

MARCOS PAULO DE OLIVEIRA LOUREIRO

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO
MODELO DE POTTS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL

2006

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

L892p
2006

Loureiro, Marcos Paulo de Oliveira, 1978-
Propagação de danos no modelo de Potts / Marcos
Paulo de Oliveira Loureiro. – Viçosa : UFV, 2006.
xiv, 69f. : il. ; 29cm.

Orientador: José Arnaldo Redinz.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 65-69.

1. Física estatística. 2. Monte Carlo, Método de.
3. Ising, Modelo de. 4. Transformações de fase (Física
estatística). I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22.ed. 530.13

MARCOS PAULO DE OLIVEIRA LOUREIRO

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO MODELO DE POTTS

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de Viçosa, como parte
das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física Aplicada, para obtenção
do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 01 de setembro de 2006.

Prof. Marcelo Lobato Martins
(Co-orientador)

Prof. João Antônio Plascak

Prof. Ladário da Silva

Prof. Sílvio da Costa Ferreira Júnior

Prof. José Arnaldo Redinz
(Orientador)

À minha mãe Maria Leonor,
ao meu orientador José Arnaldo
e em especial à minha companheira Liziane.

AGRADECIMENTOS

- À minha mãe Maria Leonor que sempre me incentivou e me apoiou, sem ela eu não teria condições de estudar.
- Ao amigo e prof. José Arnaldo pela orientação neste trabalho e pela ajuda no meu processo de crescimento pessoal.
- À minha companheira Liziane pelo seu amor e sua compreensão.
- A UFV e a todos os professores do DPF pelos anos de aprendizado e convívio.
- À Capes pelo apoio financeiro.

BIOGRAFIA

Marcos Paulo de Oliveira Loureiro, filho de José Eustáquio Loureiro e Maria Leonor de Oliveira e Silva, brasileiro nascido em 24 de janeiro de 1978 no município de Belo Horizonte, no Estado de Minas Gerais.

No ano 1999 ingressou-se no curso de graduação em Física na Universidade Federal de Viçosa, onde graduou-se no ano 2004 como Bacharel e Licenciado em Física. Em 2004 iniciou-se no curso de mestrado em Física Aplicada na mesma instituição onde se graduou e veio a obter o título de mestre após a defesa de sua dissertação em primeiro de setembro de 2006.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	vii
LISTA DE FIGURAS	viii
RESUMO	xiv
ABSTRACT	xv
1 Introdução	1
2 O Modelo de Potts	5
3 O Método de Propagação de Danos	11
3.1 Modelo de Ising	12
3.1.1 Ferromagneto de Ising na Rede Quadrada	13
3.1.2 Ferromagneto de Ising na Rede Cúbica	15
3.2 Aplicações do método em modelos mais complexos	17
3.2.1 Modelo Relógio na rede quadrada	17
3.2.2 Modelo XY Bidimensional	22
3.2.3 Modelo XY bidimensional: evidência de apenas duas fases di- nâmicas	25
3.3 Modelo de Potts na rede quadrada	27
3.3.1 Modelo de Potts com $q = 3$ estados	27
3.3.2 Modelo de Potts com q estados	32
3.3.3 Modelo de Potts com q estados usando dinâmica de agregados	35
4 Resultados	38
4.1 Definição da função dano $D(t)$	39
4.2 Simulações com a dinâmica de Banho Térmico	42
4.3 Simulações com a dinâmica de Metropolis	53

LISTA DE TABELAS

4.1	Valores assintóticos do dano médio $\langle D_{\Phi}(t, T > T_d) \rangle$ para o modelo de Potts com os números de estados $q = 2, 3, \dots$ e 7 obtidos por meio de simulações de Monte Carlo usando a dinâmica de Metropolis. O dano foi monitorado por $t = 20000$ passos de Monte Carlo após o sistema entrar em equilíbrio termodinâmico na temperatura $T = 3.0$. A simulação foi repetida para $M = 100$ amostras e em seguida feita a média termodinâmica do dano.	61
-----	---	----

LISTA DE FIGURAS

2.1	Representação do plano bidimensional contendo alguns dos q vetores propostos por Domb.	6
2.2	Representação dos q vetores no espaço de estado $q - 1$ dimensional.	8
3.1	Dependência do parâmetro de ordem ψ em função da temperatura para uma simulação de Monte Carlo via dinâmica de Glauber. (Figura retirada da ref. [10])	14
3.2	Dano médio sobre todas as amostras para o modelo de Ising em $d = 3$ em função da temperatura. (Figura retirada da ref. [26])	16
3.3	Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo Z_4 . Para os círculos abertos e fechados vale a condição inicial (1); para os triângulos abertos, vale a condição inicial (2) . (Figura retirada da ref. [30])	18
3.4	Dano médio das amostras sobreviventes $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo Z_{10} . Os círculos abertos ($L = 10$) e fechados ($L = 20$) representam a condição inicial (1); os triângulos abertos ($L = 10$) representam a condição inicial onde os spins das duas réplicas encontram-se alinhados e girados globalmente por $\pi/5$. (Figura retirada da ref. [30])	19
3.5	A probabilidade de sobrevivência $P(t)$ após o sistema evoluir até um tempo t_{max} em função da temperatura T para o modelo Z_{10} . Os círculos abertos ($L = 10$) correspondem a um tempo $T_{max} = 1000$ e os círculos fechados ($L = 20$) correspondem a um tempo $T_{max} = 4000$. (Figura retirada da ref. [30])	20

3.6	A flutuação do dano σ_d em função da temperatura para o modelo Z_{10} . (Figura retirada da ref. [30])	21
3.7	Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T num tempo $t = 500$ para as condições: (a) $\{\theta_i^{(A)}\} = 0$ e $\{\theta_i^{(B)}\} = \pi$; (b) $\{\theta_i^{(A)}\}$ aleatório e $\{\theta_i^{(B)}\} = \{\theta_i^{(A)}\} + \pi$; (c) $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$ aleatórios e independentes; (d) $\{\theta_i^{(A)}\}$ aleatório e $\{\theta_i^{(B)}\} = \{\theta_i^{(A)}\}$ exceto por um único spin $\theta_i^{(B)}$ oposto a $\theta_i^{(A)}$. (Figura retirada da ref. [5])	24
3.8	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras após cada amostra evoluir durante um tempo $t = 1500$. (Figura retirada da ref. [6])	26
3.9	Probabilidade de sobrevivência $P(t)$ em função da temperatura T para diferentes valores de tempo t partindo da condição inicial (c). (Figura retirada da ref. [11])	29
3.10	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais: (a) $D(0) = 1$; (b) $D(0) = 0,5$; (c) $D(0) = 0,05$. A media termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 64$ a cada tempo $t = 10000$. (Figura retirada da ref. [11])	30
3.11	Gráfico log-log do dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função do tempo t para temperaturas em torno de $T_c(q = 2)$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 256$ com uma condição inicial onde $D(0) = 1$ ($\{\sigma_i^A\}$ completamente aleatória e $\{\sigma_i^B\} \neq \{\sigma_i^A\} \forall i$). (Figura retirada da ref. [11])	31

3.12	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q=3,\dots,8$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 64$ amostras num intervalo de tempo $t = 2000$. O dano inicial $D(0) = 1/N$ foi aplicado na rede quadrada de tamanho $L = 50$. Note que na região caótica o dano $\langle D(t) \rangle \rightarrow (q - 1)/q$. (Figura retirada da ref. [12])	33
3.13	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura reduzida T/T_c para o número de estados $q = 3$ e diferentes condições iniciais (ver figura). O dano $\langle D(t) \rangle$ converge para $(q - 1)/q$ na fase de caótica mas mostra um dependência em função das condições iniciais na fase ordenada. (Figura retirada da ref. [12])	34
3.14	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para os números de estados $q = 2, \dots, 8$ numa rede quadrada de tamanho $L = 201$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 10$ amostras e 30000 passos de tempo após o sistema ter termalizado. (Figura retirada da ref. [13])	36
3.15	Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função do tempo t (MCS) para alguns valores de temperatura T em torno de T_1 para os números de estados (a) $q = 2$ e (b) $q = 8$. A linha tracejada mostra a inclinação correspondente à classe de universalidade da percolação direcionada. (Figura retirada da ref. [13])	37
4.1	Representação dos ângulos e vetores no plano bidimensional correspondentes à definição de dano $D(t)$ proposta por Chiu et al.	41
4.2	Probabilidade de sobrevivência $P(t)$ do modelo de Potts com $q = 3$ estados, em função da temperatura T para diferentes valores de tempo t . Este resultado se refere a uma simulação de $M = 100$ amostras numa rede quadrada com $L = 64$ usando a condição inicial (c).	44

4.3	Simulação do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função da temperatura para o modelo de Potts com $q = 3$ estados usando a dinâmica de banho térmico. Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de tempo para cada valor de temperatura T e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.	45
4.4	Dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ do modelo de Potts com $q = 3$ estados, em função do tempo t para as temperaturas $T = 0, 20$ e $T = 0, 99$. Simulação sobre $M = 100$ amostras usando a condição inicial (b) na rede quadrada com $L = 64$	46
4.5	Dano médio $\langle D_\delta \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 2$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras	47
4.6	Dano médio $\langle D_\delta(t = 10000) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os números de estados: (i) $q = 2$, (ii) $q = 3$, (iii) $q = 4$, (iv) $q = 5$, (v) $q = 6$ e (vi) $q = 7$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras numa rede quadrada com $L = 64$. As linhas tracejadas indicam as temperaturas da transição T_1 e T_2	48
4.7	Gráficos log-log do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ e $q = 7$ números de estados. Os valores de temperatura estão em torno da temperatura da segunda transição T_1 de cada modelo. As retas tracejadas servem de guia para a inclinação $0,46$	50
4.8	Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados, partindo das condições iniciais (a), (b) e (c). Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.	51

4.9	Dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 4, 5, 6$ e 7 estados respectivamente. Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.	52
4.10	Dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ estados nas temperaturas $T = 0, 20$ e $T = 0, 99$ partindo da condição inicial (b). Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.	53
4.11	Dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados partindo da condição inicial (b). Cada curva representa o tempo no qual as configurações evoluíram. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$	54
4.12	Dano médio $\langle D_{\delta}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f). A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$	56
4.13	Dano médio $\langle D_{\delta}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os respectivos números de estados: (i) $q = 2$; (ii) $q = 3$; (iii) $q = 4$; (iv) $q = 5$; (v) $q = 6$; (vi) $q = 7$. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f). A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$	57
4.14	Dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com q estados evoluindo de acordo com a dinâmica de Metropolis.	58

4.15	Dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os respectivos números de estados: (i) $q = 2$; (ii) $q = 3$; (iii) $q = 4$; (iv) $q = 5$; (v) $q = 6$; (vi) $q = 7$. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f).	59
4.16	No primeiro gráfico, mostramos o comportamento do valor assintótico do dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ na fase paramagnética em função dos q estados do modelo de Potts. No segundo gráfico, identificamos um comportamento do dano médio como lei de potência em termos de q , ou seja, $D(q) \approx q^{-\gamma}$ com $\gamma = 1,386 \pm 0,001$	60
4.17	Gráfico log-log com o comportamento do dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ e $q = 7$ estados respectivamente. Identificamos a temperatura de transição para $q = 3$ estados em $T_d = 0,995 \pm 0,003$ e para $q = 7$ estados em $T_d = 0,772 \pm 0,002$	62

RESUMO

LOUREIRO, Marcos Paulo de Oliveira, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, Setembro de 2006. **Propagação de danos no modelo de Potts**. Orientador: José Arnaldo Redinz. Co-Orientadores: Marcelo Lobato Martins e Ricardo Reis Cordeiro

Estudamos as transições de fase no modelo de Potts com q estados ($q = 2, \dots, 7$) por meio de simulações de Monte Carlo e propagação de danos. Este modelo apresenta um comportamento crítico rico, com transições de fase de segunda ($q \leq 4$) e primeira ordens ($q \geq 5$). Focamos nossos estudos na questão da dinâmica e do dano que respeitam a invariância rotacional do sistema. Mostramos que, se devidamente escolhidas a função dano e a dinâmica de evolução, o dano apresenta apenas duas fases para todos os valores de q . Neste sentido, a definição de dano e da dinâmica estão diretamente relacionadas com as transições de equilíbrio do modelo. Nós investigamos também a coincidência, ou não, das temperaturas de transição do dano com as temperaturas críticas estáticas do modelo de Potts.

ABSTRACT

LOUREIRO, Marcos Paulo de Oliveira, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa,
September, 2006. **Damage spreading in the Potts model.** Adviser:
José Arnaldo Redinz. Co-Advisers: Marcelo Lobato Martins and Ricardo
Reis Cordeiro

We study the phase transitions in the q -state Potts model (with q from 2 to 7) through Monte Carlo simulations and the damage spreading. This model presents a rich criticality with second- ($q \leq 4$) and first-order ($q \geq 5$) phase transitions. We address here mainly the question of the dynamics and damage definitions, with respect to the rotational invariance symmetry of the system. We show that with proper definitions of damage and dynamics, there are only two phases characterizing the high temperature random phase and a low temperature ordered phase for all values of q . Therefore, these definitions of damage and dynamics for the Potts model are more closely related to the equilibrium transitions in this model. We investigate also the coincidence, or not, of the damage transition temperatures with the equilibrium critical temperatures of the Potts model.

Capítulo 1

Introdução

Desde tempos muito antigos, o homem, por meio de filosofia ou ciência, vem tentando explicar ou mesmo entender o complexo comportamento da natureza. Determinar a importância das variáveis (ou pelo menos aquelas mais influentes) que governam um determinado sistema, podendo assim prever seu comportamento futuro, é, foi e será sempre um empolgante estímulo para o homem. Saber, por exemplo, como os neurônios interagem no sistema nervoso, como se propaga um câncer, como animais detectam suas presas ou predadores em seus ecossistemas, saber até mesmo a trajetória de grãos de areia durante a movimentação das dunas ou desenvolver tecnologias magneto-eletrônicas capazes de transportar ou armazenar dados, são motivações mais que suficientes para colocar uma gama de cientistas atrás destas respostas. Mas sistemas reais são, na maioria das vezes, impossíveis de serem completamente estudados devido ao alto grau de complexidade das variáveis que o influenciam direta ou indiretamente.

A física, por ser em essência uma ciência que estuda os fenômenos do universo, obviamente encontra sérias dificuldades quando se depara com situações reais em que os modelos mais simples, de solução analítica, não se aproximam da realidade.

Devido à enorme dificuldade em se estudar os modelos reais analiticamente, foram desenvolvidas teorias capazes de realizar aproximações. Estas teorias, comumente associadas à Física Estatística, não necessariamente tornaram o trabalho dos físicos mais simples, uma vez que as próprias aproximações envolvem uma série de

álgebras muitas vezes difíceis de serem resolvidas.

Com o advento do processamento de informações por meio de máquinas ou microcomputadores, estas teorias de aproximação puderam ser muito mais bem estudadas e com isso, os sistemas reais puderam ser melhor compreendidos.

Atualmente, o estudo computacional de sistemas complexos tornou-se quase que uma ciência distinta, em que sistemas com um grande número de variáveis podem ser analisados e previsões bastante precisas podem ser feitas em relação a estes sistemas.

Para a implementação computacional destes sistemas, um dos principais métodos utilizados é o de Monte Carlo [1, 2]. Ele consiste basicamente em gerar recursivamente, a partir de uma dada configuração inicial, novas configurações de acordo com uma dinâmica pré-estabelecida que, no caso de sistemas em equilíbrio, conduz à distribuição de Boltzmann. Isto é o que chamamos de uma “cadeia de Markov”, ou seja, a trajetória no espaço de fase de uma determinada configuração no tempo $t + 1$ depende diretamente do estado da configuração no tempo t . O tempo a que nos referimos é conhecido como “passo de Monte Carlo” (MCS) que corresponde ao tempo necessário para que, na média, cada spin seja “visitado” e eventualmente atualizado uma vez. Algumas dinâmicas de evolução serão vistas no decorrer do nosso trabalho.

Exemplos de aplicações dos estudos computacionais podem ser vistos em praticamente todas as áreas da ciência. Estas aplicações vão desde estudos sobre terremotos, fontes de energias, distribuição populacional, trajetórias de corpos celestes, etc, incluindo os exemplos citados no início deste capítulo.

Uma das áreas que despertaram e ainda despertam grande interesse na física de sistemas complexos, é a que está relacionada aos fenômenos magnéticos. Este fato pode ser facilmente entendido uma vez que um dos poucos modelos analíticos não triviais com solução exata está associado ao magnetismo. Este modelo é o ferromagneto de Ising, resolvido analiticamente por Ernst Ising [3] em uma dimensão e por Lars Onsager [4] em duas dimensões na rede quadrada.

Ao mesmo tempo, o grande interesse em estudar os sistemas complexos está na região fora do equilíbrio, durante a etapa que chamamos de transição de fase. O

exemplo mais comum de transição de fase ocorre durante a mudança entre os três estados da água (sólido, líquido e gasoso). Outros exemplos, talvez menos comuns, seriam as duas fases (líquida e gasosa) encontradas por Heike Kamerlingh Onnes para o hélio (He) a baixas temperaturas (prêmio Nobel em 1913) que estão associadas ao fenômeno da supercondutividade e a transição ferromagnética que ocorre em materiais como ferro (Fe) ou níquel (Ni).

O primeiro trabalho consistente a respeito da teoria das transições de fase foi proposto por van der Waals em 1873 e apresentou a teoria que descreveu a “continuidade dos estados líquido e gasoso da matéria”. Posteriormente, Pierre Curie e Pierre Weiss propuseram e desenvolveram uma teoria para a transição ferromagnética.

Dentro da teoria de Landau para o ferromagnetismo, uma transição de fase é descrita através do comportamento de uma grandeza denominada “parâmetro de ordem”, isto é, um parâmetro que apresenta valor não nulo na fase que chamamos de ordenada e nulo na fase desordenada. O parâmetro de ordem é definido de acordo com o sistema físico estudado. No caso do ferromagneto, o parâmetro de ordem natural seria a magnetização espontânea (a campo externo nulo). Para um sistema líquido-gás, o parâmetro de ordem seria a diferença das densidades da fase líquida e da fase gasosa.

Analiticamente, uma transição de fase se caracteriza por singularidades em suas funções termodinâmicas (energia livre e derivadas correspondentes como magnetização e susceptibilidade). Se uma primeira derivada da energia livre for descontínua na temperatura de transição T_c , a transição é dita de primeira ordem. Para transições de segunda ordem, essas primeiras derivadas são contínuas.

Neste trabalho, estudamos as transições de fase no modelo de Potts com q estados na rede quadrada a campo nulo através do método de propagação de danos via simulação de Monte Carlo. O modelo de Potts é uma generalização do modelo de Ising para mais de duas componentes de spin. Ele é um modelo relativamente simples se comparado ao modelo XY [5, 6] ou ANNNI [7], mas apresenta transições de fase de ordens diferentes [8, 9] para certos valores de q (para $q \leq 4$ a transição se caracteriza como de segunda ordem e para $q > 4$ a transição é de primeira ordem para o modelo

bidimensional na rede quadrada). O método de propagação de danos consiste basicamente no monitoramento da evolução temporal de duas ou mais configurações de um mesmo sistema, com diferentes condições iniciais, sujeitas a uma dinâmica específica e a um mesmo ruído térmico. A função importante a ser analisada nesta técnica é conhecida como distância de Hamming ou simplesmente dano. O comportamento do dano e sua relação com o tempo, temperatura, condições iniciais, ou qualquer outro parâmetro relevante, nos fornecem informações sobre a criticalidade do sistema.

É fato notório que as propriedades do dano dependem fortemente da dinâmica de evolução temporal e da própria definição de dano. Um exemplo bastante conhecido é o do ferromagneto de Ising na rede quadrada. No estudo realizado por Stanley et al [10], foram encontradas diferenças no comportamento do dano quando a dinâmica de evolução foi alterada. Resultados mais surpreendentes podem ser vistos em modelos mais complexos (modelo ANNI, modelo Relógio (Z_p), modelo XY, modelo de Potts), onde foram encontradas fases dinâmicas sem correspondentes termodinâmicos. Esses resultados implicam em uma redução no interesse inicial e na esperança que havia com relação ao método da propagação de danos como um método de detecção de fases caóticas, principalmente em modelos sem uma dinâmica intrínseca.

Neste trabalho iremos estudar a propagação de danos no modelo de Potts com q estados. Mostramos que, se devidamente escolhida a função dano $D(t)$ e a dinâmica de evolução de forma a preservar a invariância rotacional do sistema, o dano apresenta então apenas duas fases para qualquer um dos q estados do modelo, diferentemente do que foi proposto em trabalhos anteriores [11, 12, 13] para o modelo de Potts. Mostramos também que, partindo da definição de dano e da dinâmica proposta neste trabalho, o sistema não apresenta nenhum efeito de memória, ou seja, dependência da condição inicial. Vamos discutir também a coincidência, ou não, das temperaturas de transição de dano com as temperaturas críticas estáticas do modelo e a questão da identificação da ordem da transição através do comportamento do dano.

Nos próximos capítulos faremos uma apresentação mais detalhada do modelo de Potts bem como do método de propagação de danos e apresentaremos nossos resultados e discussões.

Capítulo 2

O Modelo de Potts

O Modelo de Potts com q estados [14] é um sistema clássico de interação entre spins em redes cristalinas notavelmente rico do ponto de vista teórico e com várias aplicações experimentais. O modelo, que é uma generalização do modelo de Ising para mais de duas componentes de spin, foi proposto pelo então professor da Universidade de Oxford, Cyril Domb, ao estudante Renfrey B. Potts em 1951 [15] como tema de sua tese de PhD. A idéia do modelo surgiu após H. A. Kramers e G. H. Wannier em 1941 [16] generalizarem o modelo de Ising bidimensional com interações entre spins paralelos e antiparalelos, como um sistema de spins confinados em um plano que podiam assumir 3 estados diferentes (0 , $2\pi/3$ e $4\pi/3$). A idéia de Domb é que seria possível estender o resultado do modelo de Kramers-Wannier para q vetores (estados) localizados em q direções simétricas no plano bidimensional especificadas pelos ângulos

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}, \quad n = 0, 1, \dots, q - 1 \quad (2.1)$$

como mostra a figura 2.1.

