

1994/05
n 386

Marcelo Lobato Martins

ESTUDO DA CRITICALIDADE DO
AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY-
KINZEL E DO MODELO DO RELÓGIO
QUIRAL DE TRÊS ESTADOS

Tese de doutorado

ESTUDO DA CRITICALIDADE DO
AUTOMATO CELULAR DE



1994/05
M386
019083

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro-Junho de 1994



Esse trabalho é um tributo à memória de meu pai e à infinita dedicação de minha mãe, luzes transcendentais a indicar sempre, por sobre as montanhas de Minas, um rumo seguro, pois que honrado, pelas trilhas incertas da vida.

AGRADECIMENTOS

Tive mestres eminentes e por amigos uma penca de gente sabida aos quais, agora, nesse momento de triunfo, devo sincero e profundo reconhecimento. Minha gratidão:

- a Constantino Tsallis, pela firme e estimulante orientação e, acima de tudo, pela atenção e amizade dedicadas a todos os membros do nosso grupo;
- aos professores Evaldo, Aglaé e Paulo Bisch pelas inúmeras discussões e constante estímulo, bem como ao Luciano que, entre uma carne de sol e outra, me ensinou a técnica de código multi-spin;
- ao camarada Hélio (Delmirão) que, como as montanhas de Minas, acompanha essa minha jornada desde os tempos da graduação em BH;
- ao Edson, Sérgio Cannas e Pancho, colegas dos tempos obscuros (mas criativos) do fim da história, da solidão pós-moderna, e que agora sabem, com certeza, que estavam a beber vida, enquanto os homens menores bebiam vinho;
- aos colegas de grupo Daniel, Ana, Welles, Ladário, Fortunato, Zé Arnaldo e André, que não são ricos e não têm mordomos, mas têm amigos;
- à Wanda, Myriam, o "general" Almério e Denise, que sempre, e com o máximo de empenho, ajudaram nosso trabalho;
- ao Departamento de Física da UFV, especialmente ao seu ex-chefe professor Luigi Toneguzzo, que ao "segurar diversas barras", e ao colega Evandro, que ao colocar a minha disposição seus poucos recursos de computação, permitiram a realização de grande parte desse trabalho;
- aos colegas professores Xandão, Fais, Fernando, Orlando e Gino e aos estudantes de Física (de hoje e de antes), especialmente Zé Antônio e Jorge Anderson autores de algumas das figuras desta tese, que juntos são pioneiros no desenvolvimento da física em Viçosa;
- à Anésia, porque, como diz Khayyam, os sábios não te ensinaram coisa alguma, mas a carícia dos longos cílios de uma mulher poderá revelar-te a felicidade.

Resumo

Através de simulação computacional extensiva vários aspectos da criticidade do autômato celular probabilístico unidimensional de Domany-Kinzel são analisados, tais como: diagrama de fases, parâmetros de ordem e seus campos externos conjugados, suscetibilidades associadas a tais parâmetros de ordem, tempo de relaxação ao equilíbrio e o efeito, sobre as classes de universalidade do modelo, da introdução de vínculos na dinâmica de evolução desse autômato.

Os resultados centrais desse amplo estudo numérico são a descoberta de uma terceira fase (fase caótica) no diagrama de fases do autômato de Domany-Kinzel e a proposta de um campo externo conjugado à distância de Hamming, o parâmetro de ordem característico da transição dinâmica desse autômato.

Também investigamos, através de um grupo de renormalização no espaço real, o modelo do relógio quirial (“chiral clock model”) de três estados definido em uma rede hierárquica. A rede do tipo ponte de Wheatstone preserva a estrutura dos estados fundamentais do modelo e permite sua solução exata, a qual será uma aproximação quando comparada ao modelo definido na rede quadrada.

ABSTRACT

Through extensive Monte Carlo simulations, we analyse several aspects of the stochastic one-dimensional Domany-Kinzel cellular automaton (CA) criticality, namely: phase diagram, order parameters, its conjugate fields and associated susceptibilities, magnetization relaxation time towards equilibrium and the effect of constraints introduced in the CA evolution rule on the critical surfaces and universality classes of the model.

The main results of these extensive numerical simulations are the demonstration that the Domany-Kinzel CA phase diagram presents a third phase (chaotic phase) beside the two previously suggested, and the introduction, for the first time, of a conjugate field to the Hamming distance, the order parameter associated to the active-chaotic (or dynamical) phase transition.

Also, we investigate, using a real-space renormalization group approach, the three-state chiral clock model in a self-dual planar hierarchical lattice. In order to simulate the square lattice and preserve, under renormalization, the ground states of the system, we selected a Wheatstone-bridge-type hierarchical lattice, for which our RG approach is exact.

Sumário

Resumo	i
Abstract	ii
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	viii
Introdução	1
1 AUTÔMATOS CELULARES.	5
1.1 Definição e Exemplos.	5
1.2 Classificação dos Autômatos Celulares Unidimensionais.	19
1.2.1 Dinâmica dos ACs: conceitos básicos.	20
1.2.2 Padrões de Evolução dos ACs e as Classes de Wolfram.	24
1.2.3 Entropias, Dimensões e as Classes de Wolfram.	26
1.2.4 Estabilidade dos Padrões de Evolução dos ACs: o Expoente de Liapunov.	39
2 AUTÔMATOS E FÍSICA ESTATÍSTICA	54
2.1 Regras Reversíveis e o AC Q2R	54
2.2 O Autômato Celular Probabilístico de Domany-Kinzel	61
3 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS NO AC DE DOMANY-KINZEL	75
3.1 Superfície Crítica e Classes de Universalidade	75
3.2 A Evolução Temporal da Magnetização.	84
3.3 Efeito do “Campo” Externo Uniforme.	89
3.4 Dinâmica Vinculada.	90
3.5 Qual é o Campo Conjugado à Distância de Hamming?	92

4 O MODELO DO RELÓGIO QUIRAL DE TRÊS ESTADOS.	101
4.1 Modelo e Formalismo	101
4.2 Resultados	105
4.3 Conclusões.	110
Conclusões	111
Bibliografia	114

Lista de Figuras

1.1	Padrões espaço-temporais gerados pela regra 90	9
1.2	Vizinhança de von Neumann e Moore no caso bidimensional	11
1.3	Exemplo de um diagrama de conexões para o modelo de Kauffman com $N = 5$ sítios e número de vizinhos ou conectividade $r = 3$	14
1.4	Padrões espaço-temporais gerados pela evolução do AC de Domany-Kinzel a partir de estados iniciais aleatórios.	16
1.5	Padrões espaço-temporais gerados pela evolução do AC de Domany-Kinzel a partir de uma semente	17
1.6	Diagrama de transição de estados para duas regras de AC unidimensionais totalísticas	21
1.7	Padrões espaço-temporais gerados por 16 regras totalísticas unidimensionais com $K = 3$ e $r = 2$	25
1.8	Regiões do espaço-tempo usadas no cálculo das entropias (a) espacial e (b) temporal.	31
1.9	Evolução de ACs totalísticos de classe 3 ($K = 2, r = 1$) a partir de um estado inicial semente	34
1.10	Entropia espacial métrica $S_{\mu}^{(x)}(X)$ em função do tempo para a regra 12 (classe 3)	35
1.11	Entropias métricas espacial $S_{\mu}^{(x)}$ e temporal $S_{\mu}^{(t)}$ em função dos comprimentos X e T dos blocos	37
1.12	Evolução do AC totalístico regra 46 ($K = 3, r = 2$) a partir de vários estados iniciais desordenados	38
1.13	Entropia métrica espacial $S_{\mu}^{(x)}$ em função do comprimento espacial X para o AC 46 ($K = 3$ e $r = 2$)	39
1.14	Diferença entre padrões que, em $t = 0$, diferiam no valor de um único sítio para as 4 classes de ACs	41
1.15	Distância de Hamming $\Psi(t)$ em função do tempo para as quatro classes de ACs unidimensionais	42
1.16	Possíveis comportamentos de $\psi(\infty) \times \psi(0)$ para a propagação de danos.	44

1.17	Comportamento de $\psi(\infty) \times \psi(0)$ para as classes de Wolfram.	45
1.18	“Moldura” do bloco espaço-temporal de $X \times T$ sítios	46
1.19	Padrões de dependência das seqüências temporais sobre as espaciais .	49
1.20	Mapas $x_{n+1} = f(x_n)$ para ACs unidimensionais $K = 2$, $r = 2$ das quatro classes de Wolfram	52
1.21	Atratores das regras unidimensionais 18 e 22, ambas com $K = 2$, $r = 1$ e de classe 3.	53
2.1	Estrutura das subredes em (a) uma dimensão e (b) na rede quadrada.	57
2.2	Relação entre magnetização e energia para o $Q2R$	60
2.3	Flutuação da magnetização em função da energia para o $Q2R$	62
2.4	Geometria do ACP de Domany-Kinzel unidimensional e sua relação com percolação direcionada na rede quadrada.	66
2.5	Diagrama de fases original e subespaço da percolação no ACP de Domany-Kinzel	67
3.1	Parâmetro de ordem $M(t)$ em função do tempo.	78
3.2	Superfície crítica do ACP de Domany-Kinzel.	79
3.3	Diagrama de fases do ACP de Domany-Kinzel isotrópico.	80
3.4	Gráfico de $\ln M_\infty \times \ln(p_1 - p_{1c})$ no caso isotrópico.	81
3.5	Parâmetro Ψ para diferentes valores da probabilidade p do dano inicial.	83
3.6	Parâmetro de ordem da transição dinâmica Ψ em função das probabi- lidades.	84
3.7	Diagrama de fases obtido por Zebende e Penna usando o método nu- mérico do gradiente.	85
3.8	Diagrama de fases do tipo campo médio obtido por Khoring e Schreck- enberg.	85
3.9	Diagrama de fases do tipo campo médio obtido por Tomé.	86
3.10	Parâmetro de ordem $M(t)$ em função do tempo.	88
3.11	Gráfico log-log de τ^* versus $(p_{1c} - p_1)$ no caso isotrópico.	89
3.12	Diagrama de fase para o caso isotrópico ($p_1 = p_3$) e $p_0 \equiv p(0, 0/1)$ arbitrário.	90
3.13	Suscetibilidade $\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial p_0} _{p_0=0}$ obtida numericamente para $p_2 = 0.1$. . .	91
3.14	Diagrama de fases isotrópico ($p_1 = p_3$) e legal ($p_0 = 0$) do ACP de Domany-Kinzel com $n \geq 1$	93
3.15	Expoente crítico β em função do alcance n dos vínculos para $p_2 = 0.70$.	94
3.16	Quatro maneiras diferentes de implementar o campo externo h	97
3.17	Distância de Hamming Ψ em função do campo externo h_2 para $p_1 =$ 0.85 e $N = 6400$	98
3.18	Suscetibilidade dinâmica $\chi_\Psi \simeq (\langle \Psi \rangle_{h \neq 0} - \langle \Psi \rangle_{h=0})/h$ em função de p_2 .	99
3.19	Suscetibilidade dinâmica χ_Ψ para o modelo de Ising bidimensional. . .	100

4.1	Células usadas para construir o grupo de renormalização	105
4.2	Diagrama de fluxo de renormalização.	108
4.3	Parte do diagrama de fase do modelo quiral de três estados.	109

Lista de Tabelas

1.1	Tabela de valores das regras 90, 22 e 150	8
1.2	Possíveis funções Booleanas de um único argumento binário.	14
1.3	Classificações de Wolfram e Tsallis dos autômatos celulares.	43
2.1	Relação entre o ACP de Domany-Kinzel e regras determinísticas	64
2.2	Equivalência entre ACPs d -dimensionais e modelos de spin $(d + 1)$ - dimensionais.	74

INTRODUÇÃO.

Nos últimos anos somos testemunhas de um grande avanço na Física Estatística, em particular no que se refere ao estudo dos sistemas complexos. Falando livremente, entendemos por complexos os sistemas constituídos de muitos componentes relativamente simples, interagindo entre si e que são capazes de mostrar intrincados padrões espaço-temporais. Tais sistemas ocorrem em profusão em áreas que variam desde a biologia até a economia, o que torna inevitável o caráter interdisciplinar de sua investigação. No caso da biologia, em particular, estruturas morfo-fisiológicas fractais [1, 2], correlações de longo alcance [3] e até o comportamento social de insetos [4], podem ser propriedades emergentes, auto-organizadas da dinâmica de muitas células ou indivíduos interagentes e cuja informação necessária à sua construção não está inicialmente contida no DNA. Uma vez que um aspecto essencial de tais sistemas é o comportamento cooperativo entre a multidão de seus constituintes simples, os fenômenos complexos são, por excelência, um campo aberto à contribuição dos físicos estatísticos.

Entretanto a maneira tradicional dos físicos de modelar fenômenos complexos leva, geralmente, a grandes conjuntos de equações diferenciais ou integrais não lineares acopladas cuja esperança de solução analítica é mínima. Mesmo acreditando-se, por princípio, que essas equações descrevam com precisão quantitativa os resultados experimentais ou o comportamento da natureza, sua complexidade obscurece os princípios físicos básicos envolvidos no fenômeno modelado e quase proíbe extrapolar qual o tipo de comportamento exibido pelo sistema sob condições experimentais distintas.

Por outro lado os métodos perturbativos não se aplicam adequadamente a sistemas não lineares, capazes de respostas “desproporcionais” mesmo às menores e mais sutis excitações ou variações em seus parâmetros. Assim, novas ferramentas de investigação devem ser introduzidas e as simulações computacionais se transformam, cada vez mais, em uma poderosa técnica para o entendimento dos fenômenos complexos. Essas simulações requerem novas estratégias ou algoritmos uma vez que a simples solução numérica das equações diferenciais ou integrais acopladas envolve enormes problemas, exigem vasta memória e tempo de computação em velozes computadores, inviabilizando, por vezes, a exploração exaustiva do espaço de parâmetros desses sistemas complexos.

Uma alternativa é construir modelos que são discretos no tempo, no espaço, nas variáveis e nos quais as leis físicas são “imitadas” por regras simples processadas, geralmente, em paralelo. Em suma: Autômatos Celulares (ACs). Exatamente por sua simplicidade, os ACs são importantes instrumentos para modelar fenômenos complexos, para os quais os parâmetros relevantes ou os mecanismos físicos envolvidos, bem como sua importância relativa, são pouco conhecidos. A grande velocidade de simulação dos ACs permite explorar melhor o espaço de parâmetros e decidir, ou pelo menos excluir, mecanismos físicos irrelevantes para cada sistema complexo.

A primeira parte desta tese se concentra exatamente no estudo de um autômato celular, proposto por Domany e Kinzel, relacionado a modelos de spins e problemas de percolação na rede quadrada. No capítulo 1 apresentamos os aspectos básicos dos ACs. Em particular discutimos como os ACs podem gerar espontaneamente estruturas complexas, um dos mais interessantes fenômenos exibidos pelos sistemas dinâmicos. Além do comportamento dinâmico (temporal) dos sistemas caóticos com poucos graus de liberdade, os ACs, como sistemas espacialmente estendidos (com muitos graus de liberdade), são capazes de exibir caos e gerar complexos padrões espaciais. Esse capítulo é, essencialmente, uma rápida revisão dos conceitos básicos e das propriedades dinâmicas dos ACs. Ele contém alguns resultados originais que incluem certas figuras e gráficos e uma comparação entre as classificações de Wolfram e Tsallis para os ACs.

