



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

RILDER DE SOUSA PIRES

DIFUSÃO SINGULAR E PERCOLAÇÃO EM MODELOS DO TIPO
“PILHA DE AREIA” CONFINADOS

FORTALEZA

2017

RILDER DE SOUSA PIRES

DIFUSÃO SINGULAR E PERCOLAÇÃO EM MODELOS DO TIPO “PILHA DE AREIA” CONFINADOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira.

Coorientador: Prof. Dr. José Soares de Andrade Jr..

FORTALEZA
2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- P747d Pires, Rilder de Sousa.
Difusão singular e percolação em modelos do tipo “Pilha de Areia” confinados / Rilder de Sousa Pires. –
2017.
98 f. : il. color.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em
Física, Fortaleza, 2017.
Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.
1. Modelo Pilha de Areia. 2. Difusão Singular. 3. Percolação. 4. Invariância de Escala. 5. Sistemas
Complexos . I. Título.

CDD 530

RILDER DE SOUSA PIRES

DIFUSÃO SINGULAR E PERCOLAÇÃO EM MODELOS DO TIPO “PILHA DE
AREIA” CONFINADOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 19/12/2017.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Frederico Wanderley Tavares
Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade
Universidade Federal da Bahia (UFBA)

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a todos os meus familiares que me apoiaram durante toda a minha vida acadêmica, em especial meus pais Deuzimar Pires de Araújo e Antônia Juvani de Sousa Pires e a minha irmã Rayna de Sousa Pires que sempre acreditaram em meu potencial.

Agradeço também a minha namorada Juliana Rabelo Nobre por ter me apoiado e acreditado no meu sucesso durante o meu doutorado.

Ao meu Professor e Orientador Prof. Dr. André Auto Moreira pela paciência, acompanhamento e orientação durante a minha vida acadêmica, desde a graduação até o doutorado.

Ao Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior pelas enormes contribuições e discussões a respeito desse trabalho, bem como pelo incentivo e a orientação que me forneceu durante meu doutorado.

Ao Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona, também, pelas enormes contribuições e discussões a respeito desse trabalho, bem como pela dedicação e paciência que certamente contribuíram para minha formação profissional.

Aos demais colegas e amigos que acreditaram no meu sucesso, em especial os integrantes e ex-integrantes do Laboratório de Sistemas Complexos que me acompanharam durante meu doutorado.

Aos professores Dr. Saulo Davi Soares e Reis, Dr. Humberto de Andrade Carmona, Dr. Frederico Wanderley Tavares e Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade por terem aceitado participar da minha banca de doutorado e pela valiosas observações a respeito dessa tese.

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

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

RESUMO

Nós investigamos o comportamento de um modelo tipo “pilha de areia” sujeito a um potencial confinante em uma e duas dimensões. A partir da descrição microscópica desse modelo simples com seu mecanismo de exclusão intrínseco, foi possível obter uma equação de difusão não linear que apresentou singularidades tanto no termo de difusão como no de arrastamento. As soluções estacionárias dessa equação, que maximizam a entropia de Fermi-Dirac, estão em perfeita concordância com os perfis espaciais da ocupação temporal média obtidas por meio de simulações numéricas em uma e duas dimensões. Surpreendentemente, no caso unidimensional, nossos resultados mostram que a presença de um potencial confinante pode levar à emergência de uma cauda em lei de potência na distribuição de tamanhos de avalanches. Esse regime é assinalado por um máximo na flutuação de energia. No caso bidimensional, nós observamos dois regimes invariantes de escala estudando os sistemas em diferentes condições de confinamento. Em um dado valor de confinamento, a distribuição de tamanho de agregados toma a forma de uma lei de potência. Esse regime corresponde à situação na qual a densidade no centro do sistema se aproxima do limiar crítico de percolação. A análise da dimensão fractal da fronteira do maior agregado nos fornece evidências de que esse regime é remanescente de percolação gradiente. Aumentando mais um pouco o potencial confinante, a maioria das partículas se agrupam em um agregado gigante e, então, observamos um regime onde a distribuição de saltos toma a forma de uma lei de potência. Como no caso unidimensional, esse regime é assinalado por um máximo na flutuação de energia.

Palavras-chave: Modelo Pilha de Areia. Difusão Singular. Percolação. Invariância de Escala. Sistemas Complexos.

ABSTRACT

We investigate the behavior of a two-state sandpile model subjected to a confining potential in one and two dimensions. From the microdynamical description of this simple model with its intrinsic exclusion mechanism, it is possible to derive a continuum nonlinear diffusion equation that displays singularities in both the diffusion and drift terms. The stationary-state solutions of this equation, which maximizes the Fermi-Dirac entropy, are in perfect agreement with the spatial profiles of time-averaged occupancy obtained from model numerical simulations in one as well as in two dimensions. Surprisingly, in the one-dimensional case, our results show that the presence of a confining potential can lead to the emergence of a power-law tail in the distribution of avalanche sizes. The onset of this regime is signaled by a maximum in the fluctuation of energy. In the two-dimensional case, by studying the systems at different confining conditions, we observe two scale-invariant regimes. At a given confining potential strength, the cluster size distribution takes the form of a power law. This regime corresponds to the situation in which the density at the center of the system approaches the critical percolation threshold. The analysis of the fractal dimension of the largest cluster frontier provides evidence that this regime is reminiscent of gradient percolation. By increasing further the confining potential, most of the particles coalesce in a giant cluster, and we observe a regime where the jump size distribution takes the form of a power law. Likewise the one-dimensional case, the onset of this second regime is also signaled by a maximum in the fluctuation of energy.

Keywords: Sandpile Model Singular Diffusion. Percolation. Scale Invariance. Complex Systems.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Espectro de potência em função da frequência da corrente de um resistor	13
Figura 2 – Fotografia do padrão encontrado na eletrodeposição do cobre	14
Figura 3 – Esboço do modelo “pilha de areia” unidimensional	16
Figura 4 – Altura e inclinação do modelo “pilha de areia” unidimensional	17
Figura 5 – Inclinação do modelo “pilha de areia” bidimensional	18
Figura 6 – Representação instantânea do modelo “pilha de areia”.	19
Figura 7 – Distribuição de tamanhos de avalanches para o modelo “pilha de areia”.	20
Figura 8 – Distribuição de “tempos de vidas” para o modelo “pilha de areia”.	21
Figura 9 – Estado final de um modelo “pilha de areia” Abeliano.	24
Figura 10 – Ilustração do modelo “pilha de areia” de dois estados.	26
Figura 11 – Perfil de probabilidade de ocupação para o modelo “pilha de areia” de dois estados.	27
Figura 12 – Esboço do modelo de Percolação	29
Figura 13 – Transição de fase do modelo de percolação.	29
Figura 14 – Probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado.	30
Figura 15 – Agregados de uma rede de percolação para $p = p_c$	31
Figura 16 – Número de agregados de uma rede no ponto crítico.	31
Figura 17 – Representação instantanea do modelo de Percolação Gradiente.	32
Figura 18 – Ilustração do modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado num potencial parabólico.	34
Figura 19 – Comparação entre o estado estacionário numérico e analítico para a pro- babilidade de ocupação do modelo “pilha de areia” de dois estados uni- dimensional confinado.	38
Figura 20 – Distribuição de tamanhos de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.	41
Figura 21 – Fração de saltos aceitos por unidade de tempo para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.	42
Figura 22 – Flutuação quadrática média da energia em função de κ para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.	43
Figura 23 – Distribuições de tamanho de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.	44
Figura 24 – Esboço do modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	46

Figura 25 – Probabilidade de ocupação em função de r para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	49
Figura 26 – Distribuição de tamanhos de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado	51
Figura 27 – Flutuação média da energia como função de κ para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	52
Figura 28 – Distribuição de tamanho de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	53
Figura 29 – Representação instantânea da simulação do modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	54
Figura 30 – Fração do maior agregado para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	55
Figura 31 – Distribuição de tamanhos de agregados para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	56
Figura 32 – Distribuição de tamanho de agregados em $\kappa = \kappa'$ para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	57
Figura 33 – Fronteira de difusão singular para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado	58
Figura 34 – Probabilidade de encontrar um sítio da fronteira de difusão singular para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	59
Figura 35 – Dimensão fractal para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.	60
Figura 36 – Aproximações da distribuição de saltos para o modelo de “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.	71
Figura 37 – Primeiro caso para o cálculo da condição de normalização.	72
Figura 38 – Segundo caso para o cálculo da condição de normalização.	73
Figura 39 – Terceiro caso para o cálculo da condição de normalização.	74

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Difusão Singular	11
1.2	Criticalidade Auto-organizada	11
1.3	Modelo “pilha de areia”	15
1.3.1	Modelo “pilha de areia” Unidimensional	15
1.3.2	Modelo “pilha de areia” Bidimensional	18
1.3.3	Modelo “pilha de areia” Abeliano	22
1.3.4	Modelo “pilha de areia” de Dois Estados.	25
1.4	Percolação	28
1.4.1	Percolação Gradiente	32
2	MODELOS “PILHA DE AREIA” DE DOIS ESTADOS CONFINADOS	34
2.1	Modelo Unidimensional	34
2.1.1	Equação de Difusão Unidimensional	35
2.1.2	Entropia para o Modelo Unidimensional	36
2.1.3	Solução Estacionária Unidimensional	37
2.1.4	Probabilidade de Ocupação Unidimensional	38
2.1.5	Distribuição de Saltos Unidimensional	39
2.1.6	Flutuação da Energia para o Modelo Unidimensional	43
2.2	Modelo Bidimensional Confinado	45
2.2.1	Equação de Difusão Bidimensional	46
2.2.2	Solução Estacionária Bidimensional	47
2.2.3	Probabilidade de Ocupação Bidimensional	48
2.2.4	Distribuição de Saltos Bidimensional	50
2.2.5	Flutuação da Energia para o Modelo Bidimensional	52
2.2.6	Agregados no Modelo Bidimensional	54
2.2.7	Fronteira de Difusão no Modelo Bidimensional	57
3	CONCLUSÃO	61
	APÊNDICE A – EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSIONAL CONFINADO	62

APÊNDICE B - SOMATÓRIOS DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSI- ONAL CONFINADO	67
APÊNDICE C - DISTRIBUIÇÃO DE SALTOS PARA O MO- DELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSIONAL CON- FINADO	70
APÊNDICE D - EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MO- DELO DE “PILHA DE AREIA” BIDIMENSIONAL CONFI- NADO	76
APÊNDICE E - ARTIGOS PUBLICADOS	78
REFERÊNCIAS	91

1 INTRODUÇÃO

A difusão é um dos fenômenos mais comuns na natureza. A todo momento, vemos casos onde ela se manifesta como, por exemplo, quando sentimos o cheiro de um perfume ou quando preparamos nosso café. A difusão ocorre quando partículas se espalham por um meio, como no exemplo apresentado onde as partículas do pó do café se espalham na água quente. Em sua forma mais simples, a difusão é descrita pela *lei de Fick*

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho. \quad (1.1)$$

na equação acima, \mathbf{J} é a *densidade de corrente*, ρ é a *densidade* e D é o *coeficiente de difusão* que nesse caso é constante. A *densidade* corresponde à concentração de substância por unidade de volume e a *densidade de corrente* à quantidade dessa substância que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo. Do ponto de vista qualitativo, a *lei de Fick* determina que a substância em questão difunde de uma região mais concentrada para uma menos concentrada. Uma consequência disso é que a difusão é um fenômeno irreversível.

Além da lei de Fick, a difusão simples também obedece à equação da continuidade

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (1.2)$$

que garante que não há criação nem aniquilação da substância que está difundindo. A combinação dessas duas equações nos fornece,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla\rho). \quad (1.3)$$

que corresponde ao que conhecemos habitualmente como *equação de difusão*. Apesar de bastante útil, essa equação de difusão não descreve todos os fenômenos difusivos. Uma difusão que não obedece Eq. (1.3) é comumente chamada *difusão anômala*. Ao contrário do que o nome sugere, a *difusão anômala* aparece com bastante frequência na natureza.

Difusão anômala é observada em muitos fenômenos físicos como, por exemplo, transporte em meios porosos [1, 2], difusão em fluidos sobrecarregados [3], difusão em substratos “fractais” [4–8], difusão turbulenta na atmosfera [9, 10], crescimento de superfícies [11], espalhamento espacial de células [12], populações biológicas [13], transporte celular [14], superlotação citoplasmática em células [15], difusão de proteínas devido superlotação molecular [16], sistemas incluindo átomos ultra-frios [17], análises de histogramas de batidas cardíacas [18], difusão em “polímeros vivos” [19] e, até mesmo, em estudos

de transações financeiras [20]. Difusão anômala pode também manifestar seu comportamento não Gaussiano em termos de equações de Fokker-Plank [21–25], que é o caso, por exemplo, da dinâmica de interação de vórtices em supercondutores desordenados [26–29], difusão em plasma “empoeirado” [30,31] e movimento de pedestres [31].

1.1 Difusão Singular

Um caso bastante interessante de difusão anômala é certamente a *difusão singular*, que é identificada como tendo um coeficiente de difusão divergente [32–36]. Esse tipo de comportamento acontece na natureza em algumas situações físicas, por exemplo quando *adsorvatos* difundem em uma superfície *adsorvente*. Nesse caso, sua difusão pode ser muito não linear [37–39] com um coeficiente de difusão que depende da cobertura local θ como [39],

$$D \propto \frac{1}{|\theta - \theta_c|^\alpha}. \quad (1.4)$$

Desse modo, o estudo dos mecanismos básicos responsáveis pela difusão em superfícies é de grande importância para entender processos tecnologicamente importantes como adsorção física [40] e reações catalíticas em superfícies [41–43].

Uma conexão direta entre *difusão singular* e *criticalidade auto-organizada* [44] foi feita por Carlson *et al.* [32,33] em termos de um modelo de pilha de areia unidimensional de dois estados com um mecanismo de arrastamento, onde partículas são adicionadas em uma das extremidades da pilha e caem fora pela outra extremidade da pilha. Esse modelo exhibe um estado auto-organizado e seu limite contínuo leva a uma equação de difusão não linear, onde o coeficiente de difusão da forma¹,

$$D \propto \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3}, \quad (1.5)$$

que não apenas depende da densidade local, mas também apresenta a singularidade em um valor “crítico” de densidade [32–36]. Apesar dessa importante conexão, alguns aspectos desse modelo não foram explicados, especialmente o fato de que o mais profundo sinal de criticalidade, correlações espaciais de longo alcance em forma de lei de potência, não estavam presentes na descrição original do sistema dinâmico estudado.

1.2 Criticalidade Auto-organizada

Em 1987, Bak *et al.* [44] propuseram o conceito de criticalidade auto-organizada com o intuito de explicar a ocorrência frequente de dois fenômenos: o surgimento do ruído $1/f$ e o aparecimento de estruturas auto-similares [44, 45]. De acordo com Bak *et al.*

¹Abordaremos esse modelo com mais detalhes na Seç 1.3.4.

muitos sistemas possuem essa propriedade, chamada criticalidade auto-organizada, que corresponde a possuir o ponto crítico como um atrator. Esse conceito foi introduzido por meio de um modelo simplificado que consistia de um autômato celular conhecido como modelo “pilha de areia”². Esse modelo se baseia na dinâmica observada nos deslizamentos de areia, a partir do qual foi observada uma dependência entre o número de avalanches e a área da avalanche dada por uma lei de potência.

O fato interessante por trás desse resultado é que essas avalanches estão associadas a dissipações de energia potencial. Desse modo, a dissipação de energia no modelo não ocorre de forma constante e a distribuição das flutuações de energia, também, está relacionadas com uma lei de potência.

Outra característica importante do modelo “pilha de areia” é que nele há sempre fluxo de energia, uma vez que energia potencial está sempre sendo introduzida no sistema através da adição de grãos de areia. Por isso, esse modelo foi difundido como a explicação do comportamento de processos fora do equilíbrio [44, 46]. Devido à grande ocorrência desses processos na natureza, a criticalidade auto-organizada foi proposta por Bak *et al.* como o mecanismo responsável pela ocorrência frequente de um efeito espaço temporal conhecido com ruído $1/f$ [47].

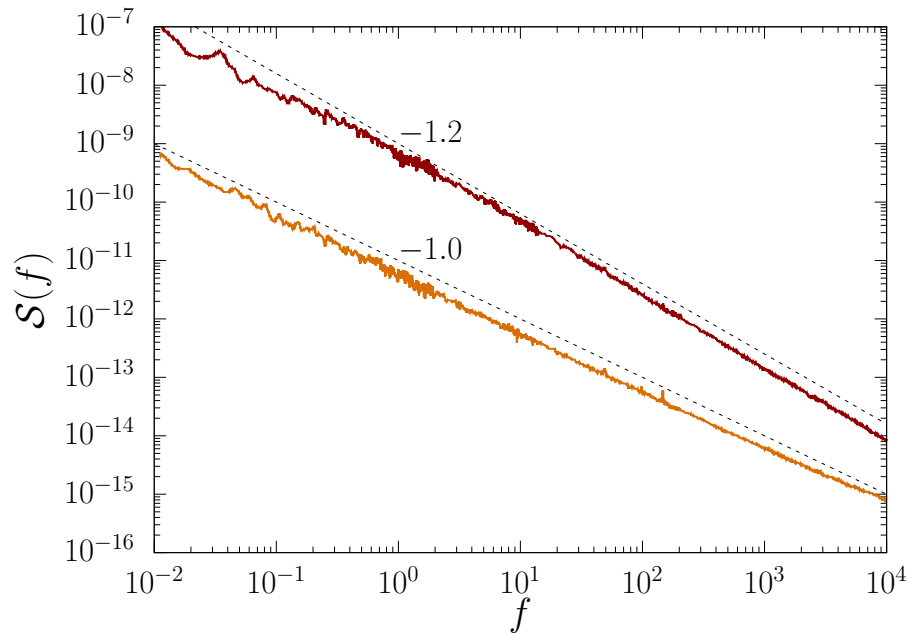
Esse fenômeno é observado, por exemplo, na luz dos quazars [48], na intensidade das manchas solares [44], na corrente através de resistores [49, 50], no fluxo de areia de uma ampulheta [51], no fluxo de rios como o Nilo [47] e nos índices de preço de bolsas de valores [52]. Na Fig. 1 vemos a densidade de *espectro de potência* de um resistor em função da corrente.

Como podemos ver nessa figura, o espectro de potência de um resistor apresenta uma dependência em lei de potência em relação à frequência. Analogamente ao que acontece numa pilha de areia, a energia nesse sistema não é dissipada de forma uniforme. Ou seja, existem flutuações na energia dissipada pelo sistema. Essas flutuações podem ser expressas como uma superposição de várias frequências de tal forma que a Fig. 1 está relacionada a média temporal de quanta energia é dissipada para cada frequência.

Além do ruído $1/f$, como foi dito anteriormente, a criticalidade auto-organizada foi considerada, também, a responsável pela ocorrência frequente da evolução de estruturas com propriedades auto-similares [47]. Mandelbrot observou que esse tipo de geometria se manifesta por exemplo no formato das nuvens, das montanhas, das linhas costeiras, das árvores, dos raios, etc [53]. Esses objetos não podem ser descritos por formas regulares, como esferas, cones, ou círculos, mas sim através de uma geometria complexa [54].

²Abordaremos esse modelo do ponto de vista quantitativo mais adiante na Seção 1.3.

Figura 1 – Espectro de potência em função da frequência da corrente de um resistor



Fonte: Elaborada pelo autor com dados obtidos em B. Pellegrini *et al.* Phys. Rev. B, **27** (1983) 1233. O gráfico superior corresponde a um resistor de filme espesso baseado em IrO_2 medido a $T = 557$ K; o gráfico inferior corresponde a um resistor baseado em rutenato, medido a $T = 300$ K. Os valores de S são medidos em V^2Hz^{-1} e os de f em Hz.

Essas estruturas podem ser descritas pelo que Mandelbrot chamou de *fractais*³ que são figuras matemáticas onde essas características auto-similares se manifestam em todas as escalas [53, 55].

A Fig. 2 mostra a fotografia da estrutura fractal encontrada quando observamos a eletrodeposição do cobre. Nessa figura, vemos a formação de um padrão que se repete em várias escalas. Esse tipo de característica é o que chamamos de auto-similaridade.

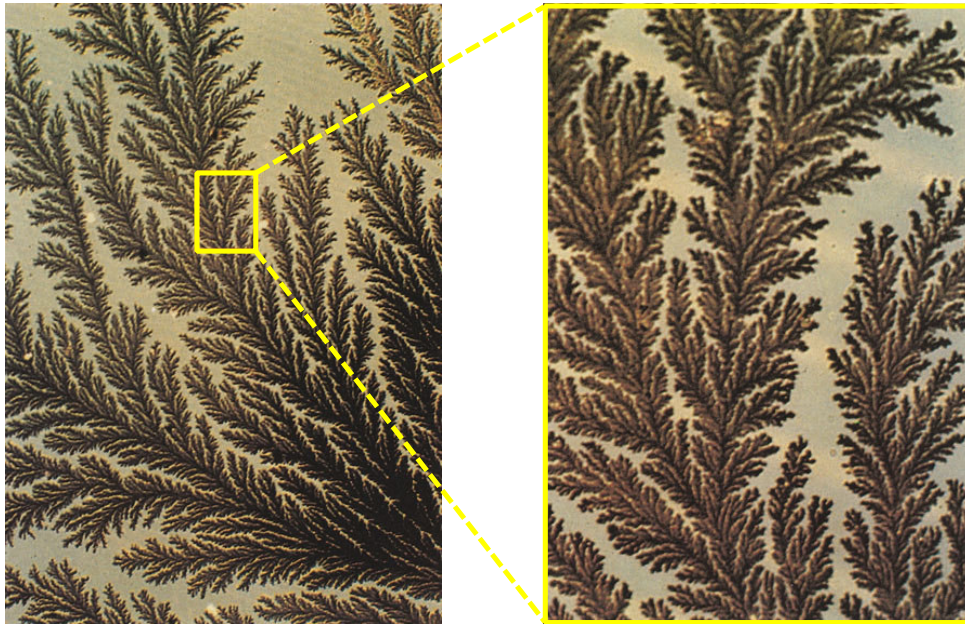
Além do modelo “pilha de areia”, outro modelo que pode exibir criticidade auto-organizada é o modelo “bloco deslizante”, descrito por Carlson e Lander [56, 57]. Além de apresentar uma ponte para o estudo do caos [58], algo interessante a respeito desse modelo, é que ele é completamente determinístico, enquanto o modelo “pilha de areia” é estocástico. Um terceiro modelo que também apresenta caos determinístico é o modelo “fogo na floresta” [59–61] que está diretamente relacionado ao modelo de percolação de sítios⁴ que sabidamente exibe comportamento crítico.

Esses três modelos possuem comportamentos similares, mas existem diferenças significantes entre eles. Muitas variações desses modelos foram propostas, algumas delas são consideradas criticamente auto-organizadas, contudo muitas outras variações não são criticamente auto-organizados. Além desses três modelos, outros modelos totalmente

³Para uma leitura detalhada a respeito de fractais veja [53].

⁴Para um estudo detalhado a respeito de percolação veja [62].

Figura 2 – Fotografia do padrão encontrado na eletrodeposição do cobre



Fonte: Modificada pelo autor, a figura original foi tirada de A. Bunde e S. Havlin, *Fractals in Science* (Springer-Verlag, New York, 1995). A figura da esquerda representa uma ampliação da parte destacada na figura a direita. Observe a semelhança entre as duas figuras, essa semelhança em escalas diferentes é o que chamamos de auto-similaridade.

diferentes foram propostos e exibem criticalidade auto-organizada. Do ponto de vista experimental, logo depois da formulação do modelo “pilha de areia”, testes foram realizados para determinar quando deslizamentos de areia descrevem um comportamento criticamente auto-organizado. Em alguns casos os resultados são consistentes com leis de potência, em outros, não, de tal forma que uma definição satisfatória de criticalidade auto-organizada continua difícil de ser elaborada [63].

Apesar da criticalidade auto-organizada ter sido introduzida de forma relativamente simples por meio do modelo “pilha de areia”, ela se trata de um conceito bastante difícil de ser definido rigorosamente. Na prática, dizemos que o sistema se encontra no estado criticamente auto-organizado se uma medida do sistema flutuar em torno no estado de estabilidade. Num sistema criticamente auto-organizado, a “perturbação” do sistema é efetuada de forma constante, enquanto a “resposta” é descrita por uma série de eventos cuja frequência segue uma lei de potência. Por exemplo, no caso de uma pilha de areia, a perturbação é a adição de grãos de areia, e a resposta são as avalanches [63]. Essa definição, apesar de não ser rigorosa, irá servir para entendermos vários problemas relevantes que iremos abordar adiante.

1.3 Modelo “pilha de areia”

A idéia básica por trás do modelo “pilha de areia” é relativamente simples. Imagine que vamos construir uma pilha de areia real. Para isso, iremos distribuir grãos de areia em locais escolhidos aleatoriamente em cima de uma mesa por exemplo. Inicialmente, nada de especial acontece com nossa pilha, porém depois de um certo tempo começam a aparecer pequenos deslizamentos de areia (avalanches). Esses deslizamentos ocorrem toda vez a pilha atinge o ângulo de repouso crítico⁵.

Esses deslizamentos ocorrem de tal forma que o tempo necessário para a pilha atingir o novo estado de equilíbrio é menor que o tempo entre as deposições de areia. Se prosseguirmos adicionando areia, nossa pilha irá crescer até atingir um estado crítico onde ela irá parar de crescer. Nesse estado, uma nova deposição de areia irá desencadear avalanches, de todos os tamanhos no sistema, que serão responsáveis pelo escoamento de areia pela borda do sistema (limites da mesa) de tal forma que a areia depositada não contribuirá mais para o crescimento da pilha.

Dessa forma, ao adicionarmos areia em um local aleatório do sistema, podemos ocasionar modificações em todo o sistema. Ou seja, o sistema é crítico uma vez que a deposição de areia transformou um sistema estável onde a dinâmica é local em um sistema crítico onde a dinâmica emergente é global. Além disso, é auto-organizado, uma vez que ocorre espontaneamente, ou seja sem um controle externo que imponha uma ordem. Nesse contexto, dizemos que nossa pilha de areia é um sistema criticamente auto-organizado [46].

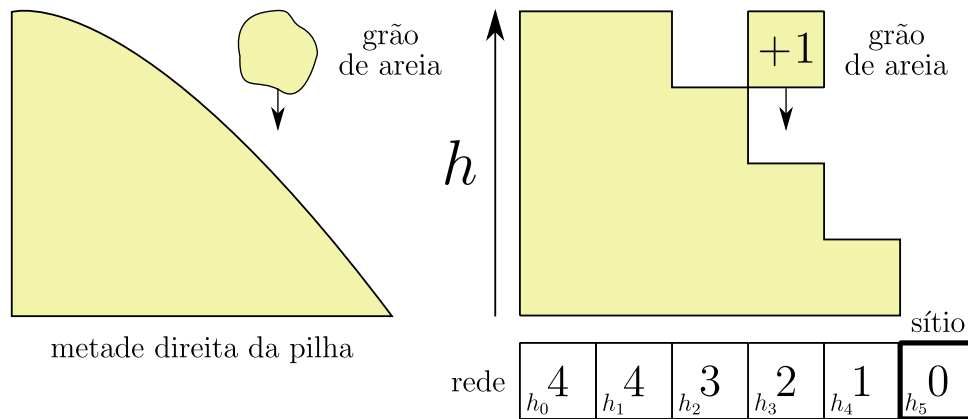
1.3.1 Modelo “pilha de areia” Unidimensional

Agora vamos discutir um pouco a respeito do modelo “pilha de areia” do ponto de vista quantitativo. Para entendermos melhor, vamos iniciar com sua versão unidimensional. Nesse caso, iremos representar a pilha de areia por uma *rede unidimensional* que pode ser entendida como L quadrados posicionados lado a lado, conforme mostra a Fig. 3. Cada quadrado da rede corresponde ao que chamamos de *sítio*. A cada sítio iremos associar um número natural h_i que corresponde à altura daquele ponto da pilha. Desse modo, a adição de grãos de areia na nossa pilha está associada a um incremento de uma unidade no valor de h_i , ou seja $h_i \rightarrow h_i + 1$. De modo a simplificar ainda mais nosso modelo, nossa rede irá representar apenas o lado direito da pilha de areia.

Além da altura, uma outra quantidade importante para a dinâmica do modelo é a *inclinação local* da pilha que é definida como a quantidade $z_i = h_i - h_{i+1}$. A inclinação

⁵O ângulo de repouso crítico, de um material é o maior ângulo em relação ao plano horizontal que o material pode ter sem que ocorra deslizamentos [64]. Para a areia seca esse ângulo é de aproximadamente 34°.

Figura 3 – Esboço do modelo “pilha de areia” unidimensional



Fonte: Elaborada pelo autor. Do lado esquerdo da figura ilustramos a metade direita da pilha de areia. Do lado direito da figura, mostramos a representação da mesma pilha, onde h_i corresponde à altura da pilha localmente. No lado inferior direito temos a representação da rede unidimensional onde cada quadrado representa um sítio da rede de tamanho $L = 6$. A adição de areia é representada por um acréscimo de uma unidade na altura h do sítio, desse modo a adição de areia ilustrada na figura corresponde a fazer $h_3 \rightarrow h_3 + 1$.

desempenha um papel essencial no nosso modelo, uma vez que ela que determina quando ocorrerá um deslizamento de areia. Dessa forma, a dinâmica do nosso modelo depende basicamente de dois mecanismos, a adição de areia em um sítio i escolhido aleatoriamente,

$$h_i \rightarrow h_i + 1,$$

e o deslizamento, que ocorre em qualquer sítio i onde $z_i \geq z_c$,

$$\begin{aligned} h_i &\rightarrow h_i - 1, \\ h_{i+1} &\rightarrow h_{i+1} + 1, \end{aligned}$$

onde z_c corresponde a um limiar de inclinação que quando ultrapassado, provoca um deslizamento. Aqui, o limiar z_c está associado ao que seria a tangente do *ângulo crítico* em uma pilha real.

Outra informação importante sobre esse modelo é que como estamos modelando apenas a metade direita da pilha, estamos considerando apenas deslizamentos que ocorrem da esquerda para a direita, ou seja, a areia sai sempre da posição correspondente ao i -ésimo sítio para a posição correspondente ao $(i + 1)$ -ésimo sítio.

Pode acontecer, também, de um deslizamento provocar um aumento na inclinação de um outro sítio de tal forma que essa inclinação ultrapassa novamente o limiar z_c , provocando, assim, um novo deslizamento. Esse tipo de evento pode levar a uma reação em cadeia de deslizamentos que corresponde a uma *avalanche* nesse modelo.

Em vez de estudarmos a altura da pilha, podemos utilizar apenas a inclinação. Nesse caso, é importante notarmos que a variação de altura no sítio i corresponde a uma variação de inclinação não somente no sítio i , mas também no sítio $i - 1$. Desse modo, uma adição de areia, é descrita por

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i + 1, \\ z_{i-1} &\rightarrow z_{i-1} - 1 \end{aligned} \quad (1.6)$$

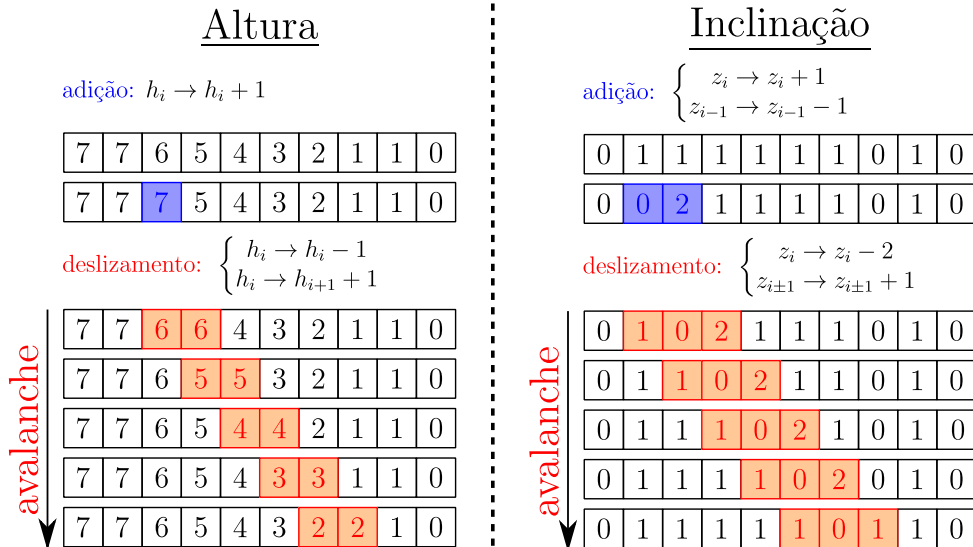
e, de forma análoga, o deslizamento que ocorre em qualquer sítio i onde $z_i > z_c$ é descrito por

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i - 2, \\ z_{i\pm 1} &\rightarrow z_{i\pm 1} + 1. \end{aligned} \quad (1.7)$$

A Fig. 4 mostra a correspondência entre a utilização da altura e inclinação local da pilha na descrição do modelo. Nessa figura, podemos notar que ao estudar o modelo “pilha de areia” do ponto de vista da inclinação, podemos pensar no problema de tal forma que “partículas de inclinação” estão difundindo para ambos os lados da pilha no momento que o valor máximo de “concentração de inclinação” $z_c = 2$ é atingido.

Como estamos interessados em estudar o sistema próximo do ponto “crítico”, o sistema é colocado em uma estado onde $z_i \gg z_c$, para todos os i 's, e então evoluímos o sistema de acordo com as Eqs. (1.6) e (1.7), obedecendo às condições de contorno

Figura 4 – Altura e inclinação do modelo “pilha de areia” unidimensional



Fonte: Elaborada pelo autor. Do lado direito da figura, mostramos a rede unidimensional correspondente a altura h da pilha e do lado esquerdo, a rede correspondente a inclinação z da mesma pilha. No caso mostrado, consideramos $z_c = 2$.

$z_0 = z_{L-1} = 0$, até que o sistema atinja o estado de equilíbrio.

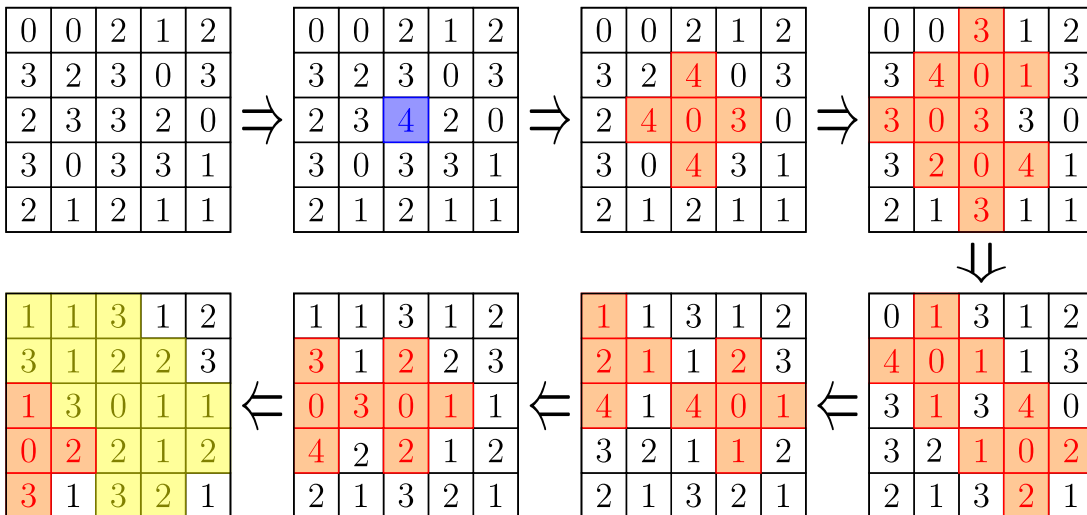
Dessa forma, o estudo do modelo é feito “perturbando” a condição de equilíbrio, ou seja, realizando uma adição de areia e observando a resposta do sistema com respeito à perturbação realizada. Segundo Bak *et al.* [47], o modelo unidimensional é interessante do ponto de vista conceitual, contudo o estado estacionário é crítico apenas em um sentido restrito. Por esse motivo, é mais conveniente observarmos o que acontece no caso bidimensional.