Esta forma mais geral do modelo de Ising considera apenas interações entre spins primeiros vizinhos, sendo que estas interações dependem do ângulo formado entre os spins (tratados como vetores). Desta forma, a Hamiltoniana generalizada

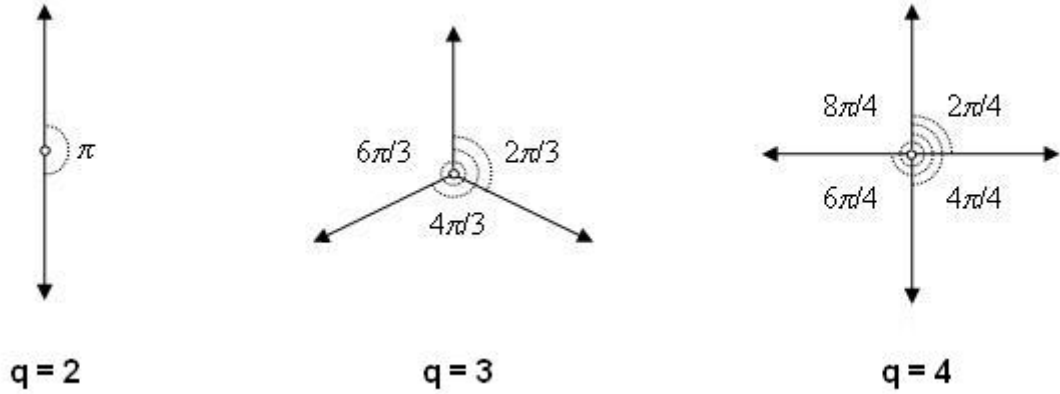


Figura 2.1: Representação do plano bidimensional contendo alguns dos q vetores propostos por Domb.

pode ser escrita como

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J(\theta_{ij}) \quad (2.2)$$

em que a função $J(\theta)$ é 2π -periódica e $\theta_{ij} = \theta_i - \theta_j$ é o ângulo entre os spins vizinhos localizados nos sítios i e j respectivamente.

O modelo específico sugerido por Domb [15], que ficou conhecido como modelo Planar, define a função $J(\theta)$ como

$$J(\theta) = -\epsilon_1 \cos(\theta) \quad (2.3)$$

Usando a mesma abordagem de Kramers-Wannier [16], Potts pôde determinar a temperatura crítica (ou temperatura de Curie ou ponto de Curie) para o modelo Planar na rede quadrada com $q=2, 3$ e 4 números de estados [8]. Devido à impossibilidade de estender os resultados para um número de estados $q>4$, Potts sugeriu uma nova forma de definir a função $J(\theta)$, em que os estados são discretizados da forma

$$J(\theta_{ij}) = \epsilon_2 \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j) \quad (2.4)$$

em que δ_{Kr} representa a função Delta de Kronecker ($\delta_{Kr}(\alpha, \alpha) = 1$, $\delta_{Kr}(\alpha, \beta) = 0$ com $\alpha \neq \beta$). As constantes ϵ_1 e ϵ_2 são constantes de acoplamento, sendo que, para $\epsilon_2 > 0$ o modelo de Potts é ferromagnético e para $\epsilon_2 < 0$ antiferromagnético¹.

O modelo desenvolvido por Potts se destacou no estudo do comportamento crítico sendo mais rico e mais geral que o modelo de Ising. Ele ficou conhecido como modelo de Potts Padrão (ou modelo de Ashkin-Teller-Potts). Note que ambos os modelos coincidem com o modelo de Ising quando o número de estados é $q = 2$.

Usando a simetria do espaço de estados $q - 1$ dimensional, podemos definir, de forma alternativa, a função Delta de Kronecker em termos de q vetores unitários no espaço $q - 1$ dimensional como

$$\delta_{Kr}(a, b) = \frac{1}{q} [1 + (q - 1) \hat{S}_a \bullet \hat{S}_b] \quad (2.5)$$

em que \hat{S}_a e \hat{S}_b , com a e $b = 0, 1, \dots, q - 1$, representam q vetores unitários que apontam para as q direções simétricas do hipertetraedro² de dimensão $q - 1$.

Podemos observar exemplos dos q vetores no espaço de estados $q - 1$ dimensional na figura 2.2.

Um caso particular onde o modelo Planar e o modelo Padrão tornam-se idênticos é quando as constantes de acoplamento magnético para os estados $q = 2$ e $q = 3$ assumem, respectivamente, as seguintes relações: $\epsilon_2 = 2\epsilon_1$ e $\epsilon_2 = 3\epsilon_1/2$. Aqui ambos os modelos passam a ter o mesmo grau de degenerescência e o mesmo “gap” de energia.

Além da interação entre primeiros vizinhos, o hamiltoniano generalizado do modelo de Potts contém os termos de interação de longo alcance (entre segundos, terceiros, ..., n-ésimos vizinhos) bem como o termo de interação com o campo magnético

¹Materiais antiferromagnéticos (MnO_2) são aqueles cuja interação de troca força átomos vizinhos a assumirem orientações de spins antiparalelos. Tais materiais apresentam um magnetismo efetivo externo muito pequeno ou mesmo nulo.

²Tetraedro é um sólido geométrico cuja superfície é composta por 4 faces triangulares. O hipertetraedro é um tetraedro em mais de três dimensões.

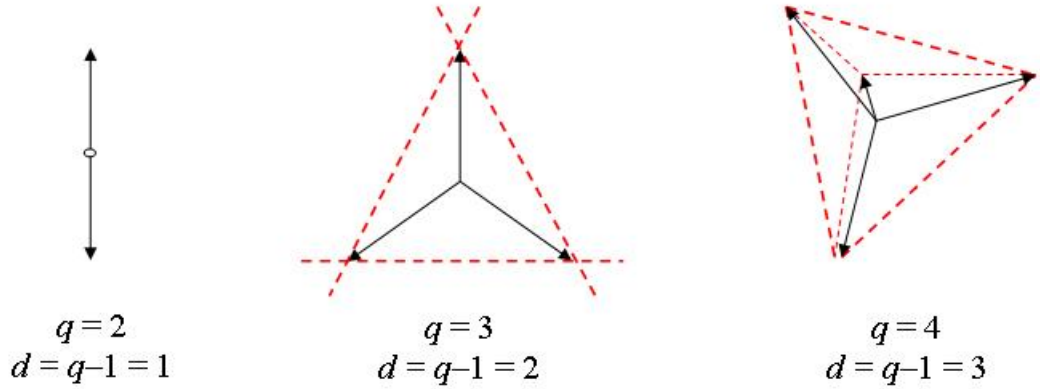


Figura 2.2: Representação dos q vetores no espaço de estado $q - 1$ dimensional.

externo, como mostra a equação abaixo:

$$-\beta H = B \sum_i \delta_{Kr}(\sigma_i, 0) + \xi \sum_{(i,j)} \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j) + \xi_3 \sum_{(i,j,k)} \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k) + \dots \quad (2.6)$$

com $\beta = 1/k_B T$, e $\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$ especifica o estado do spin do i -ésimo sítio. Note que a função Delta de Kronecker é unitária para toda combinação de spins no mesmo estado, ou seja,

$$\begin{aligned} \delta_{Kr}(\sigma_i, \dots, \sigma_n) &= 1, \quad \text{se } \sigma_i = \dots = \sigma_n \\ &= 0, \quad \text{se houver um ou mais estados diferentes} \end{aligned}$$

Aqui, $\xi = \epsilon_2, \xi_n$ com $n > 3$ é a constante de acoplamento magnético da interação de blocos de n spins e B representa um campo magnético externo na direção do estado 0.

Definido o Hamiltoniano do modelo, podemos escrever a função de partição como:

$$Z(q; B, \xi, \xi_n) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} \quad (2.7)$$

Esta função, que nos permite determinar todas as propriedades físicas relevan-

tes de um sistema, está associada à normalização da probabilidade P_i do sistema estar em um dos seus estados acessíveis com energia E_i dada por

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (2.8)$$

Tomando o limite termodinâmico (ou seja, limite no qual o valor das grandezas termodinâmicas, como compressibilidade e susceptibilidade magnética, energia livre, calor específico, etc, sofrem desvios relativos extremamente pequenos pois o sistema é extremamente grande ($N \rightarrow \infty$)) podemos escrever a energia livre magnética (ou energia livre de Gibbs) por sítio como

$$-\beta g(q; B, \xi, \xi_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(Z(q; B, \xi, \xi_n)) \quad (2.9)$$

Deste modo, podemos então escrever algumas das funções termodinâmicas como a energia interna por sítio

$$u(q; B, \xi, \xi_n) = -\frac{\partial}{\partial \beta} g(q; B, \xi, \xi_n) \quad (2.10)$$

e a magnetização por sítio

$$m(q; B, \xi, \xi_n) = -\frac{\partial}{\partial B} g(q; B, \xi, \xi_n) \quad (2.11)$$

As funções termodinâmicas são fundamentais para determinarmos a ordem da transição de fase no modelo de Potts. O modelo de Potts apresenta transições de ordens diferentes de acordo com o número de estados. Para $q \leq 4$ o modelo apresenta uma transição de segunda ordem, e para $q > 4$ o modelo apresenta uma transição de primeira ordem, caracterizada pela descontinuidade das funções termodinâmicas em $T_c = 1/\ln(1 + \sqrt{q})$.

Do ponto de vista experimental, o modelo de Potts possui relação com diversos modelos em física estatística como, por exemplo, o modelo de vértices com regra de gelo, percolação, redes de resistores, etc [8]. Outras aplicações podem ser vistas em

sistemas de adesão celular [17, 18], modelos de espumas [19], etc.

Capítulo 3

O Método de Propagação de Danos

O método de propagação de danos, apesar de estar fortemente incorporado à Física no estudo de sistemas dinâmicos, foi proposto por Stuart Kauffman [20] num contexto biológico para o estudo dinâmico de genes e suas mutações. A idéia inicial consistia em estudar a influência de pequenas mutações (danos) durante a evolução temporal desses genes. Em seu modelo, Kauffman definia seus genomas como uma seqüência de bits que evoluíam segundo regras simples, do tipo autômato celular. Ele considerava uma determinada seqüência $\{\sigma_i^{(A)}(t)\}$ como sendo um genoma “normal”, enquanto que uma outra seqüência $\{\sigma_i^{(B)}(t)\}$ representava esse mesmo genoma após sofrer uma mutação (um dano). Kauffman considerou então a diferença entre as duas seqüências binárias como sendo o dano (ou distância de Hamming). Dessa forma, o dano de Kauffman, num tempo t , foi definido como

$$\text{Distância}(t) = D(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\sigma_i^A(t) - \sigma_i^B(t)| \quad (3.1)$$

em que N representa o tamanho das seqüências.

Estudando a evolução temporal dos genes através da medida do dano $D(t)$, foi possível observar o quanto uma mudança nas condições iniciais de sistemas dinâmicos, influenciava a trajetória no espaço de fase. Quando duas configurações iniciais evoluem no tempo, de acordo com uma determinada faixa de parâmetros, e estas trajetórias seguem próximas no espaço de fase até coalescerem, o sistema é dito encontrar-se em

uma fase congelada ($D(t) \rightarrow 0$). Por outro lado, se duas configurações se mantêm afastadas uma da outra indefinidamente, o sistema é dito estar em uma fase ativa ($D(t) > 0$). Caso esse afastamento das trajetórias seja observado mesmo para um dano inicial $D(0)$ muito pequeno (apenas um bit ($D(0) = 1/N$)), podemos dizer que o sistema se encontra em uma fase caótica.

Estatisticamente, o estudo do método de propagação de danos não é o mesmo feito no modelo de autômatos de Kauffman cujas regras de evolução temporal são determinísticas. As evoluções dos sistemas físicos envolvem um ruído térmico¹ gerado computacionalmente através de uma seqüência de números aleatórios que toma parte no processo de decisão da evolução temporal do sistema.

Então, para que as duas configurações pudessem evoluir conjuntamente (mantendo assim a idéia inicial de Kauffman), sem que a regra de evolução fosse alterada entre elas, determinou-se que a evolução do sistema fosse regida pela mesma seqüência de números aleatórios, ou seja, o mesmo ruído térmico.

Faremos, em seguida, uma revisão de alguns trabalhos que consideramos importantes, que abordam a aplicação do método de propagação de danos em alguns sistemas de spins.

3.1 Modelo de Ising

A técnica de propagação de danos é bastante usada no estudo de fenômenos críticos em sistemas de spins. A aplicação da técnica no modelo ferromagnético de Ising unidimensional [21], bidimensional [10, 22], bidimensional com campo conjugado [23], e tridimensional [22] mostrou como a dinâmica usada para simular o sistema físico têm influência nos resultados.

O modelo de Ising [3, 24, 25], proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo estudar o fenômeno do ferromagnetismo de momentos localizados numa rede linear (unidimensional). O modelo

¹No estudo da Física do Estado Sólido, o ruído térmico e conhecido também como ruído branco ou ruído Johnson, e é gerado pela movimentação dos elétrons livres em um meio condutor

inicial considerava as interações de um spin σ_i com seus primeiros vizinhos σ_{i+1} e σ_{i-1} . Para um dado conjunto de spins $\{\sigma_i\}$ a Hamiltoniana de Ising é definida numa rede hipercúbica² da forma

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (3.2)$$

em que o spin $\sigma_i = \pm 1$ (com $i = 1, 2, \dots, N$) se encontra numa rede cristalina em d dimensões, $\langle ij \rangle$ representa a soma sobre todos os pares de spin primeiros vizinhos na rede, J é a constante de acoplamento ferromagnético ($J > 0$) e B representa o campo magnético externo. Existem generalizações naturais do modelo de Ising como, por exemplo, a introdução de interações entre segundos vizinhos, ou a variável de spin σ_i assumindo mais de dois valores.

O modelo unidimensional, resolvido analiticamente por Ising, não apresenta transição de fase³ a uma temperatura $T_c \neq 0$. Na rede quadrada, o modelo foi resolvido exatamente (a campo externo nulo) por Onsager em 1944. O modelo apresentou uma transição de fase ferromagnética de segunda ordem a uma temperatura $T_c = 1/\ln(\sqrt{2} + 1)$. Já o modelo tridimensional ainda não possui solução analítica exata, mas, por meio das aplicações dos cálculos numéricos realizados computacionalmente, sabemos basicamente todas as suas características.

3.1.1 Ferromagneto de Ising na Rede Quadrada

Stanley et al [10] aplicaram o método de propagação de danos ao ferromagneto de Ising na rede quadrada. Para isto, eles geraram uma configuração inicial aleatória e a evoluíram durante um certo transiente de tempo t_T até que esta configuração atingisse o equilíbrio. Logo em seguida, eles geraram uma segunda configuração (réplica) onde um único spin foi alterado (flipado) em seu centro, de modo a gerar um dano inicial $D(0) = 1/N$ (em que $N = L^2$ é o número de spins na rede quadrada de lado L).

²Uma rede hipercúbica unidimensional representa uma cadeia linear, assim como para duas, três dimensões, representa uma rede quadrada e cúbica simples.

³O “erro” de Ising foi generalizar este resultado para duas ou mais dimensões.

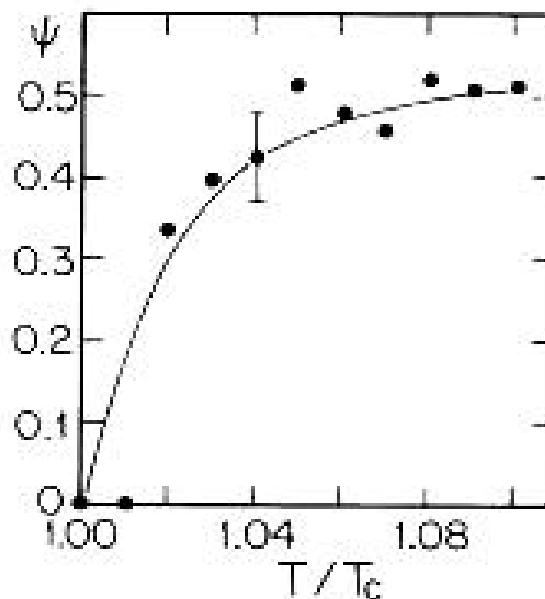


Figura 3.1: Dependência do parâmetro de ordem ψ em função da temperatura para uma simulação de Monte Carlo via dinâmica de Glauber. (Figura retirada da ref. [10])

Daí em diante, tanto a configuração inicial quanto a réplica passaram a evoluir sob a mesma dinâmica e com o mesmo ruído térmico.

Especificamente, Stanley et al usaram duas dinâmicas para evoluir o sistema:

1. a Dinâmica de Glauber, em que as configurações foram varridas como numa “máquina de escrever”, mudando os spins com probabilidade

$P = \exp(-\Delta/T) / [\exp(\Delta/T) + \exp(-\Delta/T)]$, sendo 2Δ a diferença de energia entre a configuração atual e a configuração “flipada”.

2. a Dinâmica Q2R, onde o sistema é varrido de maneira alternada (como num tabuleiro de xadrez), flipando o spin caso esta mudança não altere a energia.

Eles então passaram a monitorar o parâmetro de ordem (ou desordem) ψ definido como a média sobre todas as amostras, da fração dos sítios danificados. Na figura 3.1 mostramos o resultado obtido para o dano ψ em função da temperatura após o

sistema ter evoluído sob a dinâmica de Glauber durante um certo tempo t . Foi detectada uma temperatura T_d para a qual existe uma transição de fase no dano, ou seja, onde o comportamento do dano, para $T < T_d$, é nulo (fase congelada) e para $T > T_d$ não nulo (fase caótica) tendendo assintoticamente (no limite termodinâmico) à 0,5. A temperatura T_d , referente ao ponto de transição, coincide, considerando a margem de erro, com a temperatura crítica estática T_c do modelo em $d = 2$. Na dinâmica Q2R o dano nunca se anula, mas existe uma diferença cinética a uma determinada energia crítica E_c , onde acima de E_c o crescimento do dano se dá de maneira bem mais rápida do que abaixo de E_c .

Um fato interessante é que, no estudo do ferromagneto de Ising bidimensional realizado em [10], foram encontradas diferenças na propagação do dano, tanto na fase de baixa temperatura ($T < T_d$) quanto na fase de alta temperatura ($T > T_d$), quando a dinâmica foi alterada de Glauber para Q2R, o que revelou que o caráter da propagação de dano não é o mesmo para os dois modelos estudados devido à dependência da propagação com a dinâmica de evolução.

3.1.2 Ferromagneto de Ising na Rede Cúbica

Em um outro trabalho, Wang et al [26] estudaram o modelo de Ising na rede cúbica via simulação de Monte Carlo com a dinâmica de banho térmico e, diferentemente do resultado obtido em [10], eles obtiveram valores de dano não nulo somente abaixo do ponto crítico $T_d \approx T_c$ ($d = 3$). Eles aplicaram o método de propagação de danos partindo de duas condições iniciais diferentes. Na primeira, era criada uma configuração inicial completamente aleatória para a réplica A enquanto a réplica B era gerada a partir da inversão dos spins da réplica A, o que resulta num dano inicial local e global de 100%. Na segunda condição, tanto a réplica A quanto a réplica B foram geradas aleatoriamente sem correlação ($D(0) = 1/2$). O valor médio do dano $\langle D(t) \rangle$, sobre todas as amostras simuladas após entrarem em equilíbrio térmico, obtido em [26] está mostrado na figura 3.2.

Com base nesses resultados, os autores indicam a existência de duas fases dinâmicas distintas para o ferromagneto de Ising em $d = 3$. Uma fase onde o dano

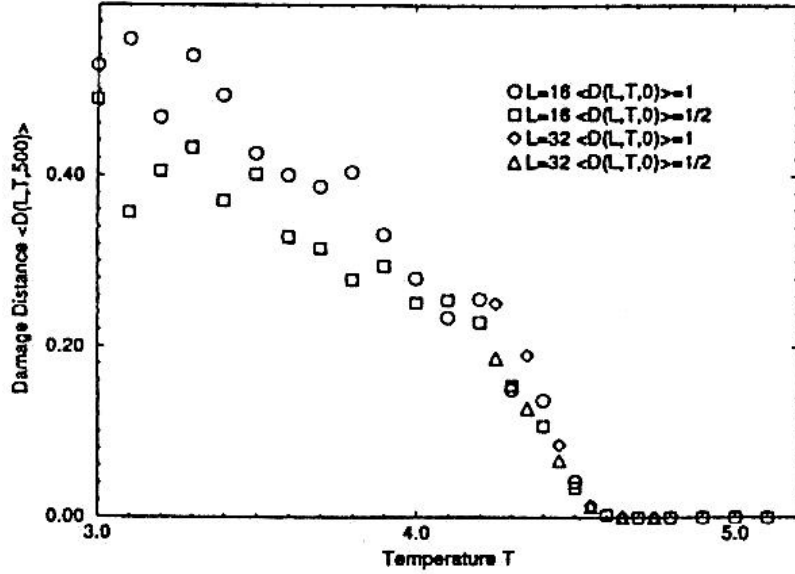


Figura 3.2: Dano médio sobre todas as amostras para o modelo de Ising em $d = 3$ em função da temperatura. (Figura retirada da ref. [26])

médio $\langle D(t = 500) \rangle$ se anula rapidamente para todas as temperaturas $T > T_d \approx T_c(d = 3) = 4,48 \pm 0,05$, e uma fase a baixas temperaturas onde o dano no tempo $t=500$ se mantém não nulo e depende ligeiramente do dano inicial ($T < T_d$).

A discrepância entre os resultados obtidos em [10] e [26] para a natureza da fase a baixas temperaturas do modelo de Ising, se congelada ou caótica, tem sua origem na diferença entre as dinâmicas utilizadas para simular o sistema. A razão principal para a diferença entre os resultados para as diferentes dinâmicas, de Glauber e banho térmico, decorre das definições das probabilidades de transição. Mais especificamente, na dinâmica de banho térmico para o modelo de Ising, o estado do spin σ_i no tempo $t + 1$ é determinado através da comparação entre um número aleatório z com a probabilidade $P_i^{(\sigma=1)} = \left\{ 1 + \exp \left[-2J \sum_j \sigma_j(t) / k_B T \right] \right\}^{-1}$ de que o spin evolua para o estado 1 (a soma em P_i é sobre os spins σ_j primeiros vizinhos de σ_i). Por outro lado, na dinâmica de Glauber, esse número aleatório deve ser comparado com a probabilidade $P_i^{(FLIP)} = \left\{ 1 + \exp \left[2J \sigma_i(t) \sum_j \sigma_j(t) / k_B T \right] \right\}^{-1}$ de que o estado do spin no tempo t venha a ser alterado em $t + 1$. Portanto dependendo do valor do spin σ_i no

tempo t , o número aleatório z será comparado com limiares que podem ser diferentes nas duas dinâmicas. Em particular, para $T \rightarrow \infty$, onde obtemos $P_i = P_i^{(FLIP)} = 1/2$, se considerarmos que os spins σ_i^A da réplica A e σ_i^B da réplica B estão no tempo t em estados diferentes (e portanto o dano local neste sítio vale 1), vemos que no tempo $t + 1$ ambos os spins irão para o mesmo estado na dinâmica de banho térmico (e portanto o dano se anula), enquanto na dinâmica de Glauber estes serão conjuntamente invertidos ou não, mantendo o dano do tempo t intacto.