No capítulo 2 fazemos uma breve revisão do uso dos ACs em Física Estatística. Discutimos inicialmente o autômato determinístico Q2R, proposto por Pomeau e Vichniac, e que é capaz, em razão de seu caráter paralelo, de rápidas simulações do modelo de Ising no ensemble microcanônico. Em seguida descrevemos em algum detalhe a relação existente entre os autômatos probabilísticos unidimensionais e os modelos estatísticos de spins em duas dimensões. Em particular mostramos como os acoplamentos desses modelos de spins são determinados pelas probabilidades condicionais usadas na definição das regras dos ACs probabilísticos unidimensionais. Também mostramos como o AC probabilístico de Domany-Kinzel, o principal objeto desta tese, contém, como casos particulares, os problemas de percolação direcionada e percolação compacta na rede quadrada. Novamente esse capítulo é uma revisão da literatura e se faz necessário para ilustrar o uso dos ACs como modelos em física estatística e como base para o capítulo seguinte.

No capítulo 3 estudaremos extensamente, através de simulação computacional, o AC de Domany-Kinzel. Vários aspectos da criticalidade desse autômato são analisados: o diagrama de fases dos casos isotrópico e anisotrópico, parâmetros de ordem, campos externos conjugados a esses parâmetros e as funções respostas lineares (susceptibilidades) associadas, o efeito da introdução de vínculos na dinâmica de evolução do AC sobre as classes de universalidade do modelo, tempo de relaxação ao equilíbrio etc. Todos esses resultados são originais e alguns deles foram confirmados por simulações mais extensas ou cálculos do tipo campo médio, realizados por outros pesquisadores. Sem dúvida os principais resultados desse amplo estudo numérico foram a demonstração inequívoca da *existência de uma terceira fase* (fase caótica) no diagrama de fases do AC e a proposta de um *campo externo conjugado à distância de Hamming*, o parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fase ativa-caótica.

O capítulo 4, que compõe a segunda parte desta tese, é dedicado ao estudo, através de um grupo de renormalização no espaço real, do modelo do relógio quiral de 3 estados definido em uma rede hierárquica. A rede hierárquica, do tipo ponte de Wheatstone, foi escolhida de modo a preservar a estrutura dos estados fundamentais do modelo. Para essa rede nosso formalismo de grupo de renormalização tem solução

exata, que fornecerá uma aproximação ao problema definido na rede quadrada. Entretanto, o formalismo de grupo de renormalização usado não foi implementado para detectar a rica estrutura de fases moduladas apresentada pelo modelo quiral.

Finalmente concluímos no capítulo 5, no qual estão reunidos e sintetizados os principais resultados obtidos nesta tese bem como indicadas as futuras perspectivas para a continuação desses trabalhos.

Capítulo 1

AUTÔMATOS CELULARES.

Neste capítulo discutiremos alguns aspectos básicos dos autômatos celulares (ACs) tais como a sua definição, alguns exemplos unidimensionais simples, os diversos critérios usados para sua classificação e certas características importantes da evolução dinâmica desses sistemas. Além disso mostraremos alguns exemplos importantes da aplicação dos ACs no estudo de sistemas complexos em Física e Biologia.

1.1 Definição e Exemplos.

Os ACs são modelos matemáticos para sistemas complexos compostos por um grande número de componentes simples e idênticos, chamados sítios ou células, que interagem entre si via acoplamentos locais (definindo, neste caso, uma estrutura de rede) ou de longo alcance (caso no qual a estrutura da rede perde o sentido e é substituída pelo número de conexões de cada sítio).

Todo sítio ou célula só pode assumir um, dentre um conjunto finito de valores possíveis. O novo valor associado à cada sítio depende dos valores *anteriores* da vizinhança desse sítio (i.e., do conjunto de sítios conectados a ele). A evolução do sistema é feita simultaneamente em passos de tempo discretos e de acordo com uma regra particular associada a cada célula (em geral a mesma para todas elas).

Em resumo, os ACs são caracterizados por três aspectos básicos: variável ou

campo discreto, espaço discreto e tempo discreto. Essa tripla discretização nos leva a um sistema que pode ser estritamente tratável num computador real, sem dúvida um dos pontos chaves responsáveis pelo interesse atual no estudo dos ACs.

Como ficará claro nos exemplos que se seguem, esses modelos, apesar da simplicidade de sua construção, exibem em muitos casos comportamentos complexos. Mesmo evoluindo a partir de estados iniciais aleatórios, sem estrutura, muitos ACs mostram “auto-organização” com o surgimento de padrões espaço-temporais para tempos grandes. É claro que a forma e a extensão desses padrões dependerá da natureza da regra de evolução do AC.

De modo a entender melhor essa definição e estabelecer nossa notação vamos considerar os ACs unidimensionais estudados por Wolfram [5, 6]. $\sigma_i(t)$ representará o valor, no tempo t , do sítio i ($i = 1, 2, \dots, N$) de uma rede periódica unidimensional, podendo ser qualquer inteiro pertencente ao intervalo $[0, K - 1]$, isto é, $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, K - 1, \forall i$. O valor do sítio i mudará no tempo pela aplicação do mapa

$$\sigma_i(t) = F_i[\sigma_{i-r}(t-1), \dots, \sigma_i(t-1), \dots, \sigma_{i+r}(t-1)] \quad (1.1)$$

onde $F_i : \{\text{vizinhança do sítio } i\} \rightarrow \{0, 1, \dots, K - 1\}$ é uma função arbitrária que especifica a regra do AC. Em geral colocamos $F_i = F, \forall i$, isto é, uma regra homogênea (idêntica para todo sítio). O parâmetro r na equação 1.1 define o alcance da regra: o valor de um dado sítio depende dos valores de uma vizinhança de no máximo $2r + 1$ sítios, no passo de tempo anterior.

Dados r e K temos K^{2r+1} possíveis configurações da vizinhança para o sítio i , sendo que cada uma delas forma uma única seqüência de $2r + 1$ dígitos, capazes de assumir K valores. Portanto cada configuração corresponde à uma “string” de $2r + 1$ dígitos K -nários, ou seja, a um número escrito na base K . Logo todas as possíveis configurações da vizinhança podem ser representadas na base 10, e de maneira única, por um número entre 0 e $(K^{2r+1} - 1)$ como abaixo:

$$v(t) = \sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j}(t) K^{r-j} \quad (1.2)$$

Uma vez que a função F pode associar qualquer um dos K valores possíveis a uma dada vizinhança $v(t)$ temos um total de $K^{K^{2r+1}}$ possíveis regras de autômatos unidimensionais. Assim uma forma alternativa da eq. 1.1 é:

$$\sigma_i(t) = F[v(t)] = F\left[\sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j}(t-1)K^{r-j}\right] \quad (1.3)$$

com F tendo um único argumento inteiro. As regras totalísticas, usadas em vários exemplos abaixo, são obtidas quando todos os sítios na vizinhança possuem igual peso, de modo que o valor de um sítio depende apenas da soma total dos valores precedentes de todas as células de sua vizinhança. Para regras totalísticas temos

$$\sigma_i(t) = F\left[\sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j}(t-1)\right] \quad (1.4)$$

O estado ou configuração de um AC no passo de tempo t fica especificado pelo conjunto dos valores $\sigma_i(t), i = 1, 2, \dots, N$. As regras cuja evolução temporal mantém invariante a configuração “nula”, para a qual $\sigma_i = 0, \forall i$, são ditas “legais”. Para tais regras legais devemos ter

$$F[0, 0, \dots, 0] = 0 \text{ ou } F[0] = 0 \quad (1.5)$$

Os autômatos totalísticos constituem uma pequena parcela de todas as regras possíveis, apenas $K^{(K-1)(2r+1)}$. Aqui $(K-1)(2r+1)$ é o número de somas possíveis para $2r+1$ sítios capazes de assumir K valores. O número de regras totalísticas legais é ainda menor, $K^{(2r+1)(K-1)-1}$, já que $F(0) = 0$ sempre.

Para fixar o que foi dito acima, consideremos três exemplos dentre os autômatos mais simples: aqueles com vizinhança de 3 sítios ($r = 1$) e dois estados por célula ($K = 2$), mostrados na tabela 1.1.

Nessa tabela vemos, por exemplo, que a regra 90 associa à vizinhança 111 o valor $\sigma_i = 0$ ao sítio central no próximo passo de tempo, isto é, $F[1, 1, 1] = 0$ ou $F[7] = 0$. Já à vizinhança 110 a regra 90 fornece $\sigma_i(t) = F[110] = 1$ ou $\sigma_i(t) = F[6] = 1$ para o novo valor do sítio central e assim sucessivamente.

	<i>Vizinhança no tempo t</i>							
<i>Regra</i>	111	110	101	100	011	010	001	000
90	0	1	0	1	1	0	1	0
22	0	0	0	1	0	1	1	0
150	1	0	0	1	0	1	1	0

Tabela 1.1: Valores associados ao sítio central para cada uma das 8 vizinhanças possíveis pelas regras 90, 22 e 150. Todas com $K = 2$ e $r = 1$.

Note que todos os ACs acima, 90, 22 e 150, são legais e que as regras 22 e 150 são totalísticas. Em particular para a regra 22 temos

$$\sigma_i(t) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j}(t-1) = 1 \\ 0 & , \text{ diferentemente,} \end{cases} \quad (1.6)$$

um exemplo da eq. 1.4.

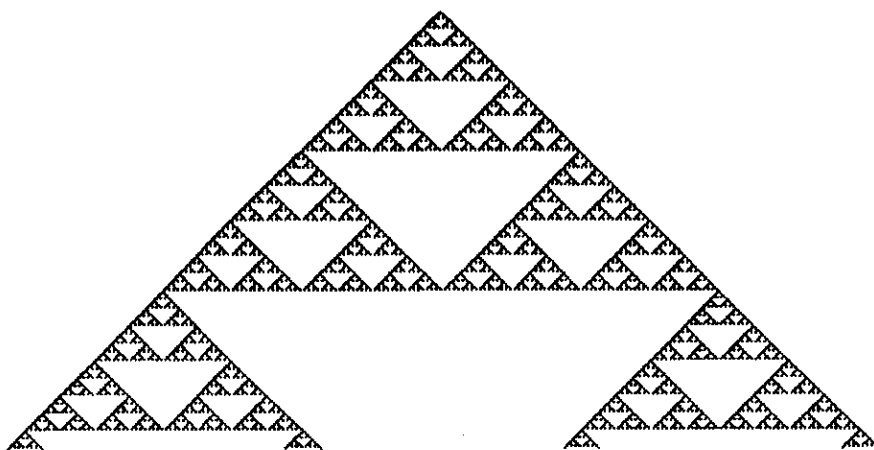
Na figura 1.1 mostramos os padrões gerados pela evolução temporal da regra 90 a partir de dois estados iniciais: o primeiro com apenas um sítio não nulo (semente) e o segundo uma configuração aleatória na qual cada sítio pode ser 1 ou 0 com igual probabilidade. Note que a regra 90, embora muito simples, produz, como mencionamos anteriormente, uma surpreendente estrutura espaço-temporal com triângulos de vários tamanhos (caso de estado inicial aleatório) ou o “gasket” de Sierpinski (caso de uma semente), um fractal regular com dimensão fractal $D = \ln 3 / \ln 2 \approx 1,59$.

Na tabela acima especificamos a função F , a regra de evolução temporal do AC, através de um número ou código

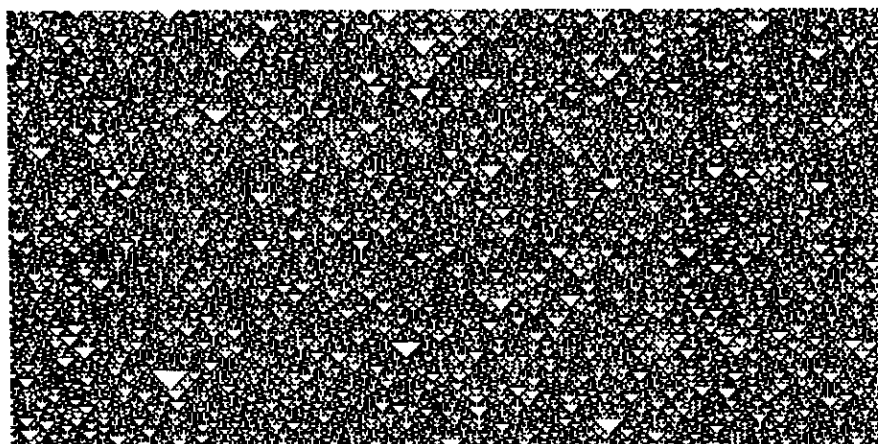
$$R_F = \sum_{\sigma_{i-r}, \dots, \sigma_{i+r}} F[\sigma_{i-r}, \dots, \sigma_{i+r}] K^{\sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j} K^{r-j}} \quad (1.7)$$

ou

$$R_F = \sum_{v(t)=0}^{K^{2r+1}} F[v(t)] K^{v(t)}. \quad (1.8)$$



(a)



(b)

Figura 1.1: Padrões espaço-temporais gerados pela evolução temporal da regra 90 ($K = 2$ e $r = 1$) a partir de: (a) uma semente (estado inicial com um único sítio não nulo) e (b) um estado inicial aleatório (valores 0 e 1 equiprováveis).

Esse número decimal contém, em resumo, toda a informação presente na tabela que define uma dada regra. Isso pode ser visto facilmente através da eq. 1.8, a decomposição na base K do código R_F . Dessa decomposição descobrimos imediatamente os valores $F(v)$ associados ao sítio central de cada vizinhança v . Assim, por exemplo, a regra 90 tem a seguinte decomposição na base 2 : $90 = 01011010|_2$. Então o sítio central será $\sigma_i(t) = 0$ se sua vizinhança anterior, $\sigma_{i-1}(t-1), \sigma_i(t-1), \sigma_{i+1}(t-1)$, for $\{111\}$; será $\sigma_i(t) = 1$ se, no tempo $t-1$, sua vizinhança for $\{110\}$ e assim por diante até $\sigma_i(t) = 0$ se, em $t-1$, sua vizinhança for $\{000\}$. De maneira análoga podemos especificar uma regra totalística por um código decimal

$$C_F = \sum_{\text{soma}=0}^{(2r+1)(K-1)} F[\text{soma}]K^{\text{soma}} \quad (1.9)$$

onde

$$\text{soma} = \sum_{j=-r}^{+r} \sigma_{i+j}. \quad (1.10)$$

É claro que todas as 256 regras de AC unidimensionais, com $K = 2$ e $r = 1$ podem ser escritas em termos de funções Booleanas de 3 entradas, envolvendo os operadores lógicos \vee (and), \wedge (or), \oplus (xor) e \neg (not). Assim, por exemplo, a regra 90 é representada pela função Booleana $\sigma_{i-1} \oplus \sigma_{i+1}$.

A generalização das equações 1.1 ou 1.3, isto é, das regras de AC para dimensões superiores é imediata. Para $r = 1$ existem no mínimo, duas formas simétricas de vizinhança: a de von Neumann, contendo $2d + 1$ sítios, e a de Moore contendo 3^d sítios; ambas são mostradas na figura 1.2. Para outros valores de r outras “células unitárias” podem ser definidas.

Discutidos esses pontos iniciais estamos em posição de tentar uma definição bastante geral para os AC, conforme referência [7].