1.3.2 Modelo “pilha de areia” Bidimensional

O modelo “pilha de areia” bidimensional consiste numa extensão do modelo descrito anteriormente aplicado a uma *rede bidimensional* de $L \times L$ sítios. Esse modelo é o que ficou tradicionalmente conhecido como o modelo “pilha de areia” propriamente dito. Nesse ponto, é conveniente desprezarmos a descrição baseada na altura da pilha e descrevermos a pilha apenas por meio da sua inclinação z . Dessa forma, podemos descrever, de forma análoga ao que foi feito na Seç 1.3.1, uma adição de areia como

$$\begin{aligned} z_{i-1,j} &\rightarrow z_{i-1,j} - 1, \\ z_{i,j-1} &\rightarrow z_{i,j-1} - 1, \\ z_{i,j} &\rightarrow z_{i,j} + 2, \end{aligned} \tag{1.8}$$

Figura 5 – Inclinação do modelo “pilha de areia” bidimensional



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, vemos a evolução de uma “pilha de areia” durante uma avalanche. O sítio azul corresponde ao sítio perturbado. Os sítios vermelhos correspondem aos sítios afetados por deslizamentos que ocorreram no passo anterior. Os sítios amarelos e vermelhos mostrados na pilha estável no canto inferior esquerdo correspondem a todos os sítios afetados pela avalanche. No caso mostrado, consideramos $z_c = 4$.

e um deslizamento que ocorre em qualquer sítio i, j onde $z_{i,j} \geq z_c$, como

$$\begin{aligned} z_{i,j} &\rightarrow z_{i,j} - 4, \\ z_{i\pm 1,j} &\rightarrow z_{i\pm 1,j} + 1, \\ z_{i,j\pm 1} &\rightarrow z_{i,j\pm 1} + 1, \end{aligned} \tag{1.9}$$

onde $z_c = 4$, também, corresponde a um limiar de inclinação para nossa pilha. Se partirmos de uma configuração $z_{i,j} \gg z_c$, análoga ao que foi feito no caso unidimensional, e aplicarmos as seguintes condições de contorno

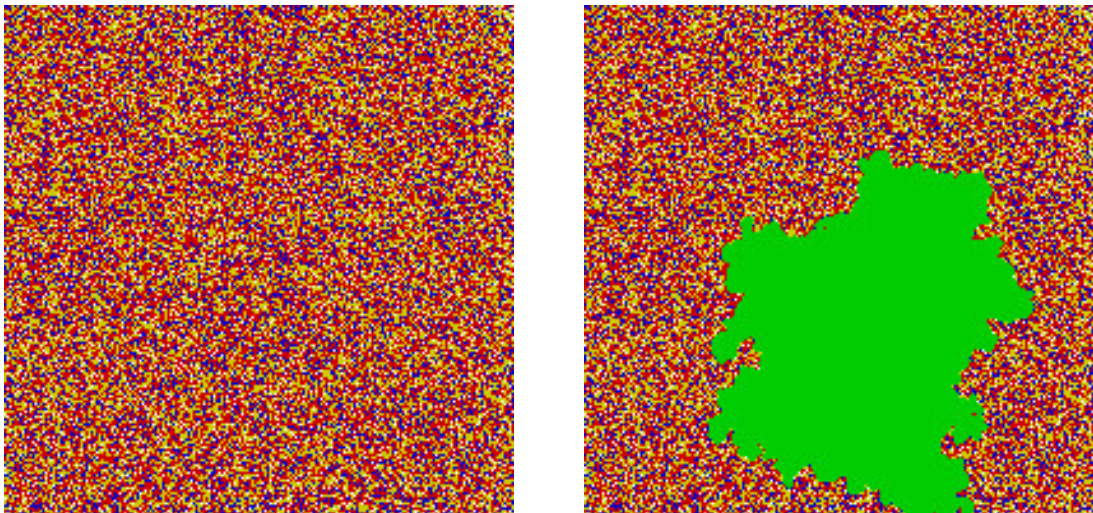
$$z_{0,j} = z_{i,0} = z_{L-1,j} = z_{i,L-1} = 0, \tag{1.10}$$

onde L é largura da rede, o sistema irá atingir uma dinâmica estacionária equivalente à obtida a partir de uma superfície reta $z = 0$ perturbada através de adições de “unidades de inclinação” ao sistema [47]. Ou seja,

$$z_{i,j} \rightarrow z_{i,j} + 1. \tag{1.11}$$

Desse modo, na prática, não importa se adicionamos grãos de areia ou “unidades de inclinação”, os resultados encontrados são estatisticamente independentes do tipo de perturbação aplicada. A Fig. 5 mostra a evolução da inclinação no modelo de “pilhas

Figura 6 – Representação instantânea do modelo “pilha de areia”.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, vemos a representação instantânea de uma simulação obtida utilizando a dinâmica descrita pelas Eqs. (1.9) e (1.11). As figuras da direita e da esquerda representam a mesma rede num instante anterior a uma avalanche, onde os sítios em verde representam os sítios que participam de uma avalanche no instante de tempo seguinte. O sistema mostrado consiste numa rede 200×200 onde a representação das cores é a seguinte: 0 - (branco), 1 - (azul), 2 - (laranja), 3 - (vermelho).

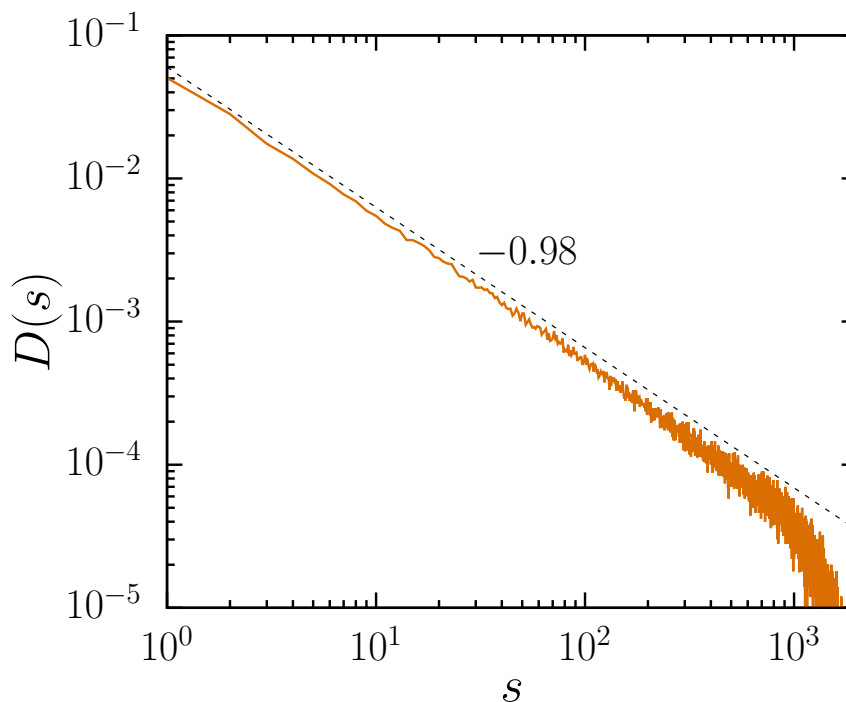
de areia” bidimensional. Nessa figura é possível ver a reação em cadeia dos deslizamentos levando à formação de uma avalanche. Na Fig. 6 podemos ver um caso típico de uma simulação realizada utilizando a dinâmica descrita anteriormente. Aqui podemos ver que o *agregado de avalanche*, que corresponde ao conjunto de sítios afetados pela avalanche (sítios verdes na figura), pode ser de vários tamanhos, inclusive da ordem do tamanho do sistema conforme mostra a figura.

Aqui, do mesmo modo que no caso unidimensional, a dinâmica descrita pelas Eqs. (1.9) e (1.11) descreve como a inclinação da pilha “difunde” de regiões com maior “concentração de inclinação” para regiões de menor “concentração de inclinação”. Embora essa análise qualitativa seja fácil, a obtenção de uma equação de difusão para esse modelo não é nada simples.

O modelo descrito pela dinâmica mostrada nas Eqs. (1.9) e (1.11) evolui de tal forma que no estado estacionário várias leis de potência se manifestam. Na figura 7, vemos o gráfico em log-log da *distribuição de tamanhos de avalanches* para o modelo “pilha de areia” bidimensional. Como podemos ver, o gráfico apresenta uma lei de potência do tipo

$$D(s) \sim s^{-\tau} \quad ; \quad \tau \simeq 0.98, \quad (1.12)$$

Figura 7 – Distribuição de tamanhos de avalanches para o modelo “pilha de areia”.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, vemos uma distribuição típica de tamanhos de avalanches para o modelo “pilha de areia”. 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 . Esses resultados foram obtidos utilizando a dinâmica descrita pelas Eqs. (1.9) e (1.11).

onde s é o número de sítios afetados em uma avalanche (tamanho do agregado de avalanche) e $D(s)$ a probabilidade de haver um salto de tamanho s . A distribuição de avalanches está diretamente relacionada a uma distribuição de flutuações nos “tempos de vida” (número de interações necessárias para uma avalanche acabar).

Isso pode ser notado observando que se a perturbação cresce com um expoente γ dentro do agregado de avalanche, o tempo de vida t de um agregado é relacionado ao seu tamanho s por $t^{1+\gamma} \simeq s$. Dessa forma, a distribuição de tempos de vida pesada pela resposta média s/t , pode ser calculada pela distribuição de tamanhos de agregados da seguinte forma [44],

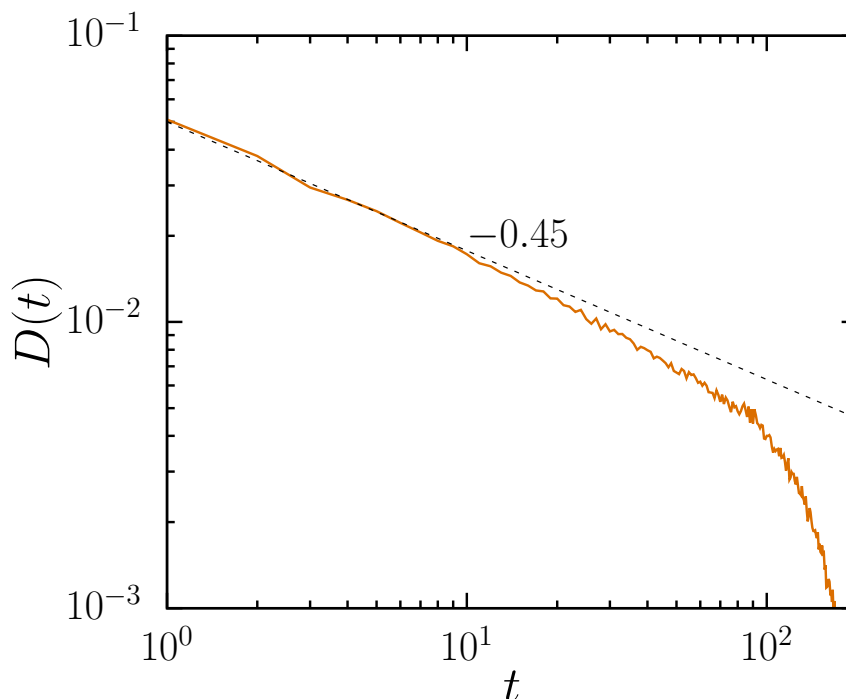
$$D(t) = \frac{s}{t} D(s(t)) \frac{ds}{dt} \approx t^{-(\gamma+1)\tau+2\gamma} \equiv t^{-\alpha}. \quad (1.13)$$

Na Fig. 8, vemos o gráfico em log-log da *distribuição de tempos de vidas* para o modelo “pilha de areia” bidimensional. Nessa figura, analogamente ao que ocorre para o caso da distribuição de avalanches, o gráfico apresenta uma lei de potência do tipo

$$D(t) \sim t^{-\alpha} \quad ; \quad \alpha \simeq 0.45, \quad (1.14)$$

onde t é o número de interações necessárias para uma avalanche acabar e $D(t)$ é a probabilidade de acontecer uma avalanche de “tempo de vida” t multiplicada pela *resposta*

Figura 8 – Distribuição de “tempos de vidas” para o modelo “pilha de areia”.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, vemos a distribuição típica 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 . Esses resultados foram obtidos utilizando a dinâmica descrita pelas Eqs. (1.9) e (1.11).

média s/t .

Esses são os principais resultados referentes ao modelo “pilha de areia” tradicional. Como foi dito anteriormente, logo após o desenvolvimento desse modelo, uma série de outros modelos criticamente auto-organizados que tinham como base o modelo “pilha de areia” tradicional foram desenvolvidos. Isso levou à necessidade de um desenvolvimento formal analítico do modelo “pilha de areia” que permitiria uma melhor análise desses modelos.

1.3.3 Modelo “pilha de areia” Abeliano

Estudar o modelo “pilha de areia” do ponto de vista analítico traria várias vantagens para o estudo de fenômenos críticos, como por exemplo estimativas de alguns expoentes críticos e o entendimento dos mecanismos por trás da criticalidade auto-organizada. Apesar disso, não existe ainda uma descrição completa do modelo “pilha de areia” [65] introduzido por Bak *et al.* [44]. Contudo, o modelo “pilha de areia” sofreu alguns avanços em uma série de artigos de Dhar *et al.* [66–69] onde foi mostrado que o modelo “pilha de areia” possuía propriedades matemáticas interessantes. Dentre elas, a de que o atrator do modelo é caracterizado em termos de um grupo Abeliano [55].

Grande parte desse desenvolvimento se deu pela formalização do que seria uma “pilha de areia” Abeliana. A partir daqui, iremos abstrair toda a descrição do modelo original e vamos considerar uma descrição puramente matemática de uma “pilha de areia”. Considere um conjunto de N sítios, numerados por inteiros de 1 a N . Para cada sítio é estabelecido uma variável inteira z_i que corresponde a um “número de partículas” nesse sítio. Nesse caso, um modelo “pilha de areia” Abeliano é descrito por duas regras [66]:

Regra de adição: Seleccionamos um sítio aleatoriamente com probabilidade p_i (onde os p_i 's não são necessariamente iguais) e aumentamos z_i de 1. Os demais valores de z_j com ($j \neq i$) permanecem inalterados.

Regra de difusão: Especificamos essa regra em termos de uma matriz $N \times N$ inteira Δ , e um conjunto de N valores limitantes z_{ci} (com $i = 1$ até N). Para qualquer sítio i , se $z_i > z_{ci}$ algumas das partículas desse sítio difundem para os outros sítios, e algumas podem deixar o sistema. Para uma difusão a partir do sítio i ,

$$z_j \rightarrow z_j - \Delta_{i,j}, \text{ para } j = 1 \text{ até } N. \quad (1.15)$$

onde, a matriz inteira Δ satisfaz as seguintes condições

$$\Delta_{i,i} > 0, \quad \text{para todo } i, \quad (1.16)$$

$$\Delta_{i,j} \leq 0, \quad \text{para todo } i \neq j, \quad (1.17)$$

e, além disso

$$\sum_{j=1}^N \Delta_{ij} \geq 0, \quad \text{para todo } i.$$

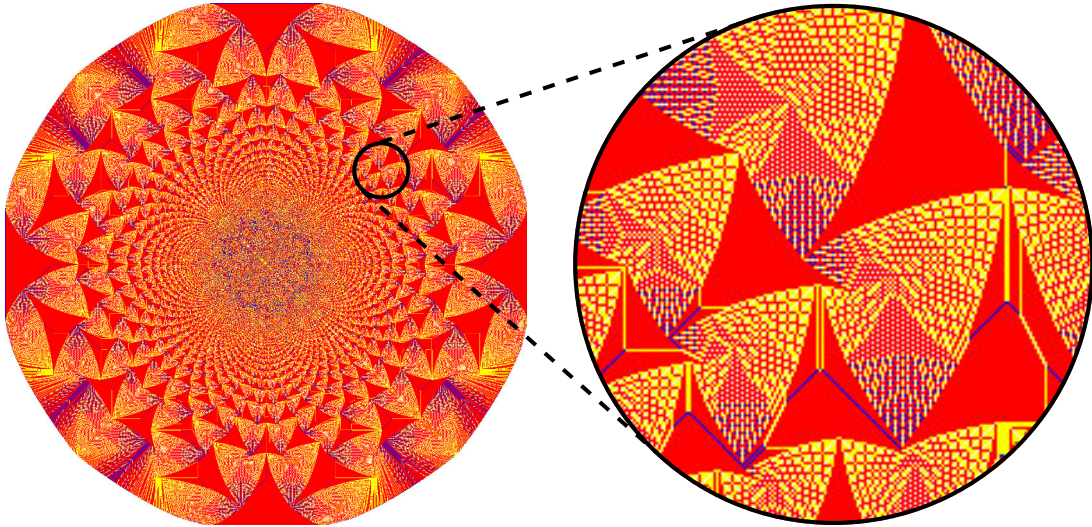
Veja que nenhuma geometria foi especificada e que também não exigimos que Δ seja simétrica. Veja também que essas regras garantem apenas que no sítio a partir do qual ocorre a difusão, z_i deve decrescer, e que z_j para $j \neq i$ não pode decrescer. Além disso, determinam que não há criação de partículas e que partículas podem deixar o sistema [66].

Dessa forma, as “pilhas de areia” de Bak *et al.* [44] (tanto o caso unidimensional como o bidimensional) são casos específicos de “pilhas de areia” Abelianas. Essas regras se aplicam também para alguns outros modelos baseados no modelo “pilha de areia” tradicional inclusive para casos direcionados. Contudo, para modelos baseados no modelo “pilha de areia” tradicional, onde as regras de difusão dependem de gradientes de z_i essa descrição não se aplica [66].

Nesse ponto, é conveniente consideramos algumas simplificações no modelo para identificarmos algumas propriedades importantes. Inicialmente, vamos considerar o caso no qual $z_{ci} = \Delta_{i,i}$ para todo i . Desse modo, podemos ver que qualquer configuração C , onde $1 \leq z_i \leq \Delta_{i,i}$, é estável com relação à regra de difusão. Podemos, então, definir N operadores a_i ($i = 1$ até N) no espaço das configurações estáveis requerendo que $a_i C$ seja uma configuração estável obtida pela adição de uma partícula no sítio i para a configuração C e permitindo o sistema evolua pela regra da difusão [66].

Considere, agora, duas configurações onde dois sítios α e β são ambos instáveis ($z_\alpha > \Delta_{\alpha,\alpha}$ e $z_\beta > \Delta_{\beta,\beta}$). Então aplicando a regra de difusão em α , β permanece instável, e depois de aplicarmos a regra em α e β obtemos uma configuração na qual z_i decresce de $\Delta_{\alpha,i} + \Delta_{\beta,i}$ para $i = 1$ até N . Isso é claramente simétrico com relação à permutação de α e β . Desse modo, obtemos a mesma configuração independente se a regra de difusão é aplicada inicialmente em α ou β . Utilizando esse argumento repetidamente, podemos dizer que o estado final de uma pilha é independente da sequência que se aplica à regra de difusão nos sítios instáveis. Além disso, se aplicarmos a regra de difusão em um sítio instável α e então adicionarmos uma partícula no sítio β obtemos o mesmo resultado no caso de adicionarmos, inicialmente, uma partícula em β e então aplicarmos a regra de difusão em α . A partir dessas duas propriedades, podemos dizer que para todas as configurações C , e todos os i e j , temos $a_i a_j C = a_j a_i C$. Dessa forma, os operadores a_i e

Figura 9 – Estado final de um modelo “pilha de areia” Abeliano.



Fonte: Elaborada pelo autor. No lado esquerdo, vemos o estado final de uma “pilha de areia” Abeliano onde, inicialmente, $n = 7593905$ partículas foram colocadas no sítio central. A cor na figura corresponde valor de z onde a representação é a seguinte: 0 - (branco), 1 - (azul), 2 - (laranja), 3 - (vermelho). No lado esquerdo, mostramos uma visão ampliada da pilha na qual percebemos o padrão auto-similar presente no modelo.

a_j comutam entre si [66]:

$$[a_i, a_j] = 0, \text{ para todo } i, j.$$

Por conta dessa propriedade chamamos isso de um processo *Abeliano* [65] ou *comutativo*. Essa é uma propriedade bastante importante pois permite tratar essa classe de modelos de forma simplificada. Além disso, ela garante que o estado estacionário do modelo pode ser caracterizado de forma simples [66]. Essa abordagem permitiu obter expoentes para algumas geometrias mais simples do modelo “pilha de areia” [66–69].

O caso mais simples do modelo “pilha de areia” Abeliano corresponde ao caso onde consideramos a dinâmica tradicional do modelo Bak *et al.* [44], na qual o sítio de onde parte a difusão decresce de quatro unidades enquanto seus vizinhos aumentam de uma unidade. Nesse caso, quando consideramos a configuração inicial com finitamente muitas partículas posicionadas no mesmo sítio, a regra de difusão sempre encontra uma configuração estável onde cada sítio tem no máximo três partículas [65]. Além disso, conforme foi discutido anteriormente, o estado final vai ser independente da ordem que a regra de difusão é aplicada nos sítios instáveis. A configuração final desse problema possui uma estrutura fractal [65, 70–73] que (após um reescalonamento) é independente do número inicial de partículas [65].

Na Fig. 9, mostramos o estado final de um modelo “pilha de areia” Abeliano que acabamos de descrever. Nessa figura, podemos ver um padrão auto-similar que emerge

naturalmente a partir da regra de difusão descrita anteriormente. Esse é um exemplo elegante de como regras simples são capazes de produzir complexidade.

1.3.4 Modelo “pilha de areia” de Dois Estados.

Os modelos “pilha de areia” de dois estados são uma classe de modelos baseados no modelo “pilha de areia” original de Bak *et al.* [44]. Esses modelos, que também foram chamados por Carlson *et al.* [74] de modelos de *desníveis*, possuem uma dinâmica governada por um conjunto de regras simples que reproduzem qualitativamente as características do modelo “pilha de areia”. A principal característica comum entre esse modelo e o modelo “pilha de areia” de Bak *et al.* é a forma a qual as “partículas”⁶ difundem. Desse modo, esse modelo pode ser utilizado para entender como as “partículas de inclinação” do modelo de Bak *et al.* difundem.

Nesses modelos, é definido um número inteiro h_i análogo ao z_i do modelo “pilha de areia”, de tal forma que um *desnível* é definido, nesses modelos, como qualquer sítio i onde h_i é inferior a um certo limiar. Carlson *et al.* [74] mostraram que as avalanches são aniquiladas nos desniveis, e que elas funcionam como paredes de domínio para o sistema. Desse modo, eles justificaram que para entendermos o que acontece no modelo “pilha de areia” precisamos apenas observar a dinâmica dos desniveis.

Um caso interessante do modelo de desniveis foi apresentado por Carlson *et al.* em [32]. Esse modelo consiste em uma rede unidimensional de N_s sítios, onde cada sítio possui um valor de 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 $j < i$ [32].

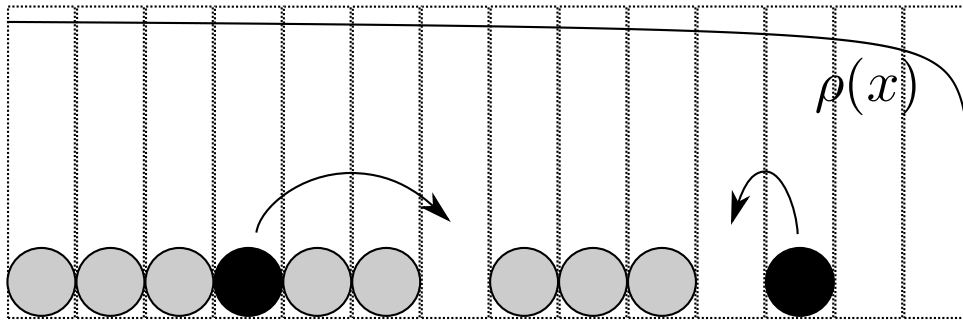
As condições de contorno do problema são impostas de tal forma que o sistema é aberto do lado direito e fechado do lado esquerdo. Além disso, partículas são injetadas na borda direita com taxa α e instantaneamente difundem para o primeiro sítio j com $h_j < h_c$. Esse tipo de movimento difusivo foi definido, por Carlson *et al.*, como um “salto”⁷. 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) [32]. Esse caso é o que chamaremos daqui em diante de *modelo “pilha de areia” de dois estados*.

Nesse caso, a dinâmica do sistema é seguinte: Os 1’s saltam com taxa 1 para

⁶As “partículas” que nos referimos aqui são as “partículas de inclinação” do modelo de Bak *et al.*

⁷Veja que um salto nesse modelo, pode também ser interpretado como se todas as partículas ultrapassadas pelo salto se movessem da distância de um sítio na direção do salto.

Figura 10 – Ilustração do modelo “pilha de areia” de dois estados.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os sítios com um círculo dentro representam os sítios ocupados e os vazios representam os desocupados. As partículas “saltam” de um sítio até o próximo sítio desocupado à direita e à esquerda com taxa 1. Na figura acima, a curva $\rho(x)$ representa qualitativamente o perfil de probabilidade de ocupação.

o primeiro 0 à direita ou à esquerda. Os 1's caem na lateral direita e são bloqueados na lateral esquerda. Além disso, uma partícula é injetada no primeiro sítio com taxa α e é instantaneamente transmitida até o próximo sítio vazio à direita [32]. Um esboço desse modelo é mostrado na Fig. 10.

A vantagem de trabalhar com o modelo descrito acima é que um limite contínuo pode ser obtido [32]. Uma das formas de fazer isso é determinando a forma exata do coeficiente de difusão que pode ser calculada assumindo um perfil linear na probabilidade de ocupação com inclinação 2ϵ . O coeficiente de difusão é então obtido por $D(\rho) = I/2\epsilon$, onde I é a corrente através do plano que separa dois sítios [32],

$$I = \sum_{k=0}^{\infty} \left[\prod_{i=0}^k [\rho + (2i + 1)\epsilon] - \prod_{i=0}^k [\rho - (2i + 1)\epsilon] \right].$$

Para cada k o primeiro termo é associado com o fluxo de corrente na direção positiva, e o segundo termo com o fluxo na direção negativa. Os produtórios são as probabilidades que todos os sítios do plano até o k -ésimo sítio para a esquerda (ou direita) estejam ocupados. Em cada caso, a k -ésima partícula pode saltar através do plano com taxa 1. Mantendo termos até $O(\epsilon)$ obtemos o seguinte coeficiente de difusão [32]

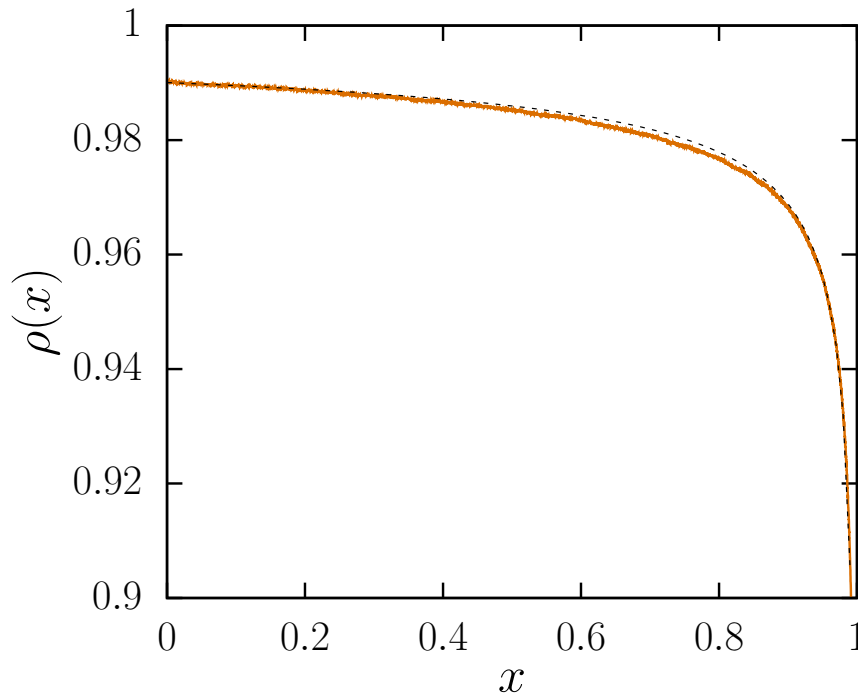
$$D(\rho) = \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \quad (1.18)$$

que depende da probabilidade de ocupação local ρ , e tem um polo de terceira ordem em $\rho = 1$. O que estabelece que o limite contínuo⁸ para a equação do modelo de dois estados que é descrita por [32]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right]. \quad (1.19)$$

⁸Esse limite é feito considerando $x = i\delta$, onde $\delta \sim N_s^{-1}$ é o espaçamento da rede.

Figura 11 – Perfil de probabilidade de ocupação para o modelo “pilha de areia” de dois estados.



Fonte: Elaborada pelo autor. Perfil de probabilidade de ocupação numérico (linha sólida) e analítico (linha tracejada). O resultado analítico é obtido através da Eq. (1.21) 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 10^6 passos de tempo.

Para N_s grande, podemos então escrever as condições de contorno descritas anteriormente da seguinte forma [32],

$$\begin{aligned} \rho(1) &= 0 && \text{(sistema aberto),} \\ \rho'(0)D(\rho(0)) &= -\alpha N_s && \text{(fluxo constante em } x=0\text{).} \end{aligned} \quad (1.20)$$

Aplicando as condições do contorno mostradas na Eq. (1.20), obtemos uma solução estacionária do problema

$$\rho_{N_s}(x) = 1 + \frac{1 - \sqrt{4\alpha N_s(1-x) + 1}}{2\alpha N_s(1-x)}. \quad (1.21)$$

Apesar da Eq. (1.19) ter sido deduzida para um sistema infinito, ela concorda muito bem com os resultados numéricos, conforme mostra a Fig. 11.

As relações de escala podem ser obtidas a partir de algumas considerações: O espaçamento entre dois sítios δ escala com $\delta \sim N_s^{-1}$. A probabilidade de ocupação média $\langle \rho_{N_s} \rangle = \int_0^1 \rho_{N_s}(x) dx$ 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 é muito grande. Assim, a probabilidade de ocupação média de zeros $\rho_0(N_s) = 1 - \langle \rho_{N_s} \rangle$ escala com $\rho_0(N_s) \sim 2/\sqrt{\alpha N_s}$ [32]. Dessa forma, a distribuição de saltos pode ser aproximada assumindo a medida do produto localmente. No sistema

descrito anteriormente, a probabilidade de uma partícula saltar $k < N_s$ sítios em um evento é⁹ [32]

$$P(k, N_s) = [1 - \rho_0(N_s)]^{k-1} \rho_0(N_s). \quad (1.22)$$

Como $\rho_0(N_s) = 2/\sqrt{\alpha N_s}$, a distribuição de eventos irá escalar com o número de sítios. Assim, pela Eq. (1.22), obtemos:

$$P(k, N_s) = N_s^{-\beta} g(k/N_s^\nu), \quad (1.23)$$

onde

$$g(z) = \frac{2}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{2}{\sqrt{\alpha}} z} \quad (1.24)$$

e $\beta = \nu = 1/2$ [32].

Observe que, nesse modelo, os saltos são como 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 de potência, Carlson *et al.* utilizam o fato desse modelo, no estado estacionário, apresentar invariância de escala, evidenciada por meio da transformação de escala Eq. (1.23), para concluir que seu modelo é criticamente auto-organizado.

1.4 Percolação

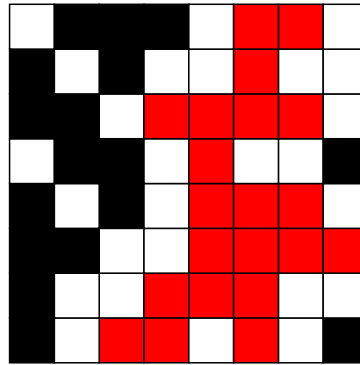
Como foi visto, os modelos apresentados até o momento estão relacionados com fenômenos difusivos. Nessa seção abordaremos um modelo bidimensional desenvolvido para estudar o fluxo em um meio poroso. Apesar de, à primeira vista, esse modelo não parecer tão relacionado com os modelos anteriores, ele possui uma conexão bastante interessante com os conceitos apresentados anteriormente.

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 [62]. Contudo, o início da teoria de percolação é normalmente associado às publicações de Broadbent e Hammersley em 1957 [75]. Apesar de mais de cinquenta anos desde a criação do modelo de percolação, esse assunto ainda é alvo de publicações recentes [76–78].

O modelo de percolação pode ser entendido simplificada da seguinte forma: Imagine uma rede quadrada $L \times L$, como a mostrada na Fig. 12, onde analogamente ao modelo pilha de areia, cada quadrado menor dessa rede é chamado de *sítio*. Aqui, 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

⁹Veja que a distribuição de saltos é exponencial.

Figura 12 – Esboço do modelo de Percolação



Fonte: Elaborada pelo autor. 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 agregado da rede (i.e., o que possui mais sítios).

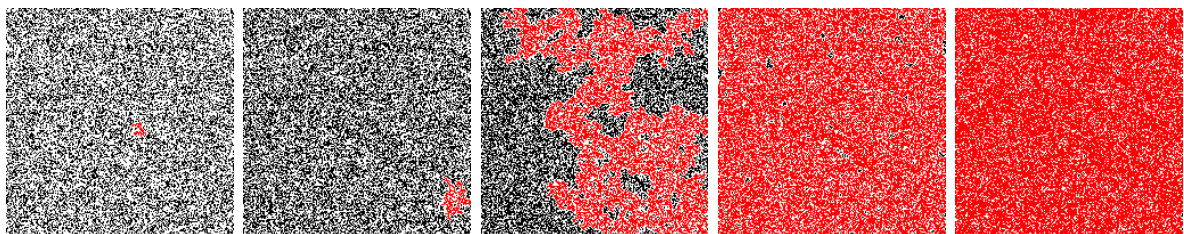
sítios ocupados vizinhos entre si dizemos que eles pertencem ao mesmo *agregado*.

O que mostramos na Fig. 12 é na verdade uma representação do modelo de percolação¹⁰, onde os sítios foram ocupados aleatoriamente com uma certa probabilidade. Na realidade, estamos interessados nas características desse modelo quando o tamanho da rede é grande o suficiente (veja a Fig. 13) para desprezarmos os efeitos provocados pelos sítios encontrados nas laterais da rede, os chamados *efeitos de tamanho finito* [62].

Esse modelo possui duas fases distintas, uma onde existem vários agregados pequenos e uma onde existe na rede um agregado cujo tamanho é da ordem do tamanho do sistema, como mostra a Fig. 13. 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 probabilidade de um sítio está ocupado, p . Isso pode ser observado na Fig. 14.

Veja que, à medida que se aumenta o tamanho da rede, a curva se torna cada vez mais íngreme por volta de $p \approx 0.593$, valor o qual é conhecido como *ponto crítico*¹¹

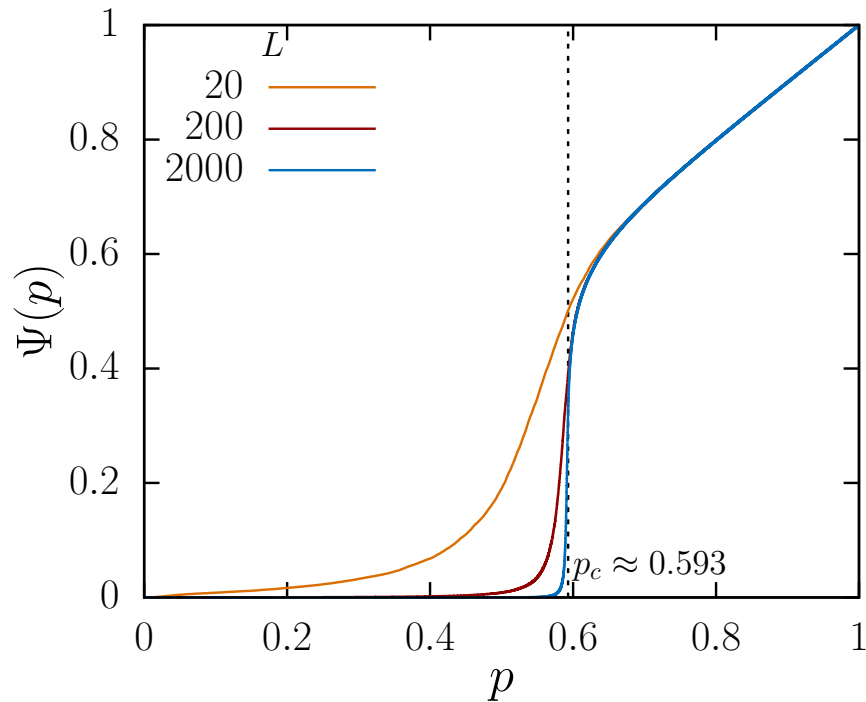
Figura 13 – Transição de fase do modelo de percolação.



Fonte: Elaborada pelo autor. Na figura, os sítios pretos e os vermelhos são ocupados e os brancos, os desocupados. Os sítios vermelhos representam os sítios que pertencem ao maior agregado da rede. As figuras foram geradas a partir de uma simulação de uma rede 200×200 à 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.

¹⁰Por questões praticas, tratamos aqui apenas do modelo de percolação de sítios. Para um tratamento mais aprofundado sobre percolação veja [62].

Figura 14 – Probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Na figura, vemos a 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 $L = 20$, $L = 200$ e $L = 2000$, respectivamente.

de percolação para essa rede [62].

De um modo geral, toda quantidade relacionada ao modelo de percolação é função de p e depende de detalhes microscópicos do sistema, por exemplo, o número vizinhos de cada sítio da rede. Contudo, a maioria delas obedece leis de escala, próximo ao ponto crítico, que são insensíveis aos detalhes microscópicos da rede. Dessa forma, podemos escrever as principais leis de escala da seguinte forma [79]

$$\begin{aligned}\Psi(p) &\sim (p - p_c)^\beta, \\ \xi(p) &\sim |p - p_c|^\eta,\end{aligned}$$

onde Ψ é o parâmetro de ordem (probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado), ξ é o comprimento de correlação.