3.2 Aplicações do método em modelos mais complexos

Além do ferromagneto de Ising, o método de propagação de danos tem sido utilizado para investigar uma grande variedade de sistemas como, por exemplo, autômatos celulares [27], modelo XY ferromagnético [5, 6], modelo de Heisenberg [28], modelo de Potts [11, 12, 29, 13], modelo ANNNI [7], relógio com p -estados [30], modelo N-vetorial discreto [31], modelo Ashkin-Teller [29], vidros de spins [32, 33, 34, 35], modelos de evolução de espécies [36], jogos de imitação [37], fogo em florestas [38], distribuição política de votos [39], sistema imunológico [40], etc. Iremos discutir aqui alguns modelos mais diretamente relacionados ao nosso trabalho.

3.2.1 Modelo Relógio na rede quadrada

O modelo relógio com p estados (ou modelo simétrico Z_p) que será visto nesta subseção, é uma generalização que se situa com relação ao grau de complexidade, entre o modelo de Ising ($p = 2$) e o modelo XY ($p = \infty$). Ele possui um Hamiltoniano clássico dado por

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (3.3)$$

em que $\langle ij \rangle$ refere-se à soma sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos, J é a constante de acoplamento ferromagnético ($J > 0$) e \hat{S}_i (\hat{S}_j) é o vetor unitário que

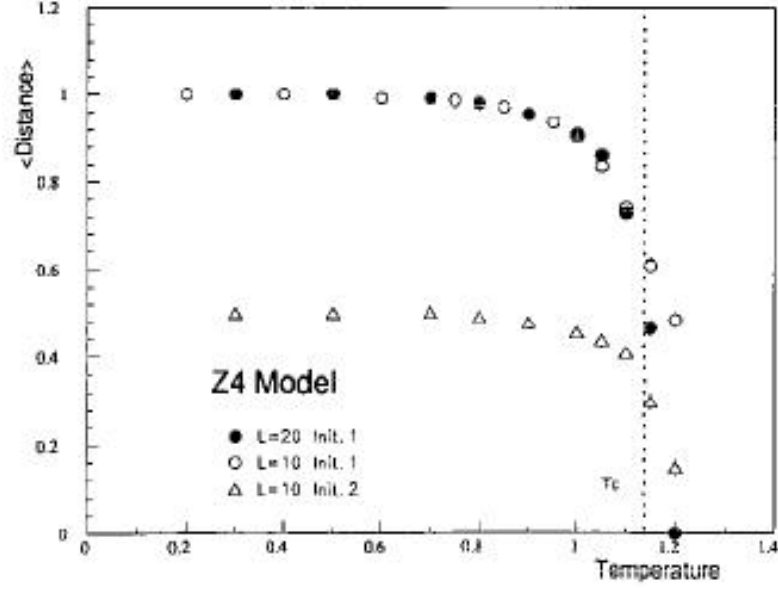


Figura 3.3: Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo Z_4 . Para os círculos abertos e fechados vale a condição inicial (1); para os triângulos abertos, vale a condição inicial (2). (Figura retirada da ref. [30])

representa o spin no sítio i (j) onde sua orientação no plano é quantizada, ou seja, o ângulo que o vetor \hat{S}_i (\hat{S}_j) faz com uma direção fixa no plano, θ_i (θ_j), assume p valores dados por

$$\theta_i = n_i \frac{2\pi}{p}, \quad n_i = 0, 1, \dots, p-1 \quad (3.4)$$

Em termos da variável angular θ_i (θ_j), a Hamiltoniana do modelo pode ser escrita como

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (3.5)$$

Leroyer et al [30] estudaram as transições de fase dinâmicas para o modelo relógio com os números de estados $p = 4, 5, 6, 7$ e 10 , usando a técnica de propagação de danos. Basicamente, o que os autores fizeram foi gerar duas configurações de spins

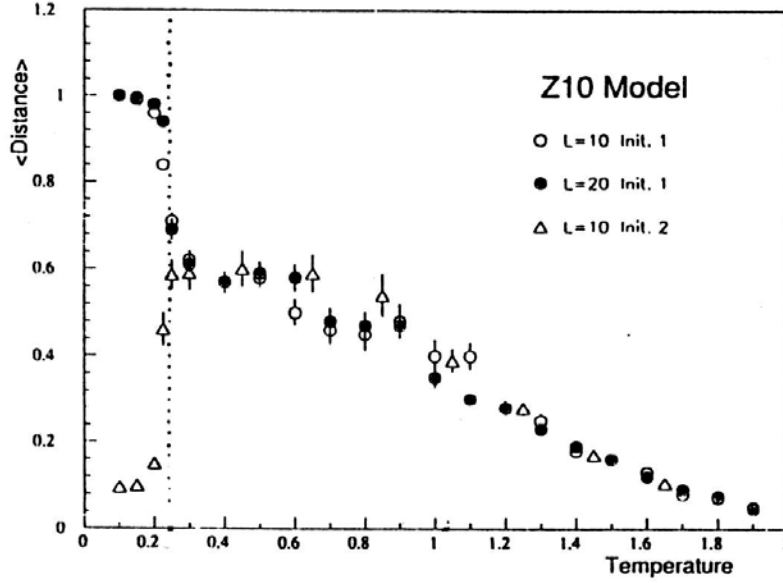


Figura 3.4: Dano médio das amostras sobreviventes $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo Z_{10} . Os círculos abertos ($L = 10$) e fechados ($L = 20$) representam a condição inicial (1); os triângulos abertos ($L = 10$) representam a condição inicial onde os spins das duas réplicas encontram-se alinhados e girados globalmente por $\pi/5$. (Figura retirada da ref. [30])

com diferentes condições iniciais $\{\theta_i^{(A)}(0)\}$ e $\{\theta_i^{(B)}(0)\}$, as evoluírem via simulação de Monte Carlo usando a dinâmica de banho térmico por um certo tempo t (suficiente para as configurações termalizarem), e em seguida, compararam os spins θ_i^A e θ_i^B medindo a distância (o dano) entre eles dado por

$$\begin{aligned} D_i(t) &= \frac{|\hat{S}_i^{(A)} - \hat{S}_i^{(B)}|^2}{4} \\ &= \frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\theta_i^{(A)}(t) - \theta_i^{(B)}(t) \right) \right] \end{aligned}$$

Assim, a média do dano sobre os L^2 spins da rede quadrada é dada por

$$D(t) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \left[1 - \cos \left(\theta_i^{(A)}(t) - \theta_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (3.6)$$

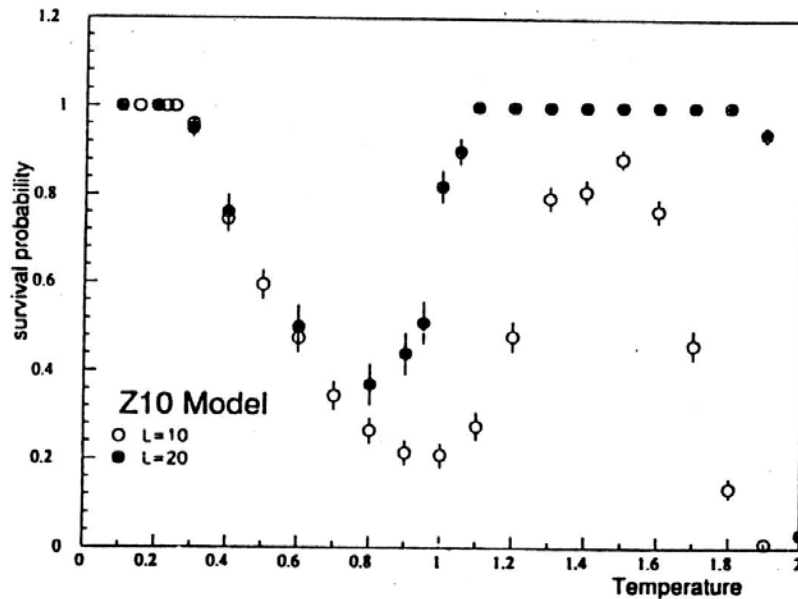


Figura 3.5: A probabilidade de sobrevivência $P(t)$ após o sistema evoluir até um tempo t_{max} em função da temperatura T para o modelo Z_{10} . Os círculos abertos ($L = 10$) correspondem a um tempo $T_{max} = 1000$ e os círculos fechados ($L = 20$) correspondem a um tempo $T_{max} = 4000$. (Figura retirada da ref. [30])

A figura 3.3 mostra o resultado do dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura para o modelo Z_4 usando as seguintes configurações iniciais:

1. $\{\theta_i^{(A)}(0)\}=0$ e $\{\theta_i^{(B)}(0)\}=\pi$ (ordenadas e opostas) $\rightarrow D(0) = 1$;
2. $\{\theta_i^{(A)}(0)\}=0$ e $\{\theta_i^{(B)}(0)\}=2\pi/p$ (ordenadas e ortogonais) $\rightarrow D(0) = 2/p$.

Do ponto de vista termodinâmico, os resultados obtidos em [30] estão de acordo, para $p = 4$, com as duas fases obtidas no modelo de Ising. Estas fases apresentam uma transição de segunda ordem em $T_c(Z_4) = \frac{1}{2}T_c(Ising) = [\ln(1 + \sqrt{2})]^{-1} \approx 1,135$ separadas por uma região “congelada” a baixas temperaturas (onde o parâmetro de ordem é $m \approx 1$) e uma região desordenada (onde o parâmetro de ordem é $m \approx 0$) à altas temperaturas. A temperatura de transição do dano está bem próxima da temperatura termodinâmica T_c ($1, 1 \leq T \leq 1,2$).

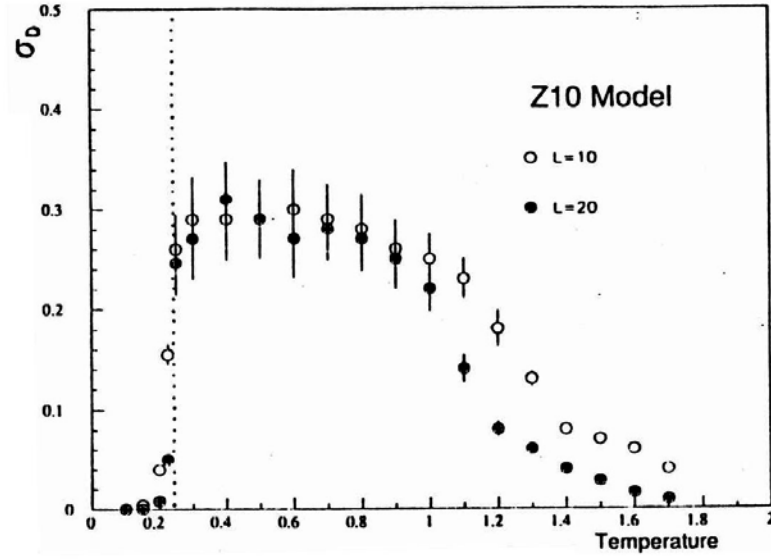


Figura 3.6: A flutuação do dano σ_d em função da temperatura para o modelo Z_{10} . (Figura retirada da ref. [30])

O modelo Z_p para $p \rightarrow \infty$ apresenta uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless (KT) [41] a uma temperatura crítica $T_c(Z_\infty) = T_{KT} \approx 0,9$. Para $p \geq 5$, foram observadas [30] duas novas fases entre a fase congelada (fase ferromagnética estática) à baixa temperatura e a fase desordenada (fase paramagnética estática) à alta temperatura. A figura 3.4, mostra o dano $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura, para o modelo relógio com $p = 10$ (Z_{10}). Foi identificada a fase congelada à baixas temperaturas ($T < T_3 \approx 0,24$) onde o dano $\langle d(t) \rangle$ é não nulo mas depende da condição inicial. Neste intervalo de temperatura, a probabilidade de sobrevivência $P(t) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} (M_1(t)/M) = 1$ (onde $M_1(t)$ é o número de amostras cujo dano $D(t) \neq 0$ e M é o número total de amostras) e a flutuação do dano $\sigma_d(t) = (\langle d^2(t) \rangle - \langle d(t) \rangle^2)^{1/2} \approx 0$, como mostram as figuras 3.5 e 3.6.

A segunda fase foi caracterizada no intervalo de temperatura $T_3 \leq T \leq T_2 \approx 1,05$ onde o dano $\langle d(t) \rangle$ é não nulo e independente das condições iniciais, $P(t)$ é pequena e as flutuações do dano $\sigma_d(t)$ são altas (identificada com a fase de equilíbrio de ondas de spins). A terceira fase, caracterizada entre $T_2 \leq T \leq T_1 \approx 2,0$ que difere da primeira pela probabilidade $P(t) \approx 1$ e $\sigma_d(t) \approx 0$ (uma fase puramente dinâmica

sem equivalente estático) e a última fase (fase paramagnética estática) caracterizada à temperaturas $T > T_1$, onde $\langle d(t) \rangle \geq P(t) = \sigma_d(t) = 0$.

3.2.2 Modelo XY Bidimensional

O modelo XY pode ser considerado como uma extensão do modelo relógio (modelo Z_p) onde a variável de estados p é contínua. O modelo, que apresenta uma transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless [41], é bastante rico do ponto de vista teórico e experimental, sendo protótipo, por exemplo, de filmes superfluidos, junções Josephson e redes de lipídeos.

Neste modelo, a representação do spin clássico pode ser feita por meio de ângulos θ_i no plano ($0 \leq \theta_i \leq 2\pi$). A Hamiltoniana de uma dada configuração de spins $\{\theta_i\}$ é definida como

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (3.7)$$

em que $\langle ij \rangle$ representa a soma sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos na rede.

Golinelli et al [5] estudaram o modelo XY bidimensional na rede quadrada através do método de propagação de danos. O estudo feito por meio de simulações de Monte Carlo, consistia inicialmente em gerar duas configurações (réplicas) $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$, segundo condições iniciais específicas (ver legenda da figura 3.7) e evoluí-las por meio da dinâmica de Metropolis até o equilíbrio. Em seguida, medir a distância entre cada um dos L^2 respectivos sítios das réplicas $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$.

Para evoluir as configurações $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$ no tempo, varreu-se cada um dos L^2 sítios da rede aleatoriamente durante um intervalo de tempo microscópico (isto é, tempo de se modificar (ou não) um único spin da rede) dado por $\Delta\tau = 1/L^2$. Para cada spin, uma nova configuração pseudo-aleatória θ'_i pode (ou não) ser aceita com a seguinte condição:

- se $H_i(\theta'_i) \leq H_i(\theta_i)$ então a nova configuração θ'_i é aceita;

- se $H_i(\theta'_i) > H_i(\theta_i)$ então $\theta_i = \theta'_i$ com probabilidade $P_i = \exp[(H_i(\theta_i) - H_i(\theta'_i))/T]$, senão o spin se mantém na configuração θ_i .

Como as duas réplicas estão submetidas a um mesmo ruído térmico, as trajetórias no espaço de fase de $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$ são correlacionadas. Isto implica que, se depois de um certo tempo t (tempo macroscópico, ou tempo de um passo de Monte Carlo) a configuração $\{\theta_i^{(A)}\}$ se igualar à configuração $\{\theta_i^{(B)}\}$, então elas permaneceram assim para sempre. A definição de dano dada por Golinelli et al define a distância (dano) entre os spins θ_i^A e θ_i^B como

$$D(t) = \frac{1}{2N} \sum_i \left[1 - \cos \left(\theta_i^{(A)}(t) - \theta_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (3.8)$$

onde $D(t)$ depende do número de spins $N = L^2$ (L representa o tamanho da rede quadrada), da temperatura T , do tempo t , das condições iniciais $\{\theta_i^A(0)\}$ e $\{\theta_i^B(0)\}$ e do ruído térmico. A figura 3.7 mostra os resultados para o dano médio entre as amostras que sobreviveram num total de M amostras.

Os resultados obtidos deixam claro a presença de três fases dinâmicas no modelo. Uma fase a altas temperaturas ($T > T_1$) onde o dano se anula sempre, uma à temperaturas intermediárias ($T_2 < T < T_1$) para a qual o dano é diferente de zero e independente da condição inicial, e uma terceira em $T < T_2$ para a qual o dano é não nulo, mas dependente da condição inicial. Essa mesma estrutura de fases foi obtida para o modelo ANNNI em $d = 2$ (com a dinâmica de banho térmico) [7] para o qual (como também ocorre no vidro de spin $\pm J$ em $d = 3$ [32, 34]) a transição mais baixa é consistente com a sua equivalente estática e a transição mais alta está próxima à transição de percolação de agregados geométricos de spins correlacionados [5, 42].

Golinelli et al concluem que o dano independe do tamanho do sistema e que para todos os tamanhos, o dano de uma determinada configuração inicial é o mesmo no limite termodinâmico. Com relação às temperaturas, eles constatam que T_2 coincide com a temperatura crítica do modelo XY ($T_2 \approx T_{KT}$) (dentro da precisão dos resultados), e que a temperatura da segunda transição ($T_1 \approx 2T_{KT}$) pode ter relação com alguma propriedade de equilíbrio do sistema, como efeito de memória ou um

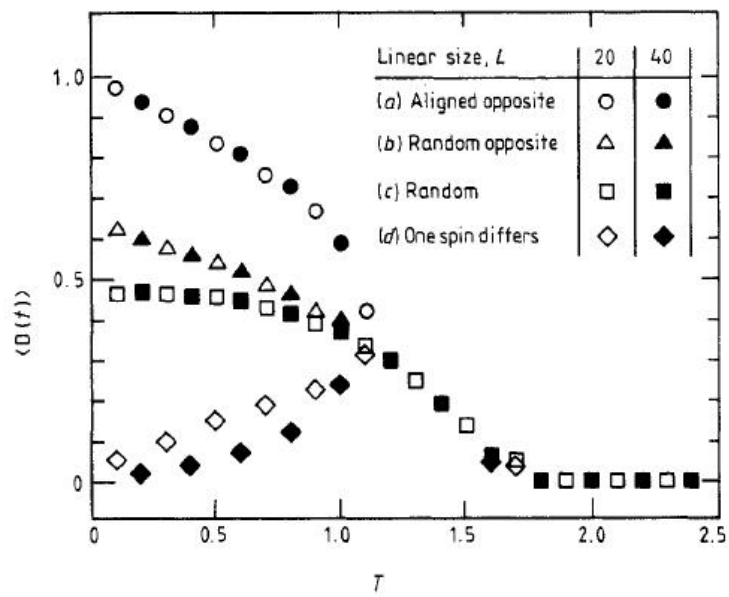


Figura 3.7: Dano médio sobre as amostras que sobreviveram $\langle d(t) \rangle$ em função da temperatura T num tempo $t = 500$ para as condições: (a) $\{\theta_i^{(A)}\} = 0$ e $\{\theta_i^{(B)}\} = \pi$; (b) $\{\theta_i^{(A)}\}$ aleatório e $\{\theta_i^{(B)}\} = \{\theta_i^{(A)}\} + \pi$; (c) $\{\theta_i^{(A)}\}$ e $\{\theta_i^{(B)}\}$ aleatórios e independentes; (d) $\{\theta_i^{(A)}\}$ aleatório e $\{\theta_i^{(B)}\} = \{\theta_i^{(A)}\}$ exceto por um único spin $\theta_i^{(B)}$ oposto a $\theta_i^{(A)}$. (Figura retirada da ref. [5])

ponto de desordem [43].

3.2.3 Modelo XY bidimensional: evidência de apenas duas fases dinâmicas

Com o objetivo de demonstrar que as três fases encontradas em [5] são consequência direta da dinâmica escolhida, Chiu et al [6] estudaram os efeitos da dinâmica na propagação de danos no modelo XY bidimensional. Eles modificaram a dinâmica e a definição do dano para preservar a simetria rotacional do Hamiltoniano e assim encontraram apenas duas fases no sistema.

Em seu estudo, os autores repetem basicamente os procedimentos usados por Golinelli et al, mas, ao invés de mudar a configuração do spin θ_i para θ'_i (onde θ'_i é escolhido independentemente de θ_i), o modelo [6] considera que o novo spin $\theta'_i = \theta_i + \Delta\theta$ onde $\Delta\theta$ está uniformemente distribuído entre $[-\delta, \delta]$, sendo δ uma função da temperatura. Como a determinação do novo spin θ'_i está relacionada com o antigo spin θ_i , os autores garantem, em seu modelo, que a dinâmica preserva invariância rotacional do sistema, ou seja, se uma configuração inicial $\{\theta_i(0)\}$ evolui no tempo t para a configuração $\{\theta_i(t)\}$, então uma configuração inicial $\{\theta_i(0) + \phi\}$ matém a invariância rotacional evoluindo para $\{\theta_i(t) + \phi\}$. O fato da dinâmica de Golinelli et al não respeitar esta invariância rotacional pode ser observado na figura 3.7, que mostra duas configurações inicialmente opostas ($D(0) = 1$) evoluindo, para altas temperaturas, para duas configurações aleatórias e paralelas (em média) em que $D(t) = 0$.

Para definirem a função dano $D(t)$, basicamente o que Chiu et al observaram foi que duas configurações giradas de um ângulo global ϕ são fisicamente equivalentes, sendo que este simples fato não foi levado em conta no trabalho anterior [5]. Os autores definiram uma função dano que respeita esta simetria, ou seja, duas configurações $\{\theta_i\}$ e $\{\theta_i + \phi\}$, quando comparadas, apresentam dano nulo sendo, portanto, são equivalentes.