Considere um conjunto *enumerável* de posições $\{x_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$) de qualquer arranjo espacial (por exemplo, uma rede de Bravais como a cadeia linear ou uma rede hierárquica como o “Sierpinski gasket”). A cada uma dessas posições associamos uma variável σ_i capaz de assumir K_i valores distintos (isto é, $\sigma_i = 1, 2, \dots, K_i$). (Em

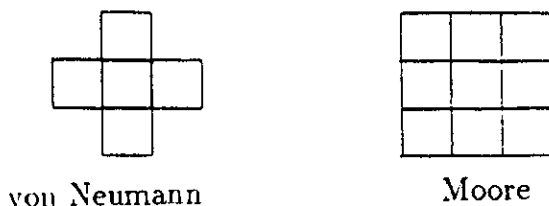


Figura 1.2: Vizinhança de von Neumann e Moore no caso bidimensional

geral $K_i = K, \forall i$ e tipicamente $K = 2$). No tempo $t = 0$ devemos fornecer o conjunto $\{\sigma_i(0)\}$; a configuração $\{\sigma_i(1)\}$, no tempo $t = 1$, ou é diretamente dada como parte das condições iniciais ou é determinada a partir de um certo conjunto de regras (determinísticas ou estocásticas) $F_i(\{\sigma_j\}, 1)$, isto é, $\sigma_i(1) = F_i(\{\sigma_j(0)\}, 1), \forall i$. No caso mais geral as condições iniciais são dadas pelo conjunto $\{\{\sigma_i(0)\}, \{\sigma_i(1)\}, \dots, \{\sigma_i(\tau)\}\} \equiv \{\sigma_i(0 \rightarrow \tau)\}$, a situação mais freqüente sendo aquela no qual $\tau = 0$, ou seja, o novo estado do AC depende apenas de seu estado anterior. Isso define um processo Markoviano em tempo discreto com variáveis simultaneamente atualizadas. O próprio conjunto de regras $\{F_i(\{\sigma_j\}, t)\}$ pode mudar com o tempo t de modo que, no caso mais geral, a evolução do AC se expressa como

$$\begin{aligned}
 \sigma_i(\tau + 1) &= F_i(\{\sigma_j(0 \rightarrow \tau)\}, \tau + 1) \\
 \sigma_i(\tau + 2) &= F_i(\{\sigma_j(1 \rightarrow \tau + 1)\}, \tau + 2) \\
 &\vdots \\
 \sigma_i(t) &= F_i(\{\sigma_j(t - 1 - \tau \rightarrow t - 1)\}, t), \quad t = \tau + 1, \tau + 2, \dots
 \end{aligned}
 \tag{1.11}$$

O caso mais freqüente é $F_i(\{\sigma_j(t - 1 - \tau \rightarrow t - 1)\}, t) = F(\{\sigma_j(t - 1 - \tau \rightarrow t - 1)\}, \forall(i, t)$, ou seja, regras imutáveis no tempo e homogêneas, quer dizer, independentes da posição do sítio (invariantes por translação no caso de redes de Bravais). Note que existe a possibilidade da regra de um AC variar no tempo também se a vizinhança de cada sítio muda a cada instante.

Além disso as regras mais comuns são homogêneas *locais*, para as quais $\sigma_i(t)$

é determinado (supondo $\tau = 0$ por simplicidade) pelos valores $\{\sigma_j(t-1)\}$ com j percorrendo os r vizinhos do sítio i (incluindo ele próprio). De modo a simplificar nossa notação usaremos, até o final desta seção, r para indicar o número total de vizinhos de um dado sítio que antes, na notação de Wolfram, era $2r + 1$. Para tais ACs as regras são estabelecidas dando, no caso *determinístico*, um mapa ou correspondência entre as K^r vizinhanças e os K estados possíveis, ou, no caso *estocástico* (também dito *probabilístico* ou *aleatório*), dando o conjunto de probabilidades

$$\{ p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r/0), p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r/1), \dots, p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r/K-1) \} \quad (1.12)$$

satisfazendo a condição

$$\sum_{\sigma=0}^{K-1} p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r/\sigma) = 1 \quad (1.13)$$

onde $\sigma_j = 0, 1, 2, \dots, K-1$ ($j = 1, 2, \dots, r$). Aqui $p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r/\sigma)$ é a probabilidade de termos, para o sítio dado, o estado σ no tempo t , sabendo-se que no tempo $(t-1)$ os estados de seus r vizinhos eram $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r\}$. Esse AC probabilístico é caracterizado por $(K-1)K^r$ probabilidades independentes, por exemplo, $\{p(\sigma_1, \dots, \sigma_r/0), \dots, p(\sigma_1, \dots, \sigma_r/K-2)\}$ para cada um dos K^r estados da vizinhança $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r\}$. É claro que esses ACs contém como casos particulares autômatos determinísticos.

Como ilustração da ampla definição acima, eq. 1.11, e da generalidade dos ACs vamos discutir mais alguns exemplos.

EXEMPLO 1: autômatos com limiar e modelos de redes de neurônios à temperatura nula [8].

Consistem de N sítios binários interagentes cujos valores $\sigma_i(t) = \pm 1$ evoluem de acordo com funções f_i , dependentes de r variáveis de entrada $\sigma_{j_1}(i), \dots, \sigma_{j_r}(i)$, e definidas pela prescrição

$$f_i = \text{sign} \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j(t) - h \right), i = 1, 2, \dots, N \text{ e } \forall t. \quad (1.14)$$

O índice j varia sobre os r vizinhos do sítio i . Os acoplamentos J_{ij} , frequentemente assimétricos, são escolhidos aleatoriamente de acordo com uma dada distribuição $P(J_{ij})$ de modo que uma fração q_1 dos acoplamentos é positiva (excitadora), uma fração q_2 é negativa (inibidora) e a fração restante é nula (diluição). Assim cada sítio realiza, em passos de tempo discretos, um teste: se o estímulo proveniente de seus vizinhos ($\sum_j J_{ij}\sigma_j(t)$) superar o limiar h então ele ficará ativo ($\sigma_i(t+1) = +1$), caso contrário ele ficará inativo ($\sigma_i(t+1) = -1$).

A regra 1.14, imutável no tempo e homogênea, pode ser aplicada a dois tipos de estruturas: um AC não local, com interações de longo alcance (caso de dimensão infinita ou de campo médio) no qual as r entradas de cada sítio são escolhidas ao acaso dentre os $N - 1$ restantes; a outra, um AC local de dimensão finita no qual os sítios estão sobre uma rede regular d -dimensional (por exemplo uma rede quadrada, $r = 4$, ou cúbica simples, $r = 6$) e as r entradas do sítio i são os seus primeiros vizinhos na rede.

Nesses modelos cada sítio pode representar um spin, um neurônio formal, um gene, um linfócito etc. O estudo da dinâmica determinística desses autômatos desordenados é relevante para o problema de processamento de imagens e reconhecimento de padrões visuais bem como a implementação de “computadores neurais” com arquitetura paralela capazes de comportamento cognitivo.

EXEMPLO 2: o modelo de Kauffman [9].

O modelo de Kauffman foi introduzido para o estudo da diferenciação celular. Ele descreve um sistema de N genes $\sigma_i(t) = \pm 1$ (+1 se o gene está ativo e -1 se ele está inibido). A atividade de um dado gene i é influenciada por r outros genes, $j_1(i), j_2(i), \dots, j_r(i)$, usualmente distantes do gene i . Assim é uma boa aproximação assumir que $j_1(i), \dots, j_r(i)$ são escolhidos aleatoriamente dentre os N genes. As atividades dos genes evoluem, em passos de tempo discretos, de acordo com funções Booleanas aleatórias f_i de r entradas

$$\sigma_i(t+1) = f_i(\sigma_{j_1(i)}(t), \dots, \sigma_{j_r(i)}(t)). \quad (1.15)$$

σ	$f_1(\sigma)$	not	identidade	$f_4(\sigma)$
-	+	+	-	-
+	+	-	+	-

Tabela 1.2: Possíveis funções Booleanas de um único argumento binário.

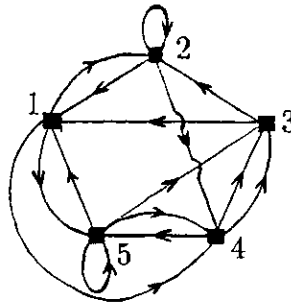


Figura 1.3: Exemplo de um diagrama de conexões para o modelo de Kauffman com $N = 5$ sítios e número de vizinhos ou conectividade $r = 3$.

Existem 2^{2^r} diferentes funções Booleanas de r variáveis: por exemplo para $r = 1$ existem 4 funções Booleanas mostradas na tabela 1.2.

O AC de Kauffman, determinístico, não homogêneo e não local, é um exemplo de uma classe de modelos conhecidos como redes de autômatos aleatórios. A aleatoriedade entra nesse AC em dois pontos: na escolha dos r vizinhos de cada sítio e das funções f_i usadas para atualizá-los. Especificados no tempo $t = 0$ eles permanecem fixos para sempre. Nessa versão de campo médio ou de dimensão infinita, a estrutura relevante é um intrincado diagrama de conexões como exemplificado na figura 1.3. É claro que podemos definir um AC de dimensão finita no qual as r entradas são os primeiros vizinhos de um sítio numa rede regular d -dimensional.

EXEMPLO 3: o AC de Domany-Kinzel [10].

Esse autômato probabilístico com $K = 2$ e $r = 2$ está ligado a modelos

de spins bidimensionais envolvendo interações anisotrópicas de multispin e campos externos. Além disso contém como casos particulares os problemas de percolação direcionada e percolação compacta numa rede quadrada. Ele será o principal objeto de estudo dessa tese.

O AC de Domany-Kinzel extendido consiste de uma cadeia linear de N sítios com condições de contorno periódicas. Cada sítio i é capaz de assumir dois valores: $\sigma_i = 0$ ou $\sigma_i = 1$. A evolução no tempo de cada uma dessas variáveis depende, de maneira probabilística, dos estados de seus vizinhos imediatos, à esquerda σ_{i-1} e à direita σ_{i+1} , no instante de tempo anterior de acordo com as probabilidades condicionais

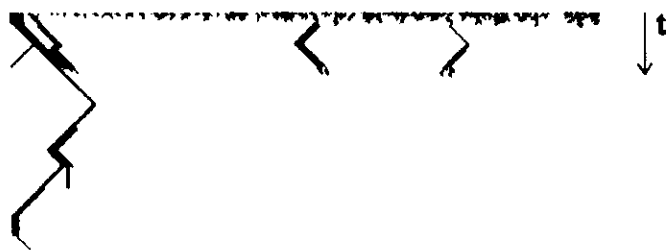
$$p(1,1/1) \equiv p_2, p(1,0/1) \equiv p_1, p(0,1/1) \equiv p_3 \text{ e } p(0,0/1) \equiv p_0. \quad (1.16)$$

(É evidente que $p(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}/0) = 1 - p(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}/1)$.) Esse autômato contém, como casos particulares, 16 ACs determinísticos unidimensionais do tipo Wolfram quando as probabilidades condicionais assumem, simultaneamente, os valores inteiros 0 ou 1. Por exemplo, no caso $p_1 = p_3 = 1, p_2 = 0$ e $p_0 = 0$ temos a regra 90 ou XOR. Note que ao tomarmos $p(0,0/1) = 0$ estamos considerando um AC *legal*.

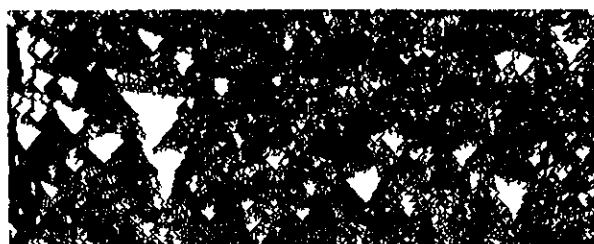
Nas figuras 1.4 e 1.5 mostramos típicos padrões espaço-temporais gerados pelo AC de Domany-Kinzel isotrópico ($p(1,0/1) = p(0,1/1)$) para três conjuntos de probabilidades pertencentes, respectivamente, à cada uma das três fases desse AC que serão discutidas mais adiante.

EXEMPLO 4: Sistemas governados por um Hamiltoniano: o modelo de Ising.

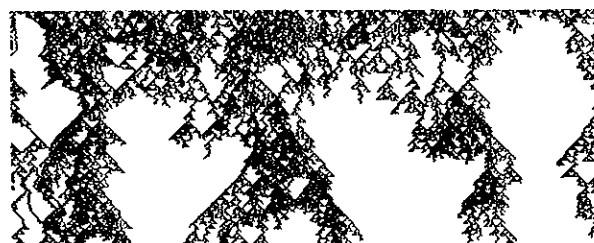
Sistemas em mecânica estatística são usualmente definidos como coleções de N objetos que interagem através de um Hamiltoniano \mathcal{H} , cuja “dinâmica” pode ser estudada através da introdução de regras de evolução compatíveis com este Hamiltoniano. Um exemplo típico é o modelo de Ising que consiste de N spins $\sigma_i = \pm 1$ localizados numa rede regular (em geral com condições de contorno periódicas). A energia $\mathcal{H}(\{\sigma\})$ da configuração de spins $\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ é dada pela expressão



(a)



(b)



(c)

Figura 1.4: Padrões espaço-temporais gerados pela evolução temporal, a partir de estados iniciais aleatórios equiprováveis, do AC de Domany-Kinzel com $N = 500$ sítios, $p(0,0/1) = 0$ e (a) $p(1,1/1) = 0.7$, $p(1,0/1) = p(0,1/1) = 0.5$ (fase congelada); (b) $p(1,1/1) = 0.7$, $p(1,0/1) = p(0,1/1) = 0.8$ (fase ativa) e (c) $p(1,1/1) = 0.1$, $p(1,0/1) = p(0,1/1) = 0.8$ (fase caótica).

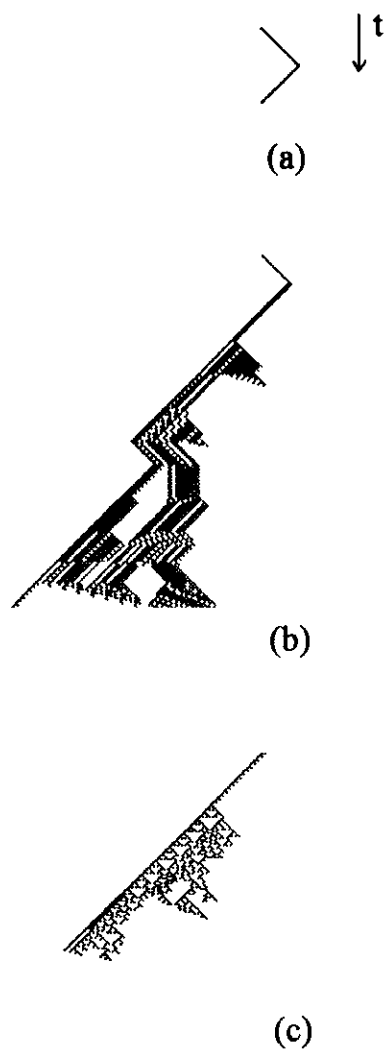


Figura 1.5: Padrões espaço-temporais gerados pela evolução temporal, a partir de estados iniciais sementes, do AC de Domany-Kinzel com $N = 500$ sítios, $p(0, 0/1) = 0$ e (a) $p(1, 1/1) = 0.7$, $p(1, 0/1) = p(0, 1/1) = 0.5$ (fase congelada); (b) $p(1, 1/1) = 0.7$, $p(1, 0/1) = p(0, 1/1) = 0.8$ (fase ativa) e (c) $p(1, 1/1) = 0.1$, $p(1, 0/1) = p(0, 1/1) = 0.8$ (fase caótica).