Outro fato interessante a respeito desse modelo é que no *ponto crítico* a rede possui agregados de todos os tamanhos, conforme mostra a Fig. 15. Na verdade, o número de agregados depende do tamanho do agregado, também, de acordo com uma lei de

¹¹O 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 [62].

Figura 15 – Agregados de uma rede de percolação para $p = p_c$.



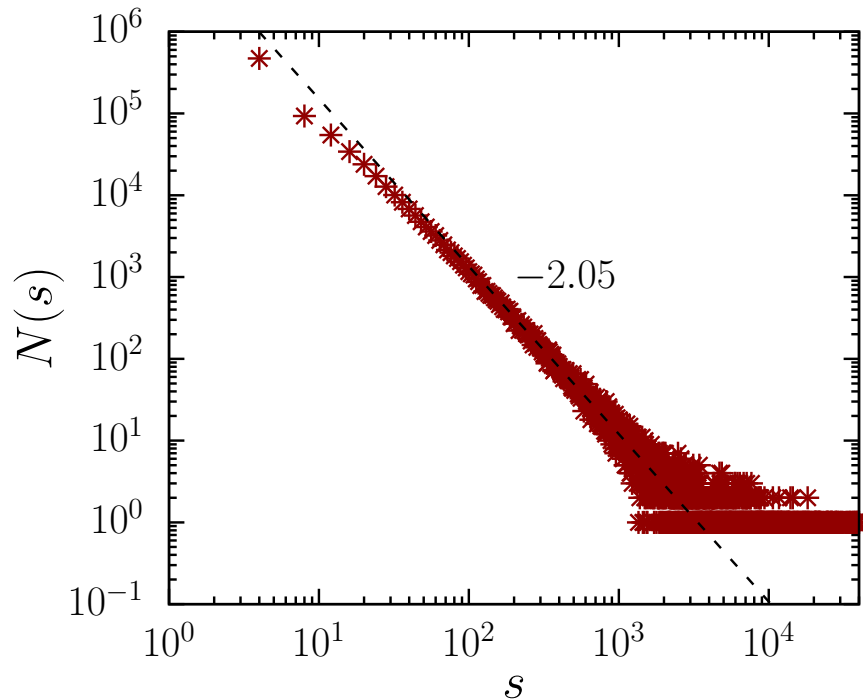
Fonte: Elaborada pelo autor. Na figura agregados diferentes foram representados com cores diferentes. Para desenhar essa figura foi utilizada uma rede 200×200 .

potência [62]

$$N(s)_{p=p_c} \sim s^{-\tau}, \quad (1.25)$$

como é mostrado a Fig. 16. Onde s é o tamanho do agregado e $\tau \approx 2.05$ é conhecido como *expoente de Fisher*.

Figura 16 – Número de agregados de uma rede no ponto crítico.



Fonte: Elaborada pelo autor. Na figura, vemos o número de agregados de uma rede no ponto crítico em função do tamanho do agregado. Para obter essa figura foi utilizada uma rede 2000×2000 . A linha tracejada é uma lei de potência com expoente -2.05 .

1.4.1 Percolação Gradiente

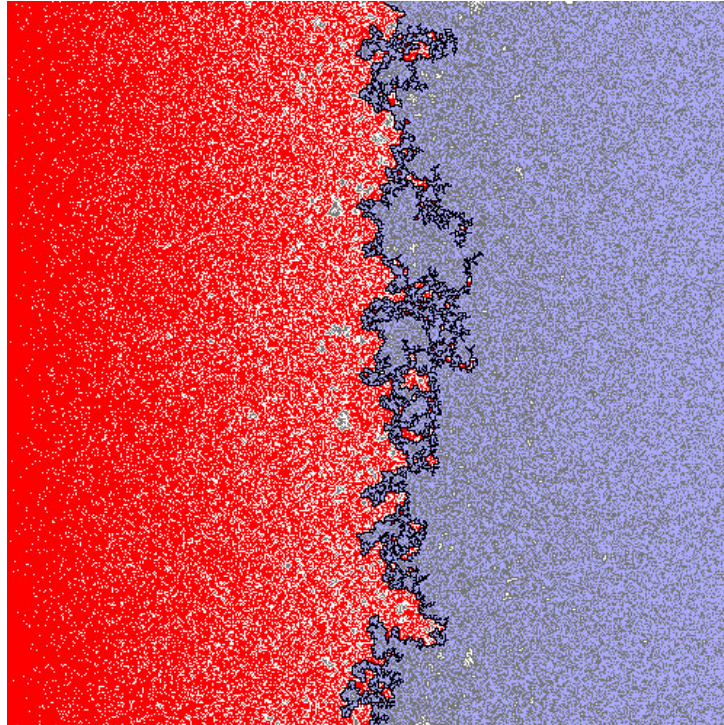
Nessa seção, abordaremos um modelo de percolação desenvolvido por Sapoval *et al.* [80] que ficou conhecido como *percolação gradiente*. Uma característica interessante desse modelo, é que ele relaciona percolação e difusão. Para isso, Sapoval *et al.* consideraram um caso simples de difusão de partículas em uma rede bidimensional, onde a fonte seria uma linha mantida a concentração constante igual a 1. No caso considerado, as partículas apenas se movem para os sítios vizinhos sem que duas delas ocupem o mesmo sítio [80]. Nessas circunstâncias a concentração varia como função do tempo e espaço como

$$p(x) = \operatorname{erfc}(x/l_D) = 1 - (2/\pi^{1/2}) \int_0^{x/l_D} du \exp(-u^2) \quad (1.26)$$

onde $l_D = 2(Dt)^{1/2}$ é o comprimento de difusão em um tempo t e D é o coeficiente de difusão. De uma forma geral, a concentração é função do tempo e do espaço, porém Sapoval *et al.* consideraram apenas situações obtidas em tempos fixos.

Na Figura 17, mostramos uma representação instantânea do modelo de percolação gradiente. A rede de percolação gradiente é construída seguindo o perfil de

Figura 17 – Representação instantânea do modelo de Percolação Gradiente.



Fonte: Elaborada pelo autor. Na figura, vemos a representação instantânea do modelo de percolação gradiente utilizando o perfil de ocupação mostrado na Eq. (1.26). O sistema mostrado consiste em um rede 500×500 onde os sítios vermelhos são sítios ocupados que pertencem ao agregado principal e os pretos são os sítios da frente de difusão. Os sítios cinza são sítios ocupados que não pertencem ao maior agregado. Os sítios brancos são vazios, e os azuis são sítios vazios que pertencem ao agregado vazio.

ocupação mostrado na Eq. (1.26). Como podemos ver o perfil de densidade é 1 para $x = 0$ e decresce na medida que x aumenta. Desse modo, é bem mais provável encontrarmos partículas ocupadas à medida que nos aproximamos da lateral esquerda da rede.

Aqui, de forma parecida ao que foi feito em percolação tradicional, podemos definir um agregado principal que corresponde ao conjunto de sítios ocupados vizinhos entre si, cujos sítios da fonte pertencem a ele. Além disso, é conveniente definirmos o agregado vazio, que corresponde ao conjunto de sítios vazios que são primeiros ou *segundos vizinhos*¹² dos sítios vazios encontrados na região mais distante da fonte, onde não há sítios ocupados (sítios mais a direita).

Nesse ponto, é conveniente definirmos também uma estrutura conhecida como *frente de difusão*. A frente de difusão é definida como o conjunto de todos os sítios do agregado principal que são vizinhos de sítios do agregado vazio. Na Figura 17 é possível ver a aparência auto similar dessa estrutura. De fato, Sapoval *et al.* observaram que a frente de difusão possui geometria fractal onde a massa da frente de difusão se relaciona com o comprimento L da rede da seguinte forma

$$M \sim L^{D_f}$$

onde a massa da frente de difusão corresponde ao número de sítios pertencentes à frente de difusão em uma rede $L \times L$. Sapoval *et al.* observaram que, para valores de comprimento de difusão l_D onde os efeitos de tamanho finito são pequenos [80],

$$D_f = 1.76 \pm 0.02,$$

que corresponde à mesma dimensão fractal do perímetro externo de percolação tradicional.

¹²Aqui, segundos vizinhos são os sítios que compartilham um vértice entre si.

2 MODELOS “PILHA DE AREIA” DE DOIS ESTADOS CONFINADOS

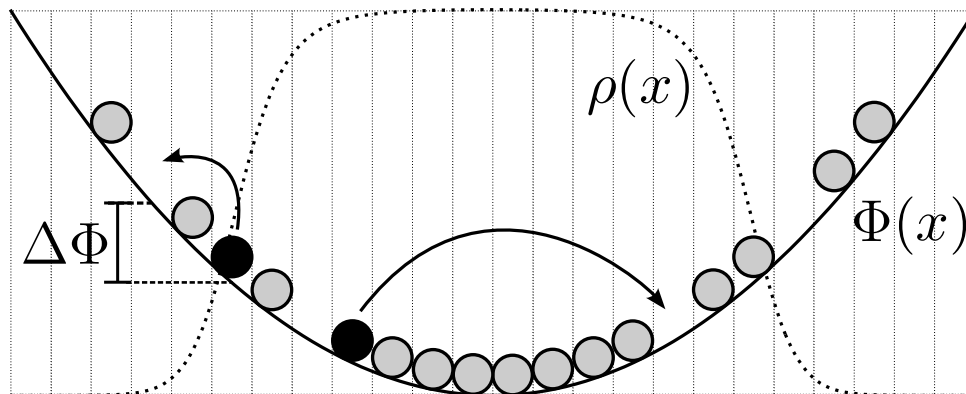
Nesse capítulo, vamos apresentar os principais resultados referentes a alguns modelos de “pilha de areia” confinados. Aqui consideramos “confinados” modelos que apresentam um potencial externo de confinamento que forçam as partículas a permanecerem em uma determinada região do espaço. Além do confinamento, uma outra característica importante dos modelos que serão apresentados aqui é que eles são fechados com relação ao número de partículas, ou seja, partículas não são inseridas nem removidas do sistema. Esse capítulo foi dividido em duas seções. Na primeira seção, introduziremos um modelo unidimensional baseado no modelo estudado por Carlson *et al.* [32] (veja Seç 1.3.4) e mostraremos os principais resultados referentes a ele. Na segunda seção, faremos uma extensão desse modelo para duas dimensões e analisaremos os principais resultados bem como as diferenças com relação ao caso unidimensional.

2.1 Modelo Unidimensional

O modelo descrito nessa seção consiste em um modelo “pilha de areia” de dois estados, onde N_p partículas são colocadas numa rede unidimensional na qual definimos a ocupação h_i (altura da pilha) para cada sítio como 0, se o sítio estiver vazio, ou 1, se o sítio estiver ocupado. Definimos também nesse modelo uma energia potencial externa Φ_i , associada a cada sítio, que irá atuar como um confinamento para essas partículas.

Dessa forma, ocupação nos permite determinar quando existe uma partícula em um determinado sítio, em um dado momento. Além disso, a dinâmica do modelo é

Figura 18 – Ilustração do modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado num potencial parabólico.



Fonte: Elaborada pelo autor. Uma partícula “salta” se $\Delta\Phi_{i,i'} < 0$ ou $\xi < e^{-\beta\Delta\Phi_{i,i'}}$, $\xi \in [0, 1]$. Como resultado, a probabilidade de ocupação média ρ tem um máximo no regime onde Φ é mínimo.

feita por meio de iterações onde uma partícula pode difundir aleatoriamente para direita ou para a esquerda, de tal forma que ela sempre difunde de um sítio ocupado i , chamado *fonte*, e ultrapassa todos os sítios ocupados na direção escolhida até atingir um sítio vazio i' , chamado *alvo*, onde ela para (veja Fig. 18).

De forma análoga ao feito na Seção 1.3.4, iremos denominar esse movimento difusivo de salto. Contudo, aqui, o salto poderá ser recusado com probabilidade $\mathcal{P} = 1 - \exp[-\beta(\Phi_{i'} - \Phi_i)]$, se a diferença de energia entre o sítio alvo e o sítio fonte for positiva. Dessa forma, um salto pode ser definido por meio do seguinte algoritmo de Metropolis, onde $\Delta\Phi_{i,i'} = \Phi_{i'} - \Phi_i$ é a diferença de energia entre o sítio alvo i' e o sítio fonte i .

```

1: se  $\Delta\Phi_{i,i'} < 0$  então
2:    $h(i) \rightarrow h(i) - 1$ 
3:    $h(i') \rightarrow h(i') + 1$ 
4: senão
5:   Escolha  $\xi$  aleatoriamente entre 0 e 1.
6:   se  $\xi < e^{-\beta\Delta\Phi_{i,i'}}$  então
7:      $h(i) \rightarrow h(i) - 1$ 
8:      $h(i') \rightarrow h(i') + 1$ 
9:   senão
10:     $h(i) \rightarrow h(i)$ 
11:     $h(i') \rightarrow h(i')$ 
12:   fim se
13: fim se

```

Nesse ponto, é importante definirmos a nossa unidade de tempo τ (nosso passo temporal) como o tempo necessário para realizarmos N_s iterações em direções aleatórias com fontes escolhidas aleatoriamente. Onde N_s é o número de sítios da rede¹. Similarmente, é apropriado definirmos nossa unidade de comprimento (nosso espaçamento de rede) como $\delta = 1/N_p$. Além disso, iremos definir a probabilidade de ocupação $\rho_{i|n}$, como a probabilidade de um sítio i estar ocupado em um dado tempo $t = n\tau$.

2.1.1 Equação de Difusão Unidimensional

O modelo descrito nessa seção corresponde a um processo de Markov, uma vez que o estado do sistema num determinado instante só depende do estado anterior. Desse modo, a probabilidade de ocupação $\rho_{i|n+1}$ em um sítio i em um dado passo de tempo $n + 1$ pode ser obtida por meio da probabilidade de ocupação em todos os sítios no passo anterior. Com isso, um limite contínuo para esse modelo microscópico pode ser obtido

¹Esse número é escolhido de forma a ser grande suficiente para as partículas não atinjam a borda do sistema.

rigorosamente se fizermos $\rho_{i|n} = \rho \equiv \rho(x, t)$ ser a probabilidade do sítio i localizado em $x \equiv i\tilde{\delta}$ estar ocupado no tempo $t \equiv n\tilde{\tau}$ e $\Phi_i = \Phi \equiv \Phi(x)$ ser o potencial no sítio i . Nesse caso, o balanço de probabilidades pode ser escrito como

$$\rho_{i|n+1} = \rho_{i|n} + \sum_{i' \neq i} \frac{1}{2} P_{i,i'-1} \rho_{i'|n} (1 - \rho_{i|n}) \Theta_{i,i'} - \sum_{i' \neq i} \frac{1}{2} P_{i,i'-1} \rho_{i|n} (1 - \rho_{i'|n}) \Theta_{i',i} \quad (2.1)$$

onde $\tilde{\delta}$ e $\tilde{\tau}$ são as unidade contínuas de espaço e tempo respectivamente, $\Theta_{i,i'} = \min(1, e^{-\beta[\Phi_i - \Phi_{i'}]})$ é o fator de Metropolis (probabilidade de um salto ser aceito) e $P_{i,i'-1}$ é a probabilidade de encontrar todos os sítios entre i e i' ocupados. A Eq. (2.1) pode ser desenvolvida analiticamente e escrita de seguinte forma²

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{d\Phi}{dx} \right]} \quad (2.2)$$

que corresponde a *equação de difusão convecção* do nosso modelo. Como podemos ver, o denominador do termo que acompanha $\frac{\partial \rho}{\partial x}$ possui uma singularidade (diverge para um $\rho = 1$), o que caracteriza uma *difusão singular*.

2.1.2 Entropia para o Modelo Unidimensional

Nesse ponto, é interessante destacar que a equação de difusão (2.2) é uma equação diferencial não linear. Dessa forma, podemos relacioná-la com uma equação de Fokker-Planck [21–25] não linear da forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D^*(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} [A(x) \Psi(\rho)], \quad (2.3)$$

onde

$$D^*(\rho) = D \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3}, \quad A(x) = -\frac{d\Phi}{dx} \quad \text{e} \quad \Psi(\rho) = D\beta\rho \frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^2}.$$

Desse modo, podemos obter a entropia do nosso modelo. Para isso, consideremos a Eq. (2.3) com $dF/dt \leq 0$, onde

$$F = U - \gamma S, \quad U = \int dx \rho(x, t) \Phi(x)$$

e a entropia escrita na forma geral como

$$S[\rho] = \int dx g[\rho(x)],$$

²Para mais detalhes, veja o Apêndice A.

com $g(0) = g(1) = 0$ e $\frac{d^2g}{d\rho^2} \leq 0$, nós obtemos [29, 81],

$$-\gamma \frac{d^2g(\rho)}{d\rho^2} = \frac{D^*(\rho)}{\Psi(\rho)} = \frac{1}{\beta\rho(1-\rho)}, \quad (2.4)$$

onde γ é um multiplicador de Lagrange positivo. Essa equação tem a solução na forma,

$$g(\rho) = \frac{-\rho \ln \rho - (1-\rho) \ln(1-\rho)}{\beta\gamma}, \quad (2.5)$$

para o qual a entropia $S[\rho] = \int dx g[\rho(x)]$ se reduz a entropia do gás de Fermi, com $\gamma = T$. O funcional $D^*(\rho)$ fisicamente corresponde a um coeficiente de difusão que depende de $\rho(x, t)$. Claramente isso diverge para $\rho = 1$ e o coeficiente de difusão tem a mesma forma para o caso sem o potencial externo. O funcional $\Psi(\rho)$ é relacionado a um arrastamento devido ao potencial externo, e também diverge para $\rho = 1$. Note que, qualquer dinâmica onde $D^*/\Psi = 1/\beta\rho(1-\rho)$, levará à entropia de Fermi. Portanto fica evidente que a difusão singular não é consequência ou efeito do fato da dinâmica maximizar essa entropia.

2.1.3 Solução Estacionária Unidimensional

Como foi dito anteriormente, a equação de difusão do nosso modelo é uma equação diferencial não linear. Nesse caso, uma solução geral para ela é bastante difícil de ser obtida. Contudo, uma solução estacionária pode ser obtida de forma relativamente simples a partir da Eq. (2.2) observando que nosso modelo obedece à equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x},$$

onde J é o fluxo total e pode ser escrito da seguinte forma

$$J = -D \left[\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{d\rho}{dx} + \beta \frac{(1+\rho)}{(1-\rho)^2} \rho \frac{d\Phi}{dx} \right].$$

Aplicando as condições estacionárias $\rho_{\text{st}}(x \rightarrow \infty) = 0$ e $J = 0$, obtemos

$$\frac{1+\rho_{\text{st}}}{(1-\rho_{\text{st}})^3} \frac{d\rho_{\text{st}}}{dx} + \beta \frac{(1+\rho_{\text{st}})}{(1-\rho_{\text{st}})^2} \rho_{\text{st}} \frac{d\Phi}{dx} = 0,$$

que pode ser escrito como

$$\frac{1}{\beta(1-\rho_{\text{st}})\rho_{\text{st}}} \frac{d\rho_{\text{st}}}{dx} = -\frac{d\Phi}{dx} = \frac{d}{dx} \left[\int_{u_0}^{\rho_{\text{st}}} \frac{1}{\beta(1-u)u} du \right]. \quad (2.6)$$

A Eq. (2.6) pode ser facilmente resolvida e resulta na solução estacionária

$$\rho_{\text{st}}(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(x) - \mu]}}, \quad (2.7)$$

onde μ é uma constante que pode ser encontrada pela condição de normalização

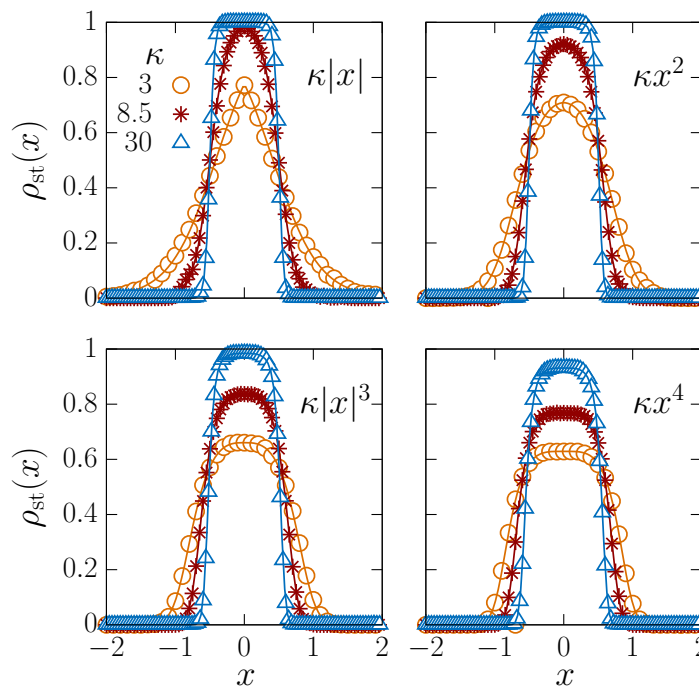
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho}{\delta} dx = N_p \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(x) - \mu]}} dx = \delta N_p, \quad (2.8)$$

onde N_p é o número de partículas. Devido ao mecanismo de exclusão intrínseco do modelo, a probabilidade de ocupação estacionária dada pela Eq. (2.7) é uma distribuição de Fermi-Dirac [82]. Além disso, essa solução estacionária já era de certo modo a esperada uma vez que essa é a solução que maximiza entropia obtida anteriormente.

2.1.4 Probabilidade de Ocupação Unidimensional

Como o mostrado na Fig. 19, a Eq. (2.7) está em excelente concordância com os perfis de probabilidade de ocupação média obtidos por meio de simulações para diferentes formas de potencial, $\Phi(x) = \kappa|x|^k$, $k = 1, 2, 3$ e 4 , e diferentes valores de confinamento κ (ou de temperatura). A Fig. 19 mostra que, na medida que a força do confinamento aumenta (ou a temperatura diminui), o máximo de probabilidade de ocupação no centro do potencial se aproxima de um, $\rho_{st} \approx 1$, e o pico no perfil de probabilidade se torna

Figura 19 – Comparação entre o estado estacionário numérico e analítico para a probabilidade de ocupação do modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os resultados numéricos são para um sistema com $N_p = 4000$ partículas, $\beta = 1$, e potenciais dados por $\Phi(x) = \kappa|x|^k$, com $k = 1, 2, 3$ e 4 . Os valores de κ utilizados foram 3.0 (círculos alaranjados), 8.5 (estrelas vermelhas) e 30 (triângulos azuis). Os resultados analíticos são dados pela Eq. (2.7) sem nenhum parâmetro de ajuste e mostrados como linhas sólidas para todos valores de κ . Em todas as simulações, utilizamos $\delta = 1/N_p$.

mais estreito. Nesse ponto, como a probabilidade não pode aumentar mais, qualquer confinamento adicional, leva a mais sítios com ocupação média máxima, e com isso o perfil de probabilidade se aproxima de uma função degrau característica de uma distribuição Fermi-Dirac.

Nos resultados mostrados na Fig. 19, os valores de μ foram obtidos por meio da solução numérica da Eq. (2.8). Isso pode ser facilmente obtido, para um potencial arbitrário, por meio de uma integração numérica e um método de busca de raízes que, por questões práticas, foram utilizados os métodos de integração de Euler e o da bisseção respectivamente. Encontrar μ analiticamente por meio da Eq. (2.8) pode ser bem complicado, dependendo da forma do potencial. Contudo, para $\Phi(x) = \kappa|x|$, μ pode ser facilmente encontrado e é dado por

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln \left(e^{\frac{\beta \kappa N_p \delta}{2}} - 1 \right) \quad (2.9)$$

Dessa forma, a probabilidade de ocupação estacionária dada pela Eq. (2.7) pode ser reescrita como

$$\rho_{\text{st}}(x) = \frac{e^{\frac{\beta \kappa N_p \delta}{2}} - 1}{\left(e^{\frac{\beta \kappa N_p \delta}{2}} - 1 \right) + e^{\kappa|x|}}. \quad (2.10)$$

Fazendo $x = 0$ na probabilidade de ocupação estacionária, obtemos o valor da probabilidade de ocupação no centro do potencial, que pode ser escrita como

$$\rho_o(\kappa) = 1 - \exp \left(-\frac{\beta \kappa N_p \delta}{2} \right), \quad (2.11)$$

onde podemos ver uma tendência exponencial para 1 quando $\kappa \rightarrow \infty$.

A existência de uma forma analítica para ρ_{st} , no caso $\Phi(x) = \kappa|x|$, torna esse potencial bastante conveniente para o estudo do nosso modelo, uma vez que isso facilita a obtenção de outras quantidades importantes.

2.1.5 Distribuição de Saltos Unidimensional

A escolha do potencial confinante não muda apenas o perfil de probabilidade de ocupação. O potencial muda também a forma como as partículas saltam para os sítios vazios mais próximos. Vejamos o que acontece se considerarmos um salto de um sítio i para um sítio i' onde o tamanho s do salto é dado por $s = |i' - i|$. Nesse caso, podemos definir a distribuição de probabilidade $S(s)$ para saltos de tamanho s como

$$S(s) \approx \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{\mathcal{N}_{S[\Delta t]}(s)}{\mathcal{N}_{S[\Delta t]T}} \right],$$

onde $\mathcal{N}_{S[\Delta t]}(s)$ é o número de saltos de tamanho s que foram aceitos no intervalo Δt , e $\mathcal{N}_{S[\Delta t]T}$ é o número total de saltos aceitos no mesmo intervalo de tempo. Nesse ponto, é conveniente definirmos o diâmetro de uma fila compacta de N_p partículas,

$$\mathcal{D} = N_p, \quad (2.12)$$

que está relacionado ao maior salto possível no nosso sistema. Assumindo que é possível obter $S(s)$ a partir da probabilidade de ocupação estacionária, podemos escrever a seguinte aproximação

$$S(s) \approx S_o \sum_i \frac{\tilde{\rho}_{i;0}}{2} \left[\lambda_{i|s}^+ + \lambda_{i|s}^- \right], \quad (2.13)$$

onde S_o é uma constante de normalização e os fatores $\lambda_{i,j|s}^\pm$ estão relacionados à probabilidade de um salto ocorrer em cada direção e são definidos como

$$\lambda_{i|s}^\pm = (1 - \tilde{\rho}_{i\pm s;s}) \Theta_{i\pm s,i} \prod_{k=i+1}^{i+s-1} \tilde{\rho}_{k;k-i}, \quad (2.14)$$

onde $\tilde{\rho}_{k;m}$ é a probabilidade estacionária³ de encontrar o k -ésimo sítio ocupado, dado que m sítios anteriores estão ocupados. Note que $\tilde{\rho}_{k;m}$ é diferente da probabilidade de ocupação estacionária $\rho_{\text{st}}(k\delta)$, devido ao fato de que ao sabermos que m sítios anteriores estão ocupados, muda a probabilidade de encontrar o próximo sítio ocupado. Devemos notar que, no limite onde $m = N_p$, se os N_p sítios anteriores tem uma partícula, então o próximo sítio tem que estar vazio e $\tilde{\rho}_{k;N_p} = 0$, independente de k . Aqui iremos considerar que $\tilde{\rho}_{k;m}$ continue seguindo uma distribuição de Fermi, porém, com um μ diferente dado por $\mu_{k;m}$ que deve ser obtido por uma condição de normalização modificada, onde

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} + \sum_{i=k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = N_p - m. \quad (2.15)$$

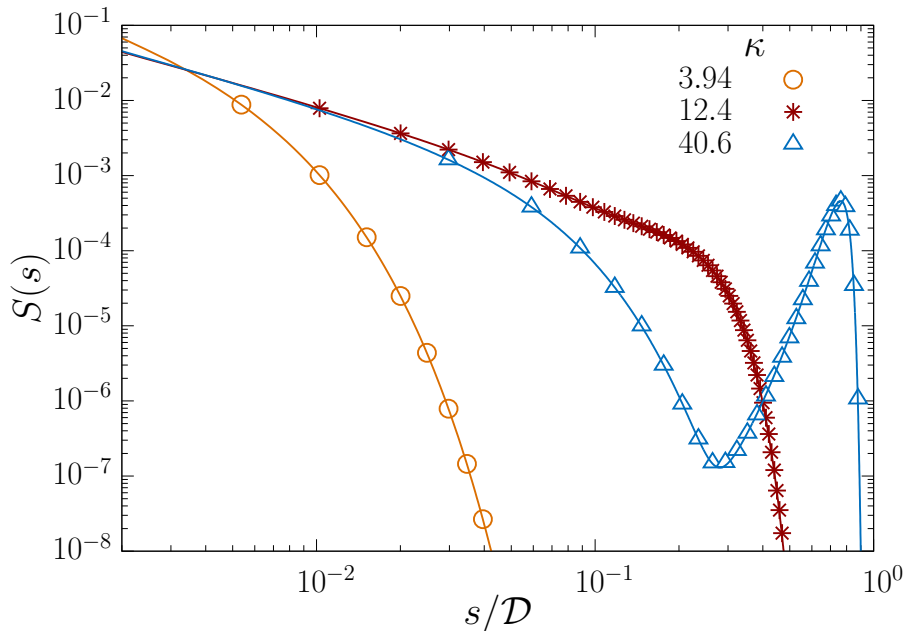
uma vez que para obter $\mu_{k;m}$, nós não precisamos somar sobre os m sítios que sabemos que estão ocupados, ou seja, a normalização tem que levar em consideração apenas as $N_p - m$ partículas restantes.

As Equações (2.13) e (2.15) podem ser usadas para calcular a distribuição de saltos para qualquer potencial, contudo, inverter a Eq. (2.15) para obter μ pode não ser simples. No caso do potencial linear $\Phi(x) = \kappa|x|$, isso pode ser feito aproximando os somatórios na Eq. (2.15) por integrais calculáveis

$$\sum_{i=\tilde{i}_o}^{i_f} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} \simeq \frac{1}{\delta} \int_{(i_o-1/2)\delta}^{(i_f+1/2)\delta} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx.$$

³Veja o Apêndice C para mais detalhes na definição e obtenção de $\tilde{\rho}_{k;m}$.

Figura 20 – Distribuição de tamanhos de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, utilizamos $N_p = 2048$ partículas com $\beta = 1$ e um potencial linear externo $\Phi(x) = \kappa|x|$ aplicado no sistema. Aqui \mathcal{D} corresponde ao diâmetro definido na Eq. (2.12). Para um κ intermediário a distribuição apresenta uma calda longa seguida de um limiar de corte da ordem do número total de partículas. Os símbolos são resultados numéricos, enquanto as linhas sólidas correspondem à forma analítica da distribuição de tamanho de saltos obtida pela Eq. (2.13).

Se o salto considerado não passa por $x = 0$, ou seja $k < 0$ ou $k - m > 0$, obtemos uma equação cúbica em $e^{\mu_{k;m}}$ da forma,

$$(1 + e^{\mu_{k;m}})^2(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)}) - e^{\kappa\delta(N_p-m)}(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-1/2)}) = 0, \quad (2.16)$$

onde k é o sítio de origem e m é o tamanho do salto. Se, por outro lado, o salto passa por $x = 0$, ou seja $k - m \leq 0$ e $k > 0$, obtemos uma equação quadrática,

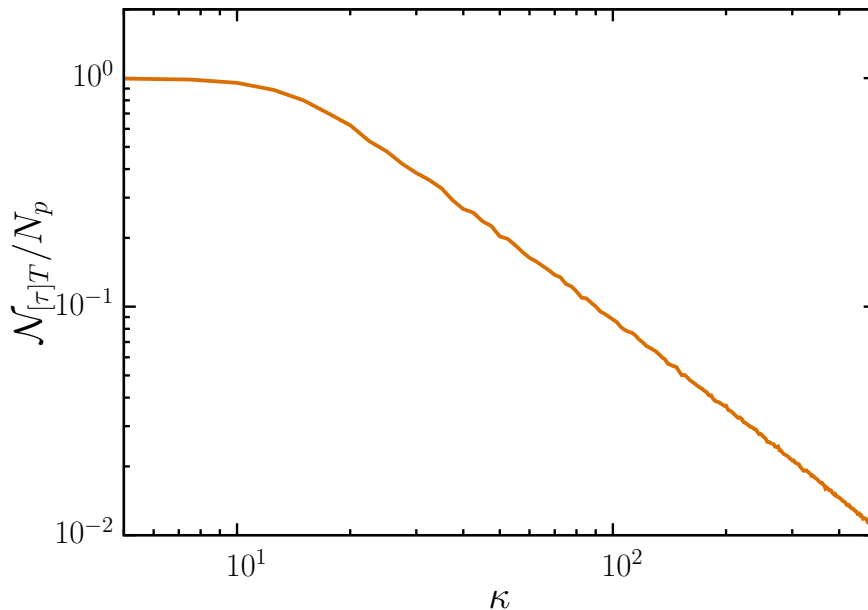
$$(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)})(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{-\kappa\delta(k-1/2)}) = e^{\kappa\delta(N_p-m)}. \quad (2.17)$$

Ambas as equações (2.16) e (2.17) possuem apenas uma raiz real positiva que corresponde a $e^{\mu_{k;m}}$, que nos permite calcular a distribuição de tamanho de saltos⁴. Na Fig. 20, nós comparamos a distribuição de tamanho de saltos obtida por esse método e com resultados obtidos por simulações numéricas. A concordância excelente encontrada confirma a precisão dessa abordagem.

A distribuição média de saltos com tamanho s é mostrada na Fig. 20 no caso onde $\Phi(x) = \kappa|x|$, para diferentes valores de κ . Como o mostrado, a distribuição cor-

⁴Veja o Apêndice C para detalhes na obtenção de $\mu_{k;m}$.

Figura 21 – Fração de saltos aceitos por unidade de tempo para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Aqui vemos que, apesar da Fig. 20 mostrar que o número de saltos grandes aumenta em comparação com os saltos menores, a fração total de saltos aceitos diminui quando κ aumenta. Esse efeito está relacionado ao aumento da probabilidade $\mathcal{P} = 1 - \exp[-\beta(\Phi_{i'} - \Phi_i)]$ de um salto entre i e i' ser recusado.

responde a um decaimento exponencial para pequenos valores de κ , em concordância com o desenvolvimento para o estado de dois níveis sem confinamento. Com o aumento de κ , grandes saltos se tornam mais prováveis, uma vez que o confinamento favorece a ocorrência de grandes agregados de partículas próximas ao centro do potencial. Para um valor intermediário⁵ de κ , a ocupação média no centro do potencial se aproxima de 1, e a distribuição de tamanho de saltos exibem uma lei de potência característica para um grande intervalo de tamanhos.

Um aumento no parâmetro de confinamento κ eventualmente leva à ocorrência de um agregado gigante, com aproximadamente todas as partículas localizadas no centro do potencial. Nessa situação, apenas dois tipos de saltos são comuns de ocorrer, ou a partícula salta um pequeno salto próximo da borda, ou viaja todo o caminho de um lado para o outro do sistema. Como resultado, um pico $s/N_p \sim 1$ aparece na distribuição de tamanhos de saltos.

Na Fig. 21 mostramos como a fração de saltos aceitos varia na medida que aumentamos o confinamento κ do sistema. Nessa figura, vemos que existe uma redução na fração de saltos aceitos quando intensificamos o potencial externo. Isso ocorre devido

⁵A determinação desse valor onde a distribuição de saltos se aproxima de uma lei de potência não é tão simples. Apesar da Figura 20 mostrar que $\kappa \approx 12.4$ (para $N_p = 2048$) apresenta uma lei de potência, variações nesse valor de κ continuam a apresentando a lei de potência para valores de κ maiores.

a dependência da probabilidade de um salto ser recusado com o valor de κ .