Para a determinação do dano entre as configurações, primeiramente os autores giraram de um mesmo ângulo ϕ todos os spins de um dos sistemas, de forma a alinhar

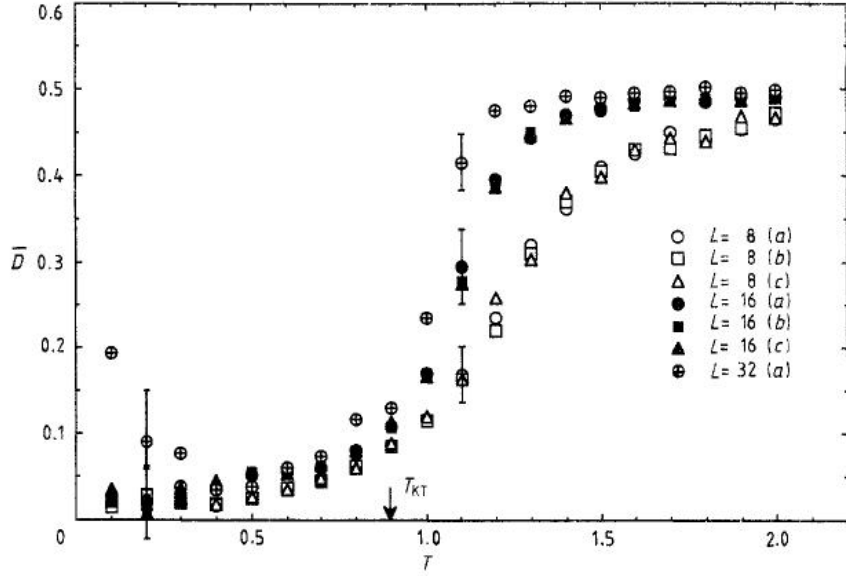


Figura 3.8: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras após cada amostra evoluir durante um tempo $t = 1500$. (Figura retirada da ref. [6])

as magnetizações totais das duas configurações. O ângulo desta magnetização global foi expresso como

$$\alpha(t) = \tan^{-1} \left(\frac{\sum_i \sin(\theta_i(t))}{\sum_i \cos(\theta_i(t))} \right) \quad (3.9)$$

Em seguida, foi medida a distância entre as duas configurações por meio da função dano

$$D(t) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \left[1 - \cos \left(\theta_i^{(A)}(t) - \alpha^{(A)}(t) - \theta_i^{(B)}(t) + \alpha^{(B)}(t) \right) \right] \quad (3.10)$$

Foram consideradas diferentes condições iniciais para as configurações $\{\theta_i^{(A)}(0)\}$ e $\{\theta_i^{(B)}(0)\}$: na primeira, (a) $\{\theta_i^{(A)}(0)\}$ é completamente aleatória e $\{\theta_i^{(B)}(0)\} = \{\theta_i^{(A)}(0)\}$ exceto por 10% dos spins estarem girados aleatoriamente $\rightarrow D(0) = 0,10$; a segunda é (b) idêntica a (a) exceto por serem 20% dos spins a estarem girados aleatoriamente $\rightarrow D(0) = 0,20$; e a terceira (c) resulta em $\{\theta_i^{(A)}(0)\}$ e $\{\theta_i^{(B)}(0)\}$

completamente aleatórias e sem correlação $\rightarrow D(0) = 0,50$.

Os resultados de Chiu et al mostram que o modelo XY bidimensional além de possuir apenas duas fases dinâmicas, não apresenta nenhum efeito de memória com relação às condições iniciais e que a temperatura de transição do dano concorda, dentro da precisão dos resultados, com o valor da temperatura crítica $T_{KT} \approx 0,89$ do modelo XY na rede quadrada, como mostra a figura 3.8.

Portanto, o trabalho de Chiu et al mostra em princípio que a fase dinâmica encontrada por Golinelli et al, que não possui equivalente termodinâmico ($T_1 \leq T < T_2$), é apenas um resultado artificial gerado por uma escolha da dinâmica e da definição do dano que não respeita uma simetria básica do sistema físico estudado.

3.3 Modelo de Potts na rede quadrada

Mais recentemente, mostrou-se que essa estrutura contendo mais de duas fases não é exclusividade de sistemas com ingredientes complexos, estando também presente no ferromagneto de Potts com número de estados q ($q \geq 3$) na rede quadrada [11, 13]. Além das transições consistentes com as de equilíbrio, também foram obtidas para este modelo, com a aplicação de diversas dinâmicas, uma nova fase dinâmica caótica com características não usuais.

3.3.1 Modelo de Potts com $q = 3$ estados

Procurando verificar a existência de mais de duas fases dinâmicas em um sistema com menor grau de complexidade, Da Silva et al [11] aplicaram a técnica de propagação de danos no ferromagneto de Potts na rede quadrada com $q = 3$ estados, sujeito à dinâmica de banho térmico. Eles associaram a cada sítio i da rede quadrada uma variável σ_i assumindo os valores 0, 1 e 2. Da Silva et al usaram o método de Monte Carlo com a dinâmica de banho térmico para evoluir os spins, onde, a cada passo de Monte Carlo (MCS) (que representa o tempo t) foi computada a diferença de energia $\Delta E_i^{\alpha\gamma}(t) = E_i^\alpha - E_i^\gamma$ entre a configuração do spin $\sigma_i(t)$ no tempo t (E_i^γ) e a possível configuração $\sigma_i(t+1)$ no tempo $t+1$ (E_i^α) ($\alpha, \gamma = 0, 1, 2$). Em seguida, calculou-se

as probabilidades $p_i^{(\alpha)}$ para $\sigma_i(t+1)$ assumir o estado α , dadas por

$$p_i^{(0)} = \left[1 + e^{-\beta\Delta E_i^{01}} + e^{-\beta\Delta E_i^{02}} \right]^{-1} \quad (3.11)$$

$$p_i^{(1)} = \left[1 + e^{-\beta\Delta E_i^{01}} + e^{-\beta\Delta E_i^{12}} \right]^{-1} \quad (3.12)$$

$$p_i^{(2)} = \left[1 + e^{-\beta\Delta E_i^{02}} + e^{-\beta\Delta E_i^{12}} \right]^{-1} = 1 - p_i^{(0)} - p_i^{(1)} \quad (3.13)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e T é a temperatura do sistema. O novo estado $\sigma_i(t+1)$ do spin σ_i é então determinado pela comparação entre um número pseudo-aleatório $r_i(t) \in [0,1]$ com as probabilidades definidas anteriormente, obedecendo a seguinte regra:

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} 0, & \text{se } r_i(t) \leq p_i^{(0)} \\ 1, & \text{se } p_i^{(0)} < r_i(t) \leq p_i^{(0)} + p_i^{(1)} \\ 2, & \text{se } p_i^{(0)} + p_i^{(1)} < r_i(t) \leq 1 \end{cases} \quad (3.14)$$

Para comparar as duas configurações $\{\sigma_i^A(t)\}$ e $\{\sigma_i^B(t)\}$, a distância de Hamming (o dano) foi definida da forma

$$D(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[1 - \delta_{Kr} \left(\sigma_i^{(A)}(t), \sigma_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (3.15)$$

onde a soma é sobre todos os N sítios da rede e δ_{Kr} é a função delta de Kronecker. Para realizar médias do dano $D(t)$ sobre as flutuações térmicas, as simulações foram repetidas para M amostras e o dano médio $\langle D(t) \rangle$ foi definido como

$$\langle D(t) \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M D_n(t) \quad (3.16)$$

onde $D_n(t)$ é o dano total no tempo t da n -ésima amostra.

Definiu-se a probabilidade de sobrevivência $P(t)$ como

$$P(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{M_1(t)}{M} \quad (3.17)$$

onde $M_1(t)$ é o número de amostras cujo dano $D(t) \neq 0$. Assim o dano médio pode

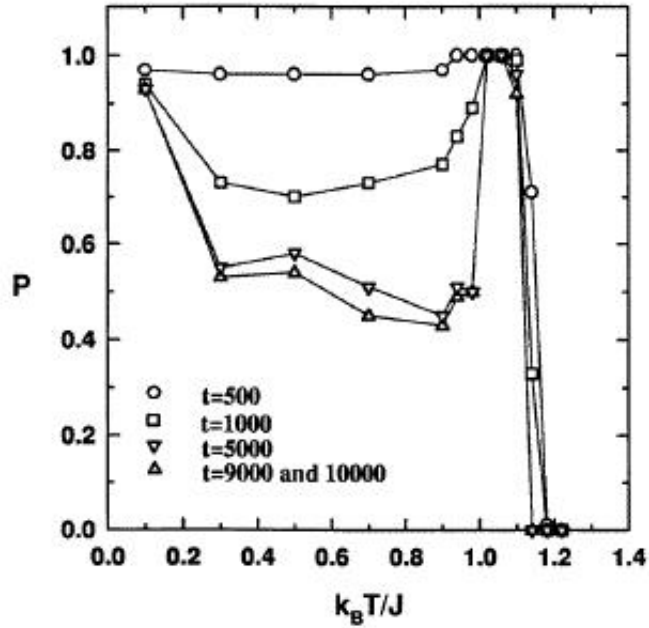


Figura 3.9: Probabilidade de sobrevivência $P(t)$ em função da temperatura T para diferentes valores de tempo t partindo da condição inicial (c). (Figura retirada da ref. [11])

ser escrito como

$$\langle D(t) \rangle = \langle d(t) \rangle P(t) \quad (3.18)$$

onde $\langle d(t) \rangle$ é a média do dano sobre apenas as amostras que sobreviveram no tempo t .

Os resultados obtidos em [11] para a probabilidade de sobrevivência $P(t)$ em função da temperatura T podem ser vistos na figura 3.9. Foram detectados três regimes distintos para $P(t = 10000)$ que dependem da temperatura: (i) um a baixas temperaturas ($T < T_2 \approx 1,0$) onde P varia com a temperatura T ; (ii) um regime intermediário em $T_2 \leq T < T_1 \approx 1,2$ onde $P = 1 \forall T$; (iii) e um a altas temperaturas ($T \geq T_1$) onde $P = 0$. Da Silva et al concluíram que a variação abrupta de P próximo de T_1 e T_2 indica a existência de uma transição de fase dinâmica nestas temperaturas.

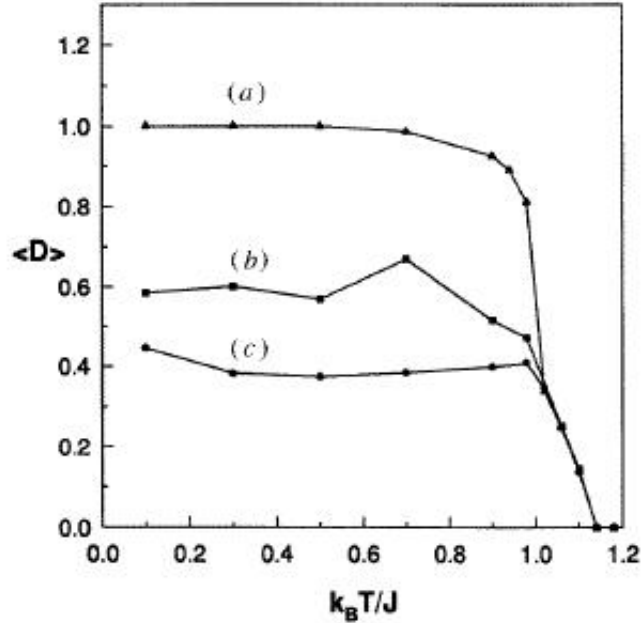


Figura 3.10: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para diferentes condições iniciais: (a) $D(0) = 1$; (b) $D(0) = 0,5$; (c) $D(0) = 0,05$. A media termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 64$ a cada tempo $t = 10000$. (Figura retirada da ref. [11])

A figura 3.10 mostra o dano médio $\langle D(t = 10000) \rangle$ sobre $M = 100$ amostras em função da temperatura obtido em [11] para as três diferentes condições iniciais a seguir:

(a) $\{\sigma_i^A(0)\} = 0$ e $\{\sigma_i^B(0)\} = 1 \rightarrow D(0) = 1$;

(b) $\{\sigma_i^A(0)\}$ completamente aleatório e $\{\sigma_i^B(0)\} = \{\sigma_i^A(0)\}$ exceto por 50% dos spins serem aleatórios e diferentes de $\{\sigma_i^A(0)\} \rightarrow D(0) = 0,5$;

(c) idem (b) exceto por 5% dos spins serem aleatórios e diferentes de $\{\sigma_i^A(0)\} \rightarrow D(0) = 0,05$.

Foram observadas três fases para este modelo. Uma para $T < T_2 \approx 0,99 \pm 0,01$ identificada como fase ferromagnética, onde o dano médio é não nulo e depende das condições iniciais, ou seja, apresenta efeito de memória (observe que T_2 está bastante próxima da temperatura crítica do modelo para $q = 3$ ($T_c = 1/\ln(1+\sqrt{3}) \approx 0,99497$)); uma outra, identificada como a fase paramagnética, foi definida em $T \geq T_1$ onde \langle

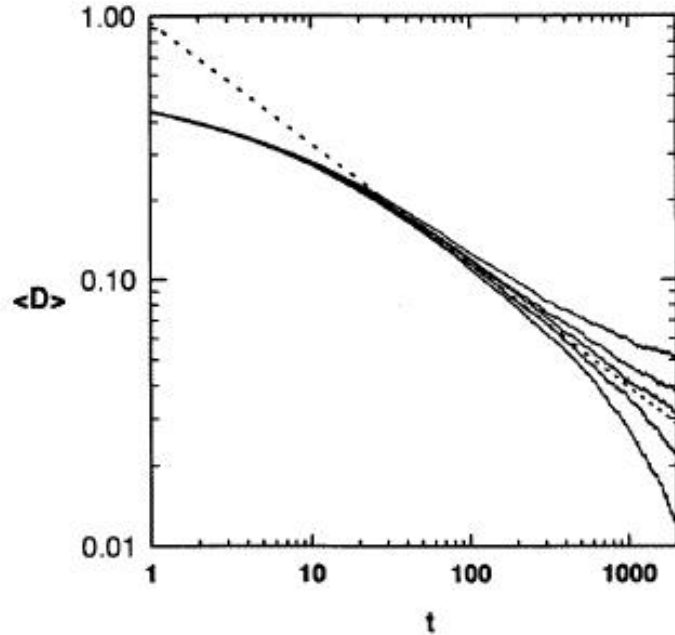


Figura 3.11: Gráfico log-log do dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função do tempo t para temperaturas em torno de $T_c(q = 2)$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras em uma rede quadrada de tamanho $L = 256$ com uma condição inicial onde $D(0) = 1$ ($\{\sigma_i^A\}$ completamente aleatória e $\{\sigma_i^B\} \neq \{\sigma_i^A\} \forall i$). (Figura retirada da ref. [11])

$\langle D(t) \rangle = 0$ para todas as condições iniciais; e uma terceira fase (ou fase intermediária de comportamento não usual) em $T_2 \leq T < T_1$ onde $\langle D(t) \rangle \neq 0$ mas independe das condições iniciais. Esta nova fase foi denominada como “fase dinâmica caótica” e sua fronteira superior está, surpreendentemente, muito próxima da temperatura estática do ferromagneto de Ising bidimensional ($T_c \approx 1,1345$).

Na figura 3.11, Da Silva et al apresentam o comportamento temporal do dano médio $\langle D(t) \rangle$ em diferentes temperaturas em torno de $T_c(q = 2)$ ($1,131 \leq T_1 \leq 1,137$). Eles determinaram o expoente crítico dinâmico δ para este intervalo ($\delta = 0,46 \pm 0,03$) assumindo que o dano médio se comporta como uma função do tipo lei de potência no tempo ($\langle D(t) \rangle \approx t^{-\delta}$). O resultado obtido coincide com o expoente crítico dinâmico referente à transição de percolação direcionada em dimensão $2+1$, de acordo com a conjectura de Grassberger [44], que diz basicamente que toda

transição de dano que não coincide com uma transição termodinâmica, está na classe de universalidade da percolação direcionada.

3.3.2 Modelo de Potts com q estados

Bibiano et al [12] estudaram a dinâmica de evolução, no espaço de fase, do modelo de Potts com q estados usando o método de propagação de danos. Seus resultados foram obtidos por meio de uma simulação de Monte Carlo onde o sistema evoluía segundo as regras da dinâmica de Glauber. Para isto, eles geraram uma configuração $\{\sigma_i^A(t)\}$ termalizada a uma dada temperatura T após ter sido evoluída por um transiente de tempo t . Em seguida, geraram uma nova configuração $\{\sigma_i^B(t)\} = \{\sigma_i^A(t)\}$ e modificaram (danificaram) uma certa fração de spins da réplica dada por $D(0) = m/N$, onde m é a fração dos spins $\sigma_i^B \neq \sigma_i^A$. Partindo desta nova configuração a temperatura T , eles [12] evoluíram o sistema de acordo com a mesma dinâmica e o mesmo ruído térmico até que a configuração $\{\sigma_i^B(t)\}$ também termalizasse.

A dinâmica de Glauber pode ser descrita da seguinte forma: primeiramente, cria-se um novo estado $\sigma_i(t+1) \neq \sigma_i(t)$ com probabilidade $1/(q-1)$. Em seguida, aceita-se (ou não) o novo estado $\sigma_i(t+1)$ com probabilidade

$$p_i(t) = \frac{1}{1 + \exp(\beta\Delta H)} \quad (3.19)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e ΔH é a diferença de energia associada à mudança de estado. A condição para se aceitar (ou não) a nova configuração é definida por meio de um número pseudo-aleatório $r_i(t)$ uniformemente distribuído em $[0,1]$. Assim, caso $r_i(t) \leq p_i(t)$ então o novo estado $\sigma_i(t+1)$ é aceito, caso contrário, não.

Partindo das duas configurações termalizadas, a distância (o dano) entre os estados $\sigma_i^{(A)}$ e $\sigma_i^{(B)}$ passou a ser monitorada durante um determinado intervalo de tempo e em seguida foi feita uma média do dano $\bar{D}(t)$ em função do tempo para aquela amostra. A fração dos sítios danificados para cada passo de tempo t é dada

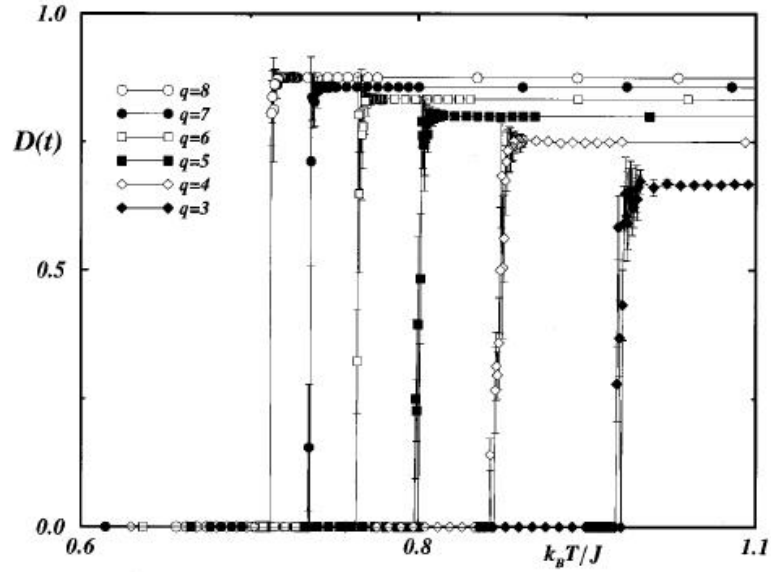


Figura 3.12: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q=3, \dots, 8$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 64$ amostras num intervalo de tempo $t = 2000$. O dano inicial $D(0) = 1/N$ foi aplicado na rede quadrada de tamanho $L = 50$. Note que na região caótica o dano $\langle D(t) \rangle \rightarrow (q-1)/q$. (Figura retirada da ref. [12])

por.

$$D(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[1 - \delta \left(\sigma_i^{(A)}(t), \sigma_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (3.20)$$

Os resultados obtidos por [12] para o $\langle \bar{D}(t) \rangle$ (chamado simplesmente de $D(t)$) para os números de estados $q = 3, \dots, 8$, referentes a uma rede quadrada de comprimento $L = 50$ e um dano inicial $D(0) = 1/N$ (com $N = L^2$), podem ser vistos na figura 3.12. Depois de evoluir o sistema por um transiente de tempo $t_T = 1000$ (até a amostra B termalizar), o dano foi monitorado por $t = 2000$ passos de tempo e a cada temperatura, foi feita uma média do dano sobre $M = 64$ amostras.

Para todos os valores de q , os autores observaram uma transição de fase do dano ocorrendo a uma temperatura de transição T_d cujo valor se aproxima razoavelmente da temperatura crítica do modelo ($T_c = 1/\ln(1 + \sqrt{q})$). Eles observaram que a fase

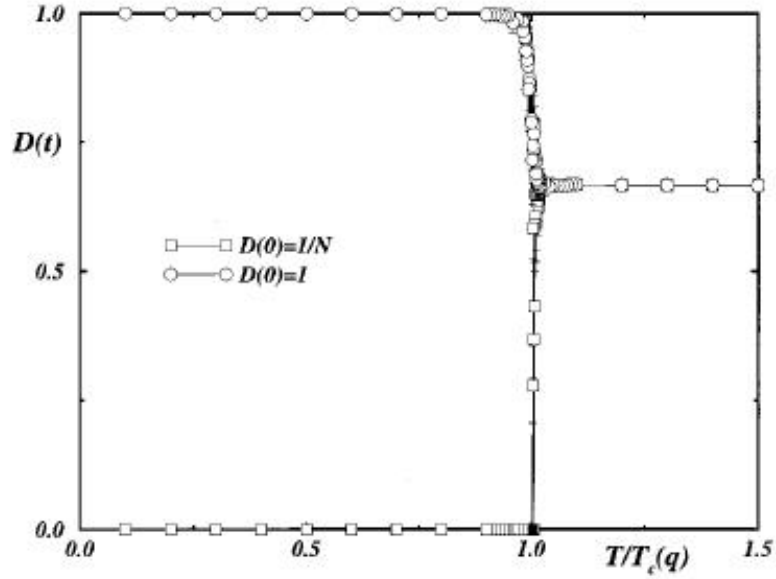


Figura 3.13: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura reduzida T/T_c para o número de estados $q = 3$ e diferentes condições iniciais (ver figura). O dano $\langle D(t) \rangle$ converge para $(q - 1)/q$ na fase de caótica mas mostra um dependência em função das condições iniciais na fase ordenada. (Figura retirada da ref. [12])

congelada ($D(t) = 0$) ocorre em $T < T_d$ e a fase caótica ocorre em $T \geq T_d$ onde o dano assume o valor $D(T \rightarrow \infty) = (q - 1)/q$. Neste limite, todas as q^2 configurações correspondentes à comparação entre os sítios $\sigma_i^{(A)}(t)$ e $\sigma_i^{(B)}(t)$ ocorrem com igual probabilidade, mas apenas $q(q - 1)$ configurações resultam em dano não nulo.