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}) = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \quad (1.17)$$

sendo $J_{ij} = J_{ji}$ a interação entre os spins i e j e h_i o campo local no sítio i . As propriedades de equilíbrio à temperatura T desse sistema são descritas pela probabilidade

$$P_{eq}(\{\sigma\}) = \frac{\exp(-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma\})}{k_B T})}{Z} \quad (1.18)$$

da configuração $\{\sigma\}$ ser ocupada. Z é a função de partição

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma\})}{k_B T}) \quad (1.19)$$

Existem diversas maneiras de introduzir regras dinâmicas para esse sistema. Vamos descrever uma delas, a dinâmica seqüencial de banho térmico (“heat bath”) na qual se atualiza do primeiro ao último spin, um de cada vez e sempre nessa ordem, à maneira de uma “datilógrafa”. Essa dinâmica também leva à tradicional distribuição de equilíbrio de Boltzmann. Na dinâmica de banho térmico começamos com uma dada configuração inicial de spins $\{\sigma(0)\}$. Para fazer a evolução do sistema de uma configuração $\{\sigma(t)\}$, no tempo $t = n\Delta t$, $n = 1, 2, 3, \dots$ e $\Delta t = 1/N$, para uma configuração $\{\sigma(t + \Delta t)\}$, no tempo $t + \Delta t$, realizamos os seguintes passos :

- i) tomamos o sítio $i = n - [(n - 1) \text{div} N]N$. Assim, a cada passo de tempo Δt escolheremos, sempre na mesma ordem e do primeiro ao último, apenas um spin da rede;
- ii) calculamos a probabilidade

$$p_i(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\sum_j J_{ij} \sigma_j + h_i}{k_B T}\right); \quad (1.20)$$

- iii) sorteamos um número aleatório $z_i(t)$ uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1]$;
- iv) atualizamos o spin σ_i de acordo com a regra

$$\sigma_i(t + \Delta t) = \text{sin}al(p_i(t) - z_i(t)) \quad (1.21)$$

mantendo todos os outros spins inalterados, isto é, $\sigma_j(t + \Delta t) = \sigma_j(t)$ para $j \neq i$.

Portanto cada configuração $\{\sigma(t + \Delta t)\}$ depende apenas da configuração prévia $\{\sigma(t)\}$, através da eq. 1.20, e de um certo ruído (a escolha do número aleatório $z_i(t)$). Esse é um exemplo de uma dinâmica estocástica na qual a regra de evolução de cada sítio varia no tempo entre a eq. 1.21 e a identidade ($\sigma_i(t + \Delta t) = \sigma_i(t)$). Assim a dinâmica de banho térmico, como a de Metropolis etc, se encaixa na definição geral dos ACs.

Deve-se ressaltar que apenas quando as interações J_{ij} são simétricas, isto é, $J_{ij} = J_{ji}$, a distribuição de equilíbrio final resultante da dinâmica de banho térmico é dada pela eq. 1.18, o que nos permite usar a maquinaria tradicional da mecânica estatística para calcular as propriedades termodinâmicas do sistema de spins. No caso de interações assimétricas, $J_{ij} \neq J_{ji}$, não se conhece uma expressão como a eq. 1.18 que forneça $P_{eq}(\{\sigma\})$ em termos dos acoplamentos J_{ij} e dos campos h_i , não sendo, portanto, muito mais fácil estudar o equilíbrio do que o não equilíbrio.

Finalmente pode-se mostrar que a atualização simultânea ou paralela dos spins que não interagem diretamente (isto é, $J_{ij} = 0$) leva sempre à mesma distribuição de equilíbrio, eq. 1.18. Portanto pode-se acelerar a simulação computacional de sistemas cujas interações permitem sua divisão em subredes, dentro das quais dois spins quaisquer não interagem, e que, assim, podem ser atualizados simultaneamente.

1.2 Classificação dos Autômatos Celulares Unidimensionais.

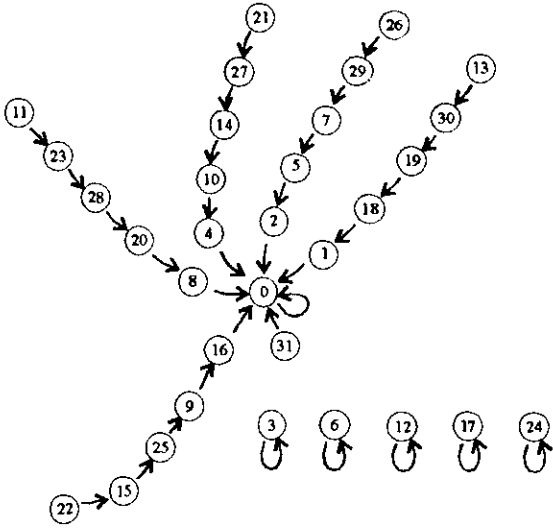
Considerados esses exemplos, voltemo-nos aos ACs unidimensionais de Wolfram de modo a estudar alguns aspectos interessantes de sua dinâmica e construir algumas medidas quantitativas usadas em sua caracterização.

1.2.1 Dinâmica dos ACs: conceitos básicos.

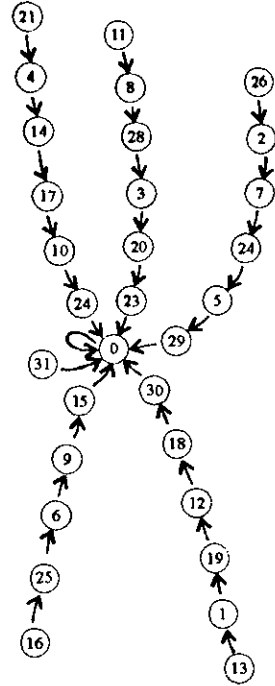
Nos exemplos acima vimos que a dinâmica dos ACs pode ser determinística ou estocástica. No caso determinístico, tais como o modelo de Ising ou as redes de neurônios com dinâmica paralela à temperatura zero, o modelo de Kauffman ou os ACs unidimensionais de Wolfram, uma configuração $\{\sigma(t+1)\}$ depende unicamente da configuração prévia $\{\sigma(t)\}$. Para um AC finito com N sítios a evolução temporal sempre se tornará periódica, pois o seu espaço de fase é finito (K^N estados diferentes possíveis). Portanto após um tempo $t > K^N$ o AC deverá ter, necessariamente, visitado pela segunda vez uma mesma configuração e, a partir de então, percorrer repetidamente uma dada seqüência de estados. Assim os ACs determinísticos possuem, no máximo, *ciclos de Poincaré* de K^N passos de tempo. Esses ciclos representam os atratores periódicos da dinâmica do AC e, mesmo para N finito, podem dividir o espaço de fase em várias *bacias de atração* correspondentes a cada um desses diversos atratores distintos.

A evolução de um AC determinístico pode ser representada por um diagrama de transição de estados finito, mostrado na figura 1.6, no qual os nós, representando configurações que são mapeadas em outras pela dinâmica do AC, são unidos por arcos diretos. Do determinismo da dinâmica é claro que um único arco leva de um dado nó ao seu sucessor após a evolução por um passo de tempo. Nesse diagrama de transição os atratores correspondem a ciclos e cada nó pertencente a esses ciclos pode ser a raiz de uma árvore representando um transiente. Os transientes são irreversíveis já que os nós das árvores tem um único sucessor mas podem ter vários antecessores. Ao longo da evolução temporal todos os estados nessas árvores transientes finalmente atingirão as configurações raízes nos ciclos aos quais esses transientes pertencem. Em particular nós ou estados da periferia do diagrama de transição de estados (chamados de terminais ou folhas das árvores transientes) nunca serão atingidos durante a evolução do AC. Esses estados só poderão ocorrer como configurações iniciais.

Mas nem todas as regras de ACs são irreversíveis. Como teremos oportunidade de discutir no próximo capítulo, existe uma maneira sistemática e simples de



a)



b)

Figura 1.6: Diagrama de transição de estados para dois ACs unidimensionais totalísticos com $N = 5$ sítios, $K = 2$, $r = 1$ e condições de contorno periódicas. Os estados são representados por seu código decimal. Temos em (a) a regra 4 e em (b) a regra 22.

criar uma profusão de regras reversíveis, para as quais cada configuração (ou um conjunto de τ configurações no caso de regras de ordem τ no tempo) possui uma única predecessora. Portanto a trajetória gerada pela evolução temporal de uma dada configuração ou é uma curva fechada ou uma curva que nunca intercepta a si mesma no espaço de estados ou no diagrama de transição do AC. Para tais ACs reversíveis, transientes e atratores não são permitidos pela dinâmica e, conseqüentemente, eles não podem exibir a fascinante capacidade de auto-organização que depende, basicamente, da fusão de trajetórias ao longo de sua “história”. Uma vez que não existe, nos ACs reversíveis, fusão de trajetórias no espaço de fase, vale o teorema de Liouville: a densidade de pontos no espaço de fase é constante numa evolução reversível.

Talvez seja no caso de uma dinâmica determinística que se torna mais clara a diferença entre ACs que evoluem de acordo com um Hamiltoniano (dinâmica paralela à temperatura zero e interações simétricas $J_{ij} = J_{ji}$) e os ACs sem um Hamiltoniano associado (J_{ij} assimétricos e ACs como os de Wolfram ou Kauffman). Para sistemas com dinâmica controlada por um Hamiltoniano podemos definir uma função de Liapunov que decresce com o tempo e leva, sempre, a atratores de pequenos períodos. Vejamos um exemplo simples [11]: para modelos de spins de Ising com dinâmica paralela, temperatura zero e interações simétricas ($J_{ij} = J_{ji}$) a regra de evolução é

$$\sigma_i(t+1) = \text{sign}(\sum_j J_{ij}\sigma_j(t)) \quad (1.22)$$

Definindo-se a *função de Liapunov* $E(t)$ por

$$E(t) = -\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i(t)\sigma_j(t+1) \quad (1.23)$$

e da simetria $J_{ij} = J_{ji}$, podemos reescrever $E(t)$ de duas maneiras

$$E(t) = -\sum_i g_i(t)\sigma_i(t+1) = -\sum_i g_i(t+1)\sigma_i(t) \quad (1.24)$$

onde $g_i(t) = \sum_j J_{ij}\sigma_j(t)$. Então a dinâmica, eq. 1.22, pode ser expressa como

$$\sigma_i(t+2) = \text{sinal}(g_i(t+1)) \quad (1.25)$$

e a eq. 1.23 como

$$E(t+1) = - \sum_i g_i(t+1)\sigma_i(t+2) = - \sum_i g_i(t+1)\text{sinal}(g_i(t+1)) \quad (1.26)$$

isto é,

$$E(t+1) = - \sum_i |g_i(t+1)| \quad (1.27)$$

Então das eqs. 1.24 e 1.27 temos

$$E(t+1) - E(t) = - \sum_i |g_i(t+1)| + \sum_i g_i(t+1)\sigma_i(t). \quad (1.28)$$

Mas $g_i(t+1) = \text{sinal}(g_i(t+1))|g_i(t+1)| = \sigma_i(t+2)|g_i(t+1)|$. Logo

$$E(t+1) - E(t) = - \sum_i |g_i(t+1)|[1 - \sigma_i(t)\sigma_i(t+2)] \quad (1.29)$$

e como $\sigma_i = \pm 1$, $E(t)$ é uma função decrescente do tempo. Uma vez que o espaço de fase é finito existirá um tempo t_0 para o qual $E(t_0+2) = E(t_0)$ e da eq. 1.29 deveremos ter

$$\sigma_i(t_0+2) = \sigma_i(t_0), \forall i \quad (1.30)$$

o que significa que o sistema atingiu um atrator que é um ciclo de período 2.

No caso de uma dinâmica estocástica, tais como o modelo de Ising ou de redes de neurônios à temperaturas não nulas ou ainda o AC de Domany-Kinzel, a configuração $\{\sigma(t+1)\}$ depende da configuração $\{\sigma(t)\}$ e de alguma variável estocástica. Usualmente um AC probabilístico finito pode realizar transições entre quaisquer estados, o que significa um espaço de fase com um único atrator. Somente no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) poderemos observar uma estrutura de vales (ou atratores) bem definida.

1.2.2 Padrões de Evolução dos ACs e as Classes de Wolfram.

Grande parte do trabalho dos físicos na área de autômatos, particularmente o exaustivo estudo de Wolfram das regras unidimensionais, focaliza os ACs como sistemas dinâmicos cujo comportamento é caracterizado por medidas quantitativas tais como entropias, complexidade etc.

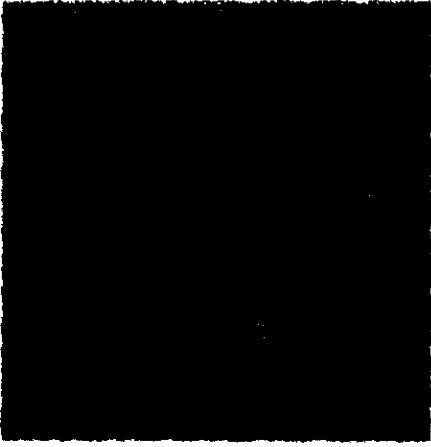
Wolfram classificou qualitativamente os ACs unidimensionais com K estados por sítio e raio da vizinhança r de acordo com os padrões espaço-temporais gerados por sua evolução. Suas simulações revelaram quatro classes que parecem também se aplicar ao caso de ACs bidimensionais:

- i) **classe 1**— A evolução leva a um estado homogêneo (todos os sítios com o mesmo valor);
- ii) **classe 2**— A evolução leva a conjunto de estruturas simples e separadas, estáveis ou periódicas;
- iii) **classe 3**— A evolução leva a um padrão caótico;
- iv) **classe 4**— A evolução leva à estruturas complexas e localizadas que, as vezes, perduram por muito tempo.

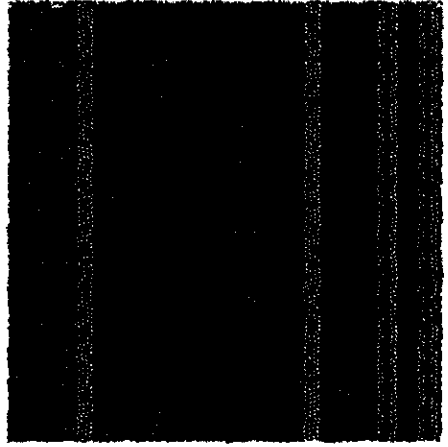
Na figura 1.7 mostramos os padrões gerados pela evolução de algumas das 59.049 regras totalísticas legais com $K = 3$ e $r = 2$, agrupadas de acordo com as classes acima. Nessas simulações as configurações iniciais são “desordenadas”, isto é, com cada sítio assumindo, independentemente, o valor 0, 1 ou 2 com probabilidade $1/3$. Para outros estados iniciais os padrões, embora com detalhes distintos, exibem os mesmos aspectos qualitativos característicos.