2.1.6 Flutuação da Energia para o Modelo Unidimensional

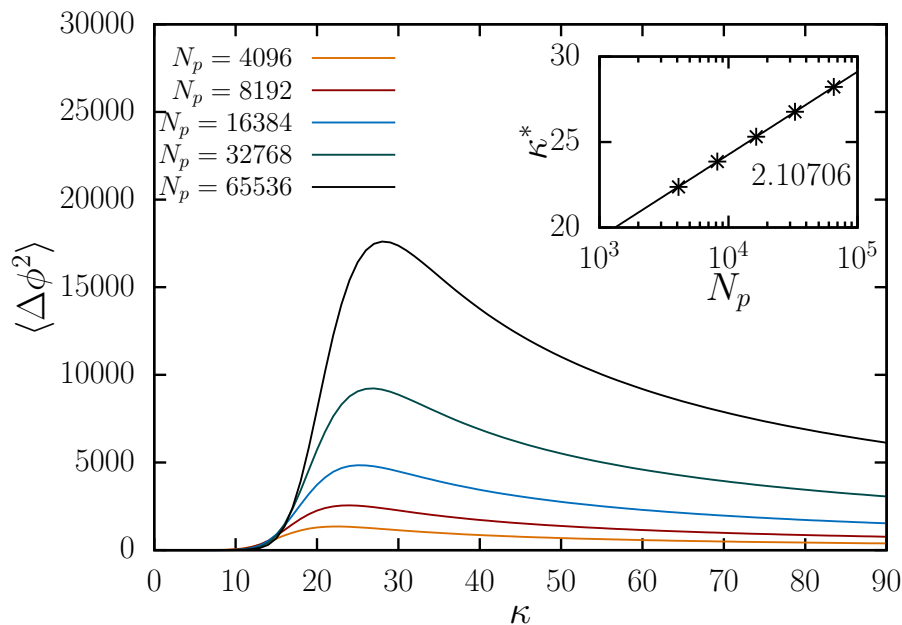
Determinar o ponto preciso onde a distribuição de tamanho de saltos se comporta como uma lei de potência é bastante importante, pois nesse ponto esperamos que a distribuição de saltos seja invariante de escala. Para nos ajudar a identificar esse ponto, é conveniente observarmos a flutuação média quadrática da energia que é definida por

$$\langle \Delta \phi^2 \rangle \equiv \sum_s \sum_i \frac{\tilde{\rho}_{i;0}}{2} \left[\lambda_{i|s}^+ (\Phi_{i+s} - \Phi_i)^2 + \lambda_{i|s}^- (\Phi_{i-s} - \Phi_i)^2 \right]. \quad (2.18)$$

onde os termos $\lambda_{i|s}^\pm$ e $\tilde{\rho}_{i;0}$ são os mesmos utilizados anteriormente para a obtenção de distribuição de saltos. De acordo com essa definição, vemos que a flutuação média quadrática da energia, $\langle \Delta \phi^2 \rangle$, nos fornece uma média do quadrado da variação da energia de uma partícula devido aos saltos que ela faz.

A Fig. 22 mostra $\langle \Delta \phi^2 \rangle$ como função de κ para diferentes número de partículas. Como podemos observar, essa função tem um máximo em um valor específico de κ para cada valor de N_p . Esse valor especial de κ é aquele que definimos como $\kappa^* = \kappa^*(N_p)$. Esse valor de κ^* possui uma dependência logarítmica com o tamanho do sistema, conforme é mostrado no interior da Fig. 22.

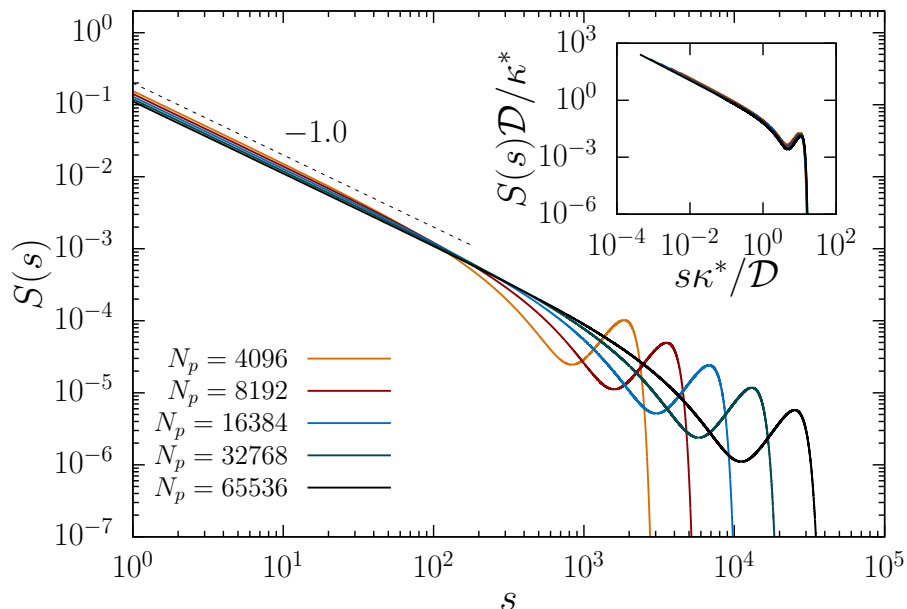
Figura 22 – Flutuação quadrática média da energia em função de κ para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nessa figura, a flutuação quadrática média da energia mostra um pico em um dado valor do parâmetro de confinamento $\kappa = \kappa^*$. No gráfico interno, mostramos que κ^* cresce com o logaritmo do número de partículas N_p .

A existência de um máximo para $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ pode ser entendida da seguinte forma. Para valores muito baixos de κ , o potencial confinante é fraco e a probabilidade de ocupação é significativamente menor que 1 em todo o sistema. Nessa situação, é improvável que linhas de vários sítios ocupados sejam encontrados, desse modo saltos com pequena diferença de energia são muito mais frequentes e as flutuações de energia são baixas. No outro limite, ou seja, para κ muito alto, as partículas estão confinadas em um núcleo denso com apenas poucos sítios vazios. Então a probabilidade que uma partícula na borda se mova para um sítio vazio dentro do núcleo, decrescendo sua energia, é muito pequena. Por outro lado, as partículas dentro do núcleo dificilmente irão saltar para a borda, aumentando suas energias, por conta do fator de Metropolis predominantemente rejeitar esses saltos. Dessa forma, os saltos mais frequentes acontecem perto da borda do núcleo com pequenas diferenças devido à simetria do potencial e, então, é também esperado que as flutuações sejam pequenas. Para valores intermediários de intensidade do potencial, κ^* , saltos de várias ordens de grandeza em energia são possíveis e as flutuações de energia alcançam seu valor máximo. Isso ocorre porque, nesse regime, o número de sítios vazios no núcleo central é suficientemente grande para que saltos com grandes dife-

Figura 23 – Distribuições de tamanho de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos são para diferentes tamanhos de sistema na condição específica $\kappa = \kappa^*(N)$. Aqui \mathcal{D} corresponde ao diâmetro definido na Eq. (2.12). Essas curvas foram obtidas computando a probabilidade para cada possível salto por meio da Eq. (2.13). A linha preta tracejada mostra uma dependência em lei de potência, $S(s) \sim s^{-1}$. Os valores de $\kappa^*(N_p)$ coincidem com a condição onde a flutuação de energia é máxima. O gráfico interno mostra que, após o reescalonamento com os respectivos valores de N_p e κ^* , todas as distribuições colapsam em uma única curva universal.

renças de energia da borda para o centro sejam tão prováveis quanto saltos com pequenas diferenças de energia na borda.

Como podemos ver, a Eq. (2.18) bem como a Eq. (2.13) são definidas de modo que podem ser obtidas analiticamente. Isso nos permite obter a flutuação média quadrática da energia e a distribuição de saltos para sistemas bem maiores que os obtidos pelo método discreto.

A distribuições de saltos correspondentes a esses valores de κ^* são mostradas na Fig. 23. Os resultados obtidos podem ser sobrepostos em uma curva única universal usando os valores de N_p e $\kappa^*(N_p)$, conforme o mostrado no interior da Fig. 23. É precisamente nessa condição que a distribuição de tamanhos de salto apresentam uma distribuição em forma de lei de potência (com expoente ≈ -1.0) com uma pequena elevação no final. A utilização da expressão analítica para a distribuição de saltos, nos permite observar que essa lei de potência (para $\kappa = \kappa^*(N_p)$) se estende em quase 3 ordens de grandeza em s .

2.2 Modelo Bidimensional Confinado

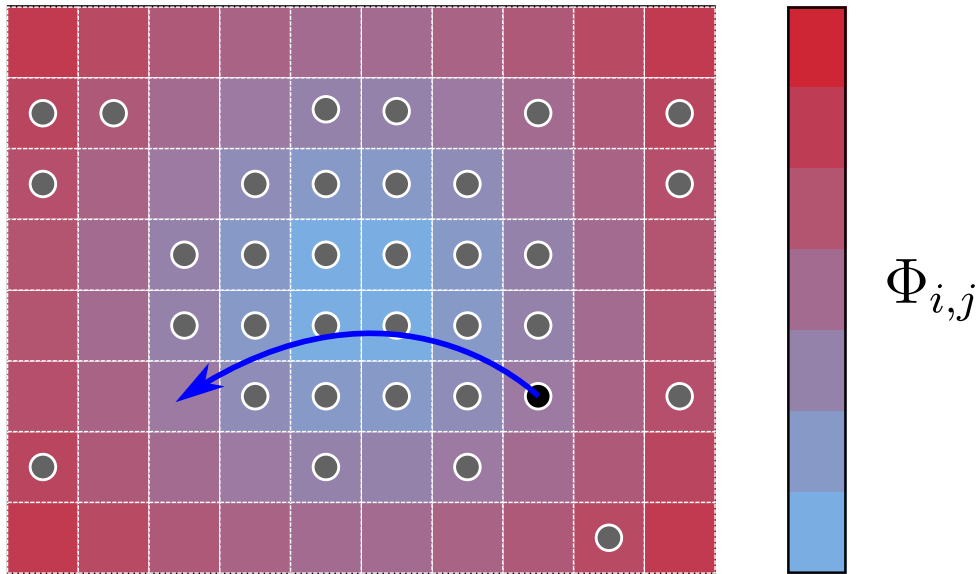
Nessa seção, introduziremos o modelo “pilha de areia” bidimensional de dois estados. Esse modelo consiste em uma extensão do modelo apresentado na seção anterior, onde as partículas são colocadas numa rede quadrada de N_s sítios (em vez de uma rede unidimensional). Aqui, definimos a ocupação $h_{i,j}$ para cada sítio como 0, se o sítio estiver vazio, ou 1, se o sítio estiver ocupado. Definimos, de forma análoga ao caso unidimensional, uma energia potencial externa $\Phi_{i,j}$, para cada sítio, que irá atuar como um “confinamento” para as partículas.

Nesse modelo, a ocupação tem significado similar ao caso unidimensional. Ela vai nos dizer quando existe uma partícula dentro de um determinado sítio, em um dado instante de tempo. Os saltos, no caso 2D, ocorrem de forma que a partícula pode difundir aleatoriamente para qualquer uma das *quatro* direções da rede⁶. Como no caso anterior, um esboço do modelo é mostrado na Fig. 24. Aqui, cada salto pode ser recusado com probabilidade $\mathcal{P} = 1 - \exp[-\beta(\Phi_{i',j'} - \Phi_{i,j})]$, se a diferença de energia entre o *sítio alvo* e o *sítio fonte* for positiva.

A unidade de tempo τ (passo temporal) continua definida como o tempo necessário para realizarmos N_s iterações em direções aleatórias com fontes escolhidas alea-

⁶Optamos aqui por essa regra de difusão devido a sua tratabilidade analítica, contudo, outras regras de difusão foram testadas, como por exemplo partículas difundindo linearmente qualquer direção ou difundindo como um *caminhante aleatório* até o sítio vazio mais próximo. Em todos os casos testados os resultados obtidos foram similares.

Figura 24 – Esboço do modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os sítios com discos dentro são ocupados, o sítio com um disco preto no interior é o *sítio fonte* do salto, e o sítio o qual possui uma seta apontando para ele é o *sítio alvo*. A seta colorida representa um salto horizontal. O gradiente de cores representa o valor de $\Phi_{i,j}$ em cada sítio.

toriamente. Já a unidade de comprimento⁷ (espaçamento de rede) é, agora, definida como $\delta = 1/\sqrt{N_p}$ onde N_p é o número total de partículas.

Analogamente, podemos definir a probabilidade de ocupação $\rho_{i,j|n}$, como a probabilidade de que um sítio na coluna i e linha j esteja ocupado num tempo $t = n\tau$. De forma similar ao que foi feito no caso unidimensional, um limite contínuo para esse modelo microscópico pode ser obtido rigorosamente se fizermos $\rho_{i,j|n} = \rho \equiv \rho(x, y, t)$ ser a probabilidade de ocupação de um sítio localizado em $(x \equiv i\delta, y \equiv j\delta)$ num tempo $t \equiv n\tilde{\tau}$ e $\Phi_{i,j} = \Phi = \Phi(x, y)$.

2.2.1 Equação de Difusão Bidimensional

Como esse modelo é também Markoviano, a probabilidade de ocupação de um sítio em uma coluna i e linha j no $(n + 1)$ -ésimo passo de tempo pode ser escrita em termos da probabilidade de ocupação de todos os sítios no passo anterior

$$\begin{aligned} \rho_{i,j|n+1} &= \rho_{i,j|n} \\ &+ \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'-1|j} \rho_{i',j|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i,i'|j} \end{aligned}$$

⁷Veja que $\delta = 1/\sqrt{N_p}$ é definido de forma diferente do caso unidimensional onde $\delta = 1/N_p$. Essa diferença está relacionada com a mudança na condição de normalização, conforme será discutido posteriormente.

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'-1|j} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i',j|n}) \Theta_{i',i|j} \\
& + \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'-1} \rho_{i,j'|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i|j,j'} \\
& - \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'-1} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i,j'|n}) \Theta_{i|j',j},
\end{aligned} \tag{2.19}$$

onde $\Theta_{i|j,j'} = \min(1, e^{-\beta[\Phi_{i,j} - \Phi_{i,j'}]})$ é o fator de Metropolis, e $P_{i|j,j'}$ é a probabilidade de encontrar todos os sítios entre j e j' na coluna i ocupados. Similarmente, $\Theta_{i,i'|j} = \min(1, e^{-\beta[\Phi_{i,j} - \Phi_{i',j}]})$, onde $P_{i,i'|j}$ é a probabilidade de encontrar todos os sítios entre a coluna i e i' na linha j ocupados. Partindo da Eq. 2.19, podemos obter a equação de difusão para o nosso modelo de forma similar a que foi feita para o caso unidimensional⁸, de tal forma que

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla \cdot \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \nabla \rho + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \nabla \Phi \right]}, \tag{2.20}$$

onde definimos

$$D = \lim_{\substack{\tilde{\delta} \rightarrow 0 \\ \tilde{\tau} \rightarrow 0}} \frac{\tilde{\delta}^2}{4\tilde{\tau}}, \tag{2.21}$$

e $\tilde{\delta}$ é a unidade de espaço utilizada para o limite contínuo que é feito consistentemente. Observe que a singularidade que acompanha os termos de difusão nas Eq. (2.2) e Eq. (2.20) é a mesma.

2.2.2 Solução Estacionária Bidimensional

Essa equação de difusão é não linear, dessa forma resolvê-la para um caso genérico não é simples. Porém uma solução estacionária pode ser obtida observando que a Eq. (2.20) obedece à equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J},$$

onde \mathbf{J} é o fluxo

$$\mathbf{J} = -D \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \nabla \rho + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \nabla \Phi \right].$$

Se considerarmos o caso, $\Phi = \Phi(r)$, e as condições para a solução estacionária $\rho_{\text{st}}(r \rightarrow \infty) = 0$ e $\mathbf{J} = \mathbf{0}$. Obtemos,

$$r \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dr} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{d\Phi}{dr} \right] = 0.$$

que corresponde a condição estacionária para um potencial radial. Essa equação pode ser

⁸Para mais detalhes veja o Apêndice D.

reescrita da seguinte forma

$$\frac{1}{\beta(1 - \rho_{\text{st}})\rho_{\text{st}}} \frac{d\rho_{\text{st}}}{dr} = -\frac{d\Phi}{dr} = \frac{d}{dr} \left[\int_{u_0}^{\rho_{\text{st}}} \frac{1}{\beta(1-u)u} du \right]$$

A equação acima pode ser facilmente resolvida e resulta na solução estacionária

$$\rho_{\text{st}}(r) = \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(r) - \mu]}}, \quad (2.22)$$

que corresponde também a uma distribuição de Fermi-Dirac, onde μ pode ser obtido pela condição de normalização⁹

$$\int \frac{\rho(r)}{\delta^2} dS = N_p,$$

que para $\Phi = \Phi(r)$ é dada por

$$\int_0^\infty \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(r) - \mu]}} r dr = \frac{N_p \delta^2}{2\pi}.$$

A integral acima nem sempre é de fácil resolução, contudo para $\Phi(r) = \kappa r^2$, obtemos

$$\int_0^\infty \frac{1}{1 + e^{\beta[\kappa r^2 - \mu]}} r dr = \frac{1}{2\beta\kappa} \ln(1 + e^{\beta\mu}) = \frac{N_p \delta^2}{2\pi}.$$

Onde é possível escrever μ , de tal forma que

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln\left(e^{\beta \frac{\kappa N_p \delta^2}{\pi}} - 1\right).$$

Assim, podemos encontrar uma forma para a Eq. (2.22) independente de μ onde

$$\rho_{\text{st}}(r) = \frac{(e^{\beta \frac{\kappa N_p \delta^2}{\pi}} - 1)}{e^{\beta \frac{\kappa N_p \delta^2}{\pi}} + (e^{\beta \kappa r^2} - 1)}. \quad (2.23)$$

Veja que, diferentemente do caso unidimensional, utilizamos aqui um potencial $\Phi(r) = \kappa r^2$ para obtermos uma solução estacionária. Isso torna o potencial parabólico¹⁰ bastante importante para o caso bidimensional, pois nos permite comparar resultados numéricos com os resultados obtidos pela Eq. (2.23) para esse potencial particular.

2.2.3 Probabilidade de Ocupação Bidimensional

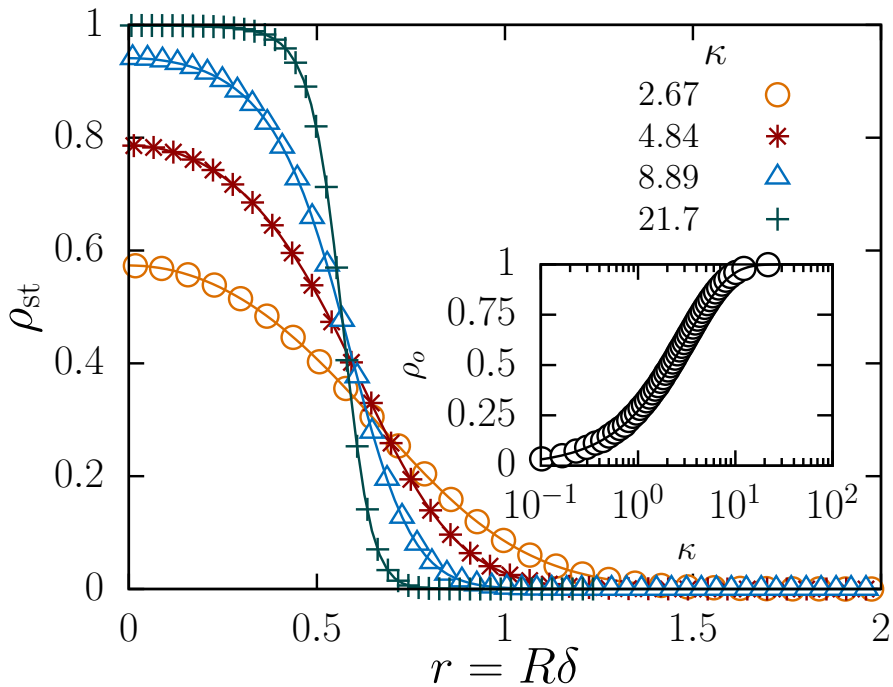
Na Fig. 25 nós podemos ver a concordância entre o resultado numérico e analítico da Eq. (2.23). Nessa figura, utilizamos $\tilde{\rho}_{i,j} \approx \langle h_{i,j|n} \rangle$ para encontrar uma aproximação¹¹ de $\rho_{\text{st}}(x = i\delta, y = j\delta) \equiv \rho_{\text{st}}(r = R\delta)$ onde fazemos um histograma na direção

⁹Veja que a integração, diferente do caso unidimensional, agora é feita no plano em vez da reta.

¹⁰Veja que, aqui, o potencial integrável é o potencial parabólico $\Phi(r) = \kappa r^2$, diferentemente do caso unidimensional onde $\Phi(x) = \kappa|x|$ é o potencial integrável.

¹¹Aqui, a média na ocupação $h_{i,j|n}$ é feita para um número n muito grande de iterações.

Figura 25 – Probabilidade de ocupação em função de r para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Probabilidade de ocupação como função de r para diferentes κ . Os pontos são valores de $\tilde{\rho}_{i,j}$ obtidos por meio de simulações computacionais e as linhas sólidas são soluções analíticas obtidas pela Eq. (2.23). O gráfico é um histograma radial da média da ocupação no tempo para uma realização única (para cada κ) com $N_p = 8000$ partículas. A figura interna mostra a probabilidade de ocupação calculada em $r = 0$ (centro do potencial). A linha sólida é o resultado analítico (sem ajuste) mostrado na Eq. (2.24).

radial. Observe que quando κ aumenta, ρ_{st} se aproxima de 1 em $r = 0$. O comportamento da Eq. (2.23) segue da característica de volume excluído do modelo, uma vez que a Eq. (2.22) é uma distribuição de Fermi-Dirac. Esse comportamento permite a formação do agregado gigante de partículas na origem do potencial quando κ aumenta.

No interior da Fig. 25 mostramos como $\rho_o \equiv \rho_{st}(r = 0)$ depende de κ . A figura mostra o comportamento numérico e analítico de ρ_o que é obtido da Eq. (2.23) fazendo $r = 0$, que resulta em

$$\rho_o = 1 - \exp\left(-\frac{\beta\kappa N_p \delta^2}{\pi}\right). \quad (2.24)$$

Para cada ponto mostrado no gráfico interno a Fig. 25 nós precisamos um diferente número n de passos de tempo para alcançar o valor teórico. Assim, ρ_o pode ser usado como um modo prático para saber se a simulação atingiu ou não o estado estacionário.

2.2.4 Distribuição de Saltos Bidimensional

De forma análoga ao que foi feito no modelo unidimensional, podemos escrever a distribuição de saltos como

$$S(s) \approx \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{\mathcal{N}_{S[\Delta t]}(s)}{\mathcal{N}_{S[\Delta t]T}} \right],$$

onde s é o tamanho de um salto, $S(s)$ é a probabilidade de um salto de tamanho s ocorrer, $\mathcal{N}_{S[\Delta t]}(s)$ é o número de saltos de tamanho s que apareceram num intervalo Δt e $\mathcal{N}_{S[\Delta t]T}$ é o número total de saltos aceitos no mesmo intervalo Δt . Dessa forma, podemos escrever uma aproximação pra essa quantidade como¹²

$$S(s) \approx S_o \sum_i \sum_j \frac{\tilde{\rho}_{i,j}}{4} \left[\lambda_{i,j|s}^+ + \lambda_{i,j|s}^- + v_{i,j|s}^+ + v_{i,j|s}^- \right], \quad (2.25)$$

onde S_o é uma constante de normalização e $\tilde{\rho}_{i,j} \approx \rho_{st}(x = i\delta, y = j\delta)$. Os fatores mostrados na Eq. (2.25) são definidos de tal forma que

$$\lambda_{i,j}^\pm(s) = (1 - \tilde{\rho}_{i\pm s,j}) \Theta_{i\pm s,i|j} \tilde{\Omega}_{i,j|s-1}^\pm$$

é a contribuição da probabilidade da partícula pular para a direção horizontal e

$$v_{i,j}^\pm(s) = (1 - \tilde{\rho}_{i,j\pm s}) \Theta_{i|j\pm s,j} \tilde{\Psi}_{i,j|s-1}^\pm$$

é a contribuição da probabilidade da partícula pular para a direção vertical, com $\tilde{\Omega}$ e $\tilde{\Psi}$ dados por

$$\tilde{\Omega}_{i,j|k}^\pm = \prod_{k'=1}^k \tilde{\rho}_{i\pm k',j} \quad \text{e} \quad \tilde{\Psi}_{i,j|k}^\pm = \prod_{k'=1}^k \tilde{\rho}_{i,j\pm k'}.$$

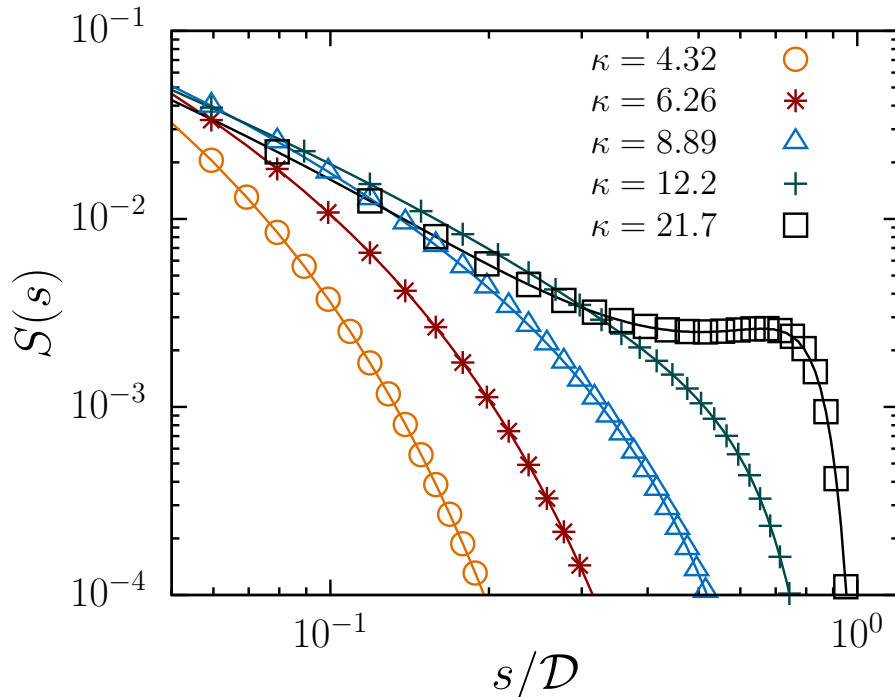
A Fig. 26 mostra os resultados da simulação numérica e o resultado analítico mostrado na Eq. (2.25). Desse modo, vemos que os resultados analíticos e numéricos estão, novamente, em perfeita concordância. Nessa figura, também comparamos o tamanho do salto com o diâmetro de um disco compacto de N_p partículas,

$$\mathcal{D} \equiv 2\sqrt{\frac{N_p}{\pi}}. \quad (2.26)$$

Essa medida nos dá um parâmetro para entendermos o que está acontecendo com os tamanhos de saltos quando κ aumenta. Vemos que quando κ aumenta, a probabilidade de que sítios próximos da origem se tornem ocupados se aproxima de 1 (veja Fig. 25).

¹²A excelente concordância entre esses dois valores, verificada nos resultados apresentados na Fig. 25, nos permite utilizar essa aproximação com confiança. Além disso, aqui não se faz necessário a utilização da probabilidade condicionada em vez da probabilidade estacionária, conforme será discutido posteriormente.

Figura 26 – Distribuição de tamanhos de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos são para diferentes valores de κ e $N_p = 8000$.

Distribuição de tamanhos de saltos para diferentes valores de κ e $N_p = 8000$. Os pontos são resultados numéricos e as linhas sólidas são obtidas através da Eq. (2.25). Aqui nós definimos $\mathcal{D} = 2\sqrt{N_p/\pi}$ como o diâmetro de um disco com N_p partículas.

Isso faz a probabilidade de um salto grande (quase o diâmetro do sistema) aumentar, o que pode ser visto na Fig. 26 para saltos grandes (grandes valores de s) quando $\kappa = 21.7$ por exemplo.

Aqui, é importante notar que consideramos nos nossos cálculos a probabilidade de ocupação simples (em vez da probabilidade condicionada que usamos no caso unidimensional), ou seja, não precisamos admitir o fato de que um sítio ocupado muda a probabilidade do próximo sítio estar ocupado no cálculo dos produtórios $\tilde{\Omega}_{i,j|k}^\pm$ e $\tilde{\Psi}_{i,j|k}^\pm$. Isso se deve ao fato de o número máximo de sítios envolvidos em um salto ser da ordem de $\mathcal{D} \sim N_p^{1/2} \ll N_p$, o que é diferente do caso unidimensional, onde o número máximo de sítios envolvidos é da ordem de N_p .

A concordância entre os resultados mostrados na Fig. 26 nos mostra a possibilidade de estudar sistemas muito grandes do ponto de vista analítico e extrair informações úteis do nosso modelo sem a necessidade de executar longas simulações. O esforço computacional necessário para esse tipo de abordagem é apenas devido às somas encontradas na Eq. (2.25).

2.2.5 Flutuação da Energia para o Modelo Bidimensional

Além disso, podemos obter uma outra informação útil sobre a dinâmica do modelo que corresponde à flutuação quadrática média da energia que é definida por

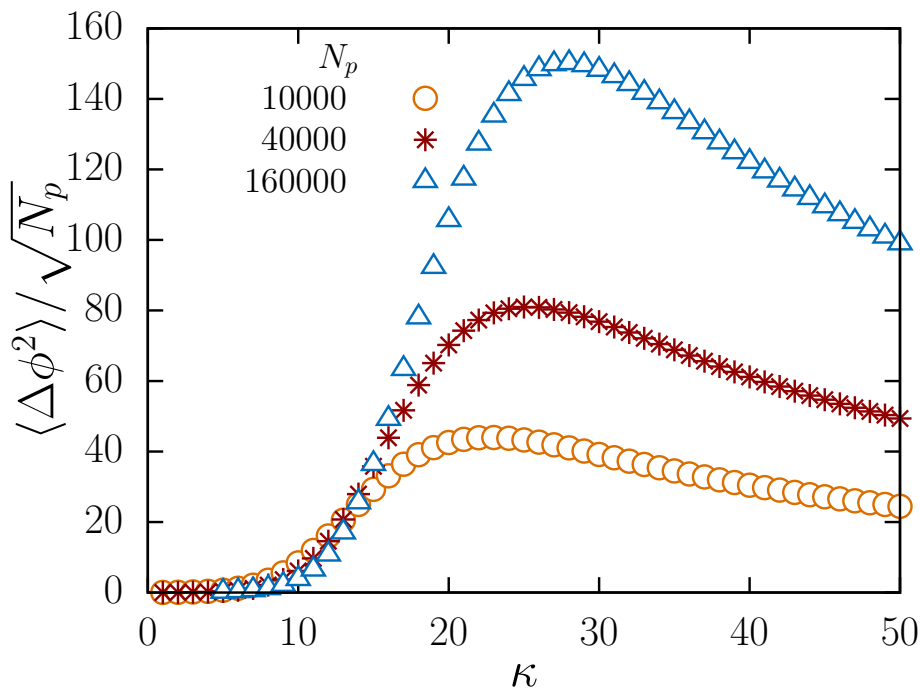
$$\begin{aligned} \langle \Delta \phi^2 \rangle \equiv & \sum_s \sum_i \sum_j \frac{\tilde{\rho}_{i,j}}{4} \left[\lambda_{i,j|s}^+ (\Phi_{i+s,j} - \Phi_{i,j})^2 + \lambda_{i,j|s}^- (\Phi_{i-s,j} - \Phi_{i,j})^2 \right. \\ & \left. + v_{i,j|s}^+ (\Phi_{i,j+s} - \Phi_{i,j})^2 + v_{i,j|s}^- (\Phi_{i,j-s} - \Phi_{i,j})^2 \right], \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde os termos $\lambda_{i,j|s}^\pm$ e $v_{i,j|s}^\pm$ são os mesmos utilizados anteriormente para a obtenção de distribuição de saltos.

A Fig. 27 mostra $\langle \Delta \phi^2 \rangle$ como função de κ para diferentes número de partículas. Como nós podemos ver, essa função tem um máximo em um valor específico de κ para cada valor de N_p , assim como no caso unidimensional. Esse valor especial de κ é aquele que definimos como $\kappa^* = \kappa^*(N_p)$.

A existência desse máximo pode ser, novamente, explicada observando o que ocorre nos casos extremos. Para pequenos valores de κ , o confinamento é fraco e a probabilidade de ocupação é muito pequena. Nesse caso, a existência de vários sítios consecutivamente ocupados é improvável e somente pequenos saltos com uma pequena

Figura 27 – Flutuação média da energia como função de κ para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



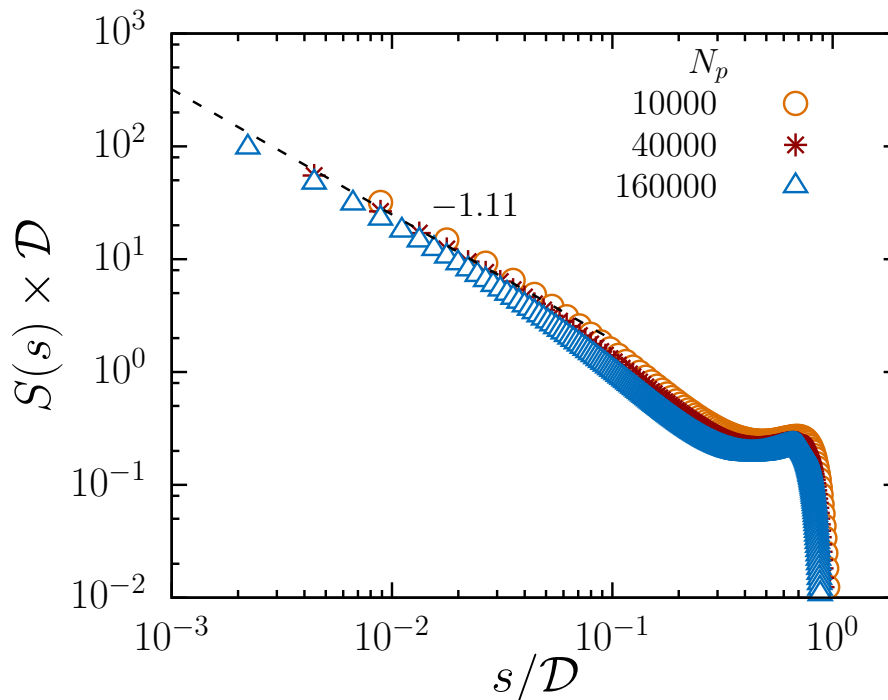
Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos são para diferentes valores de N_p . Os pontos são resultados analíticos computados pelos somatórios encontrados na Eq. (2.27). Nós definimos $\kappa^* = \kappa^*(N_p)$ como o valor de κ que corresponde para o máximo de cada curva.

diferença de energia são frequentes. Já no outro caso extremo, onde κ é muito grande, as partículas estão aglomeradas no centro do potencial e apenas poucos saltos são aceitos uma vez que as partículas já estão nos sítios mais energéticos e um salto representaria um aumento de energia (o que é improvável devido ao fator de Metropolis). Quando $\kappa \approx \kappa^*$ existe um balanço entre esses dois efeitos que permite saltos em várias ordens de grandeza.

Aqui, vemos que a expressão analítica mostrada na Eq. (2.25) nos permite calcular a distribuição de saltos bem grandes, contudo para determinarmos o valor de κ^* , é necessário calcular $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ para diferentes valores de κ , o que torna a tarefa demorada e nos restringe a valores não tão grandes de N_p . Mesmo assim, foi possível obter $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ para tamanhos razoavelmente grandes de $N_p \approx 160000$, conforme mostra a Fig. 27.

Depois de obtermos κ^* podemos analisar como se comporta a distribuição de tamanhos de saltos para esse valor de κ . Na Fig. 28, mostramos essa distribuição para diferentes valores de N_p . Esses resultados foram obtidos através da Eq. (2.25) usando $\kappa = \kappa^*$. Como podemos ver, as curvas na Fig. 28 se superpõem quando dividimos o eixo x por \mathcal{D} e multiplicamos o eixo y por \mathcal{D} , o que evidencia um regime invariante de escala

Figura 28 – Distribuição de tamanho de saltos para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos são para $\kappa = \kappa^*$ e diferentes valores de N_p . Esse resultado foi obtido através da Eq. (2.25) escolhendo S_0 de tal forma que $S(s)$ é normalizada. Os valores de \mathcal{D} foram obtidos por meio da Eq. (2.26). A linha tracejada corresponde à uma lei de potência com expoente -1.11 .

para $\kappa = \kappa^*$. Nesse ponto, a distribuição de saltos segue uma lei de potência por duas ordens de grandeza em s/\mathcal{D} com um expoente -1.0 seguido de uma pequena elevação para $s/\mathcal{D} \approx 1$.

A elevação que ocorre na Fig. 28 para $s/\mathcal{D} \approx 1$ corresponde a saltos que ocorrem de uma ponta a outra do sistema. Esses saltos só acontecem quando um grande número de sítios consecutivos se encontram ocupados, ou seja, quando um agregado grande de partículas se forma na origem do sistema.