A dependência do dano em função das condições iniciais pode ser vista na figura 3.13. Para as duas condições $D(0) = 1/N$ e $D(0) = 1$ o dano a altas temperaturas convergiu para o mesmo valor $(q - 1)/q$. Na região de baixas temperaturas, o dano é dependente da condição inicial.

Os resultados de Bibiano et al sugerem a existência de duas fases dinâmicas separadas por uma temperatura T_d cujos valores estão próximos dos valores das temperaturas críticas termodinâmicas do modelo de Potts, mas para valores de q pequenos, os resultados numéricos mostram que não há coincidência entre os valores de T_d e T_c . Esta coincidência só é clara, dentro da precisão numérica do modelo, para $q \geq 8$. Segundo os autores, a coincidência ou não entre T_d e T_c está relacionada com a ordem

da transição.

3.3.3 Modelo de Potts com q estados usando dinâmica de agregados

O ferromagneto de Potts com q estados também foi estudado por Luz et al [13] por meio da técnica de propagação de danos mas usando a dinâmica de agregados (clusters) de Swendsen-Wang [45] (SW). Nesta dinâmica, a cada iteração do algoritmo evolui-se todo um agregado de spins, ao contrário do que ocorre com as dinâmicas de Glauber, banho térmico ou Metropolis, em que se evolui apenas um spin a cada interação. Em um procedimento usual, foi gerada uma configuração inicial de spins $\{\sigma_i^{(A)}\}$ que evoluiu no tempo até alcançar o equilíbrio térmico. Em seguida, gerou-se uma segunda configuração $\{\sigma_i^{(B)}\}$ (réplica) onde introduziu-se o dano mudando o estado dos spins de um dado agregado. A partir de então o sistema passou a evoluir de acordo com as regras impostas pela dinâmica SW e sob um mesmo ruído térmico.

Os resultados da propagação de danos obtidos em [13] para o modelo de Potts com $q = 2, \dots, 8$ estados podem ser vistos na figura 3.14. Foram encontradas três fases dinâmicas para o modelo. A primeira delas encontra-se numa região de baixas temperaturas com $T \leq T_2 \approx T_c$ onde o dano médio é nulo. A segunda fase, considerada caótica, encontra-se numa região de temperaturas $T_2 < T \leq T_1$ onde o dano é não nulo, e a terceira fase se encontra a altas temperaturas $T \geq T_1$ onde o dano novamente torna-se nulo. Os autores não testaram a dependência do dano com a condição inicial. Também segundo os autores, as transições de primeira e segunda ordem foram detectadas por um “salto” no valor do dano médio à temperatura T_2 , sendo que este salto do dano é mais abrupto nas transições de segunda ordem ($q \geq 5$). Estes resultados concordam qualitativamente com os resultados encontrados por Da Silva et al [11] em que foi detectado também uma fase intermediária caótica acima de T_c . No entanto o valor da temperatura superior T_1 , para o modelo com $q = 3$ estados, não é coincidente nas duas dinâmicas.

Na figura 3.15 é mostrado o resultado do dano médio $\langle D(t) \rangle$ com os números

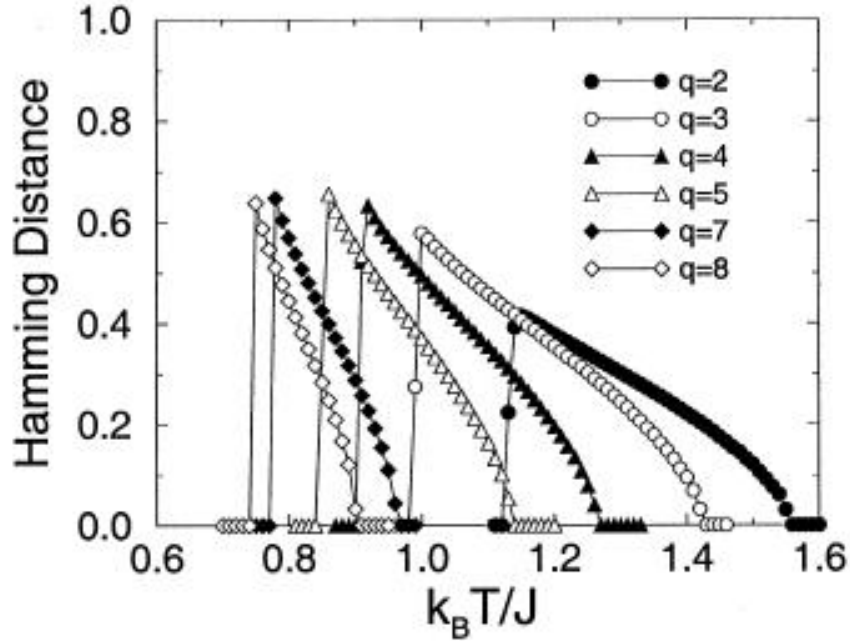


Figura 3.14: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função da temperatura T para os números de estados $q = 2, \dots, 8$ numa rede quadrada de tamanho $L = 201$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 10$ amostras e 30000 passos de tempo após o sistema ter termalizado. (Figura retirada da ref. [13])

de estados $q = 2$ e $q = 8$ em função do tempo t numa escala log-log para alguns valores de temperatura T em torno de T_1 (temperatura acima da qual o dano se anula). A linha tracejada mostra a inclinação, correspondente ao decaimento $D(t) \propto t^{-\delta}$, com $\delta = 0,46$, que é o valor esperado para a classe de universalidade da percolação direcionada. Os resultados obtidos indicam que a transição de dano em T_1 está nesta classe de universalidade, conforme a conjectura de Grassberger [44].

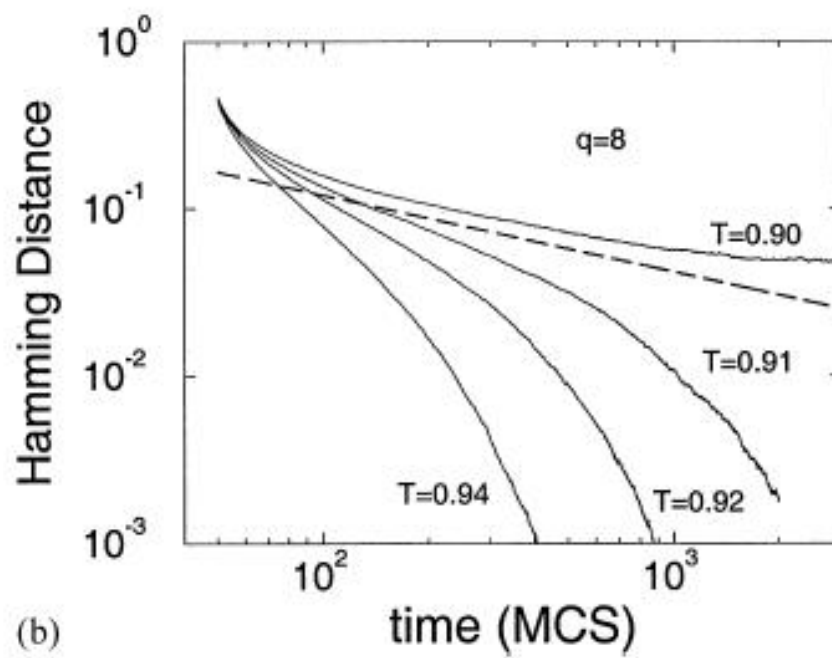
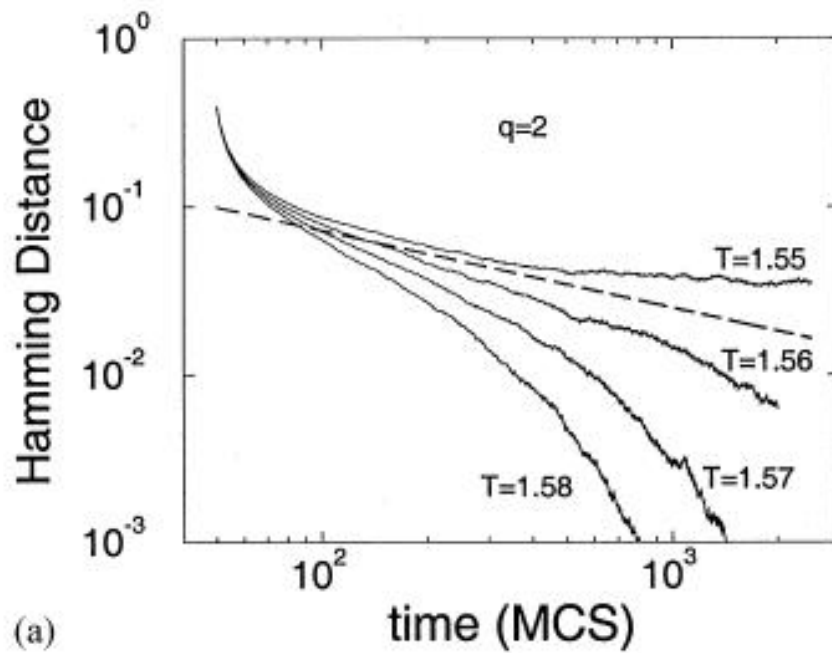


Figura 3.15: Dano médio $\langle D(t) \rangle$ em função do tempo t (MCS) para alguns valores de temperatura T em torno de T_1 para os números de estados (a) $q = 2$ e (b) $q = 8$. A linha tracejada mostra a inclinação correspondente à classe de universalidade da percolação direcionada. (Figura retirada da ref. [13])

Capítulo 4

Resultados

Como vimos, vários modelos de sistemas de spins apresentam mais de duas fases dinâmicas do ponto de vista do dano, em que, pelo menos uma destas fases, não possui um correspondente termodinâmico. Por exemplo, Golinelli et al [5] encontraram três fases dinâmicas para o dano no modelo XY bidimensional. Estes autores conjecturaram sobre a origem dessa transição de fase em uma temperatura superior à temperatura T_{KT} de Kosterlitz-Thouless. Uma possibilidade sugerida foi a presença de uma ponto de desordem, mas os autores também não excluem a possibilidade de que esta transição seja um efeito puramente dinâmico, sem nenhuma relação com as propriedades estáticas do modelo XY. Chiu et al [6] sugeriram que a terceira fase (sem correspondente termodinâmico) no modelo XY só apareceu nos resultados de Golinelli et al, devido à escolha de uma dinâmica que não preservava a invariância rotacional do sistema.

Da Silva et al [11] aplicaram o método de propagação de danos ao modelo de Potts com $q = 3$ estados e também encontraram três fases dinâmicas de dano. Uma das fases, localizada acima da temperatura crítica do modelo, não apresenta correspondente termodinâmico. O objetivo de nosso trabalho é verificar se a origem dessa terceira fase do modelo de Potts também poderia estar relacionada à escolha de uma dinâmica que não preserva a simetria rotacional do sistema. Definimos uma nova dinâmica e estudamos a função dano $D(t)$ utilizada por Da Silva et al no modelo de Potts com $q = 3$ estados. Nossos resultados comprovaram a existência de apenas duas fases para o dano, uma a baixas temperaturas ($T \leq T_d \approx T_c$) e outra a altas tempe-

raturas ($T > T_d$), cujos correspondentes termodinâmicos seriam, respectivamente, as fases ferromagnética e paramagnética.

Uma característica da definição da função dano proposta por Da Silva et al é que ela também não preserva a simetria rotacional do sistema, por exemplo, duas configurações completamente alinhadas em direções opostas apresentam um dano $D(t) = 1$. Em geral, considerando que duas configurações $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\sigma_i(t) + \phi\}$ são fisicamente idênticas, propusemos uma nova forma de definir a função dano $D(t)$ de modo a manter a invariância rotacional das configurações ($D(t) = 0$). Com a aplicação desta nova definição do dano, o sistema perdeu qualquer característica de efeito de memória das condições iniciais.

Generalizamos os resultados para o modelo de Potts com q estados na rede quadrada. Observamos que a temperatura de transição do dano T_d coincide com boa precisão, para todos os q estados, com a temperatura de transição termodinâmica T_c . Nossos resultados também sugerem uma diferença qualitativa entre as transições de primeira e segunda ordem.

Mostraremos a partir da próxima seção os resultados obtidos em nosso trabalho e faremos uma discussão mais profunda de cada caso.

4.1 Definição da função dano $D(t)$

Para generalizar a idéia proposta em [6] por Chiu et al no modelo XY, trabalhamos com uma representação vetorial do modelo de Potts com q estados em termos de q vetores unitários em um espaço euclidiano $q - 1$ dimensional.

A Hamiltoniana do modelo é escrita como

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j) \quad (4.1)$$

onde J está associada à constante de acoplamento ferromagnético ($J > 0$) e $\langle ij \rangle$ representa a interação entre primeiros vizinhos na rede. A função Delta de Kronecker

δ_{Kr} pode ser representada por

$$\delta_{Kr}(\sigma_i, \sigma_j) = \frac{1}{q} \left[1 + (q-1) \hat{S}_i \bullet \hat{S}_j \right] \quad (4.2)$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} \hat{S}_i \bullet \hat{S}_j &= 1 & \text{se } \sigma_i = \sigma_j \\ \hat{S}_i \bullet \hat{S}_j &= \frac{1}{(1-q)} & \text{se } \sigma_i \neq \sigma_j \end{aligned}$$

em que $\sigma_i, \sigma_j = 0, 1, \dots, (q-1)$ representam um dos estados do modelo. O símbolo \bullet representa aqui a operação de produto escalar entre vetores em um espaço euclidiano $q-1$ dimensional. Para definirmos a função dano $D(t)$, partimos da idéia proposta em [6] por Chiu et al onde os autores adotaram um referencial global para as duas configurações de forma a manter a invariância rotacional do sistema. Assim, para Chiu et al, o dano local entre as configurações é definido da seguinte forma

$$D_i(t) = \frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\Phi_i^{(A)}(t) - \Phi_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (4.3)$$

em que $\Phi_i(t) = \theta_i(t) - \alpha(t)$ representa a diferença, no tempo t , entre o ângulo $\theta_i(t)$ correspondente ao estado do spin $\hat{S}_i(t)$ e o ângulo $\alpha(t)$ correspondente ao vetor magnetização global $\vec{m}(t)$ do sistema. Uma representação destes ângulos e vetores no plano pode ser vista na figura 4.1.

Generalizamos a expressão 4.3 para o modelo de Potts com q estados em $q-1$ dimensões do espaço de fase, onde, a diferença entre os ângulos $\theta_i(t)$ e $\alpha(t)$ passou a ser representada por uma diferença relativa expressa em termos do produto escalar entre os vetores $\hat{S}_i(t)$ e $\vec{m}(t)$. Desta forma, definimos um novo dano da forma

$$D_i(t) = \frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\Phi_i^{(A)}(t) - \Phi_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (4.4)$$

em que $\Phi_i(t) = \cos^{-1} \left[\hat{S}_i(t) \bullet \hat{m}(t) \right]$, $\hat{S}_i(t)$ é o vetor unitário que representa o estado do spin no sítio i e $\hat{m}(t) = \vec{m} / |\vec{m}|$ representa o vetor magnetização global da configuração

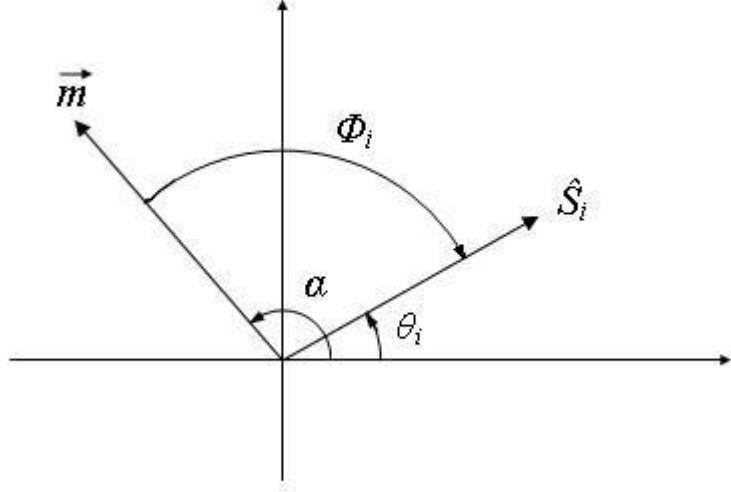


Figura 4.1: Representação dos ângulos e vetores no plano bidimensional correspondentes à definição de dano $D(t)$ proposta por Chiu et al.

definido da forma

$$\vec{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \quad \text{e} \quad \hat{m} = \frac{\vec{m}}{|\vec{m}|} \quad (4.5)$$

onde $N = L^2$ representa o número de sítos da rede quadrada de lado L . Desta forma, definimos o dano entre duas configurações por

$$D_{\Phi}(t) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N D_i(t) \quad (4.6)$$

e o dano médio $\langle D(t) \rangle$ sobre as flutuações térmicas como

$$\langle D_{\Phi}(t) \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{n=1}^M D_n(t)}{M} \quad (4.7)$$

onde M é o número total de amostras simuladas e $D_n(t)$ é o dano da n -ésima amostra depois de evoluir por um tempo t .

A propriedade importante da definição do dano adotada em (4.4) está justamente no fato de que duas configurações girados por um ângulo global são consideradas

idênticas do ponto de vista do dano, ou seja:

$$D(\{\sigma_i\}, \{\sigma_i + \phi\}) \equiv 0 \quad (4.8)$$

Esta propriedade está garantida pelo fato de que as rotações globais R_θ no espaço de estados constituem um isomorfismo (uma transformação que deixa invariante o produto escalar) e portanto:

$$R_\theta \hat{S}_\alpha \bullet R_\theta \hat{S}_\beta = \hat{S}_\alpha \bullet \hat{S}_\beta \quad (4.9)$$

sendo $R_\theta \hat{S}_\alpha$ o vetor de estado \hat{S}_α girado de um ângulo θ em relação a um eixo fixo arbitrário.

Mais especificamente, se a réplica (B) possui configuração $\{R_\theta \hat{S}_i^{(B)}\}$ e a réplica (A) possui configuração $\{\hat{S}_i^{(A)}\}$, então

$$\vec{m}^{(B)} = \sum_i R_\theta \hat{S}_i^{(A)} = R_\theta \sum_i \hat{S}_i^{(A)} = R_\theta \vec{m}^{(A)} \quad (4.10)$$

e portanto $\hat{S}_i^{(A)} \bullet \vec{m}^{(A)} = \hat{S}_i^{(B)} \bullet \vec{m}^{(B)}$ e $|\vec{m}^{(A)}| = |\vec{m}^{(B)}|$ o que implica em dano nulo entre as duas configurações.

4.2 Simulações com a dinâmica de Banho Térmico

Nesta primeira parte contendo os resultados computacionais, mostraremos o comportamento das funções dano $D(t)$ usando a dinâmica de banho térmico. Denotaremos por $D_\delta(t)$ a definição de dano proposta em [11] por Da Silva et al e $D_\Phi(t)$ a definição de dano proposta neste trabalho. Assim,

$$D_\delta(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[1 - \delta_{Kr} \left(\sigma_i^{(A)}(t), \sigma_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (4.11)$$

$$D_\Phi(t) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \left[1 - \cos \left(\Phi_i^{(A)}(t) - \Phi_i^{(B)}(t) \right) \right] \quad (4.12)$$

em que δ_{Kr} representa a função delta de Kronecker e $\Phi_i(t) = \cos^{-1} [\hat{S}_i(t) \bullet \hat{m}(t)]$, $\hat{S}_i(t)$ é o vetor unitário que representa o estado do spin no sítio i e $\hat{m}(t) = \vec{m}/|\vec{m}|$ representa o vetor magnetização global da configuração.

Nosso procedimento computacional consistiu, inicialmente, em gerar duas configurações com condições iniciais específicas $\{\sigma_i^{(A)}\}$ e $\{\sigma_i^{(B)}\}$ e evoluí-las segundo a dinâmica e mesmo ruído térmico por um tempo t , suficiente para que as mesmas entrassem em equilíbrio térmico. Em seguida, comparamos as configurações por meio da técnica de propagação de danos e os resultados serão apresentados a seguir.

Para gerar as duas configurações, consideramos as mesmas condições iniciais propostas por Da Silva et al [11], ou seja,

(a) ordenadas em estados diferentes: $\{\sigma_i^{(A)}(0)\} = 0$ e $\{\sigma_i^{(B)}(0)\} = 1 \rightarrow D(0) = 1$;

(b) $\{\sigma_i^{(A)}(0)\}$ completamente aleatória, e $\{\sigma_i^{(B)}(0)\} = \{\sigma_i^{(A)}(0)\}$ exceto por 50% dos spins aleatoriamente diferentes estando em um dos outros dois estados com igual probabilidade $\rightarrow D(0) = 1/2$;

(c) o mesmo que em (b) porém com apenas 5% dos spins aleatoriamente diferentes estando em um dos outros dois estados com igual probabilidade $\rightarrow D(0) = 0,05$.

Calculamos a média termodinâmica do dano, $\langle D_\delta(t) \rangle$, para um número de $M = 100$ amostras que evoluíram, cada uma delas, por um tempo $t = 10000$ passos de Monte Carlo (MCS). Na figura 4.2 apresentamos a probabilidade de sobrevivência P (equação 3.17) para o modelo de Potts com $q = 3$ estados. Analisando este gráfico, observamos que, para tempos da ordem de 10000 MCS, a probabilidade de sobrevivência flutua em torno de um valor médio, o que sugere que o sistema atingiu ou está próximo do equilíbrio.