Wolfram também sugere as seguintes analogias entre as quatro classes de ACs e os sistemas dinâmicos tradicionais:

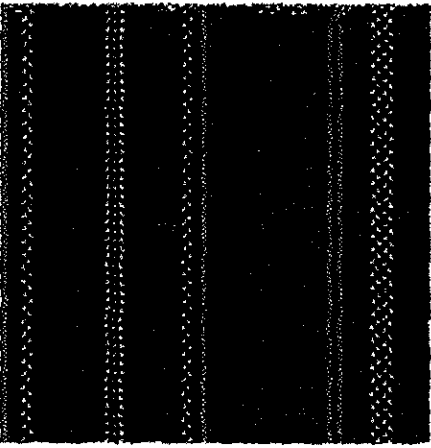
- i) **classe 1**— A evolução leva a pontos fixos;
- ii) **classe 2**— A evolução leva a ciclos limites;
- iii) **classe 3**— A evolução é caótica e controlada por um atrator estranho;
- iv) **classe 4**— não tem análogo nos sistemas dinâmicos tradicionais



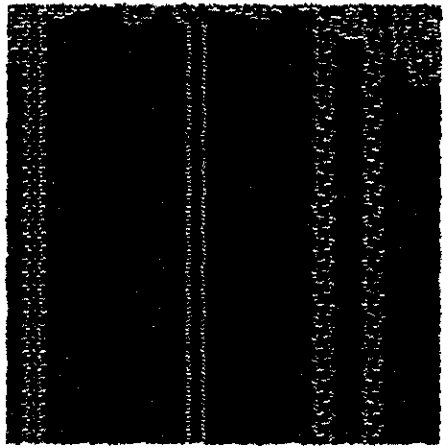
regra 6



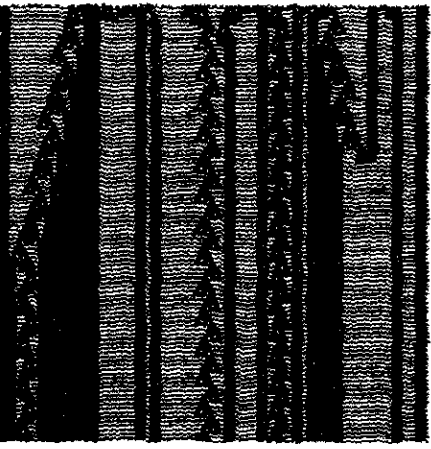
regra 22



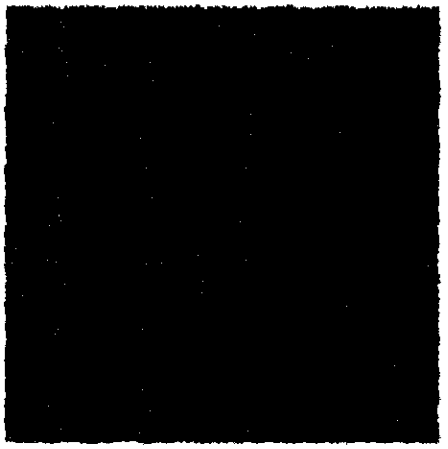
regra 64



regra 88



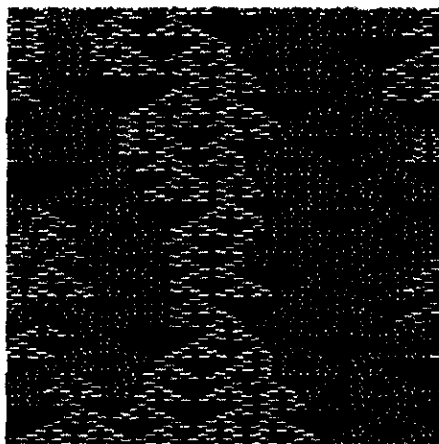
regra 38



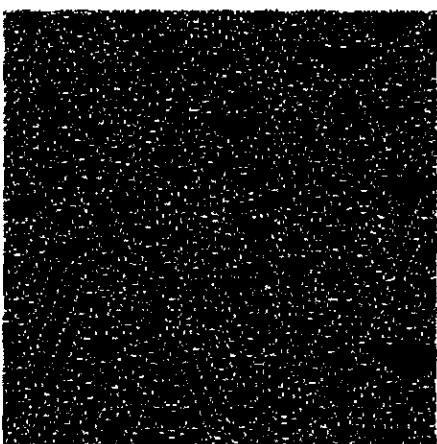
regra 36



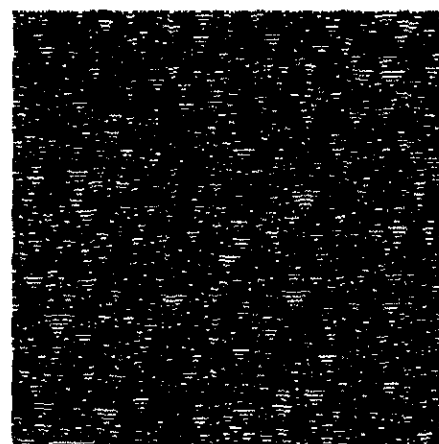
regra 30



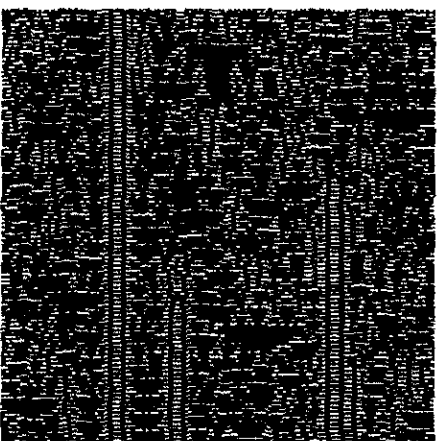
regra 42



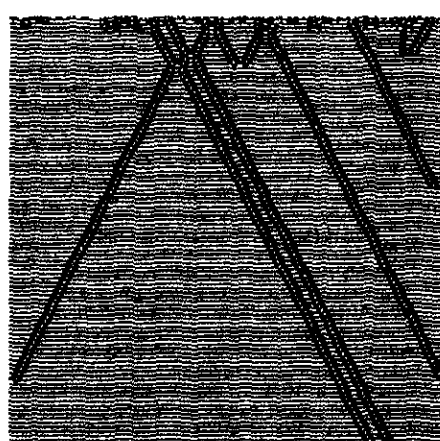
regra 58



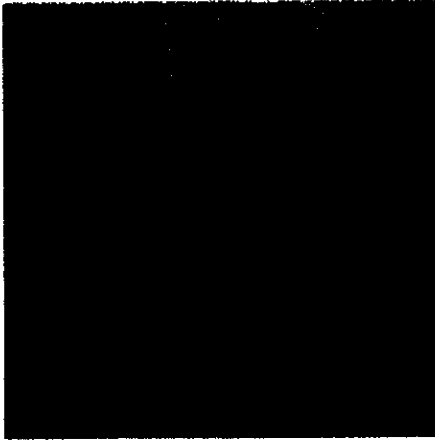
regra 110



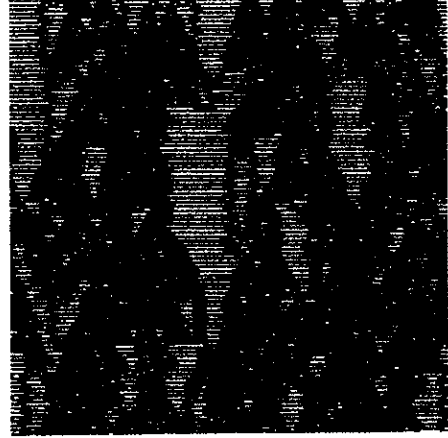
regra 1024



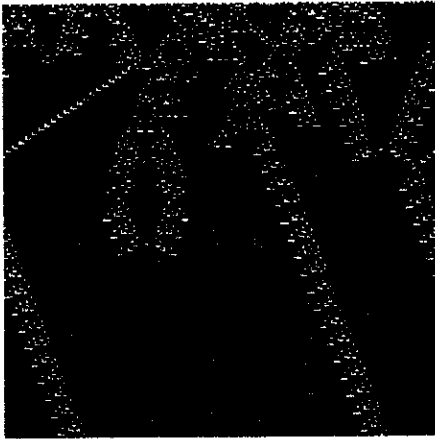
regra 104



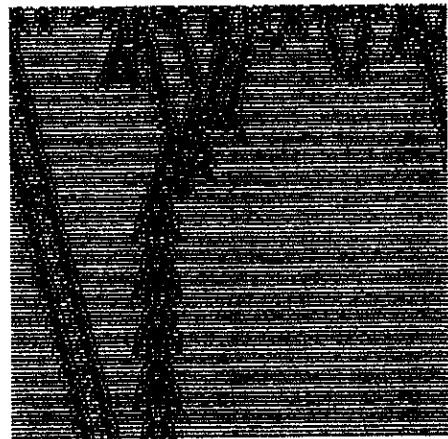
regra 90



regra 92



regra 46



regra 1022

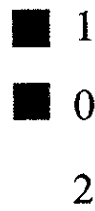


Figura 1.7: Padrões espaço-temporais gerados pela evolução de 16 dentre as 59.049 possíveis regras totalísticas legais unidimensionais com $K = 3$ e $r = 2$.

Os autômatos de classe 4 são, segundo conjectura de Wolfram, capazes de realizar computação universal. Entretanto Packard e Wolfram [12], investigando ACs uni e bidimensionais, sugerem que a classe 4 constitui um conjunto de medida nula, isto é, que no “limite termodinâmico” de um espaço infinito de regras de ACs, sua frequência de ocorrência é nula.

1.2.3 Entropias, Dimensões e as Classes de Wolfram.

Observando os padrões da figura 1.7 pode parecer que as estruturas no espaço-tempo geradas pela evolução dos ACs são de complexidade limitada. Mas essa impressão é falsa e, como veremos a seguir, existem correlações sutis escondidas nesses padrões que resultam de efeitos de longo alcance. Se faz necessário, portanto, uma caracterização quantitativa das quatro classes de comportamento qualitativo identificadas acima. Para tal usaremos certas medidas estatísticas da ordem presente nos padrões gerados pela evolução dos ACs. Medidas estatísticas das propriedades dos padrões de um autômato podem ser feitas considerando -se ou a configuração espacial gerada num particular passo de tempo ou a seqüência temporal de valores assumidos por um dado sítio.

Vejamos o primeiro caso. Um estado inicial desordenado no qual cada sítio pode assumir, com igual probabilidade, qualquer um dos K valores possíveis, é estatisticamente aleatório. Mas como vimos a evolução dos ACs é capaz de criar diversas estruturas e, portanto, capaz de produzir desvios dessa aleatoriedade estatística, criando correlações entre os sítios. Numa seqüência aleatória todos os K^X blocos ou subsequências de X sítios devem ocorrer com a mesma probabilidade. Desvios da aleatoriedade implicam probabilidades $p_i^{(x)}$ diferentes para subsequências distintas. Assim podemos definir duas medidas, a *entropia topológica* (ou de conjunto) espacial

$$S^{(x)}(X) = \frac{1}{X} \log_K \left(\sum_{j=1}^{K^X} \Theta(p_j^{(x)}) \right) \quad (1.31)$$

onde $\Theta(p^{(x)}) = 1$ para $p^{(x)} \neq 0$ e $\Theta(p^{(x)}) = 0$ para $p^{(x)} = 0$, e a *entropia métrica* (ou

de medida) espacial

$$S_{\mu}^{(x)}(X) = -\frac{1}{X} \sum_{j=1}^{K^X} p_j^{(x)} \log_K(p_j^{(x)}) \quad (1.32)$$

Nessas fórmulas o superescrito (x) indica seqüências espaciais obtidas num particular passo de tempo. A entropia topológica 1.31 é determinada pelo número total $N^{(x)}(X)$ de blocos de comprimento X gerados, com probabilidades não nulas, pela evolução do AC, isto é,

$$S^{(x)}(X) = \frac{1}{X} \log_K(N^{(x)}). \quad (1.33)$$

Por sua vez na entropia métrica 1.32, cada bloco é pesado com sua probabilidade, de modo que o resultado depende explicitamente da medida de probabilidade associada à cada diferente configuração do AC. A entropia métrica dá em geral o “conteúdo de informação” médio por sítio permitindo-se correlações em blocos de até X células, a conhecida entropia de Shannon da teoria de informação.

Antes de discutirmos algumas das propriedades das entropias topológica e métrica, vamos apresentar, brevemente, sua conexão com a entropia generalizada introduzida por Tsallis [13]:

$$S_q = \frac{k(1 - \sum_{i=1}^W p_i^q)}{q - 1}. \quad (1.34)$$

onde k é uma constante positiva cujo valor depende das unidades usadas (por simplicidade, tomaremos $k = 1$ daqui para frente), $q \in \Re$ caracteriza a particular estatística e W é o número total de configurações microscópicas cujas probabilidades são $\{p_i\}$. Então a primeira conexão a ser feita é que

$$\begin{aligned} S_1 \equiv \lim_{q \rightarrow 1} S_q &= \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i \exp[(q - 1) \ln p_i]}{q - 1} \\ &= - \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \end{aligned} \quad (1.35)$$

ou seja, corresponde à tradicional expressão da entropia da teoria de informação ou a entropia métrica definida acima.

A segunda conexão relaciona as entropias topológicas, de Renyi [14] e a generalizada de Tsallis. No contexto da teoria de informação generalizada, Renyi introduziu a seguinte entropia

$$S_q^R = \frac{\ln(\sum_{i=1}^W p_i^q)}{1 - q}. \quad (1.36)$$

que, imediatamente, podemos escrever como

$$S_q^R = \frac{\ln[1 + (1 - q)S_q]}{1 - q}. \quad (1.37)$$

onde S_q é a entropia de Tsallis, eq. 1.34. Chamando de $w \leq W$ o número total de estados microscópicos cujas probabilidades p_i são diferentes de zero, temos que

$$S_q = \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^w 1 - 1}{1} = w - 1 \quad (1.38)$$

enquanto

$$S_q^R = \frac{\ln[1 + (1 - q)S_q]}{q - 1} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \ln(1 + S_0) = \ln w \quad (1.39)$$

Portanto a entropia topológica definida acima é exatamente a entropia de Renyi para $q = 0$ ou o logaritmo natural da entropia de Tsallis S_0 mais 1.

Das definições 1.31 e 1.32 temos claramente

$$0 \leq S_\mu^{(x)}(X) \leq S^{(x)}(X) \leq 1. \quad (1.40)$$

$S_\mu^{(x)}(X) = 0$ se, e somente se, apenas uma dada seqüência de comprimento X ocorrer com probabilidade não nula, e nesse caso $S^{(x)}(X) = 0$ também. A igualdade $S^{(x)}(X) = S_\mu^{(x)}(X)$ vale para sistemas “equiprováveis”, nos quais todos os blocos com probabilidades não nulas ocorrem com igual chance. Já $S^{(x)}(X) = 1$ quando todos os K^X possíveis blocos de X sítios ocorrem, isto é, $p_i^{(x)} \neq 0, \forall i = 1, 2, \dots, K^X$. Por sua

vez $S_\mu^{(x)}(X) = 1$ somente para seqüências aleatórias nas quais todos os K^X blocos possíveis de X sítios ocorrem com igual probabilidade $p = 1/K^X$.

A condição de subaditividade da entropia de Shannon

$$(X_1 + X_2)S(X_1 + X_2) \leq X_1S(X_1) + X_2S(X_2). \quad (1.41)$$

é satisfeita por ambas as entropias: topológica $S^{(x)}(X)$ e métrica $S_\mu^{(x)}(X)$. A igualdade vale se blocos de sítios sucessivos são estatisticamente decorrelacionados. A desigualdade 1.41 implica, em geral, algum decaimento em $S^{(x)}(X)$ ou $S_\mu^{(x)}(X)$ com X (por exemplo, $S_\mu^{(x)}(2X) \leq S_\mu^{(x)}(X)$).

As entropias $S^{(x)}(X)$ e $S_\mu^{(x)}(X)$ podem ser calculadas considerando-se ou muitos blocos dentro de uma única configuração do AC ou o mesmo bloco para um ensemble de configurações diferentes. Para medidas de probabilidades suaves no ensemble de configurações iniciais possíveis, as duas formas de cálculo produzem quase sempre o mesmo resultado. (Uma medida de probabilidade será considerada suave se a mudança nos valores de uns poucos sítios de uma configuração infinita provocar somente variações infinitesimais em sua probabilidade.)

Uma vez que em simulações são usados ACs finitos, as entropias 1.31 e 1.32 são definidas com blocos de comprimento máximo igual ao número N de sítios do AC. As entropias $S^{(x)}(N)$ e $S_\mu^{(x)}(N)$ estão relacionadas às propriedades globais do diagrama de transição de estados para o AC finito. Para um particular passo de tempo, $S^{(x)}(N)$ é determinada pela fração de configurações possíveis que podem, naquele instante, ser atingida a partir do estado inicial. Para tempos muito longos o valor limite de $S^{(x)}(N)$ é determinado pela fração de estados que pertencem aos ciclos no diagrama de transição de estados. Partindo de um ensemble inicial no qual todas as K^N configurações são equiprováveis, o valor limite de $S_\mu^{(x)}(N)$ será igual ao de $S^{(x)}(N)$ se todas as árvores transientes no diagrama de transição de estados para o AC finito forem idênticas, de modo que todas as configurações com probabilidades não nulas sejam geradas com igual probabilidade.