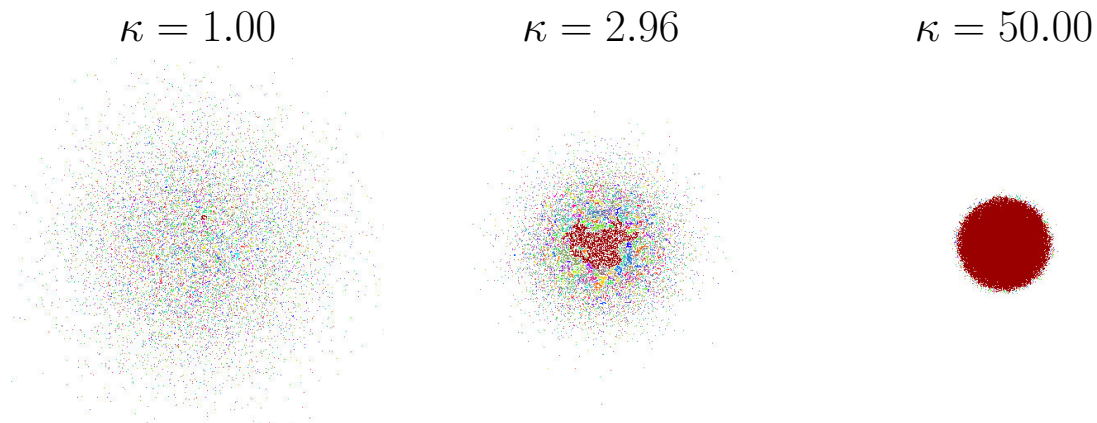
2.2.6 Agregados no Modelo Bidimensional

Como foi dito anteriormente, o crescimento desse agregado se dá quando aumentamos o valor de κ , contudo essa dependência com κ não é linear. Ao intensificarmos o potencial gradualmente, a mudança no tamanho do maior agregado parece ser pequena, até que o agregado gigante começa a crescer rapidamente a partir de um determinado valor de κ . A Fig. 29 mostra uma representação instantânea da simulação. Nela percebemos o efeito de percolação induzido pelo crescimento de κ , onde um grande agregado começa a surgir na origem. Isso pode ser observado quantitativamente analisando a média do tamanho do maior agregado, cujo valor é definido como

$$\mathcal{M} = \left\langle \frac{\max_{\tau}(m_1, m_2, \dots)}{N_p} \right\rangle, \quad (2.28)$$

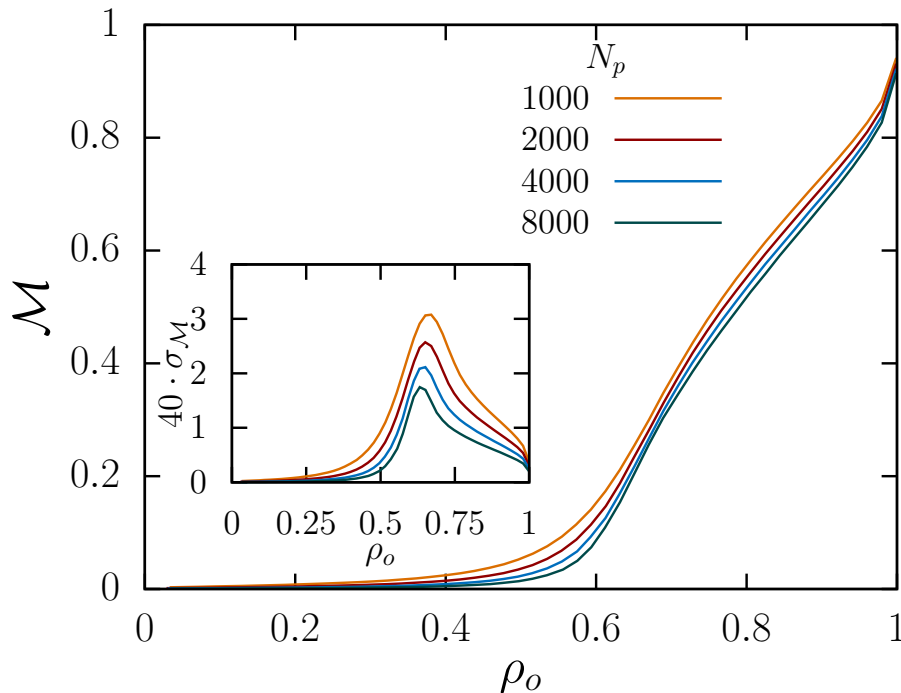
onde $\{m_1, m_2, \dots\}$ são os tamanhos dos agregados que aparecem em cada passo temporal. O máximo é tomado em todos os agregados que aparecem em um passo de tempo τ e a média é feita em todos os passos de tempo.

Figura 29 – Representação instantânea da simulação do modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Essa figura corresponde a um sistema com 10000 partículas para diferentes valores de κ . Sítios com a mesma cor pertencem ao mesmo agregado. Observe o tamanho relativo dos agregados e a formação do agregado gigante na medida que κ aumenta.

Figura 30 – Fração do maior agregado para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



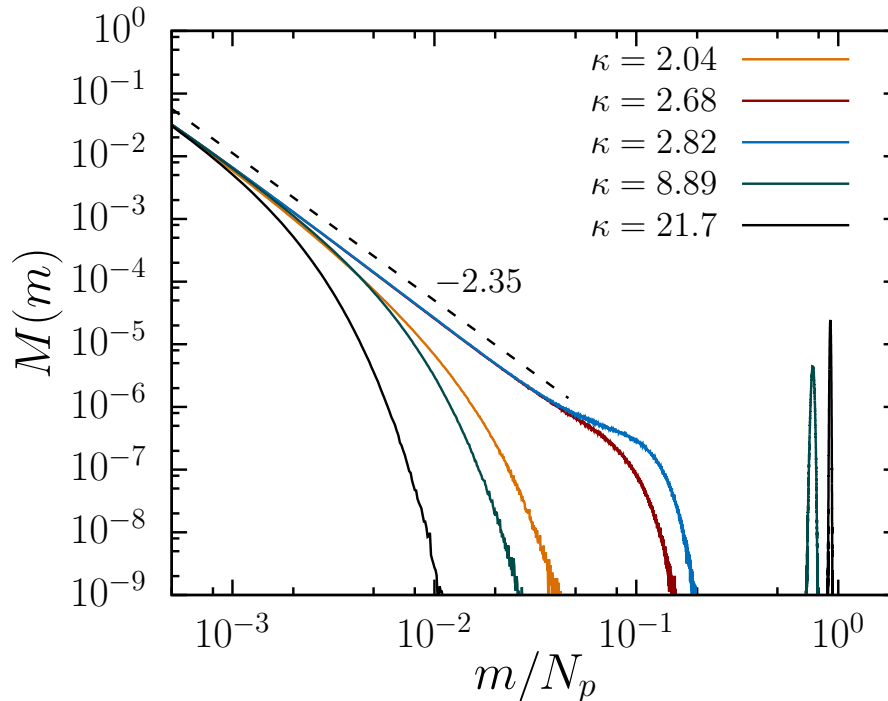
Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos são para a fração do maior agregado \mathcal{M} em função da probabilidade de ocupação no centro do potencial ρ_o para diferentes valores de N_p . A figura interna mostra o desvio padrão de \mathcal{M} em função de ρ_o .

A Fig. 30 mostra como a média do maior agregado cresce quando intensificamos o potencial. Por conveniência usamos ρ_o em vez de κ , uma vez que essas duas variáveis estão diretamente relacionadas através da Eq. (2.24). Como podemos ver, a Fig. 30 exhibe um crescimento repentino no tamanho do maior agregado para $\rho_o \approx p_c = 0.59274621(13)$, onde p_c é o ponto crítico de percolação na rede quadrada [83]. Desse modo, definimos esse valor especial de κ onde o tamanho do maior agregado instantaneamente aumenta como $\kappa' = \kappa(\rho_o = p_c) \approx 2.8213797$.

No interior da Fig. 30, vemos o desvio padrão de \mathcal{M} em função de ρ_o . Como podemos observar, existe um máximo para esse valor nas proximidades de p_c . A interpretação disso é que nesse ponto, dois agregados grandes estão se unindo para formar um agregado gigante, gerando assim flutuações no tamanho do maior agregado da ordem do tamanho do segundo maior agregado. Contudo, algo importante de ser notado é que ao contrário da percolação tradicional, as flutuações diminuem na medida que aumentamos N_p . Esse efeito, provavelmente está relacionado ao caráter inhomogêneo do sistema.

As semelhanças entre esse problema e percolação tradicional, juntamente com o fato de \mathcal{M} crescer abruptamente para $\rho_o \approx p_c$, nos faz acreditar que existe uma *transição de fase* nesse ponto. Para confirmarmos essa hipótese, é conveniente estudarmos a distri-

Figura 31 – Distribuição de tamanhos de agregados para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos foram obtidos através de simulações numéricas para $N_p = 8000$ e diferentes valores de κ . A linha tracejada é uma lei de potência com expoente -2.35 .

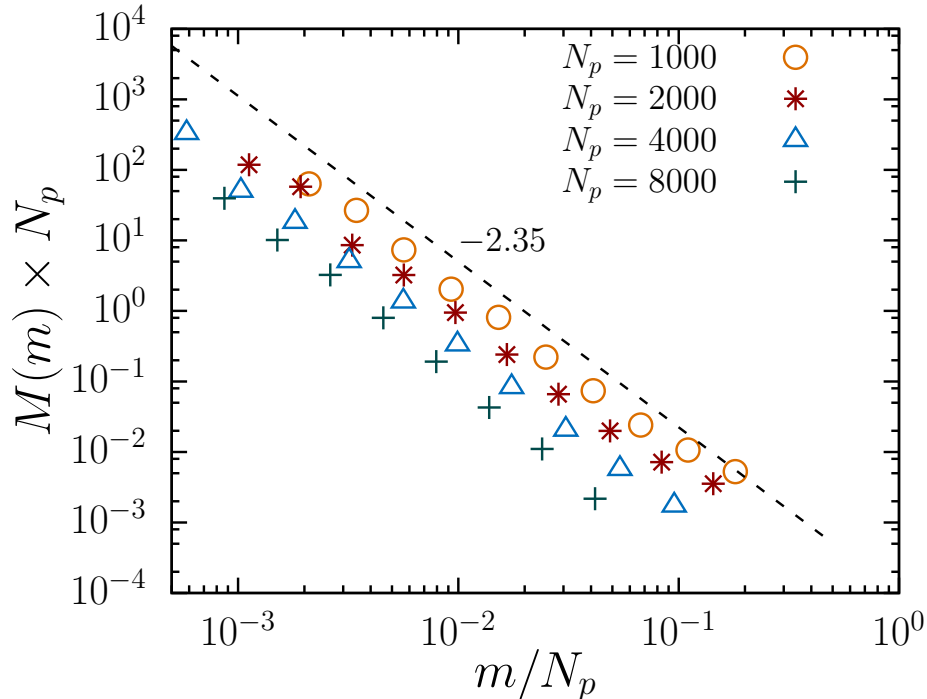
buição de agregados, que é definida da seguinte forma

$$M(m) \approx \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{N}_{C[\Delta t]}(m)}{\mathcal{N}_{C[\Delta t]T}}.$$

Onde m é o tamanho do agregado, $M(m)$ é a fração de agregados de tamanho m , $\mathcal{N}_{C[\Delta t]}(m)$ é o número de agregados de tamanho m que apareceram num intervalo Δt e $\mathcal{N}_{C[\Delta t]T}$ é o número total de agregados no mesmo intervalo Δt . A distribuição de tamanho de agregados $M(m)$ para diferentes valores de κ é mostrada na Fig. 31 Como podemos ver existe um determinado valor de κ onde $M(m)$ segue uma lei de potência com expoente -2.35 . Uma análise mais cuidadosa revela que esse valor de κ é justamente κ' .

Na Fig. 32 mostramos novamente distribuição de agregados, agora, para $\kappa = \kappa'$ e diferentes valores de N_p . Como podemos ver as distribuições de agregados seguem leis de potência em $\kappa = \kappa'$ para pelo menos duas ordens de grandeza em m/N_p . Esses resultados, qualificam a quantidade \mathcal{M} como uma boa escolha para o parâmetro de ordem do nosso sistema.

Figura 32 – Distribuição de tamanho de agregados em $\kappa = \kappa'$ para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos foram obtidos através de simulações numéricas para $\kappa = \kappa'$ em diferentes valores de N_p . A linha tracejada é uma lei de potência com expoente -2.35 .

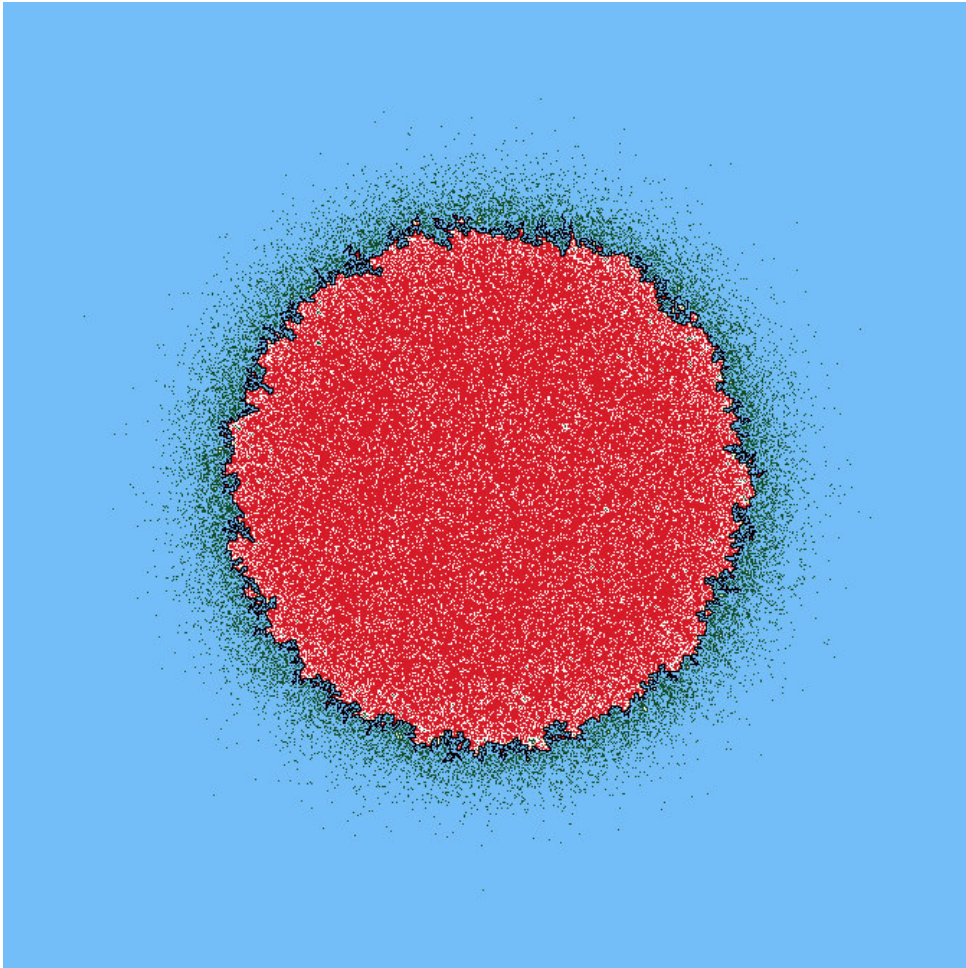
2.2.7 Fronteira de Difusão no Modelo Bidimensional

Além do agregado gigante, outra estrutura interessante que podemos estudar é a *fronteira de difusão singular* que é mostrada na Fig. 33. Aqui, utilizamos essa denominação devido às semelhanças com as *frentes de difusão* de *percolação gradiente*¹³. Diferente da *frente de difusão* estudada por Sapoval *et al.* que “avança”, a fronteira de difusão atinge um estado estacionário onde seu movimento fica restrito a pequenas flutuações. Para estudarmos melhor as características geométricas dessa estrutura, utilizamos *amostras aleatórias* [84] de sistemas bem grandes sorteadas de acordo com $\rho_{st}(x, y)$.

Conforme mostra a Fig. 33, a fronteira de difusão singular (sítios pretos na Fig. 33) é definida como os sítios do maior agregado que são primeiro ou segundo vizinhos de um sítio do agregado vazio (sítios azuis na Fig. 33). Para os resultados apresentados nessa seção, obtivemos a fronteira exatamente da definição, ou seja, detectamos os sítios do maior agregado e verificamos, um a um, quais eram primeiros ou segundos vizinhos dos sítios do agregado vazio. Como podemos observar, diretamente da definição, nossa fronteira de difusão singular também compartilha semelhanças com o *perímetro externo* do maior agregado de percolação. Vemos, na figura, que essa estrutura também apresenta

¹³Veja Seç. 1.4.1 para mais detalhes.

Figura 33 – Fronteira de difusão singular para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado



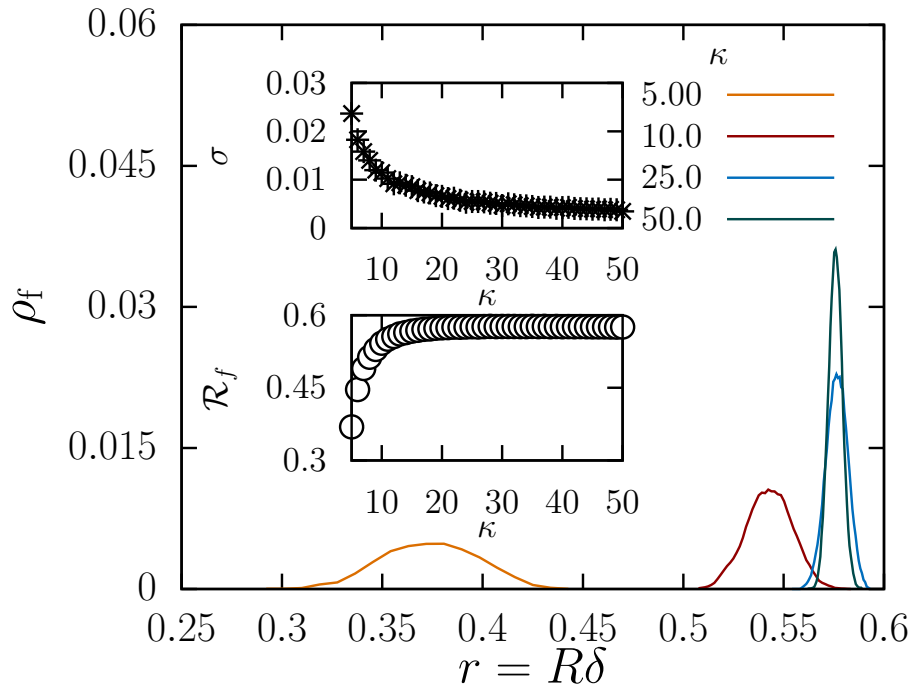
Fonte: Elaborada pelo autor. Essa figura mostra uma rede quadrada bidimensional com 100000 partículas e $\kappa = 20.0$ seguindo a probabilidade mostrada na Eq. (2.23). Os sítios vermelhos são sítios ocupados que pertencem ao maior agregado e os pretos são os sítios da fronteira de difusão. Os sítios cinza são sítios ocupados que não pertencem ao maior agregado. Os sítios brancos são vazios, e os azuis são sítios vazios que pertencem ao agregado vazio. Nessa figura, existem 5960 sítios na fronteira de difusão singular.

um formato bem irregular com uma aparência auto-similar.

A Fig. 34 mostra a probabilidade de encontrarmos um sítio da fronteira de difusão singular a uma certa distância da origem. Aqui vemos, que existe um máximo nessa probabilidade, o que sugere que existe uma região mais provável dessa fronteira se formar. Além disso, essa probabilidade aparenta ser simétrica com relação ao máximo, o que nos permite definir o *raio da fronteira* como sendo a distância média dos sítios da fronteira com relação à origem.

Na parte inferior da Fig. 34, mostramos o raio da fronteira de difusão \mathcal{R}_f e na parte superior, mostramos o desvio padrão σ da distância dos sítios da fronteira com relação à origem. Como podemos observar, o raio da fronteira aumenta com κ e se aproxima de um valor máximo assintótico, enquanto σ decresce assintoticamente para

Figura 34 – Probabilidade de encontrar um sítio da fronteira de difusão singular para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Os gráficos mostram a probabilidade de encontrar um sítio da fronteira de difusão singular a uma distância r . Na figura interna, nós mostramos o raio da fronteira de difusão. Aqui nós usamos $N_p = 10000000$.

zero. Uma diferença essencial entre nosso modelo e o modelo de difusão gradiente padrão é interdependência entre \mathcal{R}_f e σ , uma vez que ambos são função de κ . Essa característica não possibilita mantermos um deles fixo enquanto variamos o outro.

Essa condição limita os valores de \mathcal{R}_f e σ a valores próximos à condição onde efeitos de tamanho finito interferem na forma fronteira de difusão singular. Na Fig. 35 fizemos uma *análise de resolução múltipla* [85,86] para determinar a dimensão fractal d_f da fronteira de difusão singular.

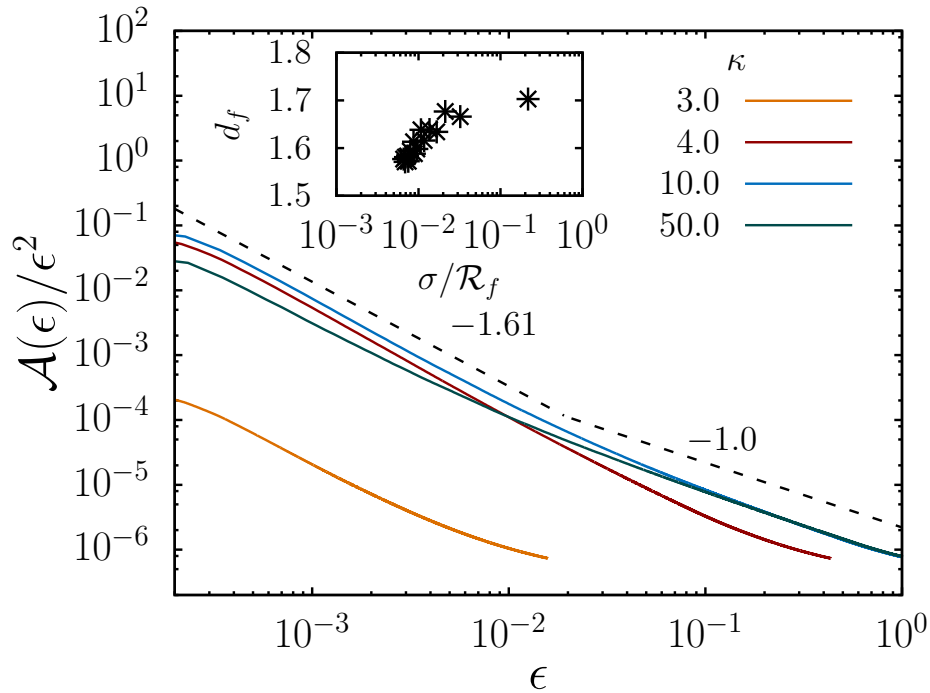
A análise de resolução múltipla consiste em considerar todos os pontos a uma distância menor que um dado ϵ de um conjunto que se quer medir a dimensão fractal. Esses pontos formam um novo conjunto o qual a área é dada pela lei de Richardson [86].

$$\mathcal{A}(\epsilon) \propto \epsilon^{2-d_f}. \quad (2.29)$$

Desse modo, a dimensão fractal de um objeto pode ser obtida verificando como \mathcal{A} muda com ϵ .

Na Fig. 35, nós mostramos o gráfico de \mathcal{A} contra ϵ que permite a determinação da dimensão fractal da fronteira de difusão singular que é obtida pela inclinação de $\mathcal{A}(\epsilon)/\epsilon^2 \propto \epsilon^{-d_f}$ no gráfico log-log. Nessa figura, como podemos ver, existe uma mu-

Figura 35 – Dimensão fractal para o modelo “pilha de areia” de dois estados bidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Determinação da dimensão fractal através da análise de resolução múltipla. A inclinação da linha tracejada é $-d_f$ de acordo com a Eq. (2.29). Essa linha representa a média da inclinação para a maioria das curvas analisadas. A figura interna mostra como d_f cresce com σ/\mathcal{R}_f .

dança de comportamento onde d_f passa de um valor médio de ≈ 1.61 para ≈ 1.0 . Essa mudança está relacionada à resolução da nossa medida ϵ que quando é muito baixa detecta a fronteira como um círculo. Dessa forma, a dimensão que estamos interessados corresponde a $d_f \approx 1.61$.

Como foi dito, esse valor é um valor médio. Na verdade d_f varia um pouco entre $d_f \approx 1.61$ e $d_f \approx 1.7$. No interior da Fig. 35, vemos como d_f varia em função da fração σ/\mathcal{R}_f , o que nos mostra que, para valores de σ/\mathcal{R}_f próximos de 1, as estimativas de d_f são acima de 1.61. Nessa figura, vemos que nesse limite, d_f se aproxima do previsto na literatura para a frente de percolação gradiente que é 1.75 [80].

3 CONCLUSÃO

Nós estudamos os efeitos de um potencial de confinamento no comportamento de um modelo “pilha de areia” de dois estados em uma e duas dimensões. Uma equação de difusão não linear foi obtida, para o caso unidimensional, a partir de uma descrição microscópica do modelo que se mostrou perfeitamente consistente com os resultados obtidos por meio de simulações numéricas. Essa equação, apesar de possuir singularidades tanto no termo de difusão como no termo de arrastamento, possui uma solução analítica estacionária para a probabilidade de ocupação das partículas que maximiza a entropia de Fermi-Dirac. Além disso, nossos resultados mostram que a introdução de um potencial confinante para o modelo “pilha de areia” de dois estados unidimensional, se propriamente ajustado, pode levar ao comportamento em lei de potência para a distribuição de saltos, o que é bastante interessante, uma vez que sistemas unidimensionais normalmente não apresentam estados críticos não triviais nem comportamentos em lei de potência. Esse comportamento pode ser explicado em termos de não homogeneidades introduzidas pelo potencial confinante e flutuações complexas devido à dinâmica da difusão singular.

Para o caso bidimensional, também conseguimos obter uma equação de difusão a partir da dinâmica microscópica do modelo. De forma análoga ao que foi feito para o caso unidimensional, obtemos também soluções estacionárias para os perfis de probabilidade de ocupação. Diferente do caso unidimensional, encontramos dois estados onde o modelo aparenta mostrar regimes invariantes de escala. O primeiro é observado quando a probabilidade de ocupação na origem aproxima do ponto crítico de percolação. Nesse regime, observamos um comportamento similar ao que ocorre em percolação, ou seja, leis de potência na distribuição de tamanho de agregados, assim como uma forma fractal para a fronteira de difusão singular comum em percolação gradiente. O segundo regime é observado em confinamentos mais intensos, onde a concentração no centro do potencial se aproxima do valor máximo e um comportamento invariante de escala é observado para a distribuição de saltos. Nós encontramos, também, expressões analíticas para as distribuições de saltos (em ambos os casos, unidimensional e bidimensional) que estavam em perfeita concordância com os resultados obtidos numericamente. Além disso, encontramos também uma forma natural de definir o regime invariante de escala associado com a difusão singular como o ponto onde as flutuações de energia são máximas.

APÊNDICE A – EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSIONAL CONFINADO

Nesse apêndice, iremos desenvolver alguns detalhes que foram omitidos na Seq. 2.1.1 (veja pg. 36) a respeito do desenvolvimento analítico da equação de difusão para o modelo de “pilha de areia” unidimensional confinado. Como foi dito anteriormente, o modelo descrito na Seq. 2.1 corresponde a um processo de Markov, cujo o balanço de probabilidades pode ser escrito da forma mostrada na Eq. (2.1),

$$\rho_{i|n+1} = \rho_{i|n} + \sum_{i' \neq i} \frac{1}{2} P_{i,i'-1} \rho_{i'|n} (1 - \rho_{i|n}) \Theta_{i,i'} - \sum_{i' \neq i} \frac{1}{2} P_{i,i'-1} \rho_{i|n} (1 - \rho_{i'|n}) \Theta_{i',i} \quad (\text{A.1})$$

Nesse ponto, é interessante definirmos a probabilidade de encontrarmos k sítios consecutivos ocupados em uma certa direção como sendo

$$\Omega_{i|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i \pm k'|n} \quad (\text{A.2})$$

onde, $\Omega_{i|k}^+$ corresponde à probabilidade de encontrarmos k sítios consecutivos ocupados à direita de i , e $\Omega_{i|k}^-$ corresponde à probabilidade de encontrarmos k sítios consecutivos ocupados à esquerda de i . Usando a mesma notação, podemos escrever

$$\Xi_i^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} \Theta_{i,i \pm k} \Omega_{i|k}^{\pm}$$

como sendo a contribuição para a probabilidade da partícula chegar no sítio alvo em i e este movimento ser aceito pelo fator de Metropolis, e

$$\Lambda_i^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i \pm k}) \Theta_{i \pm k, i} \Omega_{i|k-1}^{\pm}$$

como a contribuição para a probabilidade da partícula sair do sítio fonte em i e este movimento ser aceito pelo fator de Metropolis. Note que o termo $(1 - \rho_{i \pm k})$ aparece porque a partícula saindo de i deve chegar a um sítio em $i + k$ desocupado.

Uma análise mais cuidadosa das derivações anteriores nos permite escrever a Eq. (A.1) de tal modo que

$$\frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} = \frac{(1 - \rho_{i|n})}{2\tilde{\tau}} (\Xi_i^+ + \Xi_i^-) - \frac{\rho_{i|n}}{2\tilde{\tau}} (\Lambda_i^+ + \Lambda_i^-). \quad (\text{A.3})$$

O primeiro fator no lado esquerdo da equação anterior é a contribuição para a probabilidade de a partícula chegar de um sítio fonte qualquer da rede. O segundo fator no lado esquerdo da equação Eq. (A.3) é a contribuição da probabilidade da partícula ir para um sítio qualquer da rede.

A equação de difusão pode, então, ser obtida dividindo o problema em três casos. No primeiro caso, iremos considerar $\frac{d\Phi}{dx} > 0$ na Eq. (A.3). Desse modo¹,

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{1}{2\tilde{\tau}}(1 - \rho_{i|n}) \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + e^{-\beta(\Phi_i - \Phi_{i-k})} \Omega_{i|k}^- \right] \\ &- \frac{1}{2\tilde{\tau}} \rho_{i|n} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(1 - \rho_{i+k|n}) e^{-\beta(\Phi_{i+k} - \Phi_i)} \Omega_{i|k-1}^+ + (1 - \rho_{i-k|n}) \Omega_{i|k-1}^- \right]. \end{aligned}$$

Expandindo $\rho_{i\pm k|n} \equiv \rho(x \pm k\tilde{\delta}, t)$, em torno de $k\tilde{\delta} \rightarrow 0$ podemos escrever a Eq. (A.2) da seguinte forma²

$$\begin{aligned} \Omega_{i|k}^{\pm} &= \rho^k + \rho^{k-1} \left[\pm \frac{k(k+1)}{2} \tilde{\delta} \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right] \\ &+ \rho^{k-2} \left[\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde $\rho' = \frac{\partial \rho}{\partial x}$, $\rho'' = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$ e termos de ordem superior a $\tilde{\delta}^2$ foram desprezados. Do mesmo modo, podemos também expandir os fatores $e^{-\beta(\Phi_i - \Phi_{i-k})}$ e $e^{-\beta(\Phi_{i+k} - \Phi_i)}$ até a segunda ordem para obter,

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{1}{2\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] \\ &- \frac{\beta \Phi' \tilde{\delta}}{2\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k \left[\Omega_{i|k}^- - \rho_i \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right] \\ &+ \frac{\beta \Phi'' \tilde{\delta}^2}{4\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^- - \rho \Omega_{i|k}^- + \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right] \\ &+ \frac{\beta^2 (\Phi')^2 \tilde{\delta}^2}{4\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^- - \rho \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde calculando cuidadosamente os somatórios³, obtemos

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] = \tilde{\delta}^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + O(\tilde{\delta}^3),$$

¹A condição $\frac{d\Phi}{dx} > 0$ é utilizada para assegurar que $\Phi_{k'} > \Phi_k$ quando $k' > k$, para os saltos mais prováveis (saltos pequenos).

²Para mais detalhes na obtenção de $\Omega_{i|k}^{\pm}$ a partir da Eq. (A.2), veja o Apêndice B.

³No Apêndice B, encontram-se também os detalhes referentes ao cálculo desses somatórios.

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} k \left[\Omega_{i|k}^- - \rho \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right] &= -\tilde{\delta} \rho' \left[\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right] + O(\tilde{\delta}^2), \\
\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^- - \rho \Omega_{i|k}^- + \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right] &= 2 \left[\frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} - \frac{\rho^2(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \right] + O(\tilde{\delta}), \\
\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^- - \rho \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ - \Omega_{i|k}^+ \right) \right] &= -\tilde{\delta} \rho' \frac{7\rho^2 + 10\rho + 1}{(1 - \rho)^4} + O(\tilde{\delta}^2)
\end{aligned}$$

que, quando substituídos na Eq. (A.5), resultam em

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + D \beta \Phi' \rho' \left[\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right] \\
&+ D \beta \Phi'' \left[\frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} - \frac{\rho^2(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \right]. \tag{A.6}
\end{aligned}$$

Onde os limites $\tilde{\tau} \rightarrow 0$ e $\tilde{\delta} \rightarrow 0$ foram feitos consistentemente de tal forma que

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

Para o segundo caso, iremos considerar $\frac{d\Phi}{dx} < 0$ na Eq. (A.3). O desenvolvimento é similar ao feito anteriormente para $\frac{d\Phi}{dx} > 0$, de modo que

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{1}{2\tilde{\tau}} (1 - \rho_{i|n}) \sum_{k=1}^{\infty} \left[e^{-\beta(\Phi_i - \Phi_{i+k})} \Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- \right] \\
&- \frac{1}{2\tilde{\tau}} \rho_{i|n} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(1 - \rho_{i+k}) \Omega_{i|k-1}^+ + (1 - \rho_{i-k}) e^{-\beta(\Phi_{i-k} - \Phi_i)} \Omega_{i|k-1}^- \right]. \tag{A.7}
\end{aligned}$$

Analogamente, expandindo $e^{-\beta(\Phi_i - \Phi_{i+k})}$ e $e^{-\beta(\Phi_{i-k} - \Phi_i)}$, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{1}{2\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] \\
&+ \frac{\beta \Phi' \tilde{\delta}}{2\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho_i \Omega_{i|k}^+ - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right] \\
&+ \frac{\beta \Phi'' \tilde{\delta}^2}{4\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho \Omega_{i|k}^+ + \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right] \\
&+ \frac{\beta^2 (\Phi')^2 \tilde{\delta}^2}{4\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho \Omega_{i|k}^+ - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right], \tag{A.8}
\end{aligned}$$

onde os somatórios podem ser calculados e escritos da seguinte forma⁴

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho \Omega_{i|k}^+ - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right] &= \tilde{\delta} \rho' \left[\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right] + O(\tilde{\delta}^2), \\ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho \Omega_{i|k}^+ + \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right] &= 2 \left[\frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} - \frac{\rho^2(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \right] + O(\tilde{\delta}), \\ \sum_{k=1}^{\infty} k^2 \left[\Omega_{i|k}^+ - \rho \Omega_{i|k}^+ - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^- - \Omega_{i|k}^- \right) \right] &= \tilde{\delta} \rho' \frac{7\rho^2 + 10\rho + 1}{(1 - \rho)^4} + O(\tilde{\delta}^2), \end{aligned}$$

que, quando substituídos na Eq. (A.8), nos fornecem a seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + D\beta\Phi' \rho' \left[\frac{\rho^2 + 4\rho + 1}{(\rho - 1)^4} - \frac{2\rho(2\rho + 1)}{(\rho - 1)^4} \right] \\ &+ D\beta\Phi'' \left[\frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} - \frac{\rho^2(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

No terceiro e último caso, iremos considerar $\frac{d\Phi}{dx} = 0$ na Eq. (A.3), de modo que

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{1}{2\tilde{\tau}} (1 - \rho_{i|n}) \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- \right] \\ &- \frac{1}{2\tilde{\tau}} \rho_{i|n} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(1 - \rho_{i+k}) \Omega_{i|k-1}^+ + (1 - \rho_{i-k}) \Omega_{i|k-1}^- \right], \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

que pode ser reescrito como

$$\frac{\rho_{i|n+1} - \rho_{i|n}}{\tilde{\tau}} = \frac{1}{2\tilde{\tau}} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right], \quad (\text{A.11})$$

cujo somatório já foi calculado e corresponde ao primeiro somatório mostrado na Eq. (A.8).

Substituindo esse somatório na Eq. (A.11), obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right]. \quad (\text{A.12})$$

Aqui, vemos que a Eq. (A.12) é a mesma mostrada na Seç. 1.3.4 para o modelo de Carlson *et al.* [32] onde não há potencial. Além disso, as Eqs. (A.6), (A.9) e (A.12) para os três casos podem ser escritas de uma forma geral como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + D\beta\Phi' \rho' \left[\frac{\rho^2 + 4\rho + 1 - 4\rho^2 - 2\rho}{(\rho - 1)^4} \right] + D\beta\Phi'' \frac{\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2},$$

⁴Veja que o primeiro somatório mostrado na Eq. (A.8) corresponde ao mesmo mostrado em Eq. (A.5).

ou em uma forma mais compacta onde

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \rho}{(1 - \rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{d\Phi}{dx} \right] \quad (\text{A.13})$$

que corresponde a Eq. (2.2), mostrada na Sec. 2.1.

APÊNDICE B – SOMATÓRIOS DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSIONAL CONFINADO

Nesse apêndice, iremos desenvolver alguns detalhes que foram omitidos no Apêndice A a respeito do desenvolvimento analítico dos somatórios encontrados na equação de difusão para o modelo de “pilha de areia” unidimensional confinado.