Constatamos a existência dos três regimes distintos encontrados em [11] por Da Silva et al. Na figura 4.3 apresentamos as curvas de dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ para o modelo com $q = 3$ estados. Os intervalos de temperaturas que definem as três fases dinâmicas do dano concordam, dentro da precisão dos nossos resultados, com os intervalos obtidos em [11]. A baixas temperaturas ($T \leq T_2$ com $T_2 \approx T_c = 1/\ln(1 + \sqrt{3}) \approx 0,99497$) encontramos a fase cujo correspondente termodinâmico

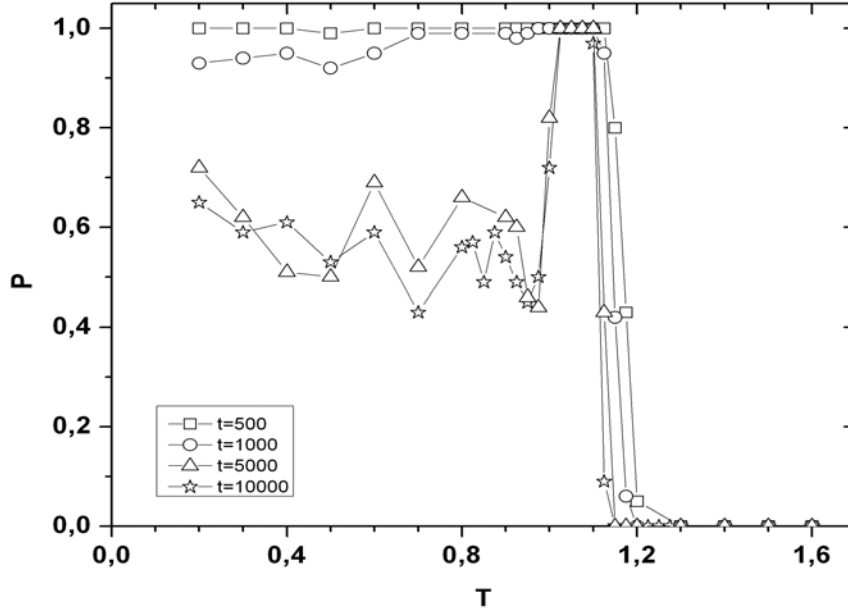


Figura 4.2: Probabilidade de sobrevivência $P(t)$ do modelo de Potts com $q = 3$ estados, em função da temperatura T para diferentes valores de tempo t . Este resultado se refere a uma simulação de $M = 100$ amostras numa rede quadrada com $L = 64$ usando a condição inicial (c).

seria a fase ferromagnética. Nesta fase, o dano médio é não nulo e apresenta efeito de memória. No intervalo em que $T_2 < T \leq T_1$, com $T_1 \approx 1,1$, encontramos uma fase intermediária para o dano. Esta fase, denominada de caótica ($P = 1$) e sem correspondente termodinâmico, não apresenta nenhum efeito de memória, no entanto, o dano é não nulo. A terceira fase, cujo correspondente termodinâmico seria a fase paramagnética, ocorre a altas temperaturas ($T > T_1$). Ela apresenta dano nulo e independe das condições iniciais (sem efeito de memória).

Estudamos o comportamento do dano para tempos superiores a 10000 MCS. Partimos das condições iniciais aleatórias (b) e (c) e evoluímos o sistema por um tempo $t = 100000$ MCS para alguns valores de temperatura. Constatamos que o sistema não atingiu o equilíbrio termodinâmico, em nenhuma das temperaturas abaixo de T_c , após

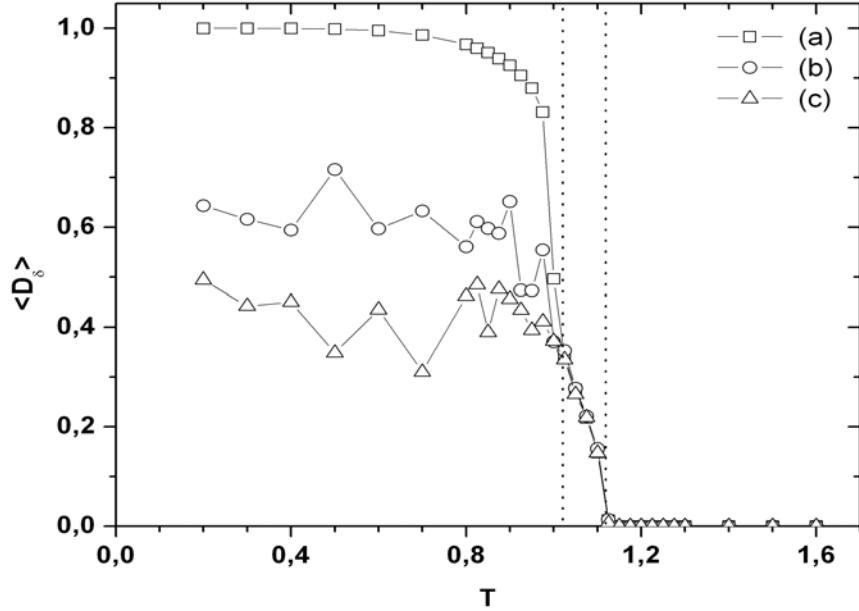


Figura 4.3: Simulação do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função da temperatura para o modelo de Potts com $q = 3$ estados usando a dinâmica de banho térmico. Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de tempo para cada valor de temperatura T e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.

evoluir por $t = 10000$ passos de Monte Carlo. Todavia, as flutuações do dano só se tornam significativas a temperaturas próximas de T_c . Os resultados da evolução do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ no tempo t para as temperaturas $T = 0,20$ e $T = 0,99$ podem ser vistos na figura 4.4. A dificuldade do sistema em alcançar o equilíbrio termodinâmico nestas temperaturas pode ser facilmente entendida se analisarmos as condições iniciais (b) e (c). Como estamos falando de configurações completamente aleatórias, implica que o sistema não tem nenhuma “preferência” de direção de magnetização, podendo flutuar entre os q estados indefinidamente (ou durante um tempo infinito). Além disso, quando estamos numa faixa de temperatura próxima de zero, naturalmente o sistema tem maior dificuldade de mudar de configuração por se encontrar num regime térmico quase estático (congelado). Para temperaturas próximas de T_c o

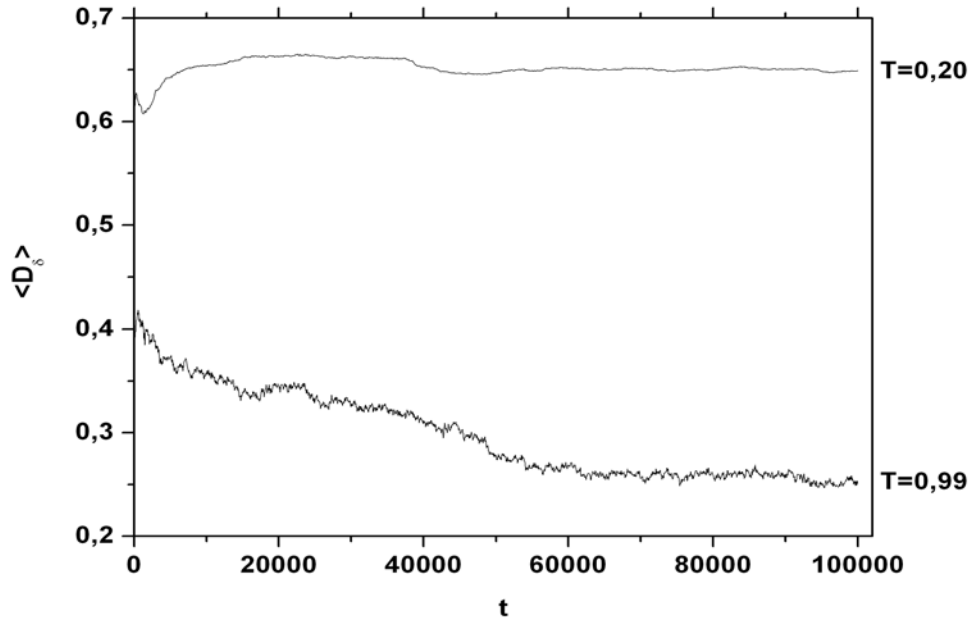


Figura 4.4: Dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ do modelo de Potts com $q = 3$ estados, em função do tempo t para as temperaturas $T = 0,20$ e $T = 0,99$. Simulação sobre $M = 100$ amostras usando a condição inicial (b) na rede quadrada com $L = 64$.

sistema encontra-se em regime de transição de fase, o que pode resultar em tempos bastante longos (ou mesmo infinitos) para as configurações alcançarem o equilíbrio termodinâmico.

Repetimos todo procedimento anteriormente citado para o modelo de Potts com $q = 2, 4, 5, 6$ e 7 estados. Observamos que, o modelo com $q = 2$ estados apresenta apenas duas fases dinâmicas para o dano (ver figura 4.5), uma a baixas temperaturas ($T \leq T_d \approx T_c \approx 1,134\dots$) na qual o dano é não nulo e apresenta efeito de memória, e outra a altas temperaturas ($T > T_d$) na qual o dano é nulo e independe das condições iniciais. Classificamos estas fases como ferromagnética e paramagnética respectivamente. A presença destas duas fases concorda com as fases termodinâmicas do modelo de Ising bidimensional.

Para $q \geq 3$ o modelo apresenta sempre três fases dinâmicas para o dano. Nós

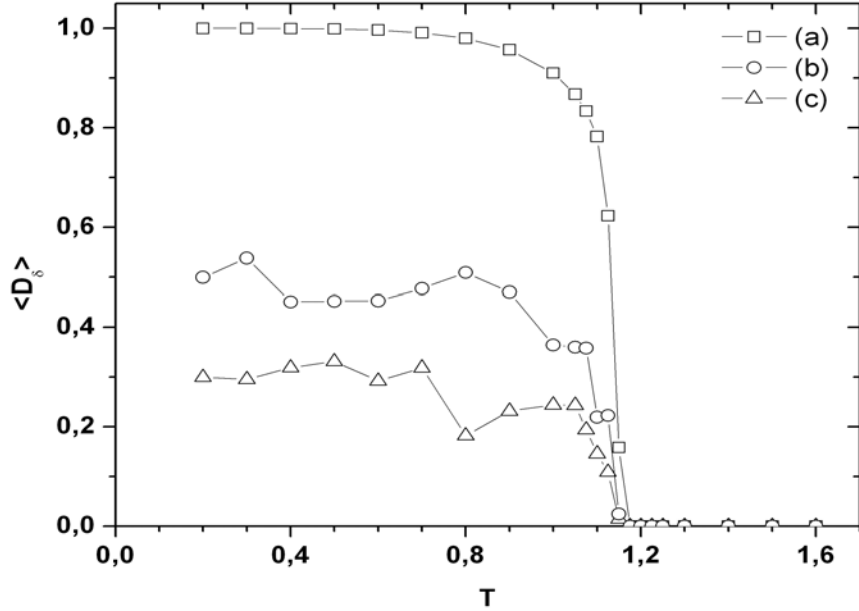


Figura 4.5: Dano médio $\langle D_\delta \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 2$ estados. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras

associamos duas destas fases às fases ferrmagnética ($T \leq T_2 \approx T_c$) e paramagnética ($T > T_1$). A fase intermediária ($T_2 < T \leq T_1$) denominada fase caótica ($P = 1$), apresenta, para todos os números de estados, um dano não nulo independente das condições iniciais. Note que, para todos os casos, a temperatura em que ocorre a primeira transição T_2 coincide, no limite da precisão de nossos cálculos, com a temperatura crítica estática T_c do modelo. Na figura 4.6 podemos ver as curvas de dano para o modelo com $q = 2, 3, \dots$ e 7 estados.

Conseguimos verificar que, sendo o dano $D_\delta(t)$ uma função do tempo t , a temperatura de transição T_1 encontra-se na mesma classe de universalidade da percolação direcionada, em que o dano obedece uma lei de potência do tipo $D(t) \approx t^{-\delta}$ com $\delta \approx 0,46$ em duas dimensões. Na figura 4.7 mostramos um gráfico log-log do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função do tempo t para diferentes valores de temperatura em torno de T_1 que nos permite estimar a temperatura de transição T_1 para $q = 3$ e 7.

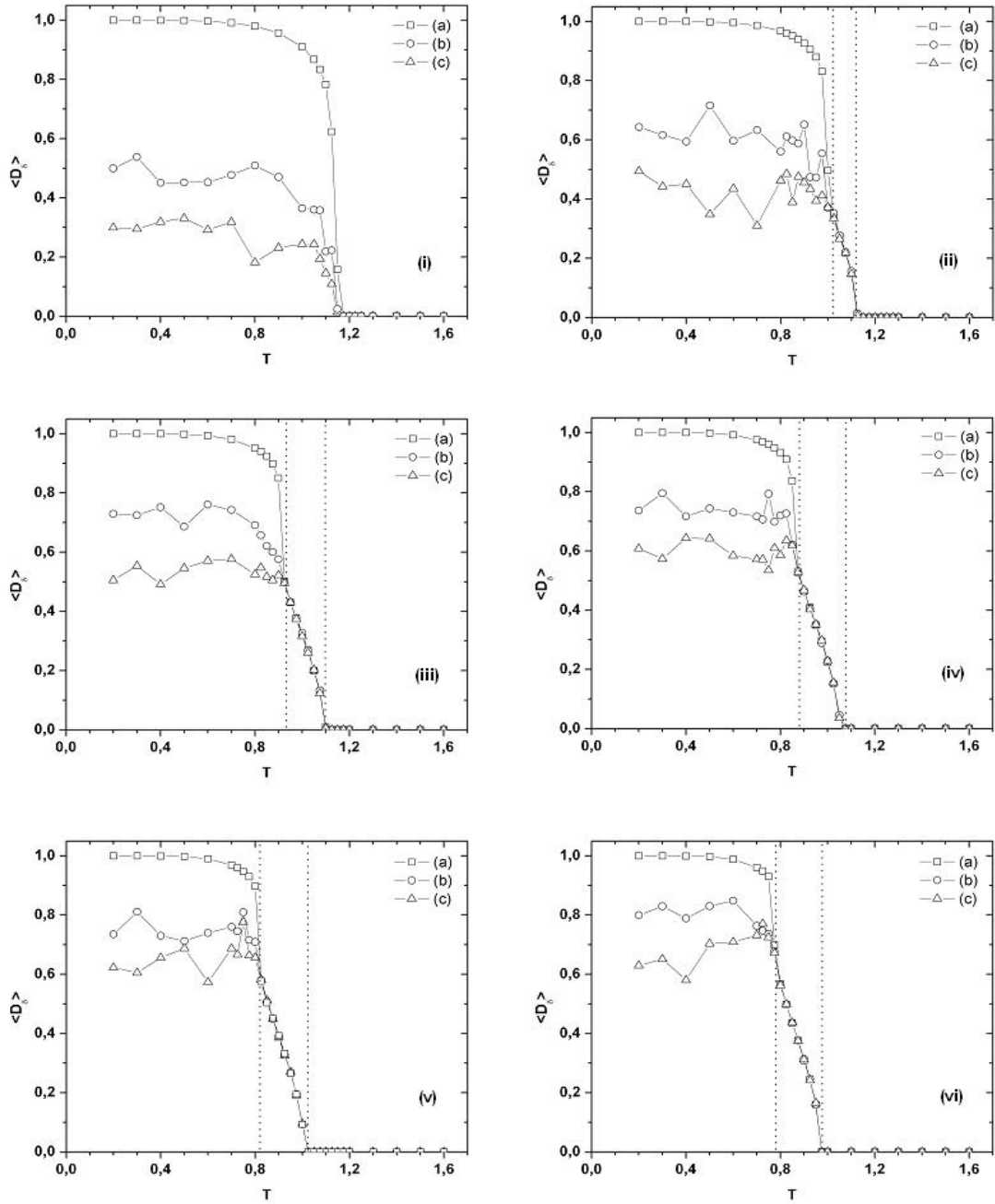


Figura 4.6: Dano médio $\langle D_\delta(t = 10000) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os números de estados: (i) $q = 2$, (ii) $q = 3$, (iii) $q = 4$, (iv) $q = 5$, (v) $q = 6$ e (vi) $q = 7$. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras numa rede quadrada com $L = 64$. As linhas tracejadas indicam as temperaturas da transição T_1 e T_2 .

Dentro da precisão dos nossos resultados, o valor da temperatura T_1 para o modelo de Potts é

$$T_1 = 1,130 \pm 0,003 \quad \text{para } q = 3 \quad (4.13)$$

$$T_1 = 0,974 \pm 0,003 \quad \text{para } q = 7 \quad (4.14)$$

Para os outros valores de q , acreditamos que esta transição em T_1 esteja sempre na classe de universalidade da percolação direcionada.

Mudamos a definição de dano entre as configurações para a que foi proposta neste trabalho $D_\Phi(t)$ (equação 4.4) e novamente estudamos o modelo de Potts com q estados sujeito à dinâmica de banho térmico. Partimos das mesmas configurações com as mesmas condições iniciais vistas anteriormente e observamos três fases para o dano, para todos os números de estados $q \geq 3$, semelhante ao obtido em [11] para $q = 3$. As fases se caracterizam nas regiões: a baixas temperaturas ($T \leq T_2 \approx T_c$) (com $T_c = 1/\ln[1 + \sqrt{q}]$ correspondendo à temperatura estática do modelo) denominada de ferromagnética; a altas temperaturas ($T > T_1$) encontramos a fase que denominamos de paramagnética; e para o intervalo de temperaturas entre as fases ferromagnética e paramagnética ($T_2 < T \leq T_1$) encontramos a fase caótica que não possui correspondente termodinâmico. A figura 4.8 mostra o resultado de uma simulação do dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados. A figura 4.9 mostra os resultados de simulações do modelo para $q = 4, \dots, 7$ estados. Qualitativamente, nossos resultados concordam com as três fases dinâmicas do dano obtidas por Luz et al [13], no entanto, as temperaturas T_1 da segunda transição não coincidem nos dois casos.

À primeira vista, na região de baixas temperaturas o dano aparenta possuir uma dependência com a condição inicial, o que constatamos não ser verdade, pois, para tempos longos ($T \rightarrow \infty$), o valor do dano converge a zero para qualquer condição inicial aplicada. Este resultado revelou que, para tempos de simulações iguais a $t = 10000$ passos de Monte Carlo, o dano $D_\Phi(t)$ não atinge seu valor assintótico partindo das condições iniciais (b) e (c) mesmo fora de T_c . A figura 4.10 mostra o resultado de

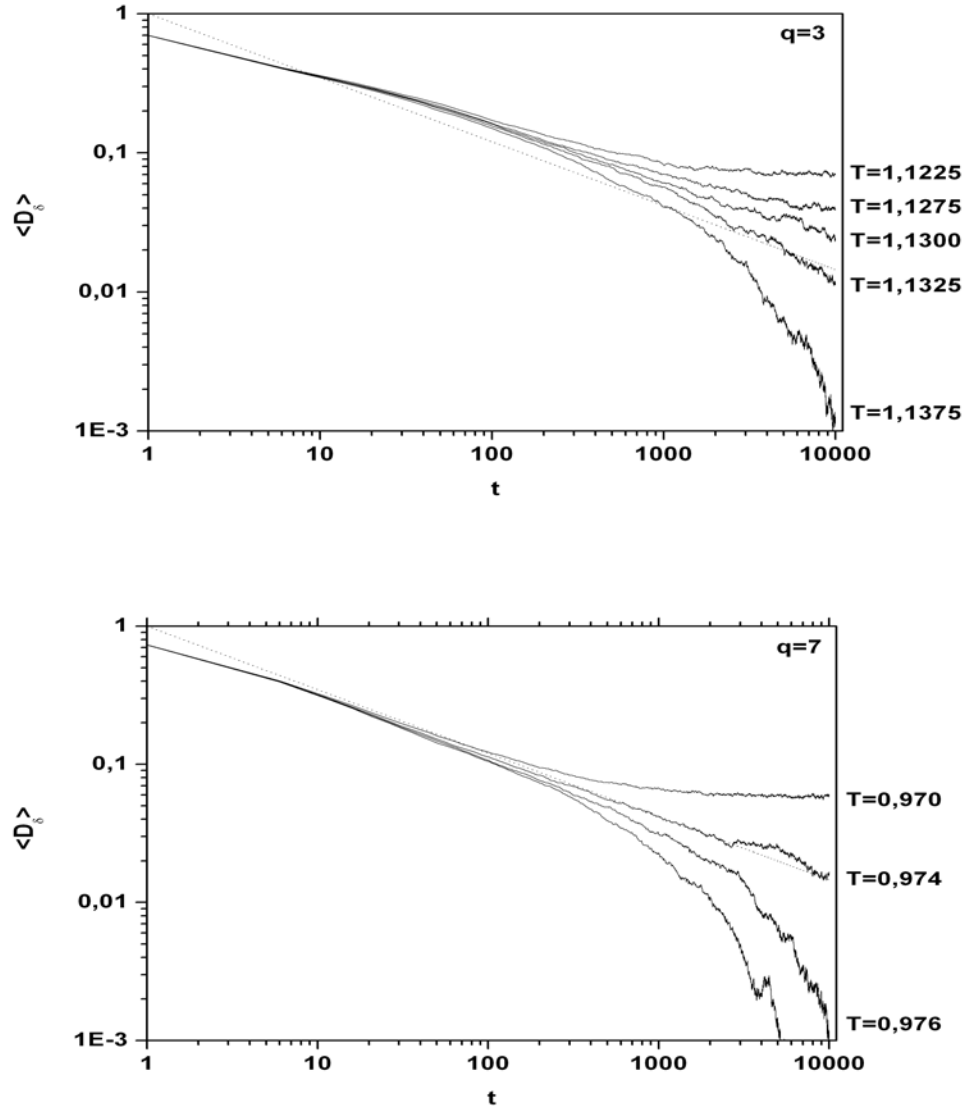


Figura 4.7: Graficos log-log do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ e $q = 7$ números de estados. Os valores de temperatura estão em torno da temperatura da segunda transição T_1 de cada modelo. As retas tracejadas servem de guia para a inclinação $0,46$.

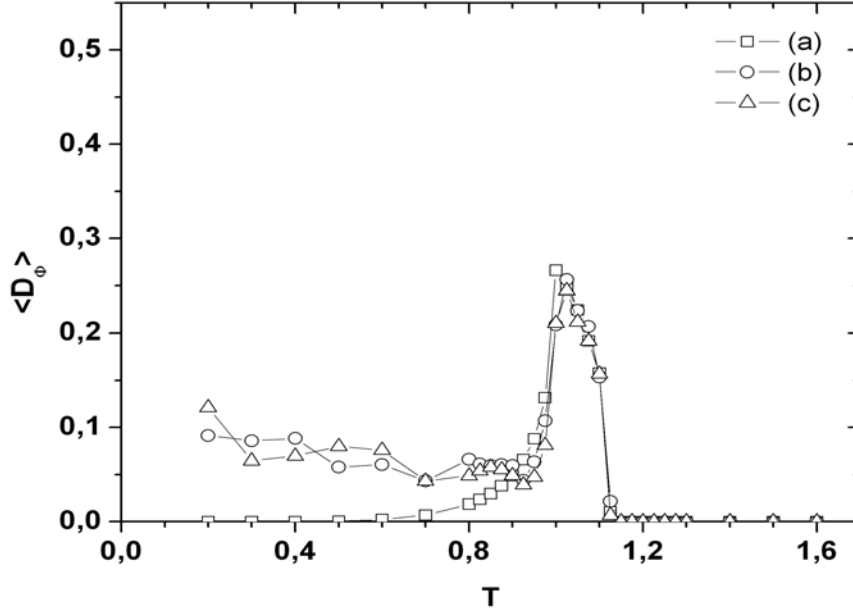


Figura 4.8: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados, partindo das condições iniciais (a), (b) e (c). Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.

uma evolução temporal do dano, partindo da condição inicial (b), para alguns valores de temperatura.