O valor limite de $S^{(x)}(X)$, quando $X \rightarrow \infty$, dá a dimensão fractal do con-

junto de configurações do atrator do AC. Relações entre entropias e dimensões podem ser derivadas de várias maneiras [15]. Considere, por exemplo, um conjunto de números no intervalo $[0, 1]$ da reta real. Divida esse intervalo em K^b segmentos (caixas) de largura K^{-b} e seja $N(b)$ o total de segmentos contendo pelo menos um dos elementos do conjunto. Para b grande (largura das caixas pequenas) esse total cresce como K^{db} . O expoente d é a dimensão de Kolmogorov ou de capacidade do conjunto. Se o conjunto contém todos os números reais no intervalo $[0, 1]$ então $N(b) = K^b$ e $d = 1$. Se o conjunto contém apenas um número finito de pontos então $N(b)$ tenderá a uma constante para b grande e, portanto, $d = 0$. Esse exemplo nos sugere definir a dimensão de conjunto d como

$$d = \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{b} \log_K N(b). \quad (1.42)$$

onde $N(b)$ é o número de “caixas”, todas de igual tamanho e em número K^b , que contém elementos do conjunto. Exceto para alguns casos patológicos a dimensão de Kolmogorov (capacidade) é igual à dimensão fractal ou de Hausdorff [16].

No caso dos ACs a definição 1.42 pode ser aplicada diretamente considerando-se as K^b “caixas” como sendo configurações do autômato nas quais um dado bloco de b sítios contém uma particular seqüência de valores. Então

$$d^{(x)} = \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{b} \log_K N(b) = \lim_{X \rightarrow \infty} \frac{1}{X} \log_K N^{(x)}(X), \quad (1.43)$$

isto é,

$$d^{(x)} = \lim_{X \rightarrow \infty} S^{(x)}(X) \quad (1.44)$$

Uma configuração aleatória, na qual todas as seqüências possíveis de valores de sítios ocorrem com probabilidades não nulas (ou um ensemble de tais configurações), possui $d^{(x)} = 1$ como esperado. Por sua vez uma configuração homogênea, tal como o estado nulo, dará $d^{(x)} = 0$.

A dimensão de capacidade dos atratores controlando a dinâmica dos ACs é dada em termos das entropias das configurações que aparecem para tempos muito



Figura 1.8: Regiões do espaço-tempo usadas no cálculo das entropias (a) espacial e (b) temporal.

longos. Na eq. 1.44 o conjunto de configurações no atrator do AC é caracterizado independentemente das probabilidades de ocorrência de cada uma delas. Podemos, portanto, definir uma dimensão de medida $d_\mu^{(x)}$ que caracteriza a medida de probabilidade para as configurações como:

$$d_\mu^{(x)} = \lim_{X \rightarrow \infty} S_\mu^{(x)}(X) \quad (1.45)$$

É claro que

$$0 \leq d_\mu^{(x)} \leq d^{(x)} \leq 1. \quad (1.46)$$

A dimensão $d_\mu^{(x)}$ é igual a “informação média por símbolo” contida numa seqüência de valores dos sítios numa configuração do AC. Se essa seqüência for completamente aleatória então $d_\mu^{(x)} = 1$ pois todos os K^X blocos de X sítios serão equiprováveis. Nesse caso não existirá padrão ou redundância na seqüência de valores dos sítios cuja determinação, para cada célula, representará a aquisição de um bit (na base K) de informação. Uma configuração de AC com qualquer estrutura ou padrão deve possuir $d_\mu^{(x)} \leq 1$.

Analogamente às entropias espaciais 1.31 e 1.32 podemos definir entropias temporais que caracterizam a seqüência de valores assumidos por um dado sítio (fixo) durante T passos de tempo sucessivos, como ilustrado na figura 1.8.

Com probabilidades $p_i^{(t)}$ para as K^T possíveis seqüências de valores de um sítio em T passos de tempo sucessivos, podemos definir a entropia temporal de conjunto

$$S^{(t)}(T) = \frac{1}{T} \log_K \left(\sum_{j=1}^{K^T} \Theta(p_j^{(t)}) \right) \quad (1.47)$$

e a entropia temporal métrica (ou de medida)

$$S_\mu^{(t)}(T) = -\frac{1}{T} \sum_{j=1}^{K^T} p_j^{(t)} \log_K p_j^{(t)}. \quad (1.48)$$

Essas entropias satisfazem relações análogas as das eqs.1.40 e 1.41 e são, em geral, bastante diferentes das entropias espaciais. Isso porque as séries temporais dos valores de um sítio, gerados pela evolução do AC, tem pouca relação com as seqüências espaciais numa dada configuração do autômato. Associadas a essas entropias temporais podemos, como antes, definir a dimensão temporal de conjunto

$$d^{(t)} = \lim_{T \rightarrow \infty} S^{(t)}(T) \quad (1.49)$$

e a dimensão de medida temporal

$$d_\mu^{(t)} = \lim_{T \rightarrow \infty} S_\mu^{(t)}(T). \quad (1.50)$$

Se a evolução de um AC é periódica, de maneira que um sítio percorre um ciclo limitado de valores, então $d_\mu^{(t)} = d^{(t)} = 0$.

De posse dessas entropias e dimensões podemos fazer uma caracterização mais quantitativa das quatro classes de ACs:

Classe 1 — sua evolução destrói completamente qualquer informação sobre o estado inicial, levando a um estado homogêneo (todos os sítios com o mesmo valor). Portanto para tais atratores

$$\begin{aligned} S_\mu^{(x)} = S^{(x)} = 0 & \rightarrow d_\mu^{(x)} = d^{(x)} = 0; \\ S_\mu^{(t)} = S^{(t)} = 0 & \rightarrow d_\mu^{(t)} = d^{(t)} = 0. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Classe 2 — sua evolução gera estruturas simples estáveis ou periódicas com, tipicamente, períodos finitos e curtos. Portanto tais ACs tem

$$S_{\mu}^{(t)} = S^{(t)} = 0 \rightarrow d_{\mu}^{(t)} = d^{(t)} = 0. \quad (1.52)$$

Por outro lado esses autômatos geram estruturas simples separadas espacialmente a partir de certas seqüências específicas (tipicamente curtas) de valores dos sítios presentes na configuração inicial. A densidade desses blocos de sítios apropriados em um dado estado inicial determinará as propriedades estatísticas do estado final para a qual o AC evoluirá. Logo

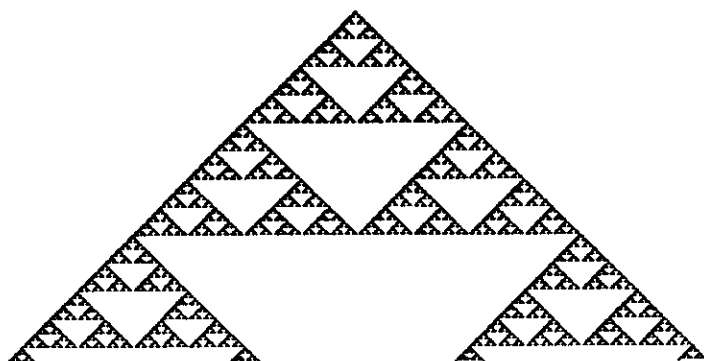
$$S_{\mu}^{(x)} \text{ e } S^{(x)} \neq 0 \rightarrow d_{\mu}^{(x)} \text{ e } d^{(x)} \neq 0. \quad (1.53)$$

Note que para os ACs unidimensionais de Wolfram, não ocorre o caso $S_{\mu}^{(x)} = 0$ e $S^{(x)} \neq 0$, correspondente à uma periodicidade espacial mas não temporal.

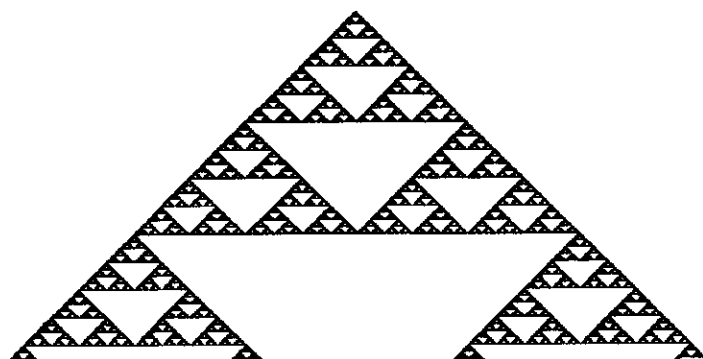
Classe 3— Sua evolução leva, a partir de quase todos os estados iniciais, a padrões aperiódicos (“caóticos”). Como mostrado na figura 1.7 os padrões de classe 3 variam de altamente irregulares (como para a regra 36) a muito regulares (regra 30). A regularidade mais óbvia é o surgimento de grandes triângulos nos quais todos os sítios tem o mesmo valor. Esses triângulos são resultado da progressiva destruição, devida ao efeito de outros sítios, de longas seqüências de sítios correlacionados.

A figura 1.9 exhibe padrões de ACs de classe 3 com configurações iniciais do tipo semente (um único sítio não nulo). Um crescimento ilimitado de sítios não nulos é evidente em todos os casos. Algumas regras produzem padrões irregulares enquanto outras levam a estruturas altamente regulares. Os padrões regulares, tais como os da regra 2, produzem assintoticamente fractais autossimilares. Já os padrões irregulares não parecem exibir estrutura de larga escala.

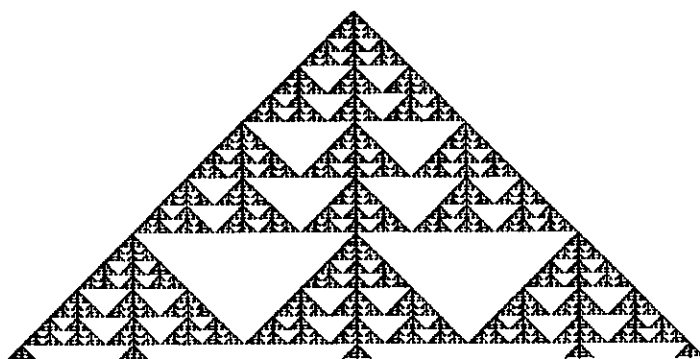
Um AC contém como única escala intrínseca o tamanho $2r + 1$ da vizinhança usada na regra de evolução. Uma configuração com um único sítio não nulo é também invariante a transformações de escala e, portanto, qualquer padrão de evolução do AC a partir dessa configuração inicial deve também possuir invariância



regra 2



regra 6



regra 10

Figura 1.9: Evolução de alguns ACs totalísticos de classe 3 com $K = 2$, $r = 1$ a partir de um estado inicial contendo um único sítio não nulo.

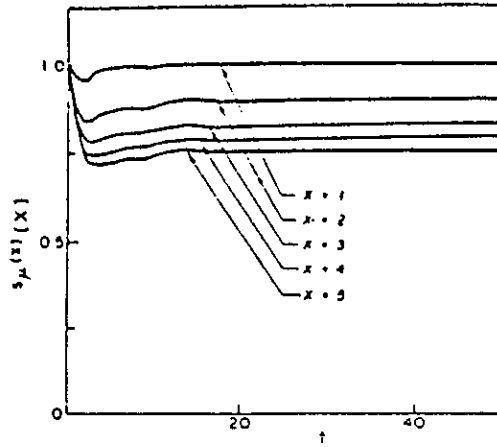


Figura 1.10: Entropia espacial métrica $S_{\mu}^{(x)}(X)$ em função do tempo para a regra 12 (classe 3). O estado inicial é aleatório.

de escala. Os padrões regulares da figura 1.9 são invariantes por escala devido à sua autossimilaridade. Os padrões irregulares, por sua vez, devem exibir correlações apenas de alcance finito e, portanto, serem efetivamente uniformes e invariantes por escala para longas distâncias.

A figura 1.10 mostra a dependência temporal da entropia $S_{\mu}^{(x)}(X)$ para um típico AC de classe 3 evoluindo a partir de um estado inicial desordenado (de máxima entropia $S_{\mu}^{(x)}(X) = 1$ pois todos os K^X estados são equiprováveis). Blocos de vários tamanhos X são considerados. Vemos que a entropia inicialmente decresce até atingir um dado valor de equilíbrio.

O decrescimento com o tempo da entropia revela a natureza irreversível da evolução do AC, sendo mais agudo para regras de classe 3 que produzem padrões regulares do que para aquelas que geram estruturas irregulares. Quanto mais regular a estrutura maior o grau de auto-organização exigido, maior a irreversibilidade e, conseqüentemente, maior o decrescimento da entropia. Isso também pode ser visto a partir da dependência em X de $S_{\mu}^{(x)}(X)$, que mede correlações espaciais presentes nas configurações dos ACs. Na presença de correlações $S_{\mu}^{(x)}(X)$ sempre decresce com X , uma conseqüência da subaditividade da entropia, eq. 1.41. Portanto $S_{\mu}^{(x)}(X)$ tende a uma constante se X é maior do que o alcance de qualquer correlação existente entre

os sítios. Simulações diretas produzem estimativas confiáveis para $S_\mu^{(x)}(X)$ somente para $0 \leq X \leq 8$ e resultados típicos são mostrados na figura 1.11. Para regras que produzem padrões irregulares $S_\mu^{(x)}(X) \geq 0.9$ no equilíbrio enquanto que, para regras que produzem padrões regulares, o decaimento da entropia é mais rápido, tipicamente como $X^{-\eta}$ com $\eta \approx 0.1$ para X pequeno, porém muito mais lento do que com o tamanho do bloco, isto é, $1/X$. Assim as regras com padrões irregulares apresentam correlações de curto alcance enquanto que as regulares mostram correlações de longo alcance.

Resumindo toda a discussão acima temos para os ACs de classe 3:

$$S_\mu^{(x)} \text{ e } S^{(x)} \neq 0 \rightarrow d_\mu^{(x)} \text{ e } d^{(x)} \neq 0. \quad (1.54)$$

A aperiodicidade temporal dos padrões de evolução dos ACs de classe 3 a partir de quase todos os estados iniciais também leva à

$$S_\mu^{(t)} \text{ e } S^{(t)} \neq 0 \rightarrow d_\mu^{(t)} \text{ e } d^{(t)} \neq 0. \quad (1.55)$$

Classe 4— A figura 1.12 mostra a evolução da regra 46, totalística, de classe 4, com $K = 3$ e $r = 2$, a partir de vários estados iniciais. Na maioria dos casos quase todos os sítios atingem o valor 1 após um tempo relativamente longo. Entretanto, em algumas vezes, surgem estruturas estáveis ou periódicas que persistem para sempre, além da formação de padrões que se propagam na rede, um importante aspecto dos ACs de classe 4.