O primeiro ponto que iremos discutir, consiste na correspondência entre as Eqs. (A.2) e (A.4). Para isso, partiremos da Eq. (A.2),

$$\Omega_{i|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i\pm k'|n}, \quad (\text{B.1})$$

onde expandimos $\rho_{i\pm k'|n}$ em torno de $k'\tilde{\delta} \rightarrow 0$ obtendo

$$\rho_{i\pm k'|n} = \rho \pm k'\tilde{\delta} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k'^2 \tilde{\delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\tilde{\delta}^3).$$

Substituindo a expansão acima na Eq. (B.1), obtemos um produto de uma soma

$$\Omega_{i|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \left[\rho + \left(\pm k'\tilde{\delta} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k'^2 \tilde{\delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) \right] + O(\tilde{\delta}^3),$$

que pode ser convertido nos somatórios abaixo,

$$\begin{aligned} \Omega_{i|k}^{\pm} &= \rho^k + \rho^{k-1} \sum_{k'=1}^k \left(\pm k'\tilde{\delta} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k'^2 \tilde{\delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) + \\ &+ \rho^{k-2} \sum_{k'=1}^k \left[\sum_{k''=k'+1}^k \left(\pm k'\tilde{\delta} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k'^2 \tilde{\delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) \left(\pm k''\tilde{\delta} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{k''^2 \tilde{\delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) \right] + O(\tilde{\delta}^3). \end{aligned}$$

Desenvolvendo os somatórios em k' e k'' , obtemos

$$\begin{aligned} \Omega_{i|k}^{\pm} &= \rho^k + \rho^{k-1} \left[\pm \frac{k(k+1)}{2} \tilde{\delta} \rho' + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right] \\ &+ \rho^{k-2} \left[\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 \right] + O(\tilde{\delta}^3), \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

onde $\rho' = \frac{\partial \rho}{\partial x}$, $\rho'' = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$. A Eq. (B.2) corresponde à Eq. (A.4), mostrada no Apêndice A.

O segundo ponto que iremos discutir nesse apêndice, consiste nas considerações

feitas para o cálculo dos somatórios mostrados nas Eqs. (A.5), (A.8) e (A.11). Consideremos o primeiro somatório apresentado na Eq. (A.5),

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\mathcal{S}_{i|k}^+ - \rho \mathcal{S}_{i|k-1}^+ \right). \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\mathcal{S}_{i|k}^{\pm} = \Omega_{i|k}^+ \pm \Omega_{i|k}^-$$

Nesse ponto, é conveniente reescrevermos $\Omega_{i|k}^{\pm}$ da seguinte forma

$$\Omega_{i|k}^{\pm} = \rho^k + \rho^{k-1} \left(\pm \mathcal{A}_k \tilde{\delta} \rho' + \mathcal{B}_k \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right) + \rho^{k-2} \mathcal{C}_k \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + O(\tilde{\delta}^3),$$

onde

$$\mathcal{A}_k = \frac{k(k+1)}{2}, \quad \mathcal{B}_k = \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \quad \text{e} \quad \mathcal{C}_k = \frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2)$$

Dessa modo, podemos escrever $\mathcal{S}_{i|k}^+$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{i|k}^+ &= \rho^k + \rho^{k-1} \left(\mathcal{A}_k \tilde{\delta} \rho' + \mathcal{B}_k \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right) + \rho^{k-2} \mathcal{C}_k \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + \\ &+ \rho^k + \rho^{k-1} \left(-\mathcal{A}_k \tilde{\delta} \rho' + \mathcal{B}_k \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right) + \rho^{k-2} \mathcal{C}_k \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + O(\tilde{\delta}^3) \\ &= 2\rho^k + \rho^{k-1} \mathcal{B}_k \tilde{\delta}^2 \rho'' + 2\rho^{k-2} \mathcal{C}_k \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + O(\tilde{\delta}^3). \end{aligned}$$

De forma análoga, podemos obter $\rho \mathcal{S}_{i|k-1}^+$ que pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \rho \mathcal{S}_{i|k-1}^+ &= \rho \left[\rho^{k-1} + \rho^{k-2} \left(\mathcal{A}_{k-1} \tilde{\delta} \rho' + \mathcal{B}_{k-1} \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right) + \rho^{k-3} \mathcal{C}_{k-1} \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + \right. \\ &+ \left. \rho^{k-1} + \rho^{k-2} \left(-\mathcal{A}_{k-1} \tilde{\delta} \rho' + \mathcal{B}_{k-1} \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \rho'' \right) + \rho^{k-3} \mathcal{C}_{k-1} \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 \right] + O(\tilde{\delta}^3) \\ &= \rho \left[2\rho^{k-1} + \rho^{k-2} \mathcal{B}_{k-1} \tilde{\delta}^2 \rho'' + 2\rho^{k-3} \mathcal{C}_{k-1} \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 \right] + O(\tilde{\delta}^3). \end{aligned}$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{i|k}^+ - \rho \mathcal{S}_{i|k-1}^+ &= 2\rho^k + \rho^{k-1} \mathcal{B}_k \tilde{\delta}^2 \rho'' + 2\rho^{k-2} \mathcal{C}_k \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 \\ &- 2\rho^k - \rho^{k-1} \mathcal{B}_{k-1} \tilde{\delta}^2 \rho'' - 2\rho^{k-2} \mathcal{C}_{k-1} \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + O(\tilde{\delta}^3) \\ &= \rho^{k-1} (\mathcal{B}_k - \mathcal{B}_{k-1}) \tilde{\delta}^2 \rho'' + 2\rho^{k-2} (\mathcal{C}_k - \mathcal{C}_{k-1}) \tilde{\delta}^2 (\rho')^2 + O(\tilde{\delta}^3) \\ &= \tilde{\delta}^2 \left[\rho^{k-1} k^2 \rho'' + \rho^{k-2} (k-1) k^2 (\rho')^2 \right] + O(\tilde{\delta}^3) \end{aligned}$$

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

Substituindo o resultado encontrado na Eq. (B.4) no somatório mostrado na Eq. (B.3), obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] &= \sum_{k=1}^{\infty} \left(\mathcal{S}_{i|k}^+ - \rho \mathcal{S}_{i|k-1}^+ \right) \\ &= \tilde{\delta}^2 \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho^{k-1} k^2 \rho') \right] \\ &= \tilde{\delta}^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^{k-1} k^2 \right) \rho' \right] + O(\tilde{\delta}^3), \end{aligned}$$

onde o somatório $\sum_{k=1}^{\infty} \rho^{k-1} k^2$ pode ser escrito da seguinte forma,

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k-1} = \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k \rho^k \right) = \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \right) \right],$$

cujo somatório $\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k$ que pode ser facilmente calculado

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k &= \rho + \sum_{k=2}^{\infty} \rho^k = \rho + \rho \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \\ \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k &= \frac{\rho}{1-\rho}. \end{aligned}$$

Dessa forma, podemos escrever,

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^2 \rho^{k-1} = \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{1-\rho} \right) \right] = \frac{1+\rho}{(1-\rho)^3}$$

e então obtemos

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left[\Omega_{i|k}^+ + \Omega_{i|k}^- - \rho \left(\Omega_{i|k-1}^+ + \Omega_{i|k-1}^- \right) \right] = \tilde{\delta}^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1+\rho}{(1-\rho)^3} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + O(\tilde{\delta}^3),$$

que corresponde ao primeiro somatório apresentado na Eq. (A.5). Os demais somatórios que aparecem nas Eqs. (A.5), (A.8) e (A.11) podem ser calculados de forma análoga ao que foi feito aqui. De modo geral, é conveniente escrevê-los em termos dos $\mathcal{S}_{i|k}^{\pm}$ que no final resultarão em somatórios que podem ser obtidos a partir do $\sum_{k=1}^{\infty} \rho^k$.

APÊNDICE C – DISTRIBUIÇÃO DE SALTOS PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” UNIDIMENSIONAL CONFINADO

Nesse apêndice, abordaremos alguns detalhes a respeito da obtenção da distribuição de saltos do modelo de “pilha de areia” unidimensional confinado apresentado na Seç. 2.1.5. A distribuição de saltos analítica para esse caso corresponde à Eq. (2.13) que foi escrita da seguinte forma

$$S(s) \propto \sum_i \frac{\tilde{\rho}_{i;0}}{2} \left[\lambda_{i|s}^+ + \lambda_{i|s}^- \right], \quad (\text{C.1})$$

onde $\tilde{\rho}_{k;m}$ foi definido como a probabilidade estacionária de encontrar o k -ésimo sítio ocupado, dado que m sítios anteriores estão ocupados. Como foi dito anteriormente $\tilde{\rho}_{k;m}$ é essencialmente diferente da probabilidade de ocupação estacionária $\rho_{\text{st}}(k\delta)$.

Podemos ver isso claramente, se definimos a seguinte aproximação alternativa para a distribuição de saltos

$$\tilde{S}(s) \propto \sum_i \frac{\rho_{\text{st}}(i\delta)}{2} \left[\tilde{\lambda}_{i|s}^+ + \tilde{\lambda}_{i|s}^- \right], \quad (\text{C.2})$$

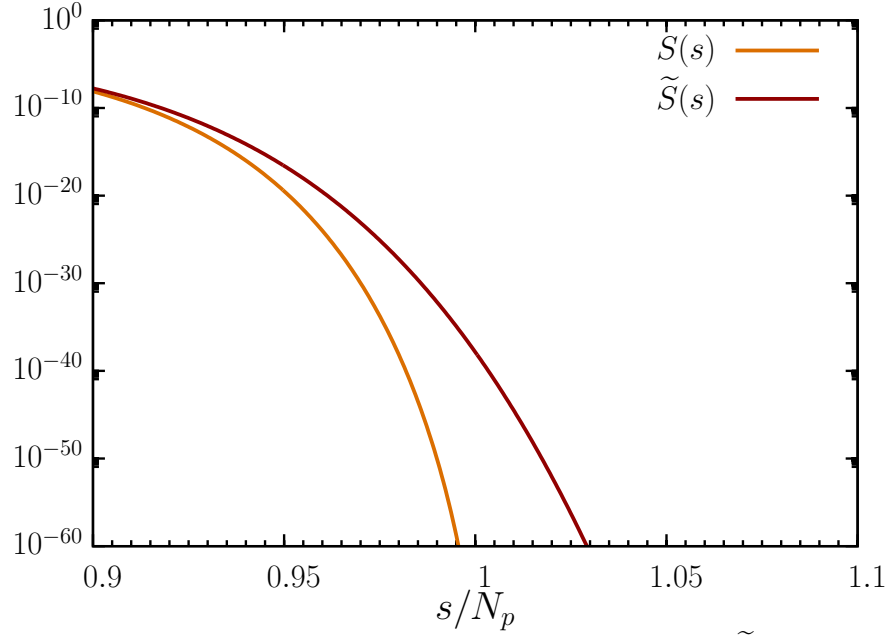
onde $\tilde{\lambda}_{i|s}^\pm$ são definidos de forma similar ao que foi feito para $\lambda_{i|s}^\pm$, substituindo $\tilde{\rho}_{k;m}$ por $\rho_{\text{st}}(k\delta)$.

$$\tilde{\lambda}_{i|s}^\pm = [1 - \rho_{\text{st}}((i \pm s)\delta)] \Theta_{i \pm s, i} \prod_{k=i+1}^{i+s-1} \rho_{\text{st}}(k\delta).$$

Para pequenos saltos, $S(s)$ e $\tilde{S}(s)$ são aproximadamente iguais. À primeira vista, a aproximação mostrada na Eq. (C.2) pareceria até mais “correta” que a distribuição de saltos original Eq. (C.1). Contudo, quando comparamos as duas distribuições (veja Fig. 36), observamos que $\tilde{S}(s)$ prevê uma probabilidade diferente de zero para $s > N_p$. Isso está necessariamente errado pois é impossível haver um salto maior que o número total de partículas. Isso ocorre porque, apesar de $\tilde{S}(s)$ se aproximar rapidamente de zero para $s > N_p$, ρ_{st} nunca é zero e conseqüentemente o produto encontrado na Eq. C.2 também nunca será zero.

Desse modo, para calcularmos a probabilidade de encontrarmos m sítios consecutivos ocupados temos que considerar que cada sítio que consideramos ocupado reduz o número de partículas que podem ocupar o próximo sítio da sequência. Isso justifica

Figura 36 – Aproximações da distribuição de saltos para o modelo de “pilha de areia” de dois estados unidimensional confinado.



Fonte: Elaborada pelo autor. Aqui vemos as duas aproximações $S(s)$ e $\tilde{S}(s)$ para a distribuição de saltos. Observe que $\tilde{S}(s)$ prevê uma probabilidade diferente de zero para $s > N_p$.

o fato de utilizarmos a probabilidade condicionada $\tilde{\rho}_{k;m}$ (probabilidade de encontrarmos o sítio k ocupado dado que m sítios anteriores estão ocupados) em vez de $\rho_{st}(k\delta)$ para escrevermos a expressão correta, mostrada na Eq. (C.1), para distribuição de saltos.

Para obtermos $\tilde{\rho}_{k;m}$, conforme foi dito anteriormente, consideramos que cada $\tilde{\rho}_{k;m}$ do produtório mostrado na Eq. (C.1) continua seguindo uma distribuição de Fermi. Porém a condição de normalização deve ser modificada de modo que não precisamos somar sobre os m sítios que sabemos que estão ocupados e a condição normalização tem que levar em consideração apenas as $N_p - m$ partículas restantes

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} + \sum_{i=k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = N_p - m. \quad (\text{C.3})$$

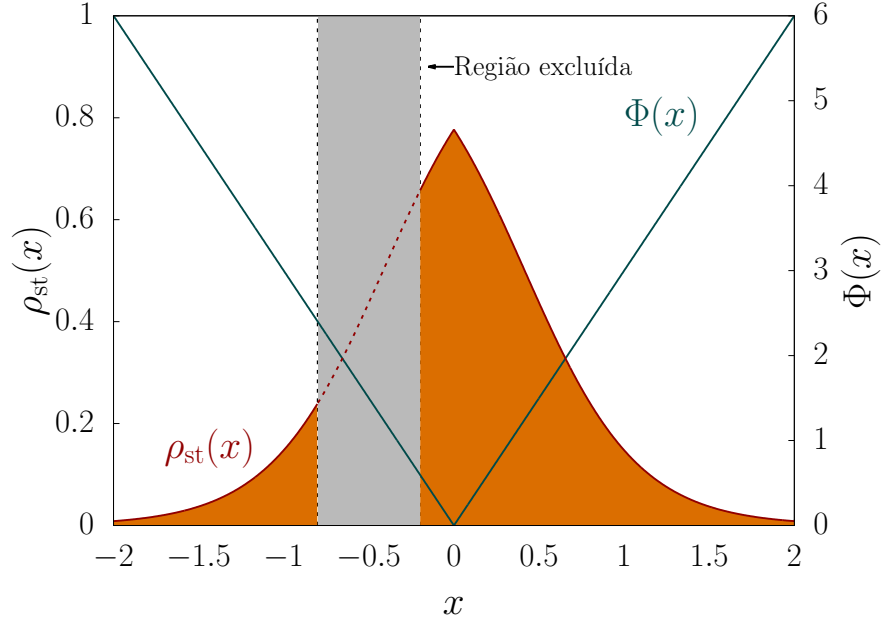
Para o potencial $\Phi(x) = \kappa|x|$, esses somatórios podem ser aproximados por integrais da forma

$$\sum_{i=i_o}^{i_f} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} \simeq \frac{1}{\delta} \int_{(i_o-1/2)\delta}^{(i_f+1/2)\delta} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx,$$

que pode ser escrita em termos das seguintes integrais exatas

$$\frac{1}{\delta} \int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta} \int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{1 + e^{\kappa x - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta \kappa} \ln \left(\frac{1 + e^{-\kappa x_i + \mu_{k;m}}}{1 + e^{-\kappa x_f + \mu_{k;m}}} \right)$$

Figura 37 – Primeiro caso para o cálculo da condição de normalização.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nesse caso, toda a região excluída (região em cinza) encontra-se à esquerda da origem. Os somatórios mostrados na Eq. C.3 correspondem aproximadamente à área mostrada em laranja na figura.

para $x_f \geq x_i \geq 0$ e

$$\frac{1}{\delta} \int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta} \int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{1 + e^{-\kappa x - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta \kappa} \ln \left(\frac{1 + e^{\kappa x_f + \mu_{k;m}}}{1 + e^{\kappa x_i + \mu_{k;m}}} \right)$$

para $x_i \leq x_f \leq 0$. No caso $x_i \leq 0 \leq x_f$,

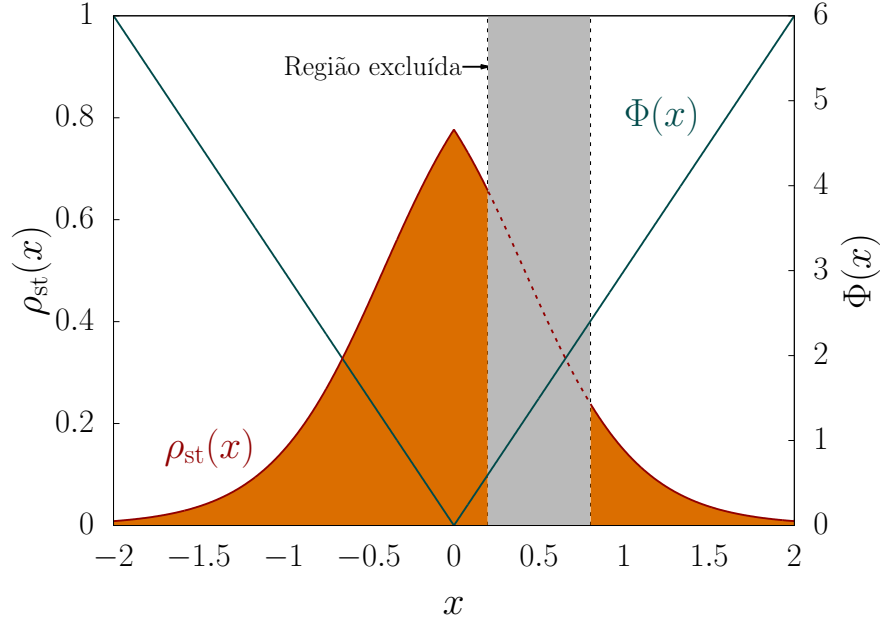
$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta} \int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx &= \frac{1}{\delta} \left(\int_{x_i}^0 \frac{1}{1 + e^{-\kappa x - \mu_{k;m}}} dx + \int_0^{x_f} \frac{1}{1 + e^{\kappa x - \mu_{k;m}}} dx \right), \\ &= \frac{1}{\delta \kappa} \ln \left[\frac{(1 + e^{\mu_{k;m}})^2}{(1 + e^{\kappa x_i + \mu_{k;m}})(1 + e^{-\kappa x_f + \mu_{k;m}})} \right]. \end{aligned}$$

Dessa forma, ao considerarmos os somatórios mostrados na Eq. (C.3), temos que dividi-los em outros somatórios que podem ser escritos em termos das integrais mostradas anteriormente. De modo geral, a divisão dos somatórios encontrados na Eq. (C.3) depende da região excluída onde sabemos que existem partículas, de forma que podemos considerar três casos.

No primeiro caso, a região excluída se encontra totalmente à esquerda da origem, conforme mostra a Fig. 37. Desse modo,

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{(k-m-1/2)\delta} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta \kappa} \ln(1 + e^{\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}})$$

Figura 38 – Segundo caso para o cálculo da condição de normalização.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nesse caso, toda a região excluída (região em cinza) encontra-se à direita da origem. Os somatórios mostrados na Eq. C.3 correspondem aproximadamente à área mostrada em laranja na figura.

e

$$\sum_{i=k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{(k-1/2)\delta}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta\kappa} \ln \left[\frac{(1 + e^{\mu_{k;m}})^2}{1 + e^{\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}} \right],$$

substituindo na Eq. (C.3) obtemos,

$$\frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}) + \frac{1}{\delta\kappa} \ln \left[\frac{(1 + e^{\mu_{k;m}})^2}{1 + e^{\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}} \right] = N_p - m.$$

Se aguparmos os logaritmos e aplicarmos exponencial dos dois lados nessa equação, chegamos a

$$(1 + e^{\mu_{k;m}})^2 (1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)}) - e^{\kappa\delta(N_p-m)} (1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-1/2)}) = 0 \quad (\text{C.4})$$

que corresponde à Eq. (2.16) mostrada na pg. 41. No segundo caso, iremos considerar que a região excluída se encontra totalmente a direita da origem, conforme mostra a Fig. 38.

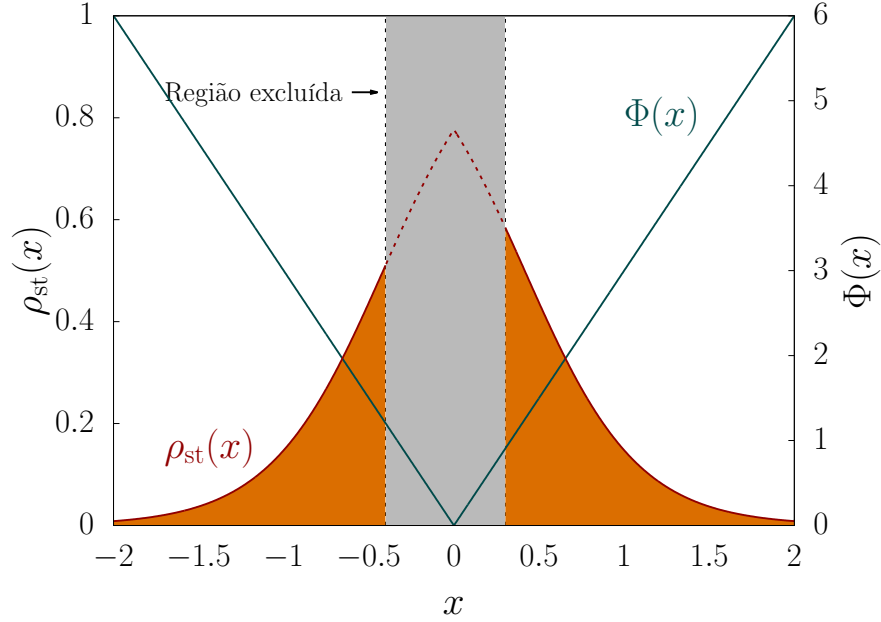
De forma similar ao caso anterior, temos

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{(k-m-1/2)\delta} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta\kappa} \ln \left[\frac{(1 + e^{\mu_{k;m}})^2}{1 + e^{-\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}} \right]$$

e

$$\sum_{i=k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{(k-1/2)\delta}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{-\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}),$$

Figura 39 – Terceiro caso para o cálculo da condição de normalização.



Fonte: Elaborada pelo autor. Nesse caso, a origem se encontra dentro da região excluída (região em cinza). Os somatórios mostrados na Eq. C.3 correspondem aproximadamente à área mostrada em laranja na figura.

substituindo na Eq. (C.3) obtemos,

$$\frac{1}{\delta\kappa} \ln \left[\frac{(1 + e^{\mu_{k;m}})^2}{1 + e^{-\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}} \right] + \frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{-\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}) = N_p - m.$$

Se agruparmos os logaritmos e aplicarmos exponencial dos dois lados nessa equação, chegamos a

$$(1 + e^{\mu_{k;m}})^2 (1 + e^{\mu_{k;m}} e^{-\kappa\delta(k-1/2)}) - e^{\kappa\delta(N_p-m)} (1 + e^{\mu_{k;m}} e^{-\kappa\delta(k-m-1/2)}) = 0. \quad (\text{C.5})$$

No terceiro caso, consideramos a origem dentro da região excluída, conforme mostra a Fig. 39. De forma similar aos casos anteriores, temos

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{-\infty}^{(k-m-1/2)\delta} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}})$$

e

$$\sum_{i=k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\Phi_i - \mu_{k;m}}} = \frac{1}{\delta} \int_{(k-1/2)\delta}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\kappa|x| - \mu_{k;m}}} dx = \frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{-\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}),$$

substituindo na Eq. (C.3) obtemos,

$$\frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{\kappa(k-m-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}) + \frac{1}{\delta\kappa} \ln(1 + e^{-\kappa(k-1/2)\delta} e^{\mu_{k;m}}) = N_p - m.$$

Se agruparmos os logaritmos e aplicarmos exponencial dos dois lados nessa equação, che-

gamos a

$$(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)})(1 + e^{\mu_{k;m}} e^{-\kappa\delta(k-1/2)}) = e^{\kappa\delta(N_p-m)} \quad (\text{C.6})$$

que corresponde à Eq. (2.17) mostrada na pg. 41. Desse modo, o cálculo da condição de normalização mostrada na Eq. (C.3) recai em uma equação cúbica em $e^{\mu_{k;m}}$ como as mostradas nas Eqs. (C.4) e (C.5) ou numa equação quadrática em $e^{\mu_{k;m}}$ como a mostrada na Eq. (C.6). Apesar dessas equações possuírem mais de uma raiz, apenas uma delas possui valor real positivo que corresponde à raiz que estamos procurando uma vez que $e^{\mu_{k;m}} > 0$ necessariamente.

As raízes dessas equações podem ser encontradas analiticamente por meio dos métodos de Cardano-Tartaglia e Báscara de tal forma que ao encontrarmos o valor de $e^{\mu_{k;m}}$, podemos substituí-lo na equação

$$\rho_{k;m} = \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi_k - \mu_{k;m}]}}$$

para obtermos o valor de $\rho_{k;m}$ e utiliza-lo para encontrar os valores de $\lambda_{i|s}^{\pm}$ que aparecem na Eq. (C.3).

APÊNDICE D - EQUAÇÃO DE DIFUSÃO PARA O MODELO DE “PILHA DE AREIA” BIDIMENSIONAL CONFINADO

Nesse apêndice, iremos desenvolver alguns detalhes que foram omitidos na Seç. 2.2.1 a respeito do desenvolvimento analítico da equação de difusão para o modelo de “pilha de areia” bidimensional confinado. Como foi dito anteriormente, o modelo descrito na Seç. 2.2, também, corresponde a um processo de Markov, cujo o balanço de probabilidades pode ser escrito da forma mostrada na Eq. (2.19),

$$\begin{aligned}
\rho_{i,j|n+1} &= \rho_{i,j|n} \\
&+ \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'-1|j} \rho_{i',j|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i,i'|j} \\
&- \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'-1|j} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i',j|n}) \Theta_{i',i|j} \\
&+ \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'-1} \rho_{i,j'|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i|j,j'} \\
&- \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'-1} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i,j'|n}) \Theta_{i|j',j}, \tag{D.1}
\end{aligned}$$

Nesse ponto, é interessante definirmos a probabilidade de encontrarmos k sítios consecutivos ocupados em uma direção como sendo

$$\Omega_{i,j|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i \pm k',j} \quad \text{e} \quad \Psi_{i,j|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i,j \pm k'},$$

onde $\Omega_{i,j|k}^{\pm}$ é usado para a direção horizontal e $\Psi_{i,j|k}^{\pm}$ é usado para a direção vertical. Dessa forma, podemos escrever

$$\Xi_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} \Theta_{i,i \pm k|j} \Omega_{i,j|k}^{\pm}$$

como a contribuição para a probabilidade da partícula chegar na fonte pela direção horizontal e

$$\Gamma_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} \Theta_{i|j,j \pm k} \Psi_{i,j|k}^{\pm}$$

como a contribuição para a probabilidade da partícula chegar na fonte pela direção vertical. Similarmente, podemos escrever

$$\Lambda_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i\pm k,j}) \Theta_{i\pm k,i|j} \Omega_{i,j|k-1}^{\pm}$$

como a contribuição para a probabilidade da partícula sair do sítio fonte na direção horizontal e

$$\Upsilon_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i,j\pm k}) \Theta_{i|j\pm k,j} \Psi_{i,j|k-1}^{\pm}$$

como a contribuição para a partícula sair do sítio fonte na direção vertical.

Uma análise mais cuidadosa das derivações anteriores nos permite escrever a Eq. (D.1) de tal modo que

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,j|n+1} - \rho_{i,j|n}}{\tilde{\tau}} &= \frac{(1 - \rho_{i,j})}{4\tilde{\tau}} (\Xi_{i,j}^+ + \Xi_{i,j}^- + \Gamma_{i,j}^+ + \Gamma_{i,j}^-) \\ &- \frac{\rho_{i,j}}{4\tilde{\tau}} (\Lambda_{i,j}^+ + \Lambda_{i,j}^- + \Upsilon_{i,j}^+ + \Upsilon_{i,j}^-). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

A equação de difusão para esse problema pode ser encontrada através da Eq. (D.2), similarmente ao que foi feito para o caso unidimensional resultando em

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla \cdot \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \nabla \rho + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \nabla \Phi \right], \quad (\text{D.3})$$

que corresponde a Eq. (2.20) encontrada na Seç 2.2.1.

APÊNDICE E – ARTIGOS PUBLICADOS



January 2015

EPL, **109** (2015) 14007
doi: 10.1209/0295-5075/109/14007

www.epljournal.org

Singular diffusion in a confined sandpile

R. S. PIRES, A. A. MOREIRA, H. A. CARMONA and J. S. ANDRADE jr.

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará - 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil

received 17 November 2014; accepted in final form 18 December 2014
published online 22 January 2015

PACS 45.70.Cc – Granular systems: Static sandpiles; granular compaction
PACS 68.43.Jk – Diffusion of adsorbates, kinetics of coarsening and aggregation
PACS 05.10.Ln – Computational methods in statistical physics and nonlinear dynamics: Monte Carlo methods

Abstract – We investigate the behavior of a two-state sandpile model subjected to a confining potential in one and two dimensions. From the microdynamical description of this simple model with its intrinsic exclusion mechanism, it is possible to derive a continuum nonlinear diffusion equation that displays singularities in both the diffusion and drift terms. The stationary-state solutions of this equation, which maximizes the Fermi-Dirac entropy, are in perfect agreement with the spatial profiles of time-averaged occupancy obtained from spatial numerical simulations in one as well as in two dimensions. Surprisingly, our results also show that, regardless of dimensionality, the presence of a confining potential can lead to the emergence of a power-law tail in the distribution of avalanche sizes.



Copyright © EPLA, 2015

Introduction. – Physical processes involving anomalous diffusion are typically associated with systems in which the mean square displacement of their elementary units follows a nonlinear power-law relationship with time, $\sigma^2 \propto t^\alpha$, with an exponent $\alpha \neq 1$, in contrast with linear standard diffusion ($\alpha = 1$). Instead of being a rare phenomenon, as suggested by its own denomination, anomalous diffusion, however, appears rather ubiquitously in Nature, playing an important role in a variety of scientific and technological applications, such as fluid flow through disordered porous media [1], surface growth [2], diffusion in fractal-like substrates [3–7], turbulent diffusion in the atmosphere [8,9], spatial spreading of cells [10] and biological populations [11], cellular transport [12], and cytoplasmic crowding in cells [13]. Anomalous diffusion can also manifest its non-Gaussian behavior in terms of nonlinear Fokker-Plank equations [14–18], which is the case, for example, of the dynamics of interacting vortices in disordered superconductors [19–22], diffusion in dusty plasma [23,24], and pedestrian motion [24].

The extreme case of nonlinear behavior in diffusive systems certainly corresponds to *singular diffusion*. For instance, in some physical conditions, the diffusion of adsorbates on a surface can be strongly nonlinear [25–27], with a surface diffusion coefficient that depends on the local coverage θ as, $D \propto |\theta - \theta_c|^{-\alpha}$. The study of surface-diffusion mechanisms is crucial for the understanding of technologically important processes related with physical

adsorption [28] and catalytic surface reactions [29–31]. In particular, a singularity in the coverage dependence of the diffusion coefficient is frequently associated to continuous phase transitions [27].

A direct connection between singular diffusion and self-organized criticality [32] has been disclosed by Carlson *et al.* [33,34] in terms of a two-state one-dimensional sandpile model with a driving mechanism, where grains are added at one end of the pile and fall off at the other end. Besides exhibiting a self-organized state, the continuum limit of this simple model leads to a nonlinear diffusion equation, where the diffusion coefficient not only depends on the local density, but also displays a singularity at a “critical” density value [33–37]. Indeed, some aspects of this model remain to be elucidated, specially due to the fact that the most prominent sign of criticality, namely long-range power-law spatial correlations, is not present in the original setup of the simulated dynamical system. Here we show that the addition of a confining potential to the two-state sandpile model leads to power-law tails in the distribution of avalanche sizes [38] in both one- and two-dimensional versions of the theoretical model. Moreover, our results reveal that the continuum description of the model contains singular nonlinearities in both the diffusion and drift terms of the resulting partial differential equation for the transport process.

Model formulation. – The microscopic model investigated in this study consists of an one-dimensional lattice

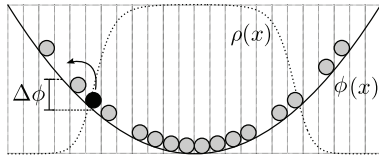


Fig. 1: Illustration of the model. A grain moves if $\Delta\phi_{i,j} < 0$ or $\xi < e^{-\beta\Delta\phi_{i,j}}$, $\xi \in [0, 1]$. As a result, the average density ρ has a maximum in the region where ϕ is minimum.

on which N particles are placed in such a way that the height $h(i)$ of each site is either 1 or 0 (see fig. 1). At each step, one grain is chosen randomly to move to the left or to the right with equal probability. If the nearest neighbor in the chosen direction is occupied, the grain jumps instantly to the next-nearest neighbor in the same direction. If this site is also occupied, the particle keeps jumping until it finally reaches an empty site j [33]. This type of exchange driving mechanism for closed systems has been previously introduced in the context of fluctuations and local equilibrium in self-organizing systems [34,39]. Here, an external confining potential is applied to the system by introducing a non-uniform transition probability from site i to j . Precisely, each site at a position $x_i = i\delta$, with δ being the lattice spacing, and $\phi(x_i)$ the potential energy. For a given transition, we compute $\Delta\phi_{i,j} = \phi(x_j) - \phi(x_i)$ and use the following Metropolis rules:

$$\left. \begin{array}{l} h(i) \rightarrow h(i) - 1 \\ h(j) \rightarrow h(j) + 1 \end{array} \right\} \text{ if } \Delta\phi_{i,j} < 0 \text{ or } \xi < w = e^{-\beta\Delta\phi_{i,j}},$$

$$\left. \begin{array}{l} h(i) \rightarrow h(i) \\ h(j) \rightarrow h(j) \end{array} \right\} \text{ if } \Delta\phi_{i,j} > 0 \text{ and } \xi > w,$$

where ξ is a uniform random number in the interval $[0, 1]$, $\beta \equiv 1/k_B T$, T is the temperature of the thermal reservoir in contact with the system, k_B is the Boltzmann constant, and we count one unit of time for every N grains moved. The effect of decreasing the temperature is equivalent to increasing the strength of the external potential.

A continuum limit for this microscopic model can be obtained rigorously. If we let $\rho_i = \rho(x_i, t)$ be the probability that site i located at x_i is occupied at time t and $\phi_i = \phi(x_i)$, a master equation can then be written as

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

where τ is the average time between transitions. The first term on the right side is the transition rate corresponding to site i being occupied at time t and losing the grain, while the second term accounts for the transition rate for an empty site i to gain a grain. To obtain a continuum equation, we take the limit of (1) where δ and τ go to zero, while $D = \delta^2/(2\tau)$ is kept constant. In this way, and keeping terms of order up to δ^2 , we arrive at the following non-linear diffusion equation:

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

Details of this derivation can be found in next section. Equation (2) can be related to a nonlinear Fokker-Planck equation (FPE) of the form,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Omega(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} [A(x) \Psi(\rho)], \quad (3)$$

with $\Omega(\rho) = D(1 + \rho)/(1 - \rho)^3$, $A(x) = -d\phi(x)/dx$, and $\Psi(\rho) = D\beta\rho(1 + \rho)/(1 - \rho)^2$. Considering the FPE (3), with $dF/dt \leq 0$, where $F = U - \gamma S$, $U = \int dx \rho(x, t) \phi(x)$, and the entropy taken in a general form as $S[\rho] = \int dx g[\rho(x)]$, with $g(0) = g(1) = 0$ and $d^2g/d\rho^2 \leq 0$, we obtain [22,40]

$$-\gamma \frac{d^2g(\rho)}{d\rho^2} = \frac{\Omega(\rho)}{\Psi(\rho)} = \frac{1}{\beta\rho(1 - \rho)}, \quad (4)$$

where γ is a positive Lagrange multiplier. This equation has a solution in the form

$$g(\rho) = \frac{-\rho \ln \rho - (1 - \rho) \ln(1 - \rho)}{\beta\gamma}, \quad (5)$$

for which the entropy $S[\rho] = \int dx g[\rho(x)]$ reduces to the entropy of a Fermi gas, with $\gamma = T$. The functional $\Omega(\rho)$ physically corresponds to a diffusion coefficient which depends on $\rho(x, t)$. Clearly it diverges for $\rho = 1$ and the diffusion coefficient has the same form as for the case without the external potential [33]. The functional $\Psi(\rho)$ is related to a drift due to the external potential, and also diverges for $\rho = 1$.