Uma característica importante da definição de dano $D_\Phi(t)$ proposta neste trabalho é que, quando comparada com a definição $D_\delta(t)$, o dano $D_\Phi(t)$ apresenta um comportamento mais lento para atingir seus valores assintóticos, o que nos levou a procurar outras formas para minimizar o tempo de simulação. Partimos então em busca de outras condições iniciais, ajustadas de forma a minimizar o tempo de simulação. Após vários testes, optamos por definir condições iniciais com certa predominância de um determinado estado, de maneira a dar uma certa “preferência” de direção de magnetização para as configurações. Condições iniciais parcialmente ordenadas foram utilizadas também por Grassberger em [44]. Assim, foram definidas as seguintes condições:

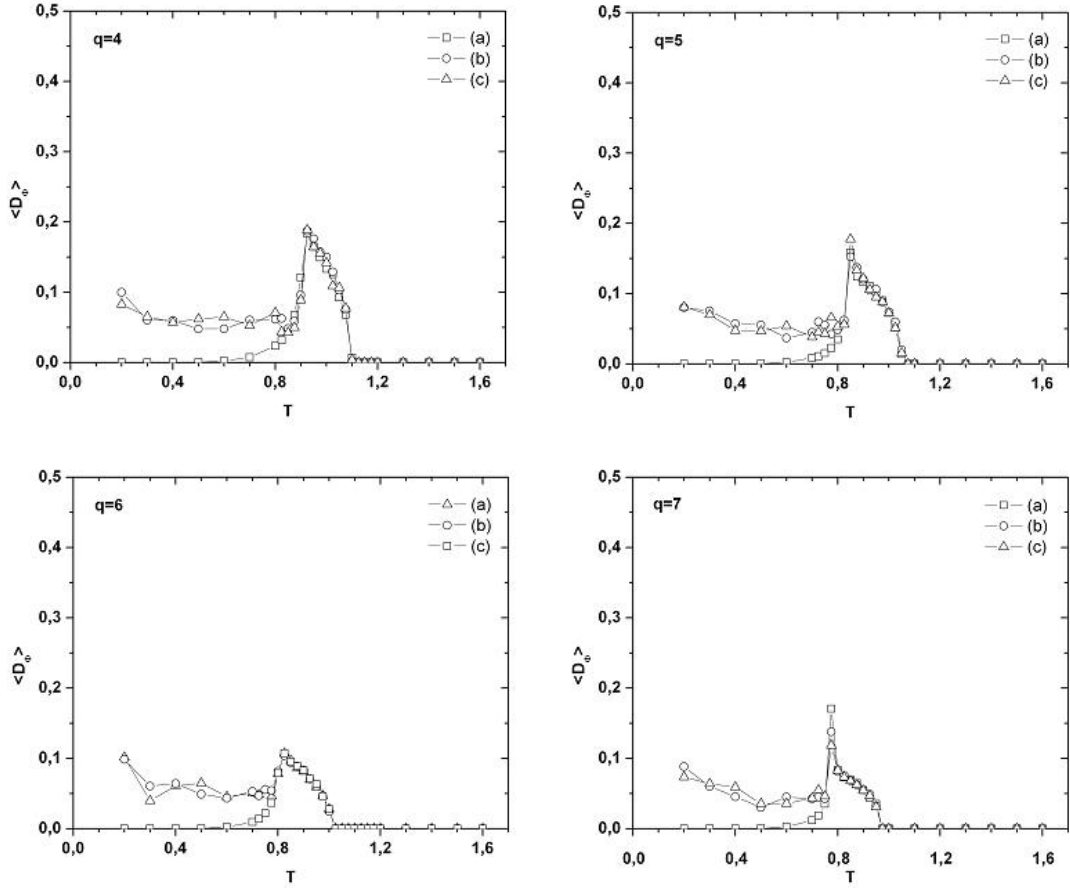


Figura 4.9: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 4, 5, 6$ e 7 estados respectivamente. Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.

(d) $\{\hat{S}_i^{(A)}(0)\}$ aleatória com predominância de um dos q estados escolhido aleatoriamente a cada nova amostra e $\{\hat{S}_i^{(B)}(0)\}$ aleatória com predominância de um dos q estados escolhido aleatoriamente sem relação com $\{\hat{S}_i^{(A)}(0)\}$;

(e) $\{\hat{S}_i^{(A)}(0)\}$ aleatória com predominância de um dos q estados com probabilidade $1/q$ e $\{\hat{S}_i^{(B)}(0)\} = \{\hat{S}_i^{(A)}(0)\}$ exceto por 50% dos spins serem escolhidos aleatoriamente desde que $\hat{S}_i^{(B)} \neq \hat{S}_i^{(A)}$;

(f) idem (e) mas com apenas 5% dos spins escolhidos aleatoriamente.

Na próxima seção estudaremos o método de propagação de danos no modelo

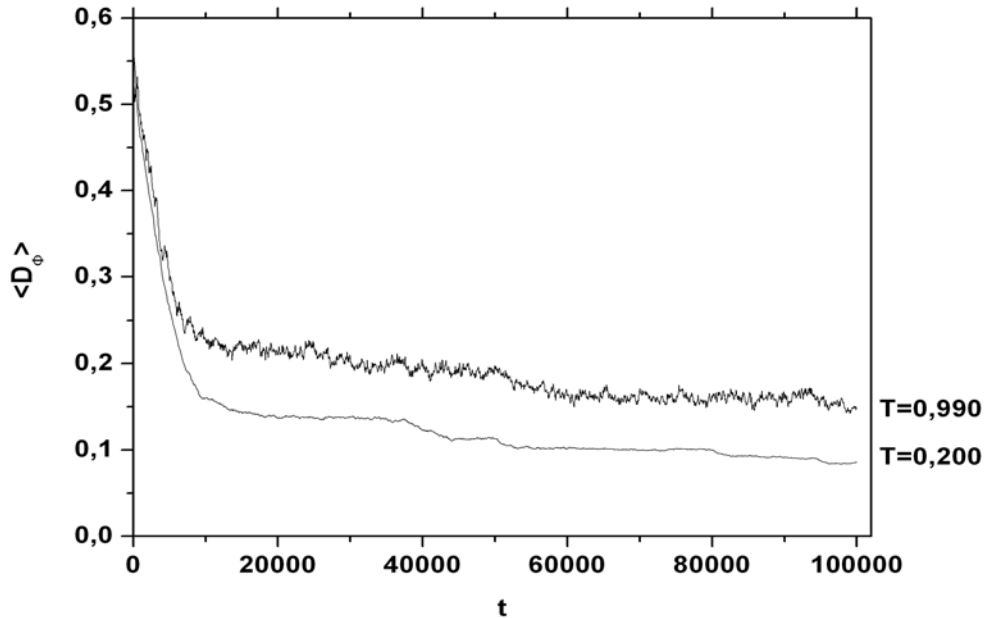


Figura 4.10: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ estados nas temperaturas $T = 0,20$ e $T = 0,99$ partindo da condição inicial (b). Os spins da rede quadrada com $L = 64$ evoluíram durante $t = 10000$ passos de Monte Carlo e a média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ amostras.

de Potts partindo destas novas condições iniciais usando a dinâmica de Metropolis.

4.3 Simulações com a dinâmica de Metropolis

Como vimos, os resultados do método de propagação de danos no modelo de Potts com $q = 3, 4, 5, 6$ e 7 números de estados, levaram ao aparecimento de três fases dinâmicas para o dano quando o sistema evoluiu sob a dinâmica de banho térmico. Para estudarmos o comportamento das fases do dano quando o sistema é submetido a uma dinâmica que preserve a invariância rotacional, passamos a evoluir as configurações de acordo com a dinâmica de Metropolis. Lembrando que nesta dinâmica, se uma determinada configuração $\{\sigma_i(0)\}$ evolui para $\{\sigma_i(t)\}$, então a configuração $\{\sigma_i(0) + \phi\}$ evolui para $\{\sigma_i(t) + \phi\}$, mantendo a invariância rotacional.

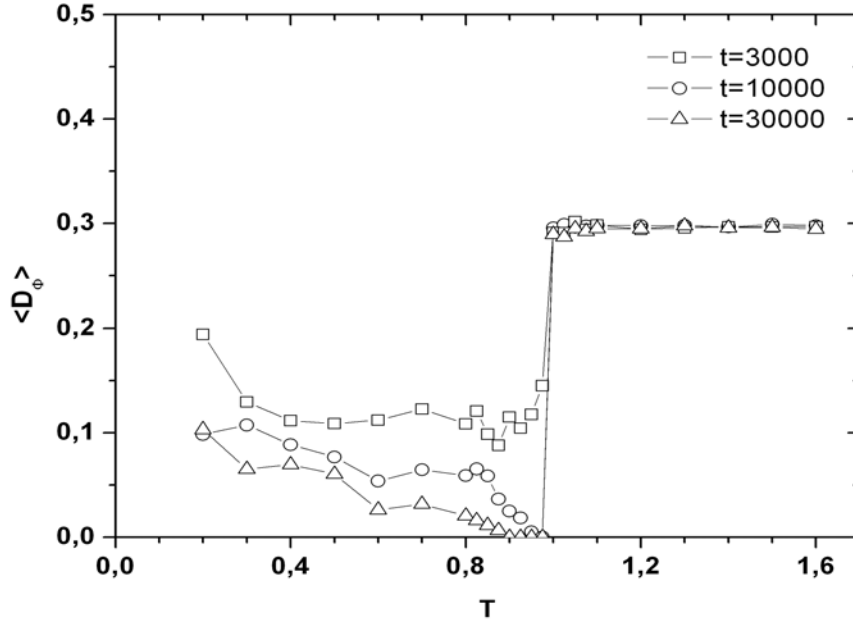


Figura 4.11: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados partindo da condição inicial (b). Cada curva representa o tempo no qual as configurações evoluíram. A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$.

Inicialmente testamos as condições iniciais propostas por Da Silva et al (condições (a), (b) e (c)) no modelo submetido a esta nova dinâmica e observamos novamente o fato do sistema não entrar em equilíbrio a baixas temperaturas. A figura 4.11 mostra o comportamento do dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados, partindo da condição inicial (b). As curvas do gráfico mostram a dependência do dano com o tempo, indicando que o valor assintótico do dano a baixas temperaturas não foi alcançado ($D(T < T_d \approx T_c, t \rightarrow \infty) = 0$).

Quando partimos das condições iniciais parcialmente ordenadas, o tempo de simulação se reduz consideravelmente. Graças a esta diminuição, melhoramos a média termodinâmica do dano. Primeiramente evoluímos o sistema durante um transiente

de tempo $t_T = 3000$ suficiente para que o dano atingisse seu valor assintótico em praticamente todo intervalo de temperaturas (exceto na região muito próxima a T_c). Em seguida monitoramos o dano a cada passo de Monte Carlo durante um tempo $t = 3000$. Para cada temperatura, repetimos este processo para um total de $M = 100$ amostras. Isto significa que a média termodinâmica do dano foi feita no tempo e no número de amostras, ou seja,

$$D(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_i(t) \quad (4.15)$$

$$\bar{D}(t) = \frac{1}{t_{MAX}} \sum_{\tau=1}^{t_{MAX}} D_\tau(t) \quad (4.16)$$

$$\langle \bar{D}(t) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \bar{D}_n(t) \quad (4.17)$$

em que $N = L^2$ corresponde ao número total de spins da rede, t_{MAX} é o tempo total em que o dano foi monitorado e M é o número total de amostras. Manteremos a notação $\langle D(t) \rangle$ para denotar o dano médio $\langle \bar{D}(t) \rangle$.

A figura 4.12 mostra o comportamento do dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ para o modelo com $q = 3$ estados. Note que, quando a dinâmica de evolução preserva a invariância rotacional do sistema, o dano apresenta somente duas fases dinâmicas, correspondendo às fases ferromagnética e paramagnética. Como o dano D_δ não preserva a invariância entre configurações giradas globalmente, a fase ferromagnética ($T \leq T_d \approx T_c$) apresenta efeito de memória. Na figura 4.13 mostramos o dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 2, 3, \dots, 7$ estados. Estes resultados concordam qualitativamente com os resultados obtidos por Bibiano et al [12] para o modelo de Potts com q estados.

Comparamos novamente as duas configurações partindo das condições iniciais (d), (e) e (f) mas usando a definição de dano D_Φ . A figura 4.14 mostra o comportamento do dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 2, 3, \dots$ e 7 estados. Observamos que, além do dano médio apresentar apenas duas fases, ele é completamente independente da condição inicial, ou seja, não apresenta efeito de memória, analogamente ao resultado obtido por Chiu et al [6] no modelo XY. Na figura 4.15 podemos observar, separadamente, o comportamento

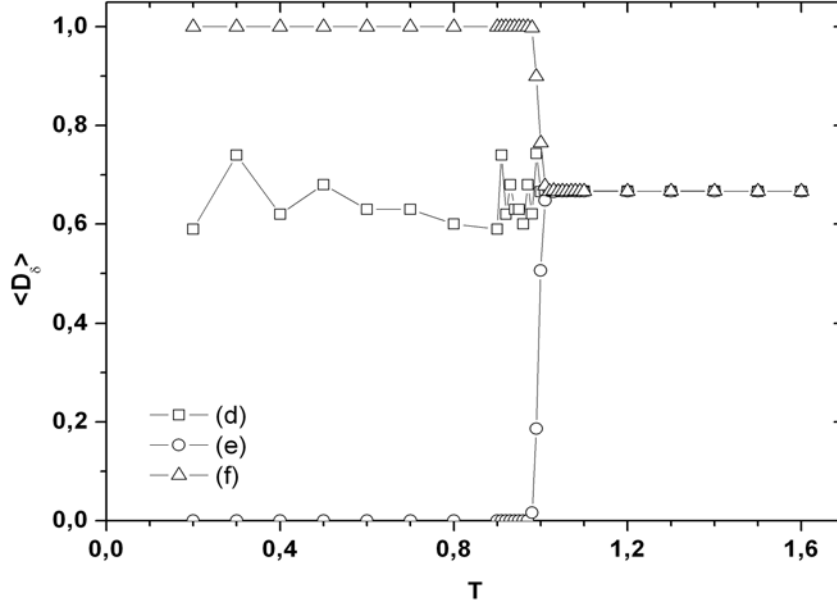


Figura 4.12: Dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com $q = 3$ estados. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f). A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$.

do dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ para cada um dos $q = 2, 3, \dots, 7$ números de estados do modelo.

Os valores assintóticos do dano na fase paramagnética não concordam com os obtidos com a definição do dano D_δ . Com esta definição, existem apenas q^2 configurações possíveis entre dois sítios sendo que apenas $q(q - 1)$ correspondem a configurações danificadas. Usando a definição de dano D_Φ , esta análise fica bem mais complexa, uma vez que graças ao termo da magnetização global \vec{m} , passamos a ter infinitas configurações possíveis entre dois sítios. Na representação vetorial do modelo de Potts, a convergência da função delta de Kronecker $\langle \delta_{Kr} \rangle \rightarrow 1/q$, corresponde a $\langle \hat{S}_\alpha \bullet \hat{S}_\beta \rangle \rightarrow 0$, ou seja, os vetores de estados \hat{S}_α e \hat{S}_β são ortogonais na média.

A tabela 4.1 mostra os valores assintóticos do dano médio $\langle D_\Phi(t, T > T_d) \rangle$

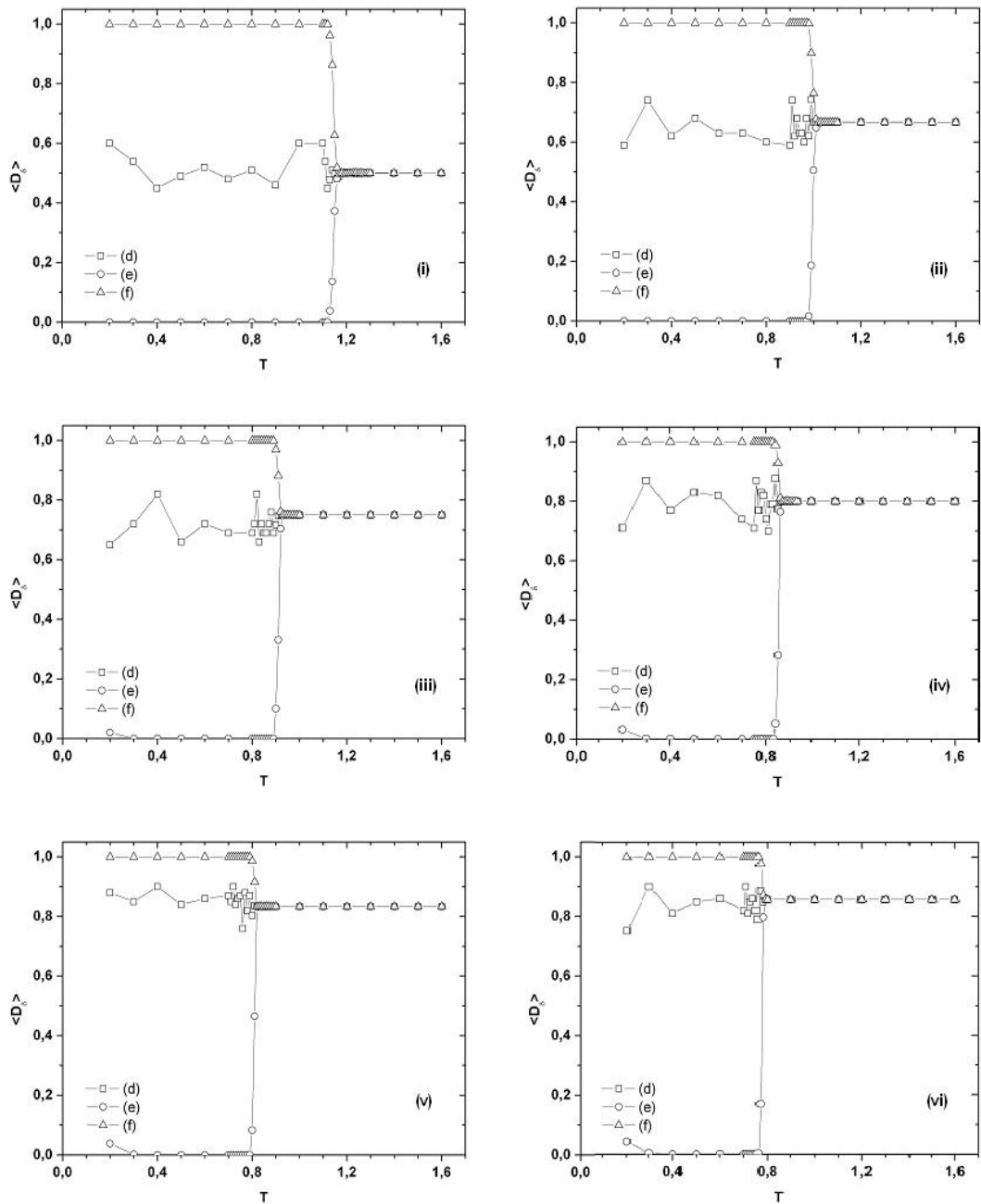


Figura 4.13: Dano médio $\langle D_\delta(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os respectivos números de estados: (i) $q = 2$; (ii) $q = 3$; (iii) $q = 4$; (iv) $q = 5$; (v) $q = 6$; (vi) $q = 7$. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f). A média termodinâmica foi feita sobre $M = 100$ configurações de redes quadradas com $L = 64$.

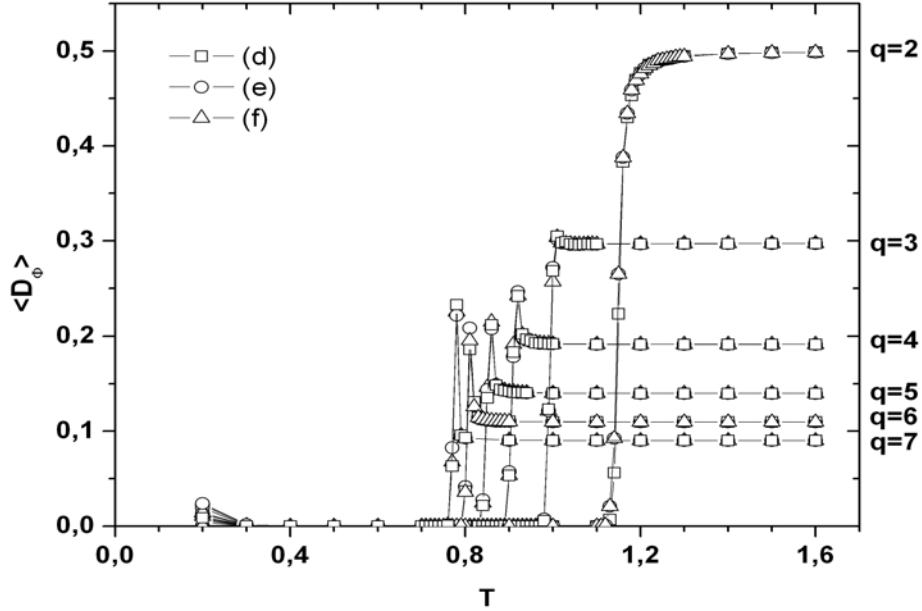


Figura 4.14: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com q estados evoluindo de acordo com a dinâmica de Metropolis.

para o modelo com os números de estados $q = 2, 3, \dots$ e 7.

Até o momento, não conseguimos determinar uma relação analítica, em função dos q estados, que definisse o valor assintótico do dano D_Φ no limite termodinâmico, mas observamos que o dano tem um comportamento do tipo lei de potência em função dos q números de estados da forma

$$D(q, T \rightarrow \infty) \approx q^{-\gamma} \quad (4.18)$$

em que $\gamma = 1,386 \pm 0,001$. A figura 4.16 mostra o comportamento do $D_\Phi(T > T_d)$ em função do número de estados q .