Wolfram sugere que alguns ACs de classe 4 sejam capazes de computação universal mesmo no caso simples dos autômatos unidimensionais com $K = 2$, $r = 2$ e $K = 3$, $r = 1$. Para sistemas capazes de computação universal existem importantes limitações sobre a previsão do seu comportamento. Não somente o valor de um dado sítio pode depender, após muitos passos de tempo, de um número muito grande de valores de sítios iniciais, como também esse valor não pode ser determinado por qualquer procedimento mais simples ou curto do que a própria simulação explícita da evolução do AC. Logo o comportamento de um AC de classe 4 é essencialmente imprevisível

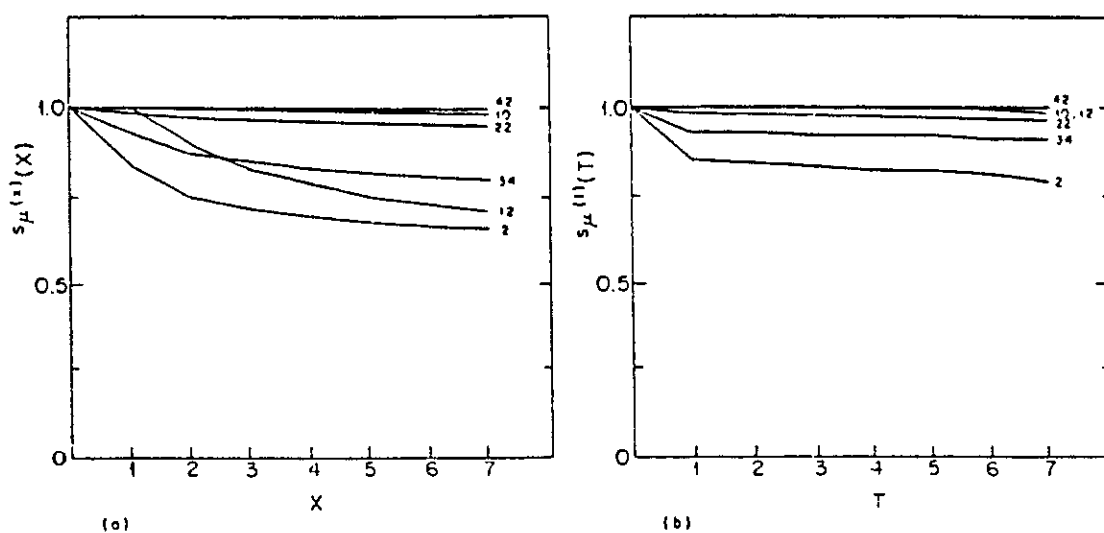


Figura 1.11: Evolução das entropias métricas (a) espacial $S_\mu^{(x)}$ e (b) temporal $S_\mu^{(t)}$ em função dos comprimentos espacial X e temporal T dos blocos, para vários ACs de classe 3. Os códigos são listados na figura.

mesmo se conhecermos completamente o seu estado inicial. Assim, por exemplo, não existe um algoritmo geral finito que possa prever se uma dada configuração inicial de um AC capaz de computação universal evoluirá para um estado homogêneo ou gerará estruturas persistentes por períodos arbitrariamente longos. (Esse é o análogo do problema de “halting” para máquinas de Turing universais [17].) Portanto se um AC é de fato computacionalmente universal, nenhum algoritmo finito poderá prever se um particular estado inicial será finalmente homogêneo ou dará origem à estruturas persistentes. Além disso essa questão poderá inclusive não ser decidida por meio de uma simulação explícita do AC, já que talvez sejam necessários tempos arbitrariamente longos até que ocorram os estados procurados. Temos, portanto, um típico problema indecidível.

Na figura 1.13 mostramos o comportamento da entropia métrica espacial $S_\mu^{(x)}$ em função do tempo para a regra 46 ($K = 3$, $r = 2$), tomando-se blocos de vários tamanhos X .

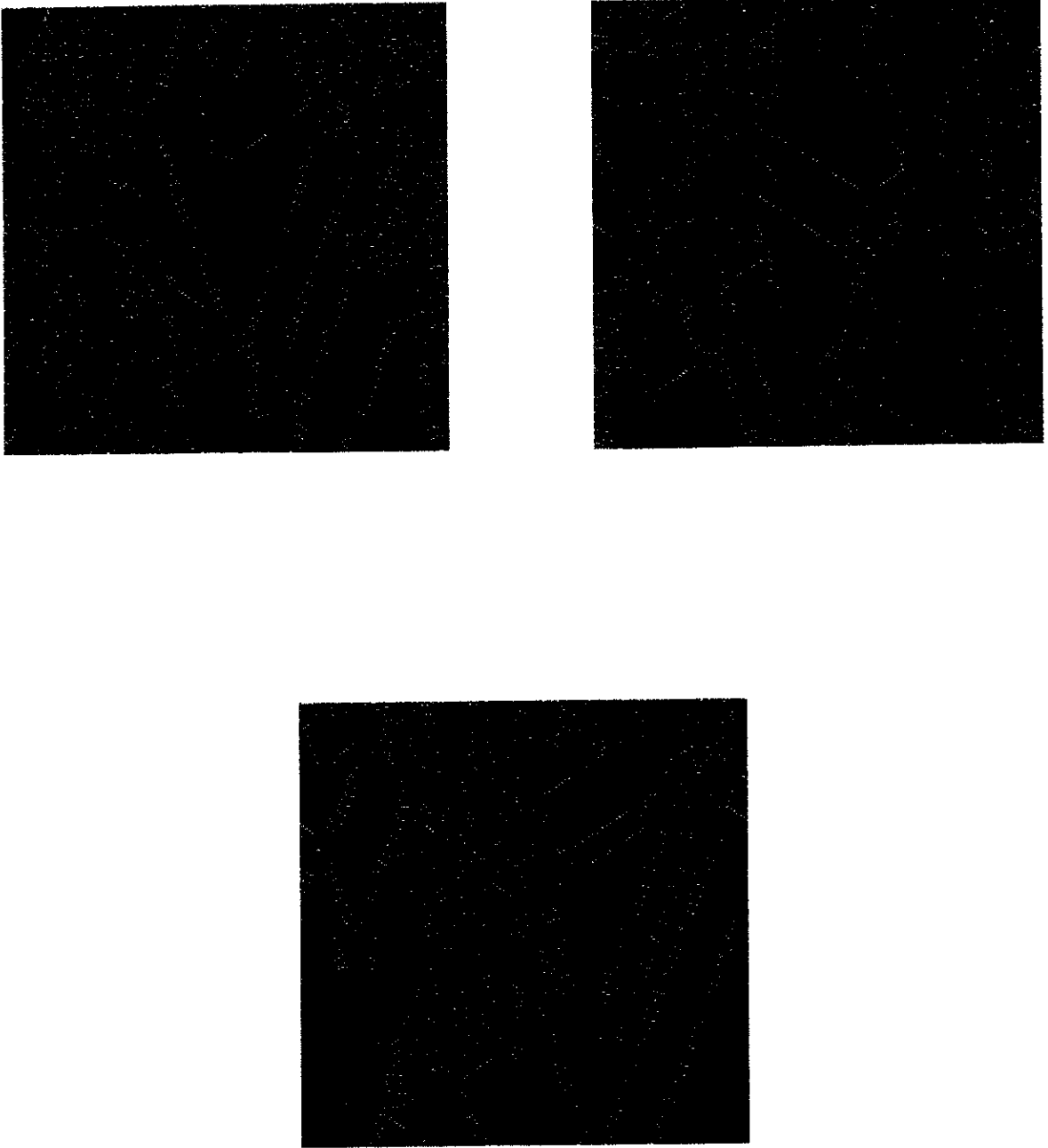


Figura 1.12: Exemplos de evolução do AC totalístico regra 46 ($K = 3, r = 2$) a partir de vários estados iniciais desordenados. $N = 400$ sítios e $t = 400$ passos de tempo.

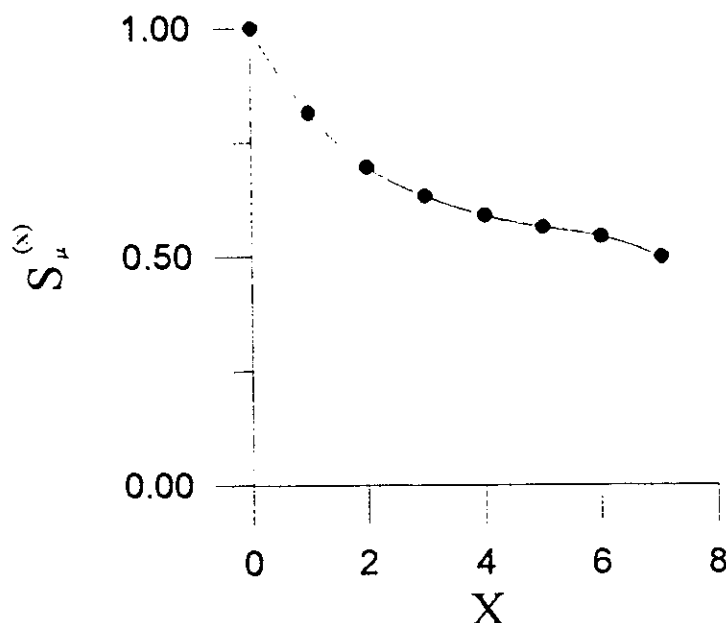


Figura 1.13: Evolução da entropia métrica espacial $S_\mu^{(x)}$ em função do comprimento espacial X para o AC 46 ($K = 3$ e $r = 2$) da classe 4.

1.2.4 Estabilidade dos Padrões de Evolução dos ACs: o Exponente de Liapunov.

Uma outra maneira de se caracterizar as classes de ACs é considerar a estabilidade dos padrões espaço-temporais gerados pela evolução do sistema com relação a pequenas perturbações introduzidas no estado inicial. O efeito global dessas perturbações pode ser medido através da distância de Hamming $\Psi(t)$ definida como o número total de sítios cujos valores diferem nessas duas configurações após t passos de tempo, isto é,

$$\Psi(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \delta_{\sigma_i(t), \sigma'_i(t)} \quad (1.56)$$

onde N é o número de sítios do AC. $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\sigma'_i(t)\}$ são os dois padrões que diferiam no tempo $t = t_0$ em uma fração $\Psi(t_0)$ de sítios. (Usualmente $t_0 = 0$ e $\Psi(t_0) = 1/N$, isto é, as duas configurações iniciais diferem no valor de apenas um sítio.) Na figura 1.14 mostramos, para as quatro classes de ACs unidimensionais, a evolução

temporal da diferença entre os dois padrões $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\sigma'_i(t)\}$. Somente os pontos onde $\sigma_i(t) \neq \sigma'_i(t)$ são colocados na figura. $\Psi(t)$ é para os ACs o análogo do expoente de Liapunov λ dos sistemas dinâmicos contínuos. No caso discreto λ pode ser definido como a velocidade média com a qual as frentes dos padrões se propagam à esquerda e a direita na rede, de modo que $\Psi(t) - \Psi(0) \sim 2\lambda t$ dará o crescimento médio com o tempo da distância de Hamming Ψ . Na figura 1.15 mostramos como a distância de Hamming $\Psi(t)$ se comporta em função do tempo para as quatro classes de ACs.

Da figura 1.14 vemos por exemplo que a regra 2 possui, sem sombra de dúvida, um expoente de Liapunov $\Psi(t)$ positivo e, portanto, mostra sensibilidade às condições iniciais. Essa dependência sensível às condições iniciais significa que o defeito, isto é, a região onde os dois padrões são diferentes, se expande sem limites com o tempo. A sensibilidade às condições iniciais é um dos aspectos básicos dos sistemas caóticos, o outro sendo a existência de um atrator grande.

Em resumo as quatro classes de ACs propostas por Wolfram podem, com base no critério de sensibilidade às condições iniciais, serem caracterizadas como[18]:

Classe 1—O defeito inicial finalmente desaparece, $\Psi(t \rightarrow \infty) = 0$ independentemente de $\Psi(0)$ e, portanto, o padrão espaço-temporal gerado é estável.

Classe 2—O defeito inicial não desaparece mas permanece pequeno e localizado, $\Psi(t \rightarrow \infty) \ll 1$ e proporcional à $\Psi(0)$. Ainda temos, portanto, padrões de evolução estáveis.

Classe 3—O dano inicial aumenta e se propaga por toda a rede, $\Psi(t \rightarrow \infty) \neq 0$ independentemente de $\Psi(0) \neq 0$. Os ACs dessa classe são instáveis e exibem caos.

Classe 4— O dano inicial não desaparece, movendo-se por toda a rede porém permanecendo pequeno.

Analogamente, com base no critério de sensibilidade às condições iniciais proposto por Tsallis [7] e esquematizado na figura 1.16, as quatro classes de Wolfram de ACs podem ser assim classificadas:

Classe 1—insensível;

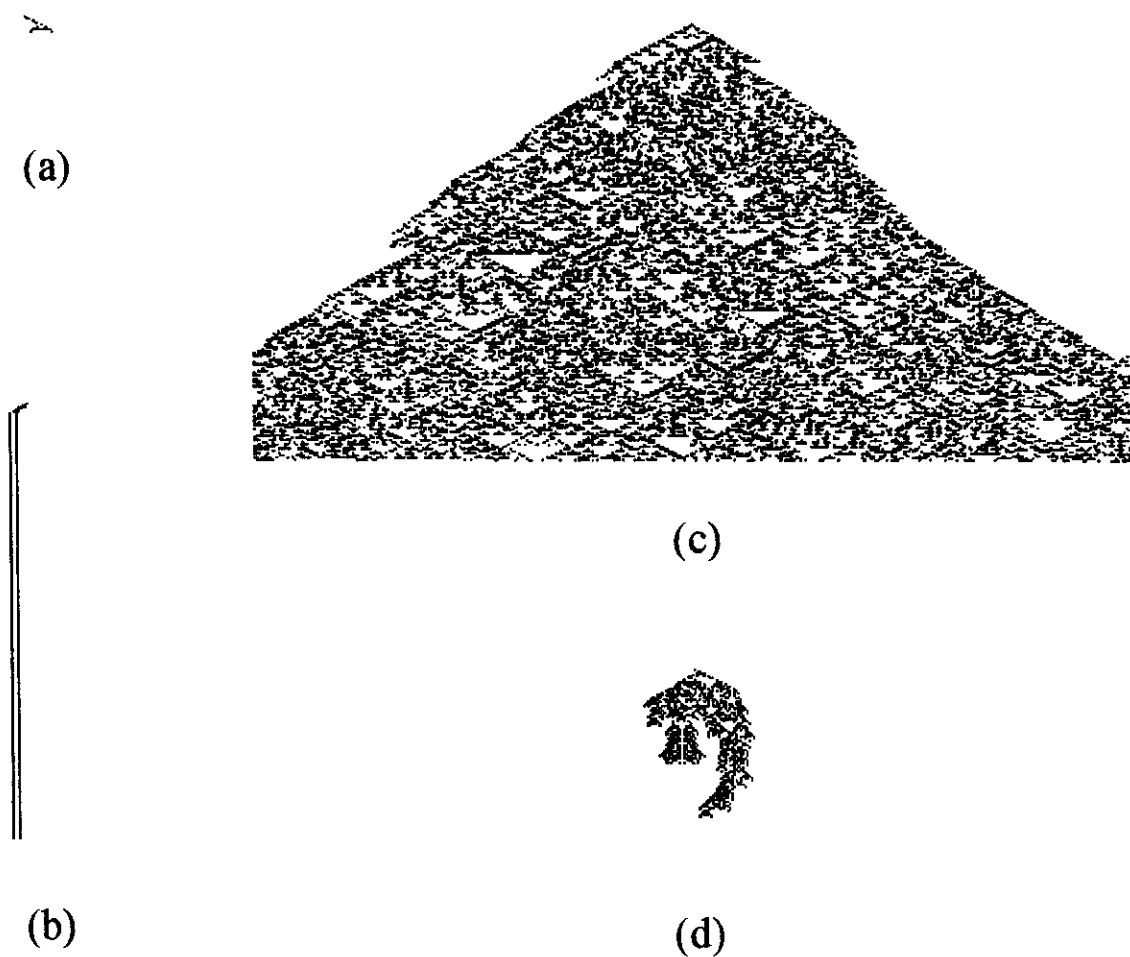


Figura 1.14: Diferença entre os padrões que, em $t = 0$, diferiam no valor de um único sítio para as regras (a) 4 (classe 1), (b) 24 (classe 2), (c) 2 (classe 3) e (d) 20 (classe 4), todas com $K = 2$, $r = 2$.