The stationary state solution for eq. (2) can be readily obtained by imposing that $\partial\rho/\partial t = 0$, and both $\rho(x)$ and $\partial\rho/\partial x$ go to zero as $x \rightarrow \pm\infty$. Also, since the dynamics of eq. (2) should maximize the Fermi entropy (5), we should expect the stationary distribution of the confined system to converge to equilibrium, therefore, $\rho(x)$ should converge to the Fermi distribution

$$\rho_{\text{st}}(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta[\phi(x) - \mu]}}, \quad (6)$$

where the integration constant μ relates to the chemical potential, and can be determined by the normalization

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x, t)}{\delta} dx = N. \quad (7)$$

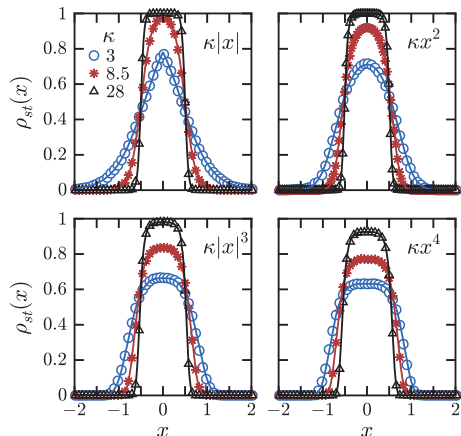


Fig. 2: (Color online) Comparison between numerical and analytical stationary-state solutions for the occupancy density of the confined two-state sandpile model in 1D. Numerical results are for a system with $N = 4000$ grains, $\beta = 1$, and potentials given by $\phi(x) = \kappa|x|^n$, with $n = 1, 2, 3$ and 4 . The κ values are 3.0 (blue circles), 8.5 (red stars) and 28 (black triangles). The analytical results are given by the solution (6) with no fitting parameter and shown as solid lines for all values of κ . In all simulations, we use $\delta = 1/N$.

Derivation of the continuous equation. – Treating ρ as a continuous function in time $\rho_i(t = n\tau) \equiv \rho(i; n)$, we can write explicitly the master equation of our process as shown in eq. (1),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = & \frac{1}{2\tau}(1 - \rho_i) \sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + e^{-\beta \Delta \phi_{i-k,i}} S_k^-], \\ & - \frac{1}{2\tau} \rho_i \sum_{k=1}^{\infty} [(1 - \rho_{i+k}) e^{-\beta \Delta \phi_{i,i+k}} S_{k-1}^+ \\ & + (1 - \rho_{i-k}) S_{k-1}^-], \end{aligned} \quad (8)$$

where $\Delta \phi_{i,j} = \phi_j - \phi_i$, and $S_k^{\pm} = \prod_{j=1}^k \rho_{i \pm j}$. We can expand the factor $e^{-\beta(\phi_{i+k} - \phi_i)}$ up to second order to obtain

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & \frac{1}{2\tau} \sum_{k=1}^{\infty} [S_k^+ + S_k^- - \rho(S_{k-1}^+ + S_{k-1}^-)] \\ & - \frac{\beta \phi' \delta}{2\tau} \sum_{k=1}^{\infty} k [S_k^- - \rho S_k^- - \rho(S_{k-1}^+ - S_k^+)] \\ & + \frac{\beta \phi'' \delta^2}{4\tau} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 [S_k^- - \rho S_k^- + \rho(S_{k-1}^+ - S_k^+)] \\ & + \frac{\beta^2 (\phi')^2 \delta^2}{4\tau} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 [S_k^- - \rho S_k^- - \rho(S_{k-1}^+ - S_k^+)], \end{aligned} \quad (9)$$

where terms of order superior to δ^2 have been neglected. Moreover, approximating ρ_i as a continuous function in

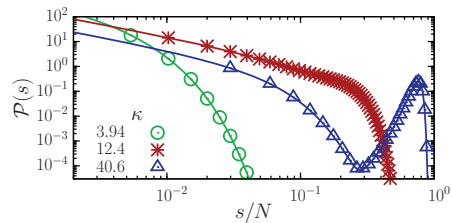


Fig. 3: (Color online) Stationary-state distributions of avalanche sizes s for the confined two-state sandpile model in 1D. The number of grains is $N = 2048$, $\beta = 1$, and a linear external potential, $\phi(x) = \kappa|x|$, is applied to the system. For $\kappa = 12.4$ the distribution displays a heavy tail, followed by a cutoff at the order of the total number of particles. The symbols are results from numerical simulations, while the solid lines correspond to the analytic evaluation of the avalanche-size distributions.

space $\rho(x = id, t) = \rho_i(t)$, we can expand it in a Taylor series to obtain

$$\begin{aligned} S_k^{\pm} = & \rho^k + \rho^{k-1} \left[\pm \frac{k(k+1)}{2} \delta \rho' \right. \\ & \left. + \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \frac{\delta^2}{2} \rho'' \right] \\ & + \rho^{k-2} \left[\frac{1}{24} k(k+1)(3k^2 - k - 2) \delta^2 (\rho')^2 \right], \end{aligned} \quad (10)$$

where $\rho' = \partial \rho / \partial x$ and $\rho'' = \partial^2 \rho / \partial x^2$. The careful evaluation of the sums neglecting, again, terms of order superior to δ^2 yields our continuum formulation, eq. (2), where we define $D = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta^2}{2\tau}$. The case for $d\phi/dx < 0$ can be evaluated in a similar manner to obtain the same final result.

Results and discussion. – As shown in fig. 2, the solution (6) is in excellent agreement with the spatial profiles of time-averaged occupancy obtained from numerical simulations for distinct forms of the potential, namely, $\phi(x) = \kappa|x|^n$, $n = 1, 2, 3$ and 4 , and different values of κ (or temperature). As the strength of the confining potential increases (or the temperature decreases), the maximum occupancy density at the center of the potential approaches unity, $\rho_{st} \approx 1$, and the peak in the profile becomes narrower. At this point, since the density can not increase further, any additional confinement leads to more sites with a maximum average occupancy, resulting in the characteristic step shape of the Fermi-Dirac distribution.

The confining potential substantially changes the way grains jump to the nearest empty site. Here a jump from site i to j corresponds to an avalanche of size $|j - i|$. The average distribution of avalanches with size s is shown in fig. 3 for the case where $\phi(x) = \kappa|x|$, and different values of κ . As depicted, the distribution is an exponential decay

for small values of κ , in agreement with the derivation for the two-state sandpile model without confinement [33]. By increasing κ large avalanches become more probable, since the confinement favors the occurrence of large clusters of grains near the center of the potential. For a specific value of $\kappa \approx 12.4$ the average occupancy near the center of the potential approaches 1, and the avalanche size distribution exhibits a power-law characteristics for a wide range of sizes. Further increase in the confinement parameter κ eventually leads to the occurrence of a very large cluster, with near all the grains, located at the center of the symmetrical potential. In this situation, only two types of jumps are likely to occur, either the particle performs a small jump near the border or it travels all the way from one side to the other side of the system. As a result, a pronounced peak for $s/N \sim 1$ becomes evident in the avalanche size distribution.

To obtain the probability $\mathcal{P}(s)$ for an avalanche of size s , we can identify

$$\mathcal{P}(s) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left[\prod_{k=i}^{i+s-1} \rho(k|k-i) \right] (1 - \rho(i+s|s)) \Theta_{i+s,i}, \quad (11)$$

where $\Theta_{i+s,i} = \min(1, e^{-\beta(\phi_{i+s} - \phi_i)})$, and, considering the symmetry, we are summing over avalanches to the right, and $\rho(k|m)$ is defined as the probability of finding the k th site occupied, given that the m previous sites have been also found occupied. Note that $\rho(k|m)$ is different from the original particle distribution ρ_k , that is, the fact that we know the m previous sites were occupied, changes the probability of finding the next one occupied. One should note that, in the limit where $m = N$; if the previous N sites had a particle, then the next one has to be empty and $\rho(k|N) = 0$, independent of k . We can expect $\rho(k|m)$ to follow the Fermi distribution, however, the chemical potential $\mu(k|m)$ has to be determined by a modified normalization constraint:

$$\sum_{i=-\infty}^{k-m-1} (1 + \exp(\phi_i - \mu(k|m)))^{-1} + \sum_{i=k}^{\infty} (1 + \exp(\phi_i - \mu(k|m)))^{-1} = N - m. \quad (12)$$

To obtain $\mu(k|m)$ we do not need to sum over the m sites we know are occupied, and the normalization have to account only for the remaining $N - m$ particles.

Equations (11) and (12) may be used to compute the probability of avalanches for any potential, however, inverting eq. (12) to obtain μ may not be that simple. In the case of a linear potential, $\phi(x) = \kappa|x|$, this can be done by approximating the sums in eq. (12) to solvable integrals, $\sum_{i=i_0}^{i_f} \rho_i \simeq \delta^{-1} \int_{(i_0-1/2)\delta}^{(i_f+1/2)\delta} \rho(x) dx$. If the avalanche we are considering does not jump over $x = 0$, that is $k < 0$ or $k - m > 0$, we obtain a cubic equation in $e^{\mu(k|m)}$:

$$(1 + e^{\mu})^2 (1 + e^{\mu} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)}) - e^{\kappa\delta(N-m)} (1 + e^{\mu} e^{\kappa\delta(k-1/2)}) = 0. \quad (13)$$

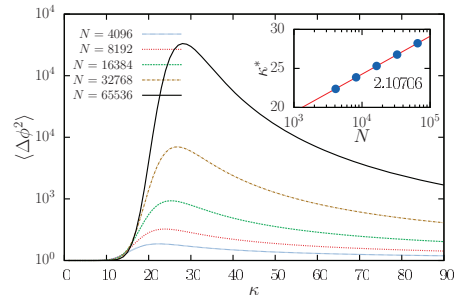


Fig. 4: (Color online) The average squared energy fluctuation shows a peak at a given value of the confining parameter $\kappa = \kappa^*$. In the inset we show that κ^* grows with the logarithm of the number of particles N .

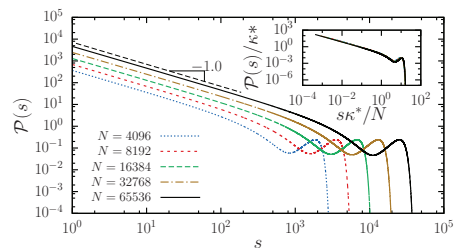


Fig. 5: (Color online) The distributions of avalanche sizes for different system sizes, at a specific condition $\kappa = \kappa^*(N)$, display a power-law shape, $\mathcal{P}(s) \sim s^{-1}$. These curves were obtained by numerically computing the probabilities of each possible avalanche. The values of $\kappa^*(N)$ were set to coincide with the condition where the energy fluctuation is maximum. The inset shows that, after rescaling with the corresponding values N and κ^* , all distributions collapse onto a single universal curve.

If the avalanche jumps over $x = 0$, that is $k - m \leq 0$ and $k > 0$, a quadratic equation is found:

$$(1 + e^{\mu} e^{\kappa\delta(k-m-1/2)})(1 + e^{\mu} e^{-\kappa\delta(k-1/2)}) = e^{\kappa\delta(N-m)}. \quad (14)$$

Equations (13) and (14) have only one positive real root that can be identified as e^{μ} , from which we can compute the avalanche size distribution. In fig. 3 we compare the avalanche size distributions obtained in this way with results from numerical simulations of the model. The excellent agreement found confirms the precision of this approach.

From the probability of each possible jump, we can evaluate the energy fluctuation $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ as the average squared potential difference in each event. In fig. 4 we show the dependence of $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ on the confining parameter κ for different number of particles. As one can observe, for each N , there is a specific value κ^* where $\langle \Delta\phi^2 \rangle$ is maximum. We show in fig. 5 the corresponding avalanche size

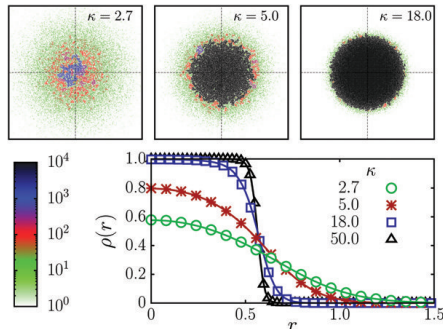


Fig. 6: (Color online) On the top are snapshots of the grain positions for different values of κ at the stationary state. Different colors correspond to distinct clusters and the color code in the bar indicates the cluster size, which increases from white to black. On the bottom are the stationary-state profiles of the average occupancy, $\rho(r)$, for two-state two-dimensional sandpiles confined by a parabolic potential. The number of particles is $N = 100000$ and different curves correspond to distinct values of the potential strength κ . The solid lines correspond to the Fermi distribution obtained without fitting parameters, calculated for different values of κ and $\beta = 1$. In all simulations, we use $\delta = 1/\sqrt{N}$.

distributions for these values of κ^* . The obtained results can be collapsed onto a single universal curve using the values of N and $\kappa^*(N)$, as shown in the inset of fig. 5. It is precisely at this condition that the avalanche size distribution presents a power-law shape. Moreover, as shown in the inset of fig. 5, the values of κ^* can be used to collapse onto a single universal curve all the distributions obtained for different numbers of particles.

Next we extend our results to two-dimensional systems. In this case, a grain at position $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ moves in a randomly selected direction until it finds the nearest empty site. The transition is then accepted or not following the same Metropolis algorithm previously described for the 1D case, but now with a confining parabolic potential of the form, $\phi(\mathbf{r}_i) = \kappa(x_i^2 + y_i^2)$. Figure 6 shows the radial profile of the time average occupancy in 2D, $\rho(r)$, obtained from numerical simulations for different values of the strength of the confining potential κ .

The qualitative behavior of the system is the same as in 1D, namely, the stronger the confining potential, the narrower the profile with the maximum occupancy at the center of the potential approaching unit. Further increasing κ , the occupancy saturates at $\rho \sim 1$ and the profile becomes broader, resembling a step function. Also shown in fig. 6 are typical snapshots of the grain positions for the same values of κ , colored according to the size of the clusters they belong to. If the confinement is weak, all sizes of clusters are present, with larger clusters located at the center of the potential. As κ increases, larger and

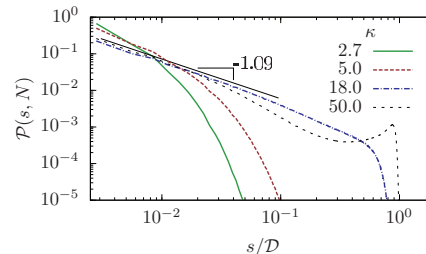


Fig. 7: (Color online) Stationary-state distributions of avalanche sizes s for the confined two-state sandpile model in 2D. The number of grains is $N = 100000$ and $\beta = 1$ for the numerical simulations. For $\kappa \approx 18$ the distribution displays power-law behavior, $\mathcal{P}(s, N) \sim s^{-\alpha}$, followed by a cutoff of the form $\exp(-s^2)$ at the order of the characteristic system size, $D \approx 2\sqrt{N/\pi}$. The least-squares fit to the data of a power law in the scaling region gives $\alpha = 1.09 \pm 0.04$.

more compact clusters are favored at the center of the potential, tending to a limit where most of the grains belong to a single, compact cluster with an irregular surface.

As for the one-dimensional case, the results in fig. 6 computed for distinct confinement strengths show that the average radial profiles of occupancy in 2D are perfectly consistent with the Fermi-Dirac distribution, but now subjected to the normalization condition, $\iint \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\delta^2} d\mathbf{r}^2 = N \Rightarrow \mu = \frac{1}{\beta} \ln(e^{\beta \frac{N\delta^2 \kappa}{\pi}} - 1)$. This excellent agreement between simulations and the Fermi-Dirac distribution suggests that in two-dimensions the system satisfies the generalization of the FPE (3) to higher dimensions, which is of the form

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [\Omega(\rho) \nabla \rho] - \nabla \cdot [\mathbf{A}(\mathbf{r}) \Psi(\rho)], \quad (15)$$

where $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(\mathbf{r})$, with the condition (4) still valid in 2D. As shown in fig. 7, the avalanche size distribution for the two-dimensional system also presents non-trivial properties, with an exponential decay for a weak confining potential. In the case of a strong confining potential, a peak also appears corresponding to avalanches of the order of the system size. Likewise the 1D case, the confining potential, at a specific condition, leads to an avalanche size distribution that follows a power law.

Conclusions. – In summary, here we studied the effect of a confining potential on the behavior of a two-state sandpile model in one and two dimensions. A continuum nonlinear diffusion equation could be derived from the microdynamical description of the model that is shown to be perfectly consistent with the transport of grains observed from numerical simulations. This equation, besides displaying singularities in both the diffusion and drift terms, has a stationary-state solution for the spatial profiles of average occupancy of grains that maximizes the Fermi-Dirac entropy. Moreover, our results show that

the introduction of a confining potential to the two-state sandpile model, if properly tuned, can lead to power-law behavior in the distribution of grain-jump sizes. These results are rather surprising since 1D systems usually do not display non-trivial critical states nor power-law behavior. They can be explained in terms of the non-homogeneity introduced by the confining potential and the complex fluctuations due to the singular-diffusion dynamics. The extension to two-dimensions reveals that the strongly non-linear features of the system together with the intrinsic exclusion mechanism present in the model also lead to the Fermi-Dirac distribution for the occupancy profiles. Power-law distributions of avalanches sizes are also observed in 2D at specific values of the intensity of the confining potential.

* * *

We thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FUNDAP, and FINEP, and the National Institute of Science and Technology for Complex Systems in Brazil for financial support.

REFERENCES

- [1] LUKYANOV A. V., SUSHCHIKH M. M., BAINES M. J. and THEOFANOUS T. G., *Phys. Rev. Lett.*, **109** (2012) 214501.
- [2] SPOHN H., *J. Phys. I*, **3** (1993) 69.
- [3] STEPHENSON J., *Physica A*, **222** (1995) 234.
- [4] ANDRADE J. S. jr., STREET D. A., SHIBUSA Y., HAVLIN S. and STANLEY H. E., *Phys. Rev. E*, **55** (1997) 772.
- [5] BULDYREV S. V., HAVLIN S., KAZAKOV A. YA., DA LUZ M. G. E., RAPOSO E. P., STANLEY H. E. and VISWANATHAN G. M., *Phys. Rev. E*, **64** (2001) 041108.
- [6] COSTA M. H. A. S., ARAUJO A. D., DA SILVA H. F. and ANDRADE J. S. jr., *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 061406.
- [7] HAVLIN S. and BEN-AVRAHAM D., *Adv. Phys.*, **51** (2002) 187.
- [8] RICHARDSON L. F., *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **110** (1926) 709.
- [9] HENTSCHEL H. G. E. and PROCACCIA I., *Phys. Rev. A*, **29** (1984) 1461.
- [10] SIMPSON M. J., BAKER R. E. and McCUE S. W., *Phys. Rev. E*, **83** (2011) 021901.
- [11] COLOMBO E. H. and ANTENEODO C., *Phys. Rev. E*, **86** (2012) 036215.
- [12] CASPI A., GRANER R. and ELBAUM M., *Phys. Rev. E*, **66** (2002) 011916.
- [13] WEISS M., ELSNER M., KARTBERG F. and NILSSON T., *Biophys. J.*, **87** (2004) 3518.
- [14] LENZI E. K., ANTENEODO C. and BORLAND L., *Phys. Rev. E*, **63** (2001) 051109.
- [15] MALACARNE L. C., MENDES R. S., PEDRON I. T. and LENZI E. K., *Phys. Rev. E*, **63** (2001) 030101.
- [16] MALACARNE L. C., MENDES R. S., PEDRON I. T. and LENZI E. K., *Phys. Rev. E*, **65** (2002) 052101.
- [17] DA SILVA P. C., DA SILVA L. R., LENZI E. K., MENDES R. S. and MALACARNE L. C., *Physica A*, **342** (2004) 16.
- [18] LENZI E. K., MENDES R. S., ANDRADE J. S. jr., DA SILVA L. R. and LUCENA L. S., *Phys. Rev. E*, **71** (2005) 052101.
- [19] ZAPPERI S., MOREIRA A. A. and ANDRADE J. S. jr., *Phys. Rev. Lett.*, **86** (2001) 3622.
- [20] MOREIRA A. A., ANDRADE J. S. jr., MENDES FILHO J. and ZAPPERI S., *Phys. Rev. B*, **66** (2002) 174507.
- [21] MIGUEL M., ANDRADE J. S. jr. and ZAPPERI S., *Braz. J. Phys.*, **33** (2003) 557.
- [22] ANDRADE J. S. jr., DA SILVA G. F. T., MOREIRA A. A., NOBRE F. D. and CURADO E. M. F., *Phys. Rev. Lett.*, **105** (2010) 260601.
- [23] LIU B. and GOREE J., *Phys. Rev. Lett.*, **100** (2008) 055003.
- [24] BARROZO P., MOREIRA A. A., AGUIAR J. A. and ANDRADE J. S. jr., *Phys. Rev. B*, **80** (2009) 104513.
- [25] EHRlich G. and STOLT K., *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **31** (1980) 603.
- [26] GOMER R., *Rep. Prog. Phys.*, **53** (1990) 917.
- [27] MYSHLYAVTSEV A. V., STEPANOV A. A., UEBING C. and ZHDANOV V. P., *Phys. Rev. B*, **52** (1995) 5977.
- [28] VIDALI G., IHM G., KIM H.-Y. and COLE M. W., *Surf. Sci. Rep.*, **12** (1991) 135.
- [29] MANANDHAR P., JANG J., SCHATZ G. C., RATNER M. A. and HONG S., *Phys. Rev. Lett.*, **90** (2003) 115505.
- [30] HOFMANN S., CSÁNYI G., FERRARI A. C., PAYNE M. C. and ROBERTSON J., *Phys. Rev. Lett.*, **95** (2005) 036101.
- [31] SCHMIDTBAUER J., BANSEN R., HEIMBURGER R., TEUBNER T., BOECK T. and FORNARI R., *Appl. Phys. Lett.*, **101** (2012) 043105.
- [32] BAK P., TANG C. and WIESENFIELD K., *Phys. Rev. Lett.*, **59** (1987) 381.
- [33] CARLSON J. M., CHAYES J. T., GRANNAN E. R. and SWINDLE G. H., *Phys. Rev. Lett.*, **65** (1990) 2547.
- [34] CARLSON J. M., GRANNAN E. R., SINGH C. and SWINDLE G. H., *Phys. Rev. E*, **48** (1993) 688.
- [35] CARLSON J. M. and SWINDLE G. H., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **92** (1995) 6712.
- [36] KADANOFF L. P., CHHABRA A. B., KOLAN A. J., FEIGENBAUM M. J. and PROCACCIA I., *Phys. Rev. A*, **45** (1992) 6095.
- [37] BARBU V., *Annu. Rev. Control*, **34** (2010) 52.
- [38] MAKSE H. A., *Phys. Rev. Lett.*, **83** (1999) 3186.
- [39] MONTAKHAB A. and CARLSON J. M., *Phys. Rev. E*, **58** (1998) 5608.
- [40] SCHWÄMMLE V., NOBRE F. D. and CURADO E. M. F., *Phys. Rev. E*, **76** (2007) 041123.

Confined sandpile in two dimensions: Percolation and singular diffusion

R. S. Pires, A. A. Moreira, H. A. Carmona, and J. S. Andrade, Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received 1 June 2017; revised manuscript received 19 September 2017; published 15 November 2017)

We investigate the properties of a two-state sandpile model subjected to a confining potential in two dimensions. From the microdynamical description, we derive a diffusion equation, and find a stationary solution for the case of a parabolic confining potential. By studying the systems at different confining conditions, we observe two scale-invariant regimes. At a given confining potential strength, the cluster size distribution takes the form of a power law. This regime corresponds to the situation in which the density at the center of the system approaches the critical percolation threshold. The analysis of the fractal dimension of the largest cluster frontier provides evidence that this regime is reminiscent of gradient percolation. By increasing further the confining potential, most of the particles coalesce in a giant cluster, and we observe a regime where the jump size distribution takes the form of a power law. The onset of this second regime is signaled by a maximum in the fluctuation of energy.

DOI: [10.1103/PhysRevE.96.052123](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.052123)

I. INTRODUCTION

Anomalous diffusion is observed in many physical scenarios such as fluid transport in porous media [1,2], diffusion in crowded fluids [3], diffusion in fractal-like substrates [4–8], turbulent diffusion in the atmosphere [9,10], diffusion of proteins due to molecular crowding [11], systems including ultracold atoms [12], analysis of heartbeat histograms [13], diffusion in “living polymers” [14], and study of financial transactions [15]. Anomalous diffusion can also manifest its non-Gaussian behavior in terms of nonlinear Fokker-Plank equations [16–20], which is the case, for example, of the dynamics of interacting vortices in disordered superconductors [21–24], diffusion in dusty plasma [25,26], and pedestrian motion [26]. A very interesting case of anomalous diffusion is surely the singular diffusion which is identified as having a divergent diffusion coefficient [27–31]. This kind of behavior happens in nature in some physical situations; for instance, when adsorbates diffuse on a adsorbent surface, its diffusion can be very nonlinear with a diffusion coefficient which depends on the local coverage θ as $D \propto |\theta - \theta_c|^{-\alpha}$ [32]. Therefore, the study of the basic mechanisms behind surface diffusion is of large importance for understanding technologically important processes like physical adsorption [33] and catalytic surface reactions [34–36].

A special class of singular diffusion models was intensively studied by Carlson *et al.* [27,28] in two-state one-dimensional sandpile models, for which they derive diffusion equations with singularities in the diffusion coefficient of the form $D \propto (1 + \rho)/(1 - \rho)^3$, where ρ is the local density. Based on these results, it was then suggested that some open driven systems display self-organized criticality [37] because in their continuum limit singularities appear in the diffusion constant at a critical point [27]. However, the critical aspects of this model remain to be elucidated, especially due to the fact that the most prominent sign of criticality, namely, long-range power-law spatial correlations, is not present in the original setup of the simulated dynamical system. Here we show that the addition of a confining potential to the two-state sandpile model solves this problem; namely, power-law tails are observed in the distribution of avalanche sizes. Our model represents an extension of the one introduced in [38] for the

case of two dimensions. Under this framework, it is possible to deduce the continuous limit for the model, which culminates in a diffusion equation with a singular diffusion coefficient. We observe in the confined system the onset of two scale-invariant regimes. The first one occurs when the concentration at the origin (the center of the confining region) reaches the critical percolation threshold. At this point, we detect a scale-invariant behavior in the cluster size distribution, as well as fractality in the perimeter of the central cluster. At more confined regimes, when the concentration reaches the critical threshold of singular diffusion, another signature of scale invariance appears, but now in the jump size distribution.

II. MODEL FORMULATION

In the present model, N_p particles are placed on a square lattice, where we define the occupation $h_{i,j}$ for each site as zero (if the site is empty) or one (if the site is occupied). As shown in Fig. 1, at each iteration, a particle can move randomly to any of four directions of the square lattice. The particle moves from an occupied site (the source) and jumps over all occupied sites in the chosen direction until it reaches an empty site (the target), where it may stay with a given probability (see Fig. 1). Therefore, a jump produces exactly the same results as if all particles between the source and the target had moved one site in the chosen direction, producing an avalanche. The probability that a jump is accepted is given by the Metropolis factor $\Theta = \min(1, \exp(-\beta[\Phi_{i,j_i} - \Phi_{i_s,j_s}]))$, where we define $\Phi_{i,j}$ as the external potential energy of a site. This probability introduces the effect of a confining potential on the particles. Here we present results using only four directions, since, for this case, a continuous limit of the model can be found analytically. However, we have also performed simulations with models in which particles can move in any arbitrary direction, and where they move in a random walk until finding an empty site, leading to similar results.

III. CONTINUOUS LIMIT OF THE MODEL

It is possible to verify that the model we described is a Markov process; that is, the occupation probability of a site (i, j) at a given step $n + 1$, $\rho_{i,j|n+1}$, can be obtained from the

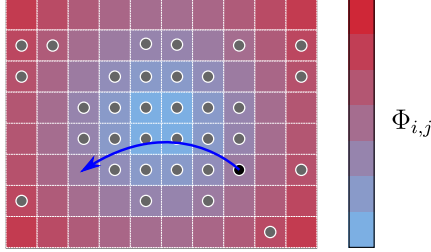


FIG. 1. Schematic picture of the two-dimensional confined sandpile model. The sites with discs inside are occupied, the site with a black disk inside is the source site of the jump, and the arrow points to the target site of the jump. The jump is the colored arrow. The tone gradient indicates the local potential Φ .

occupation probability of all sites on the previous step:

$$\begin{aligned} \rho_{i,j|n+1} &= \rho_{i,j|n} \\ &+ \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'-1|j} \rho_{i',j|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i,i'|j} \\ &- \sum_{i' \neq i} \frac{1}{4} P_{i,i'+1|j} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i',j|n}) \Theta_{i',i|j} \\ &+ \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'-1} \rho_{i,j'|n} (1 - \rho_{i,j|n}) \Theta_{i|j,j'} \\ &- \sum_{j' \neq j} \frac{1}{4} P_{i|j,j'+1} \rho_{i,j|n} (1 - \rho_{i,j'|n}) \Theta_{i|j',j}, \end{aligned} \quad (1)$$

where $\Theta_{i|j,j'} = \min(1, \exp(-\beta[\Phi_{i,j} - \Phi_{i,j'}]))$ is the Metropolis factor, and $P_{i|j,j'}$ is the probability of finding all sites between j and j' in the i column occupied. Similarly, $\Theta_{i,i'|j} = \min(1, \exp(-\beta[\Phi_{i,j} - \Phi_{i',j}]))$, and $P_{i,i'|j}$ is the probability of finding all sites between column i and i' on the j line occupied. We define the probabilities of finding k consecutive sites occupied in a given direction as

$$\Omega_{i,j|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i \pm k',j} \quad \text{and} \quad \Psi_{i,j|k}^{\pm} = \prod_{k'=1}^k \rho_{i,j \pm k'},$$

where $\Omega_{i,j|k}^{\pm}$ is used for the horizontal direction and $\Psi_{i,j|k}^{\pm}$ is used for the vertical direction. We then define

$$\Xi_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} \Theta_{i,i \pm k|j} \Omega_{i,j|k}^{\pm}$$

as the contribution for the probability due to particles arriving from the horizontal direction. In a similar fashion, we define $\Gamma_{i,j}^{\pm}$ as the contribution due to particles arriving from the vertical direction, and

$$\Lambda_{i,j}^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \rho_{i \pm k,j}) \Theta_{i \pm k,i|j} \Omega_{i,j|k-1}^{\pm}$$

as the contribution due to particles leaving in the horizontal direction. Finally, $\Upsilon_{i,j}^{\pm}$ is the contribution due to particles leaving in the vertical direction.

Using these definitions, Eq. (1) can be written as

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,j|n+1} - \rho_{i,j|n}}{\tau} &= \frac{(1 - \rho_{i,j})}{4\tau} (\Xi_{i,j}^+ + \Xi_{i,j}^- + \Gamma_{i,j}^+ + \Gamma_{i,j}^-) \\ &- \frac{\rho_{i,j}}{4\tau} (\Lambda_{i,j}^+ + \Lambda_{i,j}^- + \Upsilon_{i,j}^+ + \Upsilon_{i,j}^-), \end{aligned} \quad (2)$$

where τ is the time unit. The first factor on the right side of Eq. (2) accounts for particles arriving at a given site from each of four directions of the lattice, while the second factor on the left side of Eq. (2) accounts for particles leaving this site in each of the four directions of the lattice.

The continuous limit of Eq. (2) can be obtained similarly to what was done for one dimension [38], resulting in the following nonlinear diffusion equation:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \nabla \rho + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \nabla \Phi \right], \quad (3)$$

where we define

$$D = \lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} \frac{\delta^2}{4\tau}, \quad (4)$$

with δ being the space unit used for the space continuous limit and $\rho = \rho(x = i\delta, y = j\delta, t = n\tau)$. From Eq. (3), we see that our model obeys the continuity equation $\partial \rho / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}$, where we have

$$\mathbf{J} = -D \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \nabla \rho + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \nabla \Phi \right].$$

In the case where the dependence of the potential is only radial, $\Phi = \Phi(r)$, the conditions for a stationary solution are $\partial \Phi / \partial r = 0$, $\rho_{st}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, and $\mathbf{J} = \mathbf{0}$. Thus,

$$r \left[\frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^3} \frac{d\rho}{dr} + \beta \frac{(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \rho \frac{d\Phi}{dr} \right] = 0,$$

which can be written as

$$\frac{1}{\beta(1 - \rho)\rho} \frac{d\rho_{st}}{dr} = -\frac{d\Phi}{dr} = \frac{d}{dr} \left[\int_{u_0}^{\rho_{st}} \frac{1}{\beta(1 - u)u} du \right]. \quad (5)$$

Equation (5) can be easily solved and results in the stationary solution given by

$$\rho_{st}(r) = \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(r) - \mu]}}, \quad (6)$$

where μ can be obtained from the constraint $\int \frac{\rho(r)}{\delta^2} dS = N_p$, leading to

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\beta[\Phi(r) - \mu]}} r dr = \frac{N_p \delta^2}{2\pi}.$$

In the particular case of a parabolic confining potential, $\Phi(r = R\delta) = \kappa r^2 = \kappa(i^2 + j^2)\delta^2$, this integral can be solved, and it is possible to show that $\mu = (1/\beta) \ln[\exp(\beta\kappa N_p \delta^2/\pi) - 1]$, so that Eq. (6) is now independent of μ :

$$\rho_{st}(r) = \frac{(e^{\beta \frac{\kappa N_p \delta^2}{\pi}} - 1)}{e^{\beta \frac{\kappa N_p \delta^2}{\pi}} + (e^{\beta \kappa r^2} - 1)}. \quad (7)$$

In Fig. 2, we can see the agreement between predictions from Eq. (7) and results from numerical simulations. The detailed balance forced by the Metropolis acceptance factor

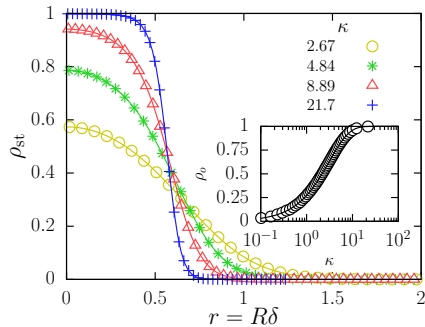


FIG. 2. Occupation density as a function of r for different values of κ . The points are estimated from a radial histogram of the occupation averaged over time with $N_p = 8000$ particles, while the solid lines are the predictions of Eq. (7). The inset shows the occupation density calculated at $r = 0$. The solid line is the analytical prediction $\rho_0 = 1 - \exp(-\beta\kappa N_p \delta^2 / \pi)$.

assures that the system should reach an equilibrium state, where the probability of a single state of the whole system decays exponentially with the energy, as in the canonical ensemble. The constraint that the site occupancy cannot be larger than 1 makes the site occupation probability, Eq. (6), take the form of the Fermi-Dirac distribution. As a consequence, as κ increases, the occupation tends to saturate at $\rho_{st} = 1$, near $r = 0$. This behavior leads to the formation of a giant cluster of particles near the origin as κ increases. The occupation at $r = 0$ follows $\rho_0 = 1 - \exp(-\beta\kappa N_p \delta^2 / \pi)$, and, as the inset in Fig. 2 shows, this prediction follows closely the results from numerical simulations.

IV. JUMP SIZE DISTRIBUTION AND MEAN SQUARE ENERGY FLUCTUATION

At this point, it is important to define a quantity that can give information about the dynamics of the model, which is the jump size distribution

$$S(s) \approx \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{\mathcal{N}_{[t]}(s)}{\mathcal{N}_{[t]T}} \right],$$

where s is the size of a jump, $S(s)$ is the probability of a jump of size s to occur, $\mathcal{N}_{[t]}(s)$ is the number of jumps of size s that appeared in a time interval t , and $\mathcal{N}_{[t]T}$ is the total number of jumps in a time interval. Assuming that it is possible to obtain the dynamics of the model from the occupation probability, we can use the following approximation:

$$S(s) \approx S_0 \sum_i \sum_j \frac{\rho_{i,j}}{4} [\lambda_{i,j|s}^+ + \lambda_{i,j|s}^- + v_{i,j|s}^+ + v_{i,j|s}^-], \quad (8)$$

where S_0 is a normalization constant, and we used the approximation, $\rho_{i,j} \approx \rho_{st}(x = i\delta, y = j\delta)$, for the mean occupation probability, $\rho_{i,j}$. The factors $\lambda_{i,j|s}^\pm$ account for the chance of a jump to be accepted in the horizontal direction and are defined as

$$\lambda_{i,j|s}^\pm = (1 - \rho_{i\pm s, j}) \Theta_{i\pm s, i|j} \Omega_{i,j|s}^\pm.$$

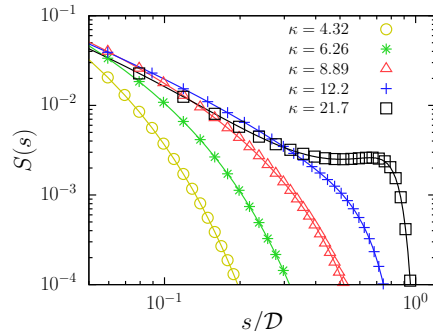


FIG. 3. Jump size distribution for different values of κ with $N_p = 8000$. The points are numerical simulations and the solid lines are the predictions of Eq. (8). Here we define $\mathcal{D} = 2\sqrt{N_p}/\pi$ as the diameter of a dense disk with N_p particles.