Conjecturamos a possibilidade de definir a ordem da transição de fase analisando o comportamento do dano na vizinhança da temperatura crítica T_d . Esperamos que, para tempos suficientemente longos, tenhamos um salto abrupto no valor do dano em torno de T_d , como o que foi detectado por Luz et al em [13]. Os picos observados

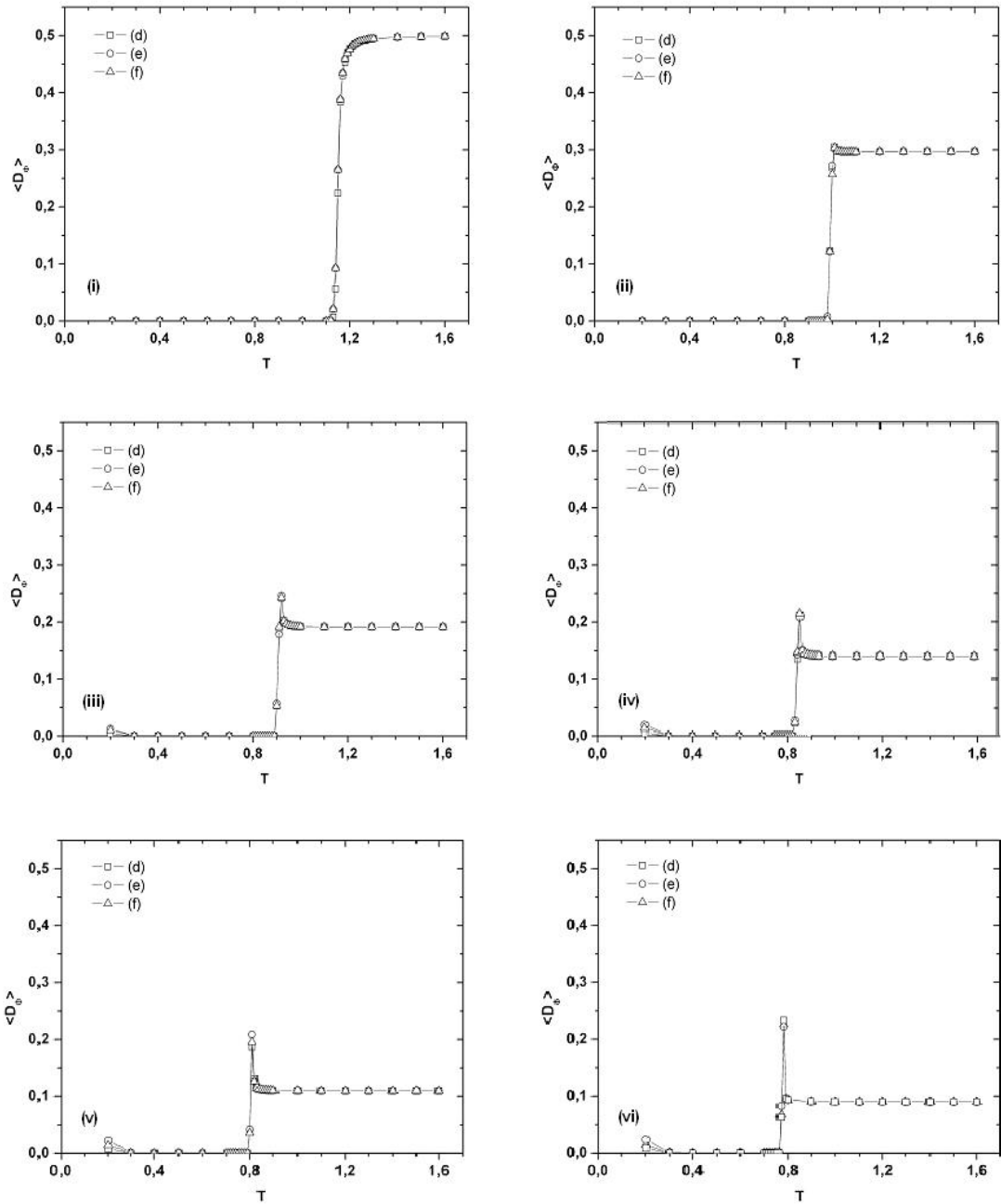


Figura 4.15: Dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função da temperatura T para o modelo de Potts com os respectivos números de estados: (i) $q = 2$; (ii) $q = 3$; (iii) $q = 4$; (iv) $q = 5$; (v) $q = 6$; (vi) $q = 7$. Os quadrados, círculos e triângulos vazios correspondem, respectivamente, às condições iniciais (d), (e) e (f).

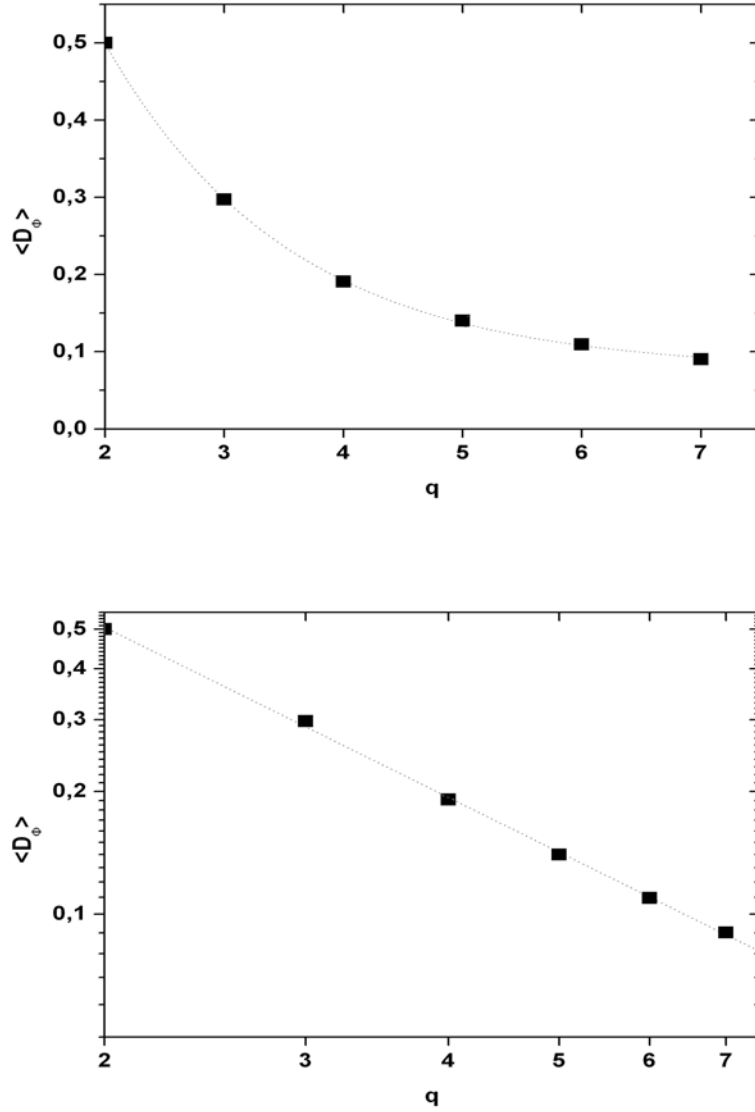


Figura 4.16: No primeiro gráfico, mostramos o comportamento do valor assintótico do dano médio $\langle D_\phi(t) \rangle$ na fase paramagnética em função dos q estados do modelo de Potts. No segundo gráfico, identificamos um comportamento do dano médio como lei de potência em termos de q , ou seja, $D(q) \approx q^{-\gamma}$ com $\gamma = 1,386 \pm 0,001$.

q	$\langle D_{\Phi}(t, T > T_d) \rangle$
2	0,49875
3	0,29729
4	0,19147
5	0,13964
6	0,10959
7	0,09008

Tabela 4.1: Valores assintóticos do dano médio $\langle D_{\Phi}(t, T > T_d) \rangle$ para o modelo de Potts com os números de estados $q = 2, 3, \dots$ e 7 obtidos por meio de simulações de Monte Carlo usando a dinâmica de Metropolis. O dano foi monitorado por $t = 20000$ passos de Monte Carlo após o sistema entrar em equilíbrio termodinâmico na temperatura $T = 3.0$. A simulação foi repetida para $M = 100$ amostras e em seguida feita a média termodinâmica do dano.

nos estados $q \geq 3$ são consequência da lentidão do sistema em atingir o equilíbrio perto da temperatura de transição.

Por fim, procuramos um método para prever a temperatura de transição do modelo. Identificamos a temperatura de transição do modelo de Potts com $q = 3$ e 7 números de estados por meio de uma mudança no comportamento temporal do dano em torno da temperatura de transição. A figura 4.17 mostra dois gráficos log-log com o comportamento do dano médio $\langle D_{\Phi}(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ e $q = 7$ estados respectivamente. Dentro da precisão numérica dos nossos resultados, estimamos a temperatura de transição do dano T_d para o modelo em:

$$T_d = 0,995 \pm 0,003, \quad \text{para } q = 3 \quad (4.19)$$

$$T_d = 0,772 \pm 0,002, \quad \text{para } q = 7 \quad (4.20)$$

Essas temperaturas de transição T_d concordam, dentro da precisão dos nossos resultados, com os valores de T_c e acreditamos que isso vale para qualquer q .

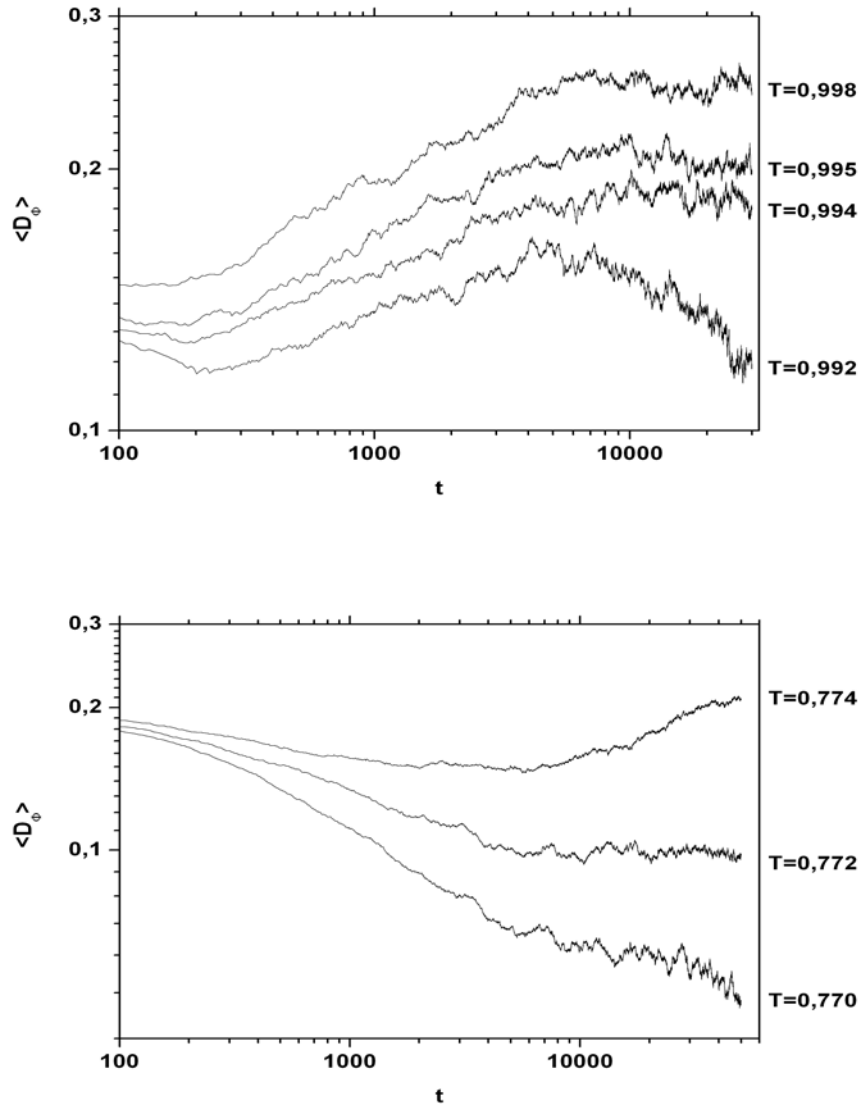


Figura 4.17: Gráfico log-log com o comportamento do dano médio $\langle D_\Phi(t) \rangle$ em função do tempo t para o modelo de Potts com $q = 3$ e $q = 7$ estados respectivamente. Identificamos a temperatura de transição para $q = 3$ estados em $T_d = 0,995 \pm 0,003$ e para $q = 7$ estados em $T_d = 0,772 \pm 0,002$.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Concluimos então que, usando a dinâmica de banho térmico, qualquer uma das duas definições de dano estudadas apresentam três fases dinâmicas do dano para todos os q estados (com $q \geq 3$) do modelo de Potts, sendo que uma destas fases não possui correspondente termodinâmico. A diferença entre o dano D_δ e D_Φ é que D_Φ preserva a igualdade entre duas configurações giradas uma da outra de um ângulo ϕ . Com isso, o dano D_Φ não apresenta efeito de memória. Usando a dinâmica de Metropolis, que preserva a invariância rotacional do sistema, as duas definições de dano apresentam apenas duas fases dinâmicas. O que difere D_δ de D_Φ é que novamente D_Φ não apresenta efeito de memória das condições iniciais.

Portanto, dada uma dinâmica de evolução e uma definição de dano que preservam a invariância rotacional do sistema, o modelo de Potts apresenta apenas duas fases dinâmicas para o dano para todos os q números de estados, sem que nenhuma das duas fases apresentem efeito de memória das condições iniciais. Além disso, concluímos que a temperatura de transição do dano T_d concorda com a temperatura crítica do modelo para todos os q , dentro da nossa precisão.

O próximo passo evolve a realização de medidas computacionais mais precisas (maior tempo de simulação, redes maiores e maior número de amostras) em torno das temperaturas de transição do dano T_d para os q estados do modelo. Esperamos identificar claramente a ordem da transição observando o comportamento do dano, ou seja, esperamos encontrar um salto descontínuo no valor do dano quando a transição

for de primeira ordem, como foi encontrado no trabalho de Luz et al [13]. Vamos estimar as temperaturas de transição T_d para os outros estados do modelo e, com o aumento do número de amostras e do tempo de simulação, esperamos melhorar a precisão das temperaturas já obtidas. Continuaremos em busca da função que define o valor assintótico do dano médio $\langle D_\Phi(t, T \rightarrow \infty) \rangle$ em função do número de estados q .

Finalmente, concluímos nesse trabalho que, se pretendemos fazer um estudo do dano em um sistema físico, com a esperança de que os resultados possuam correspondência fiel com a termodinâmica desse sistema, devemos ter cuidado na escolha da dinâmica e na própria definição do dano. Aqui abordamos o cuidado que devemos ter em preservar a simetria rotacional do sistema. Esse procedimento pode ser útil no estudo de sistemas mais complicados do que o modelo de Potts, modelos cuja termodinâmica não tenha muitos resultados já conhecidos. Um exemplo é o modelo de vidro de spin de Ising $\pm J$ na rede quadrada. Existe um consenso na literatura de que esse sistema não apresenta nenhuma transição de fase termodinâmica. No entanto, na dinâmica de banho térmico, esse sistema apresenta um transição de dano.

Pretendemos aplicar as técnicas propostas aqui para esse modelo nas redes quadrada e cúbica e investigar a existência das transições de fase termodinâmicas neste modelo através do estudo do dano.

Referências Bibliográficas

- [1] D. P. Landau and K. Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [2] K. Binder and D. W. Heermann. *Monte Carlo simulations in statistical physics*. Springer-Verlag, 1992.
- [3] E. Ising. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Z. Phys., 31(253), 1925.
- [4] L. Onsager. *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*. Phys. Rev., 65(117), 1944.
- [5] O. Golinelli and B. Derrida. *Dynamical phase transitions in the two-dimensional XY model*. J. Phys. A, 22(L939), 1989.
- [6] J. Chiu and S Teitel. *The effect of dynamics on damage spreading in the two-dimensional classical XY model*. J. Phys. A, 23(L891), 1990.
- [7] M. N. Barber and B. Derrida. *Dynamical Phase Transitions in the Two-Dimensional ANNNI Model*. J. Stat. Phys., 51(877), 1988.
- [8] F. W. Wu. *The Potts Model*. Rev. Mod. Phys., 54(235), 1982.
- [9] C. Tsallis and A. C. N. de Magalhães. *Pure and random Potts-like models: real-space renormalization-group approach*. Phys. Reports, 268(305), 1996.
- [10] H. E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész, and H. J. Herrmann. *Dynamics os Spreading Phenomena in Two-Dimensional Ising Model*. Phys. Rev. Lett., 59(20), 1987.

- [11] L. da Silva, F. A. Tamarit, and A. C. N. Magalhães. *Damage spreading in a two-dimensional Potts ferromagnet in a external field.* J. Phys. A, 30(2329), 1997.
- [12] M. F. A. Bibiano, F. G. B. Moreira, and A. M. Mariz. *Damage spreading in the q-state Potts model.* Phys. Rev. E, 55(2), 1997.
- [13] E. M. S. Luz, M. P. Almeida, U. M. S. Costa, and M. L. Lyra. *Damage spreading in the Potts model with cluster dynamics.* Phys. A, 282(176), 2000.
- [14] R. B. Potts. *Some Generalized Order-Disorder Transformations.* Proc. Camb. Phil. Soc., 48(106), 1952.
- [15] C. Domb. *Configurational Studies of the Potts Model.* J. Phys. A, 7(11), 1974.
- [16] H. A. Kramers and G. H. Wannier. *Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I.* Phys. Rev., 60(252), 1941.
- [17] J. A. Glazier and F. Graner. *Simulation of the differential adhesion driven rearrangement of biological cells.* Phys. Rev. E, 47(2128), 1993.
- [18] M. A. Knewitz and J. C.M. Mombach. *Computer simulation of the influence of cellular adhesion on the morphology of the interface between tissues of proliferating and quiescent cells.* Comp. Biol. and Medic., 36(59), 2006.
- [19] G.L. Thomas, J.C.M. Mombach, M.A.P. Idiart, C. Quilliet, and F. Graner. *Simulations of viscous shape relaxation in shuffled foam clusters.* Coll. Surf. A, 263(90), 2005.
- [20] S. A. Kauffman. *Metabolic Stability and Epigenesis in Randomly Connected Nets.* J. Theor. Biol., 22(437), 1969.
- [21] H. Hinrichsen and E. Domany. *Damage spreading in the Ising model.* Phys. Rev. E, 56(1), 1997.
- [22] P. H. Poole and N. Jan. *Dynamical properties of the two- and three-dimensional Ising models by 'damage spreading'.* L. Phys. A, 23(453), 1990.

- [23] F. A. Tamarit and L. Da Silva. *The 2D Ising ferromagnet: spreading of damage and its conjugate field*. J. Phys. A, 27(809), 1994.
- [24] V. L. Líbero. *De Ising a Metrópolis*. Rev. Bras. Ens. Fis., 22(3), 2000.
- [25] A. c. M. Stein-Barana, M. Yoshida, and V. L. Líbero. *A aproximação de campo médio de Bethe-Peierls*. Rev. Bras. Ens. Fis., 26(4), 2004.
- [26] F. Wang, N. Hatano, and M. Suzuki. *Study on Dynamical Critical Exponents of the Ising Model Using the Damage Spreading Method*. J. Phys. A, 28(4543), 1995.
- [27] M. L. Martins, H. F. V. Resende, C. Tsallis, and A. C. N. Magalhães. *Evidence for a new phase in the DMany-Kinzel cellular automaton*. Phys. Rev. Lett., 66(15), 1991.
- [28] E. N. Miranda and N. Parga. *Dynamical phase transitions in the classical Heisenberg model*. J. Phys. A, 24(1059), 1991.
- [29] A. M. Mariz. *Damage spreading in the Potts and Ashkin-Teller models: exact results*. J. Phys. A, 23(979), 1990.
- [30] Y. Leroyer and K Roudi. *Dynamical phase diagram of the two-dimensional p-state clock model*. J. Phys. A, 24(1931), 1991.
- [31] A. M. Mariz, A. M. C. Souza, and C. Tsallis. *Spread of damage in the discrete N-vector ferromagnet: exact results*. J. Phys. A, 26(1007), 1993.
- [32] B. Derrida and G. Weisbuch. *Dynamical phase transitions in 3-dimensional spin glasses*. Euro. Lett., 4(657), 1987.
- [33] A. V. Neumann and B. Derrida. *Finite size scaling study of dynamical phase transitions in two dimensional models: Ferromagnet, Symmetric and non Symmetric*. J. Phys. France, 49(1647), 1988.
- [34] I. A. Campbell and L. Arcangelis. *On the damage spreading in Ising spin glasses*. Phys. A, 178(29), 1991.

- [35] L. Arcangelis, A. Coniglio, and H. Herrmann. *Damage spreading in spin glasses*. Europhys. Lett., 9(749), 1989.
- [36] F. A. Tamarit, S. A. Cannas, and C. Tsallis. *Sensitivity to initial conditions in the Bak-Sneppen model of biological evolution*. Eur. Phys J. B, 1(545), 1998.
- [37] A. R. R. Papa and C. Tsallis. *Initiation games: Power-law sensitivity to initial conditions and nonextensivity*. Phys. Rev. E, 57(4), 1998.
- [38] E. V. Albano. *Spreading analysis and finite-size scaling study of the critical behavior of a forest fire model with immune trees*. Phys. A, 216(213), 1995.
- [39] A. T. Bernardes, U. M. S. Costa, A. D. Araújo, and D. Stauffer. *Damage spreading, coarsening dynamics and distribution of political votes in Sznajd model on Square Lattice*. Inter. J. Moder. Phys. C, 12(159), 2001.
- [40] R. M. Z. Santos. *Immunization and Aging: A learning process in the immune network*. Phys. Rev. Lett., 81(14), 1998.
- [41] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*. J. Phys. C, 6(1181), 1973.
- [42] M. Nicodemi. *Percolation and Cluster formalism in continuous spin systems*. Phys. A, 238(9), 1997.
- [43] T. Garel, J.C. Niel, and H. Orland. *Disorder line and tricriticality in the two dimensional XY model*. Europhys. Lett., 11(349), 1990.
- [44] P. Grassberger. *Damage spreading in the Ising model with Glauber dynamics*. J, Phys. A, 28(L67), 1995.
- [45] S. Wang and R. H. Swendsen. *Cluster Monte Carlo algorithms*. Phys. A, 167(565), 1990.
- [46] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. EdUSP, 1999.

- [47] P. L. DeVries. *A First Course in Computational Physics*. John Wiley & Sons, Inc., 1994.