\infty} [\rho^{k-1} k^2 \rho'' + \rho^{k-2} (k-1) k^2 (\rho')^2], \\
&= \delta^2 \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho^{k-1} k^2 \rho') \right], \\
&= \delta^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^{k-1} k^2 \right) \rho' \right] + O(\delta^3), \\
&= \delta^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + O(\delta^3). \tag{C.11}
\end{aligned}$$

C.2.2 Somatório das Transições de Arrastamento

Esse somatório acompanha os termo $D\beta U'/\delta$ e $D\beta^2(U')^2/2$ na Eq. (B.3). e pode ser desenvolvido da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} k [S_k^- - \rho S_k^- - \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] &= \sum_{k=1}^{\infty} k \left\{ \left[\rho^k - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \right] \right. \\
&- \rho_i \left[\rho^k - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \right] \\
&- \rho_i \left[\left(\rho^{k-1} + \frac{(k-1)k}{2} \delta \rho^{k-2} \rho' \right) \right. \\
&- \left. \left. \left(\rho^k + \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \right) \right] \right\} \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} k \left\{ \rho^k - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' - \rho^{k+1} \right. \\
&+ \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^k \rho' - \rho^k - \frac{(k-1)k}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \\
&+ \left. \rho^{k+1} + \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^k \rho' \right\}, \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} k [-k^2 \delta \rho^{k-1} \rho' + k(k+1) \delta \rho^k \rho'], \\
&= \delta \rho' \sum_{k=1}^{\infty} [-k^3 \rho^{k-1} + k^2(k+1) \rho^k] + O(\delta^2), \\
&= -\delta \rho' \left(\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right) + O(\delta^2). \quad (C.12)
\end{aligned}$$

C.2.3 Somatório dos Termos Proporcionais à U''

Esse somatório acompanha o termo $D\beta U''/2$ na Eq. (B.3) e pode ser desenvolvido da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} [S_k^- - \rho S_k^- + \rho (S_{k-1}^+ - S_k^+)] &= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left\{ \rho^k - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' - \rho^{k+1} \right. \\
&+ \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^k \rho' + \rho^k + \frac{(k-1)k}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' - \rho^{k+1} \\
&\left. - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^k \rho' \right\}, \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left\{ 2\rho^k - 2\rho^{k+1} - \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \right. \\
&\left. + \frac{(k-1)k}{2} \delta \rho^{k-1} \rho' \right\}, \\
&= 2 \sum_{k=1}^{\infty} k^2 (\rho^k - \rho^{k+1}) + O(\delta), \\
&= 2 \left(\frac{\rho(1+\rho)}{(1-\rho)^3} - \frac{\rho^2(1+\rho)}{(1-\rho)^3} \right) + O(\delta). \tag{C.13}
\end{aligned}$$