Similarly, $v_{i,j|s}^\pm$ accounts for the chance of a jump being accepted in the vertical direction and is defined in a similar fashion. We performed the summations of Eq. (8) numerically and compared it with the results from numerical simulations. The results are displayed in Fig. 3, showing very good agreement.

As κ increases, the occupation at the center of the system saturates to 1 (see Fig. 2). Consequently, in very confined systems, jumps that pass through the whole system have larger probability, as indicated by the peak at a large value of s in Fig. 3 when $\kappa = 21.7$. The agreement between numerical simulations and the predictions from Eq. (8) shown in Fig. 3 allow us to confidently study larger systems and extract useful information without the need to run time expensive simulations.

Another useful piece of information about the dynamics of the model is the mean square energy fluctuation of the system, which can be determined from the probabilities $\lambda_{i,j|s}^+$ and $v_{i,j|s}^+$ as

$$\begin{aligned} \langle \Delta\phi^2 \rangle \equiv & \sum_s \sum_i \sum_j \frac{\rho_{i,j}}{4} [\lambda_{i,j|s}^+ (\Phi_{i+s,j} - \Phi_{i,j})^2 \\ & + \lambda_{i,j|s}^- (\Phi_{i-s,j} - \Phi_{i,j})^2 + v_{i,j|s}^+ (\Phi_{i,j+s} - \Phi_{i,j})^2 \\ & + v_{i,j|s}^- (\Phi_{i,j-s} - \Phi_{i,j})^2], \quad (9) \end{aligned}$$

where the sum goes over all jump sizes s and all sites (i, j) . Figure 4 shows the mean jump energy fluctuation as a function of κ for different number of particles. As can be seen, it has a maximum in a specific value of κ^* , for each value of N_p . The existence of a maximum can be understood as follows. For very low values of κ , the confining potential is weak, and the occupation probability is significantly smaller than the one throughout the whole system. In this situation it is unlikely that stripes of several occupied sites are found, hence jumps with little energy differences are much more frequent, and the jump energy fluctuations are small. In the other limit, namely, for κ very large, the particles are confined in a dense core, with only a few, if any, empty sites. So the probability that a particle in

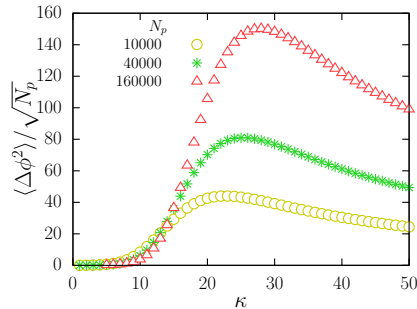


FIG. 4. Mean jump energy fluctuation as function of κ for different number of particles N_p . The points are the results from Eq. (9). For each value of N_p , the energy fluctuation exhibits a maximum at a different value $\kappa^*(N_p)$.

the border moves to an empty site inside the core, decreasing its energy, is very small. On the other hand, the particles inside this core will rarely jump to the border, increasing their energy, because the Metropolis factor predominantly rejects these jumps. Therefore the most frequent jumps take place near the border of the core, with small energy differences due to the symmetry of the potential, and the jump energy fluctuations are also expected to be small. For the intermediate value of the potential strength, κ^* , jumps within a large range of energy are possible and the jump energy fluctuation reaches a maximum value. This arises since, in this regime, the number of vacancies in the central core is sufficiently large for jumps with large energy difference from the border to the center to be probable, as well as jumps with small energies differences at the border. The shape of the jump size distribution at the condition of maximum energy fluctuation appears to be size invariant, as shown in Fig. 5. The distribution of jump sizes, at $\kappa = \kappa^*$, closely follows a power law with an exponent -1.11 , with a cutoff at the diameter of a compact cluster with all particles,

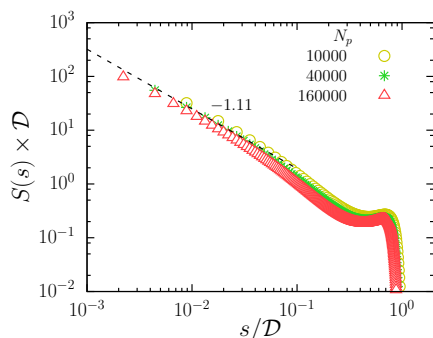


FIG. 5. Jump size distribution for $\kappa = \kappa^*$ and different values of N_p . This result is obtained through Eq. (8) choosing S_o in such a way that $S(s)$ is normalized. The factor $D = 2\sqrt{N_p/\pi}$ is the diameter of a compact cluster with all particles.

$\kappa = 1.00$ $\kappa = 2.96$ $\kappa = 50.00$



FIG. 6. Snapshots of simulations of systems with 10 000 particles for different values of κ . The colors indicate different clusters. Observe the relative size of the clusters and the formation of a giant cluster when κ increases.

$D = 2\sqrt{N_p/\pi}$. The distributions collapse when the jump size is scaled by the diameter $D = 2\sqrt{N_p/\pi}$ of a dense cluster with all particles. These results are suggestive of a scale-invariant regime observed at $\kappa = \kappa^*$. We have noted, however, that numerical experiments performed with different forms for the confining potential resulted in qualitatively similar results, but with different scaling exponents.

V. CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DIFFUSION FRONTIER

In this section we investigate some of the geometric aspects of our model. Figure 6 shows the formation of a giant cluster centered at the origin of the confining potential, as the strength κ increases. As κ grows, there is a clear percolationlike behavior induced where the large cluster starts to grow at the origin. This can be observed quantitatively by investigating the mean largest cluster size \mathcal{M} which can be obtained at each time step. Figure 7 shows how the mean largest cluster size changes when κ increases. For convenience, we plot \mathcal{M} as a function of the density at the origin ρ_o , which increases monotonically with κ (see the inset of Fig. 2). As depicted, there is a sudden increase in the size of the largest cluster for $\rho_o \approx p_c$, where $p_c = 0.59274621(13)$ is the percolation critical point [39]. Figure 8 suggests that this increasing in the size of the largest cluster takes place due to a percolationlike

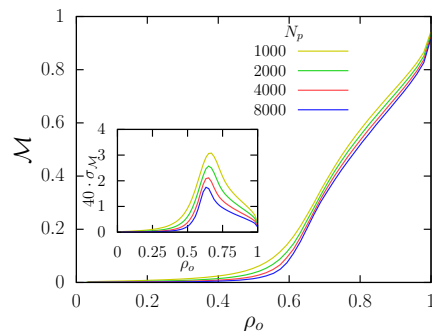


FIG. 7. Fraction of the largest cluster \mathcal{M} computed from numerical simulations as a function of occupation density at the origin ρ_o for different values of number of particles N_p . The inset shows the standard deviation of \mathcal{M} as a function of ρ_o .

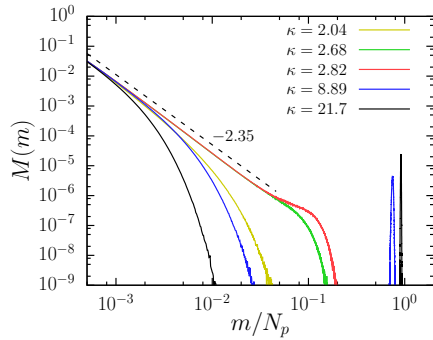


FIG. 8. Cluster size distribution obtained through numerical simulations for $N_p = 8000$ and different values of κ . The dashed line is a power law with exponent equal to -2.35 .

transition that changes the cluster size distribution of this model. This conjecture may be supported by investigating the cluster size distribution at the condition where the confining potential starts to induce the formation of a larger cluster in the center of the system, $\kappa' = \kappa(\rho_o = p_c) \approx 2.82$. Figure 9 shows that the cluster size distribution at this value of κ follows a power law with exponent -2.35 , which is different from the expected percolation exponent -2.05 [40]. The reason for this difference is the nonhomogeneity of the system induced by the confining potential. In fact, we have performed tests with a constant potential, where we could recover the -2.05 exponent, showing that this exponent is closely related to the shape of the potential. Besides the square lattice, we have also investigated the honeycomb and triangular lattices, and observed that the onset of the percolationlike transition seems to be consistently near the percolation threshold. This suggests an intrinsic interrelation between this model and the gradient percolation model, despite the constraints of its microscopic dynamics. This relationship is further investigated below.

Another relevant quantity that can be considered is the cluster external perimeter (the so called hull) of the largest

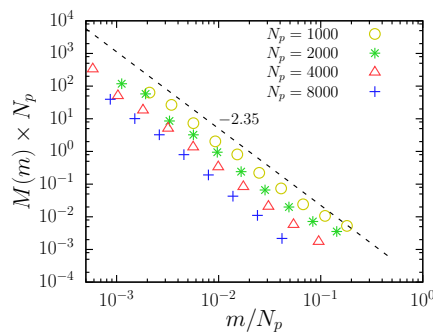


FIG. 9. Log-log plot of the cluster size distribution obtained through numerical simulations for different values of N_p and $\kappa = \kappa'$. The dashed line is a power law with exponent equal to -2.35 .

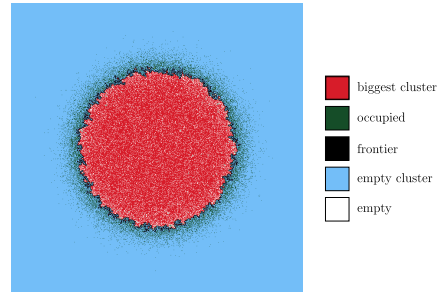


FIG. 10. Diffusion frontier with $N_p = 100000$ and $\kappa = 20.0$. This picture shows the results of a simulation on a two-dimensional square lattice where we put 100 000 particles following the probability given by Eq. (7). The red sites are the occupied sites that belong to the largest cluster and the black sites are the largest cluster sites that belong to the diffusion frontier. The gray sites are the occupied sites that do not belong to the largest cluster. The white sites are empty, and the blue ones correspond to the empty sites that belong to the empty cluster (connected through first or second neighbors to the more external empty sites). In this picture, there are 5960 sites at the diffusion frontier.

cluster. As shown in Fig. 10, this structure is what we call the diffusion frontier and its characteristics are closely related to the gradient percolation diffusion front [41]. We define the frontier radius \mathcal{R}_f as the mean distance of the diffusion frontier sites to the origin. To study systems with a larger number of particles, we used random samples [42] to generate a sample system from Eq. (7). Figure 11 shows the probability of finding a diffusion frontier site at a given distance to the origin. The insets in Fig. 11 show σ , the standard deviation of the distance of the diffusion frontier sites to the origin, and \mathcal{R}_f , the diffusion frontier radius as a function of the strength κ of the confining potential. One important difference between our model and usual gradient percolation models is the relation

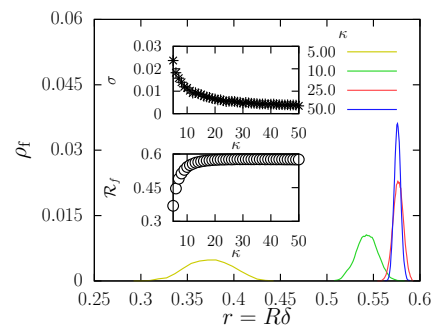


FIG. 11. Probability of finding a diffusion frontier site at a distance r . In the inset, we show σ , the standard deviation of the distance of the diffusion frontier sites to the origin, and \mathcal{R}_f , the diffusion frontier radius as a function of the strength κ of the confining potential. Here we used $N_p = 10\,000\,000$.

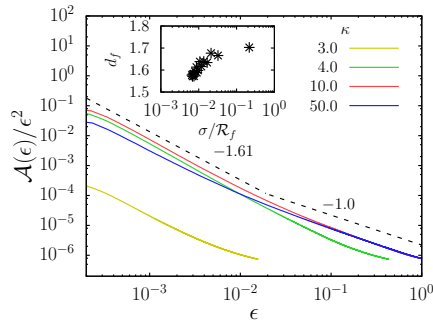


FIG. 12. Fractal dimension determination from multiple resolution analysis. The slope of the dashed line is $-d_f$ according to Eq. (10). The dashed line represents approximately the slope for most curves analyzed. The inset shows us how d_f grows with σ/\mathcal{R}_f .

between the linear size \mathcal{R}_f and σ , since both are functions of κ , in such a way that we can not fix one and vary the other. This condition limits the values of \mathcal{R}_f and σ that are close to the condition where finite size effects affect the diffusion frontier. In Fig. 12, we use multiple resolution analysis [43,44] to estimate the fractal dimension d_f of the diffusion frontier. This method consists in considering all points at a distance less than a given ϵ from the set for which the fractal dimension is being estimated. These points form a new set with the area given by the Richardson law [44]:

$$A(\epsilon) \propto \epsilon^{2-d_f}. \quad (10)$$

One can see, at higher scales, that the frontier appears as a one-dimensional line, crossing over to a higher fractal dimension

d_f at smaller scales. For $\kappa > \kappa'$, the fractal dimension d_f approaches 1.61. As κ decreases, approaching the value κ' , where $\rho_0 \approx p_c$, the fractal dimension d_f slowly grows to the theoretical value for diffusion fronts, namely, $d_f = 1.75$ [41], but the scaling region decreases. In the inset of Fig. 12, we can see how d_f changes with σ/\mathcal{R}_f . In the limit, $\sigma/\mathcal{R}_f \rightarrow 1$, we should expect, $d_f \rightarrow 1.75$.

VI. CONCLUSIONS

We studied a two-dimensional two-state confined sandpile model. From a microscopic dynamics we derived a singular diffusion equation and were able to obtain an analytical stationary solution for the particular case of parabolic potential. This system appears to display two scale-invariant regimes. The first is observed when the concentration at the origin approaches the critical value for percolation. This regime is similar to what is observed for gradient percolation, that is, power laws in the cluster size distribution are observed, as well as a fractal shape for the singular diffusion frontier. The second regime is associated with more intense confinements, when the concentration in the center approaches the maximum value, and a scale-invariant behavior is observed for the jump size distribution. We derived an analytical expression for the jump size distribution and find it to be in good agreement with our numerical solutions. We could, also, find a natural way to define the onset of the scale-invariant regime as the situation where the energy fluctuations are maximum.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FUNCAP, and the National Institute of Science and Technology for Complex Systems in Brazil for financial support.

- [1] M. Küntz and P. Lavallée, *J. Phys. D* **34**, 2547 (2001).
- [2] A. V. Lukyanov, M. M. Sushchikh, M. J. Baines, and T. G. Theofanous, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 214501 (2012).
- [3] J. Szymanski and M. Weiss, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 038102 (2009).
- [4] J. Stephenson, *Physica A* **222**, 234 (1995).
- [5] J. S. Andrade, Jr., D. A. Street, Y. Shibusa, S. Havlin, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **55**, 772 (1997).
- [6] S. V. Buldyrev, S. Havlin, A. Y. Kazakov, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, H. E. Stanley, and G. M. Viswanathan, *Phys. Rev. E* **64**, 041108 (2001).
- [7] M. H. A. S. Costa, A. D. Araújo, H. F. da Silva, and J. S. Andrade, Jr., *Phys. Rev. E* **67**, 061406 (2003).
- [8] S. Havlin and D. Ben-Avraham, *Adv. Phys.* **51**, 187 (2002).
- [9] L. F. Richardson, *Proc. R. Soc. A* **110**, 709 (1926).
- [10] H. G. E. Hentschel and I. Procaccia, *Phys. Rev. A* **29**, 1461 (1984).
- [11] D. S. Banks and C. Fradin, *Biophys. J.* **89**, 2960 (2005).
- [12] Y. Sagi, M. Brook, I. Almog, and N. Davidson, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 093002 (2012).
- [13] P. Grigolini, L. Palatella, and G. Raffaelli, *Fractals* **9**, 439 (2001).
- [14] A. Ott, J. P. Bouchaud, D. Langevin, and W. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2201 (1990).
- [15] V. Plerou, P. Gopikrishnan, L. A. Nunes Amaral, X. Gabaix, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **62**, R3023 (2000).
- [16] E. K. Lenzi, C. Anteneodo, and L. Borland, *Phys. Rev. E* **63**, 051109 (2001).
- [17] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron, and E. K. Lenzi, *Phys. Rev. E* **63**, 030101 (2001).
- [18] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron, and E. K. Lenzi, *Phys. Rev. E* **65**, 052101 (2002).
- [19] P. C. da Silva, L. R. da Silva, E. K. Lenzi, R. S. Mendes, and L. C. Malacarne, *Physica A* **342**, 16 (2004).
- [20] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, J. S. Andrade, Jr., L. R. da Silva, and L. S. Lucena, *Phys. Rev. E* **71**, 052101 (2005).
- [21] S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade, Jr., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3622 (2001).
- [22] A. A. Moreira, J. S. Andrade, Jr., J. Mendes Filho, and S. Zapperi, *Phys. Rev. B* **66**, 174507 (2002).
- [23] M. Migel, J. S. Andrade, Jr., and S. Zapperi, *Braz. J. Phys.* **33**, 557 (2003).
- [24] J. S. Andrade, Jr., G. F. T. da Silva, A. A. Moreira, F. D. Nobre, and E. M. F. Curado, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010).
- [25] B. Liu and J. Goree, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 055003 (2008).

- [26] P. Barrozo, A. A. Moreira, J. A. Aguiar, and J. S. Andrade, Jr., *Phys. Rev. B* **80**, 104513 (2009).
- [27] J. M. Carlson, J. T. Chayes, E. R. Grannan, and G. H. Swindle, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2547 (1990).
- [28] J. M. Carlson, E. R. Grannan, C. Singh, and G. H. Swindle, *Phys. Rev. E* **48**, 688 (1993).
- [29] J. M. Carlson and G. H. Swindle, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **92**, 6712 (1995).
- [30] L. P. Kadanoff, A. B. Chhabra, A. J. Kolan, M. J. Feigenbaum, and I. Procaccia, *Phys. Rev. A* **45**, 6095 (1992).
- [31] V. Bardu, *Annu. Rev. Control* **34**, 52 (2010).
- [32] A. V. Myshlyavtsev, A. A. Stepanov, C. Uebing, and V. P. Zhdanov, *Phys. Rev. B* **52**, 5977 (1995).
- [33] G. Vidal, G. Ihm, H. Kim, and M. W. Cole, *Surf. Sci. Rep.* **12**, 135 (1991).
- [34] P. Manandhar, J. Jang, G. C. Schatz, M. A. Ratner, and S. Hong, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 115505 (2003).
- [35] S. Hofmann, G. Csányi, A. C. Ferrari, M. C. Payne, and J. Robertson, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 036101 (2005).
- [36] J. Schmidtbauer, R. Bansen, R. Heimburger, T. Teubner, and T. Boeck, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 043105 (2012).
- [37] P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
- [38] R. S. Pires, A. A. Moreira, H. A. Carmona, and J. S. Andrade, Jr., *Europhys. Lett.* **109**, 14007 (2015).
- [39] M. E. J. Newman and R. M. Ziff, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4104 (2000).
- [40] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd ed. (Taylor & Francis, London, 2003).
- [41] B. Sapoval, M. Rosso, and J. F. Gouyet, *J. Phys. Lett.* **46**, 149 (1985).
- [42] D. E. Knuth, *Seminumerical Algorithms*, The Art of Computer Programming Vol. 2, 2nd ed. (Addison-Wesley, Reading, MA, 1981).
- [43] S. Peleg, J. Naor, R. Hartley, and D. Avnir, *IEEE T. Pattern Anal.* **PAMI-6**, 518 (1984).
- [44] E. Peli, *J. Opt. Soc. Am. A* **7**, 2032 (1990).

REFERÊNCIAS

- [1] KÜNTZ, M.; LAVALLÉE, P. Experimental evidence and theoretical analysis of anomalous diffusion during water infiltration in porous building materials. **J. Phys. D: Appl. Phys.**, v. 34, p. 2547–2554, 2001.
- [2] LUKYANOV, A. V.; SUSHCHIKH, M. M.; BAINES, M. J.; THEOFANOUS, T. G. Superfast Nonlinear Diffusion: Capillary Transport in Particulate Porous Media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 109, p. 214501, 2012.
- [3] SZYMANSKI, J.; WEISS, M. Elucidating the Origin of Anomalous Diffusion in Crowded Fluids. **Phys. Rev. Lett.**, v. 103, p. 038102, 2009.
- [4] STEPHENSON, J. Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion. **Physica A**, v. 222, p. 234–247, 1995.
- [5] ANDRADE JR., J. S.; STREET, D. A.; SHIBUSA, Y.; HAVLIN, S.; STANLEY, H. E. Diffusion and Reaction in Percolating Pore Networks. **Phys. Rev. E**, v. 55, p. 772–777, 1997.
- [6] BULDYREV, S. V.; HAVLIN, S.; KAZAKOV, A. Y.; DA LUZ, M. G. E.; RAPOSO, E. P.; STANLEY, H. E.; VISWANATHAN, G. M. Average time spent by Lévy flights and walks on an interval with absorbing boundaries. **Phys. Rev. E**, v. 64, p. 041108, 2001.
- [7] COSTA, M. H. A. S.; ARAÚJO, A. D.; DA SILVA, H. F.; ANDRADE JR., J. S. Scaling behavior of diffusion and reaction processes in precolating porous media. **Phys. Rev. E**, v. 67, p. 061406, 2003.
- [8] HAVLIN, S.; BEN-AVRAHAM, D. Diffusion in Disordered Media. **Adv. Phys.**, v. 51, p. 187–292, 2002.
- [9] RICHARDSON, L. F. Atmospheric Diffusion Shown on a Distance-Neighbour Graph. **P. Roy. Soc. Lond. A Mat.**, v. 110, p. 709–737, 1926.
- [10] HENTSCHEL, H. G. E.; PROCACCIA, I. Relative diffusion in turbulent media: The fractal dimension of clouds. **Phys. Rev. A**, v. 29, p. 1461–1470, 1984.
- [11] SPOHN, H. Surface dynamics below the roughening transition. **J. Phys. I**, v. 3, p. 69–81, 1993.
- [12] SIMPSON, M. J.; BAKER, R. E.; MCCUE, S. W. Models of collective cell spreading with variable cell aspect ratio: a motivation for degenerate diffusion models. **Phys. Rev. E**, v. 83, p. 021901, 2011.
- [13] COLOMBO, E. H.; ANTENEODO, C. Nonlinear diffusion effects on biological population spatial patterns. **Phys. Rev. E**, v. 86, p. 036215, 2012.
- [14] CASPI, A.; GRANER, R.; ELBAUM, M. Diffusion and directed motion in cellular transport. **Phys. Rev. E**, v. 66, p. 011916, 2002.

- [15] WEISS, M.; ELSNER, M.; KARTBERG, F.; NILSSON, T. Anomalous subdiffusion is a measure for cytoplasmic crowding in living cells. **Biophys. J.**, v. 87, p. 3518–3524, 2004.
- [16] BANKS, D. S.; FRADIN, C. Anomalous Diffusion of Proteins Due to Molecular Crowding. **Biophys. J.**, v. 89, p. 2960–2971, 2005.
- [17] SAGI, Y.; BROOK, M.; ALMOG, I.; DAVIDSON, N. Observation of Anomalous Diffusion and Fractional Self-Similarity in One Dimension. **Phys. Rev. Lett.**, v. 108, p. 093002, 2012.
- [18] GRIGOLINI, P.; PALATELLA, L.; RAFFAELLI, G. Asymmetric anomalous diffusion: an efficient way to detect memory in time series. **Fractals**, v. 9, p. 349–449, 2001.
- [19] OTT, A.; BOUCHAUD, J. P.; LANGEVIN, D.; URBACH, W. Anomalous Diffusion in "Living Polymers": A Genuine Levy Flighth?. **Phys. Rev. Lett.**, v. 65, p. 2201–2204, 1990.
- [20] PLEROU, V.; GOPIKRISHNAN, P.; AMARAL, L. A. N.; GABAIX, X.; STANLEY, H. E. Economic fluctuations and anomalous diffusion. **Phys. Rev. E**, v. 62, p. R3023–R3026, 2000.
- [21] LENZI, E. K.; ANTENEODO, C.; BORLAND, L. Escape time in anomalous diffusive media. **Phys. Rev. E**, v. 63, p. 051109, 2001.
- [22] MALACARNE, L. C.; MENDES, R. S.; PEDRON, I. T.; LENZI, E. K. Nonlinear equations for anomalous diffusion: Unified power-law and stretched exponential exact solution. **Phys. Rev. E**, v. 63, p. 030101, 2001.
- [23] MALACARNE, L. C.; MENDES, R. S.; PEDRON, I. T.; LENZI, E. K. N-dimensional nonlinear Fokker-Planck equation with time-dependent coefficients. **Phys. Rev. E**, v. 65, p. 052101, 2002.
- [24] DA SILVA, P. C.; DA SILVA, L. R.; LENZI, E. K.; MENDES, R. S.; MALACARNE, L. C. Anomalous diffusion and anisotropic nonlinear Fokker-Planck equation. **Physica A**, v. 342, p. 16–21, 2004.
- [25] LENZI, E. K.; MENDES, R. S.; ANDRADE JR., J. S.; DA SILVA, L. R.; LUCENA, L. S. N-dimensional fractional diffusion equation and Green function approach: Spatially dependent diffusion coefficient and external force. **Phys. Rev. E**, v. 71, p. 052101, 2005.
- [26] ZAPPERI, S.; MOREIRA, A. A.; ANDRADE JR., J. S. Flux Front Penetration in Disordered Superconductors. **Phys. Rev. Lett.**, v. 86, p. 3622–3625, 2001.
- [27] MOREIRA, A. A.; ANDRADE JR., J. S.; MENDES FILHO, J.; ZAPPERI, S. Boundary effects on flux penetration in disordered superconductors. **Phys. Rev. B**, v. 66, p. 174507, 2002.
- [28] MIGEL, M.; ANDRADE JR., J. S.; ZAPPERI, S. Deblocking of Interacting Particle Assemblies: from Pinning to Jamming. **Braz. J. Phys.**, v. 33, p. 557–572, 2003.

- [29] ANDRADE JR., J. S.; DA SILVA, G. F. T.; MOREIRA, A. A.; NOBRE, F. D.; CURADO, E. M. F. Thermostatistics of Overdamped Motion of Interaction Particles. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, p. 260601, 2010.
- [30] LIU, B.; GOREE, J. Superdiffusion and Non-Gaussian Statistics in a Driven-Dissipative 2D Dusty Plasma. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, p. 055003, 2008.
- [31] BARROZO, P.; MOREIRA, A. A.; AGUIAR, J. A.; ANDRADE JR., J. S. Model of Overdamped Motion of Interating Magnetic Vortices through Narrow Superconducting Channels. **Phys. Rev. B**, v. 80, p. 104513, 2009.
- [32] CARLSON, J. M.; CHAYES, J. T.; GRANNAN, E. R.; SWINDLE, G. H. Self-Organized Criticality and Singular Diffusion. **Phys. Rev. Lett.**, v. 65, p. 2547–2550, 1990.
- [33] CARLSON, J. M.; GRANNAN, E. R.; SINGH, C.; SWINDLE, G. H. Fluctuations in Self-Organizing Systems. **Phys. Rev. E**, v. 48, p. 688–698, 1993.
- [34] CARLSON, J. M.; SWINDLE, G. H. Self-Organized Criticality: Sandpiles, Singularities and Scaling. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, v. 92, p. 6712–6719, 1995.
- [35] KADANOFF, L. P.; CHHABRA, A. B.; KOLAN, A. J.; FEIGENBAUM, M. J.; PROCACCIA, I. Critical indices for singular diffusion. **Phys. Rev. A**, v. 45, p. 6095–6098, 1992.
- [36] BARDU, V. Self-Organized Criticality and Convergence to Equilibrium of Solutions to Nonlinear Diffusion Equations. **Annu. Rev. Control**, v. 34, p. 52–61, 2010.
- [37] EHRLICH, G.; STOLT, K. title. **Ann. Rev. Phys. Chem.**, v. 31, p. 603–637, 1980.
- [38] GOMER, R. title. **Rep. Prog. Phys**, v. 53, p. 917–1002, 1990.
- [39] MYSHLYAVTSEV, A. V.; STEPANOV, A. A.; UEBING, C.; ZHDANOV, V. P. Surface diffusion and continuous phase transition in adsorbed overlayers . **Phys. Rev. B**, v. 52, p. 5977–5984, 1995.
- [40] VIDALI, G.; IHM, G.; KIM, H.; COLE, M. W. Potentials of physical absorption. **Surf. Sci. Rep.**, v. 12, p. 133–181, 1991.
- [41] MANANDHAR, P.; JANG, J.; SCHATZ, G. C.; RATNER, M. A.; HONG, S. Anomalous Surface Diffusion in Nanoscale Directed Deposition Processes. **Phys. Rev. Lett.**, v. 90, p. 115505, 2003.
- [42] HOFMANN, S.; CSÁNYI, G.; FERRARI, A. C.; PAYNE, M. C.; ROBERTSON, J. Surface Diffusion: The Low Activation Energy Path for Nanotube Growth. **Phys. Rev. Lett.**, v. 95, p. 036101, 2005.
- [43] SCHMIDTBAUER, J.; BANSEN, R.; HEIMBURGER, R.; TEUBNER, T.; BOECK, T. Germanium nanowire growth controlled by surface diffusion effects. **Appl. Phys. Lett.**, v. 101, p. 043105, 2012.
- [44] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-Organized Criticality: An Explanation of $1/f$ Noise. **Phys. Rev. Lett.**, v. 59, p. 381–384, 1987.

- [45] BAK, P. **How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality**. New York: Copernicus, 1996.
- [46] ROMAN, F. Self-organised criticality—what it is and what it isn't. **Studies In History and Philosophy of Science Part A**, v. 34, p. 613–632, 2003.
- [47] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality. **Phys. Rev. A**, v. 38, p. 364, 1988.
- [48] NOLAN, P. L.; GRUBER, D. E.; MATTESON, J. L.; PETERSON, L. E.; ROTHSCHILD, R. E.; LEVINE, A. M.; DOTY, J. P.; PRIMINI, F. A. Rapid variability of 10–140 keV X-rays from Cygnus X-1. **Adv. Space Res.**, v. 1, p. 215–218, 1981.
- [49] VOSS, R. F.; CLARKE, J. Flicker (1/f) noise: Equilibrium temperature and resistance fluctuations. **Phys. Rev. B**, v. 13, p. 556, 1976.
- [50] PELLEGRINI, B.; SALETTI, R.; TERRENI, P.; PRUDENZIATI, M. $1/f^\gamma$ noise in thick-film resistors as an effect of tunnel and thermally activated emissions, from measures versus frequency and temperature. **Phys. Rev. B**, v. 27, p. 1233, 1983.
- [51] SCHICK, K. L.; VERVEEN, A. A. $1/f$ noise with a low frequency white noise limit. **Nature**, v. 251, p. 599–601, 1974.
- [52] MANDELBROT, B. B.; NESS, J. W. V. Fractional Brownian motions, fractional noises and applications. **SIAM Rev.**, v. 10, p. 422–437, 1968.
- [53] MANDELBROT, B. B.; PIGNONI, R. **The fractal geometry of nature**. New York: WH freeman, 1983.
- [54] BARNESLEY, M. F. **Fractals everywhere**. Boston: Academic press, 2014.
- [55] BUNDE, A.; HAVLIN, S. **Fractals in Science**. New York: Springer-Verlag, 1995.
- [56] CARLSON, J. M.; LANGER, J. S. Properties of earthquakes generated by fault dynamics. **Phys. Rev. Lett.**, v. 62, p. 2632, 1989.
- [57] CARLSON, J. M.; LANGER, J. S. Mechanical model of an earthquake fault. **Phys. Rev. A**, v. 40, p. 6470, 1989.
- [58] HUANG, J.; TURCOTTE, D. L. Are earthquakes an example of deterministic chaos?. **Geophys. Res. Lett.**, v. 17, p. 223–226, 1990.
- [59] BAK, P.; CHEN, K.; TANG, C. A forest-fire model and some thoughts on turbulence. **Phys. Lett. A**, v. 147, p. 297–300, 1990.
- [60] DROSSEL, B.; SCHWABL, F. Self-organized critical forest-fire model. **Phys. Rev. Lett.**, v. 69, p. 1629, 1992.
- [61] DROSSEL, B.; SCHWABL, F. Self-organized criticality in a forest-fire model. **Physica A**, v. 191, p. 47–50, 1992.
- [62] AHARONY, A.; STAUFFER, D. **Introduction to percolation theory**. London: Taylor & Francis, 2003.

- [63] TURCOTTE, D. L. Self-organized criticality. **Rep. Prog. Phys.**, v. 62, p. 1377, 1999.
- [64] MEHTA, A.; BARKER, G. C. The dynamics of sand. **Rep. Prog. Phys.**, v. 57, p. 383, 1994.
- [65] LEVINE, L.; PEGDEN, W.; SMART, C. K. Apollonian structure in the Abelian sandpile. **Geom. Funct. Anal.**, v. 26, p. 306–336, 2016.
- [66] DHAR, D. Self-organized critical state of sandpile automaton models. **Phys. Rev. Lett.**, v. 64, p. 1613, 1990.
- [67] DHAR, D.; RAMASWAMY, R. Exactly solved model of self-organized critical phenomena. **Phys. Rev. Lett.**, v. 63, p. 1659, 1989.
- [68] DHAR, D.; MAJUMDAR, S. N. Abelian sandpile model on the Bethe lattice. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 23, p. 4333, 1990.
- [69] MAJUMDAR, S. N.; DHAR, D. Equivalence between the Abelian sandpile model and the $q \rightarrow 0$ limit of the Potts model. **Physica A**, v. 185, p. 129–145, 1992.
- [70] LIU, S. H.; KAPLAN, T.; GRAY, L. J. Geometry and dynamics of deterministic sand piles. **Phys. Rev. A**, v. 42, p. 3207, 1990.
- [71] OSTOJIC, S. Patterns formed by addition of grains to only one site of an abelian sandpile. **Physica A**, v. 318, p. 187–199, 2003.
- [72] DHAR, D.; SADHU, T.; CHANDRA, S. Pattern formation in growing sandpiles. **Europhys. Lett.**, v. 85, p. 48002, 2009.
- [73] CARACCILO, S.; PAOLETTI, G.; SPORTIELLO, A. Conservation laws for strings in the Abelian Sandpile Model. **Europhys. Lett.**, v. 90, p. 60003, 2010.
- [74] CARLSON, J. M.; CHAYES, J. T.; GRANNAN, E. R.; SWINDLE, G. H. Self-organized criticality in sandpiles: nature of the critical phenomenon. **Phys. Rev. A**, v. 42, p. 2467, 1990.
- [75] BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes: I. Crystals and mazes. **Math. Proc. Cambridge**, v. 53, p. 629–641, 1957.
- [76] ACHLIOPTAS, D.; D’SOUZA, R. M.; SPENCER, J. Explosive percolation in random networks. **Science**, v. 323, p. 1453–1455, 2009.
- [77] RADICCHI, F.; FORTUNATO, S. Explosive percolation in scale-free networks. **Phys. Rev. Lett.**, v. 103, p. 168701, 2009.
- [78] DA COSTA, R. A.; DOROGOVTSSEV, S. N.; GOLTSEV, A. V.; MENDES, J. F. F. Explosive percolation transition is actually continuous. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, p. 255701, 2010.
- [79] SAHIMI, M. **Applications of percolation theory**. London: CRC Press, 1994.
- [80] SAPOVAL, B.; ROSSO, M.; GOUYET, J. F. The fractal nature of a diffusion front and the relation to percolation. **J. Physique Lett.**, v. 46, p. L149–L156, 1985.

- [81] SCHWÄMMLE, V.; NOBRE, F. D.; CURADO, E. M. F. Consequences of the H theorem from nonlinear Fokker-Planck equations. **Phys. Rev. E**, v. 76, p. 041123, 2007.
- [82] FERNANDO, A. E.; LANDMAN, K. A.; SIMPSON, M. J. Nonlinear diffusion and exclusion processes with contact interactions. **Phys. Rev. E**, v. 81, p. 011903, 2010.
- [83] NEWMAN, M. E. J.; ZIFF, R. M. Efficient Monte Carlo Algorithm and High-Precision Results for Percolation. **Phys. Rev. Lett.**, v. 85, p. 4104, 2000.
- [84] KNUTH, D. E. **Seminumerical algorithms, Volume 2 of The art of computer programming. 2d ed.** Massachusetts: Addison-Wesley, 1981.
- [85] PELEG, S.; NAOR, J.; HARTLEY, R.; AVNIR, D. Multiple Resolution Texture Analysis and Classification. **IEEE T. Pattern Anal.**, v. 6, p. 518–523, 1984.
- [86] PELI, E. Contrast in complex images. **J. Opt. Soc. Am. A**, v. 7, p. 2032–2040, 1990.