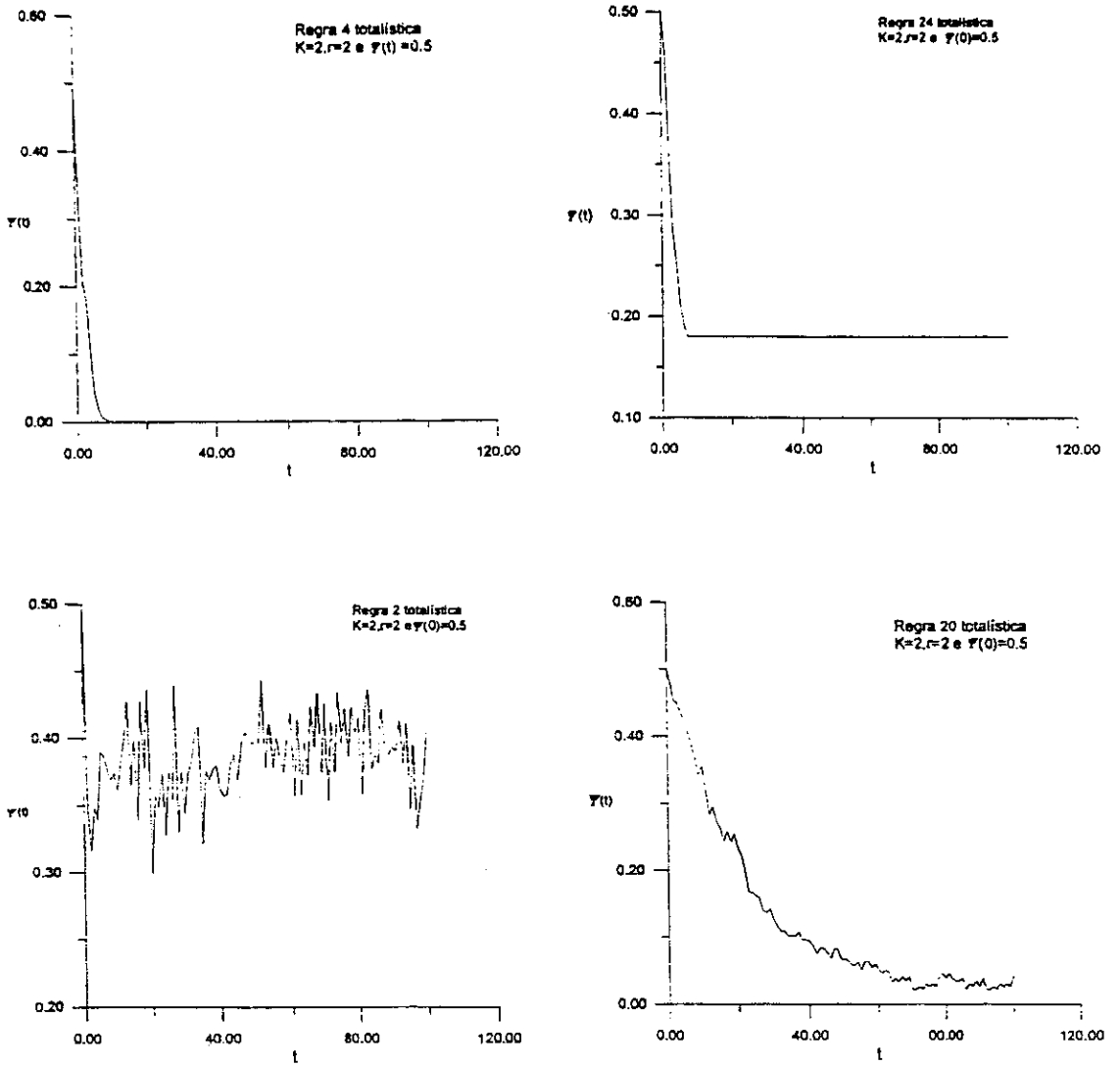


Figura 1.15: Distância de Hamming $\Psi(t)$ em função do tempo para as quatro classes de ACs unidimensionais. $\Psi(0) = 0.5$ e $K = 2, r = 2$.

Wolfram/Tsallis	Fortemente sensível	Sensível	Marginal	Insensível
Classe 1	-	-	-	×
Classe 2	-	-	×	-
Classe 3	×	-	-	-
Classe 4	-	-	×	-

Tabela 1.3: Classificações de Wolfram e Tsallis dos autômatos celulares.

Classe 2—marginal;

Classe 3—fortemente sensível;

Classe 4— marginal.

Na figura 1.17 mostramos os possíveis comportamentos $\psi(\infty) \times \psi(0)$ da distância de Hamming para regras típicas pertencentes a cada uma das classes de Wolfram. Notamos que, pelo menos para as regras simples e unidimensionais de ACs, nenhuma classe pode ser enquadrada como sensível e que, além disso, as classes insensível e fortemente sensível caem, respectivamente, nos casos particulares $\psi(\infty) = 0 \forall \psi(0) \in (0, 1]$ e $\psi(\infty)$ igual, em média, a uma constante não nula para todo $\psi(0) \in (0, 1]$. O fato dos ACs da classe 4 serem marginais, nos remete novamente ao fato desses autômatos acabarem por gerar, ao longo de sua evolução, um certo conjunto de estruturas persistentes. Na tabela 1.3 apresentamos uma comparação entre as classificações de Wolfram e de Tsallis.

No que se segue estabeleceremos uma relação entre o expoente de Liapunov λ e as entropias definidas anteriormente. Para tal vamos generalizá-las considerando os padrões ou blocos espaço-temporais gerados pela evolução de um AC.

Associando-se probabilidades $p_i^{(t,x)}$ a cada um dos K^{XT} possíveis blocos de $X \times T$ sítios (largura espacial X e temporal T) podemos definir a entropia topológica de bloco,

$$S^{(t,x)}(T, X) = \frac{1}{T} \log_K \left(\sum_{i=1}^{K^{XT}} \Theta(p_i^{(t,x)}) \right) \quad (1.57)$$

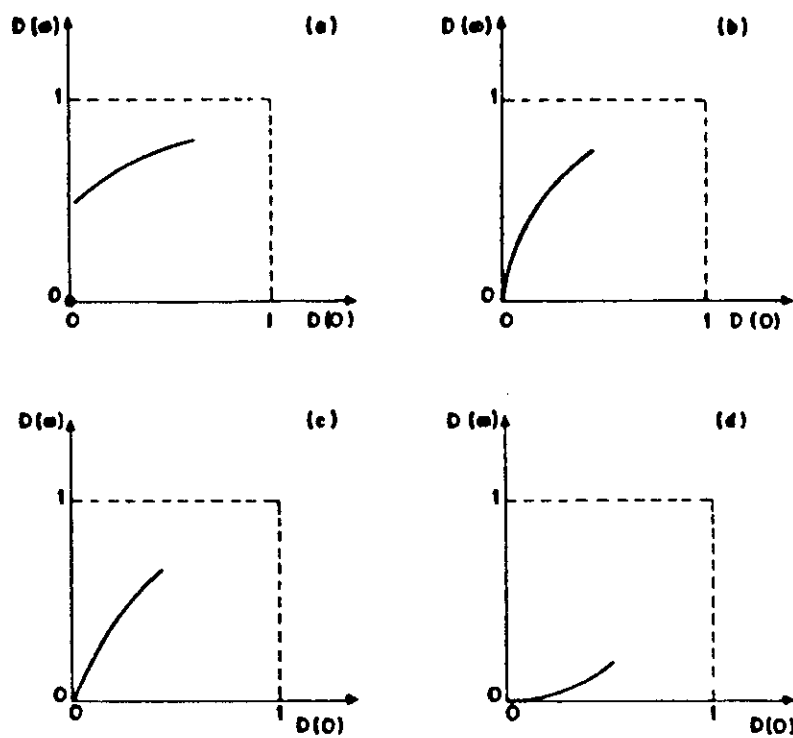


Figura 1.16: Possíveis comportamentos de $\psi(\infty) \times \psi(0)$ para a propagação de danos. (a) fortemente sensível, (b) sensível, (c) marginal e (d) insensível. Nos gráficos, retirados da referência [7], D é igual à ψ .

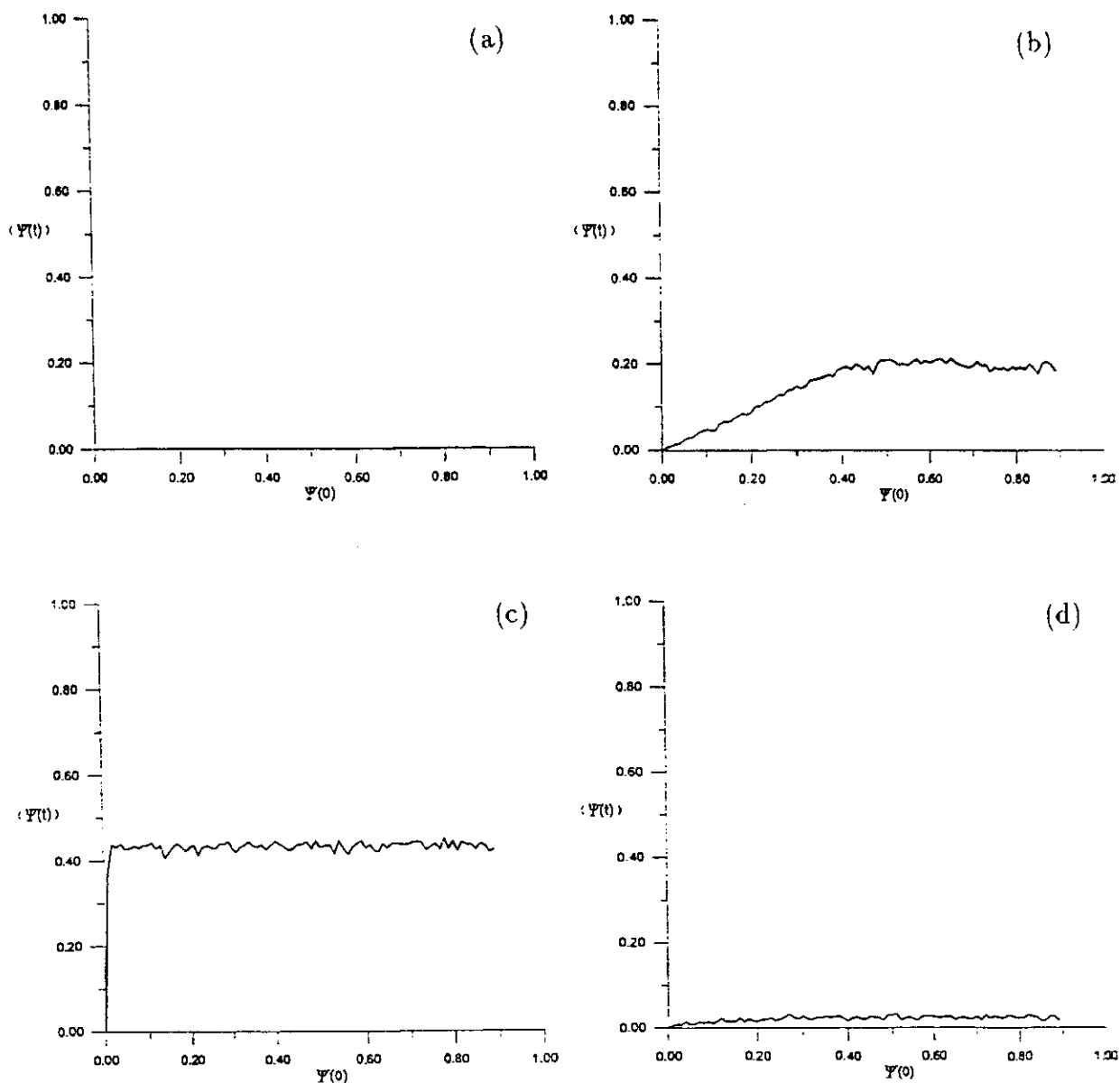


Figura 1.17: Comportamento de $\psi(\infty) \times \psi(0)$ para as classes de Wolfram. Todos os casos são para $N = 1000$, $K = 2$ e $r = 2$, transiente de 50 passos de tempo e evolução por outros 200 passos. (a) regra 4, (b) regra 24, (c) regra 2 e (d) regra 20, todas totalísticas. Espera-se que, no limite $N \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$, as flutuações nas figuras desapareçam.



Figura 1.18: Bloco espaço-temporal de $X \times T$ sítios, cujos valores são determinados de maneira única pelos sítios da “moldura” do bloco.

e a entropia métrica de bloco

$$S_{\mu}^{(t,x)}(T, X) = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{K^{XT}} p_i^{(t,x)} \log_K p_i^{(t,x)} \quad (1.58)$$

Essas quantidades parecem ser mais sensíveis aos efeitos de longo alcance do que a função de correlação espacial $\langle \sigma_i(t) \sigma_{i+n}(t) \rangle - \langle \sigma_i(t) \rangle^2$ [19] e contém, como casos particulares, as definições anteriores para as entropias espacial e temporal. Por exemplo

$$S_{\mu}^{(t)}(t) = S_{\mu}^{(t,x)}(T, 1) \text{ e } S_{\mu}^x(X) = \frac{1}{X} S_{\mu}^{(t,x)}(1, X) \quad (1.59)$$

Se não existem correlações entre sucessivas configurações teríamos como cota superior para essas entropias

$$S_{\mu}^{(t,x)}(T, X) \leq S^{(t,x)}(T, X) \leq X \quad (1.60)$$

Porém as regras dos ACs introduzem correlações entre configurações sucessivas e “apertam” essa cota superior. De fato os valores dos sítios dentro de um bloco $X \times T$ ficam completamente determinados, como mostrado na figura 1.18, pelos estados dos sítios nas bordas superior (contendo $X + 2r$ sítios), da esquerda e da direita (contendo, cada uma, $r(T - 1)$ sítios).

Uma vez que a cada uma das K^{X+2rT} possíveis configurações das bordas corresponde uma única configuração do bloco $X \times T$ devemos ter

$$S_{\mu}^{(t,x)}(T, X) \leq S^{(t,x)}(T, X) = \frac{1}{T} \log_K \sum_{i=1}^{K^{TX}} \Theta(p_i^{(t,x)}) \quad (1.61)$$

Mas

$$\frac{1}{T} \log_K \sum_{i=1}^{K^{TX}} \Theta(p_i^{(t,x)}) = \frac{1}{T} \log_K \sum_{i=1}^{K^{X+2r(T-1)}} \Theta(p_i^{(t,x)}) \quad (1.62)$$

onde $p_i^{(t,x)}$ é a probabilidade associada a uma dada configuração dos $X + 2rT$ sítios da “moldura” do bloco. Portanto

$$S_{\mu}^{(t,x)}(T, X) \leq S^{(t,x)}(T, X) \leq 2r + \frac{X}{T} \quad (1.63)$$

Logo a evolução de um AC nunca pode gerar padrões espaço-temporais aleatórios já que, se ambos X e T tendem a infinito (com T/X fixo), a equação 1.63 mostra que a informação por sítio $S_{\mu}^{(t,x)}(T, X) / X$ num bloco $X \times T$ tende à zero. No caso de $T \rightarrow \infty$, com X fixo, o comprimento X da borda superior será desprezível e a entropia será máxima se as $2r$ colunas verticais das bordas laterais forem estatisticamente independentes, de modo que

$$S_{\mu}^{(t,x)}(\infty, X) \leq 2r S_{\mu}^{(t)}(\infty) = 2r d_{\mu}^{(t)} \quad (1.64)$$

e

$$S^{(t,x)}(\infty, X) \leq 2r S^{(t)}(\infty) = 2r d^{(t)} \quad (1.65)$$

Além disso

$$S_{\mu}^{(t,x)}(\infty, X) \leq S_{\mu}^{(t,x)}(\infty, X + 1) \quad (1.66)$$

atingindo a cota superior se as séries temporais associadas aos diferentes conjuntos de sítios (com X grande) forem estatisticamente descorrelacionadas.

De maneira análoga ao caso das entropias espacial e temporal, podemos definir as dimensões topológica (ou de conjunto)

$$h = \lim_{\substack{T \rightarrow \infty \\ X \rightarrow \infty \\ \frac{T}{X} \rightarrow \infty}} S^{(t,x)}(T, X) \quad (1.67)$$

e a dimensão de medida (métrica)

$$h_\mu = \lim_{\substack{T \rightarrow \infty \\ X \rightarrow \infty \\ \frac{T}{X} \rightarrow \infty}} S_\mu^{(t,x)}(T, X) \quad (1.68)$$

As equações 1.64, 1.65 e 1.66 estabelecem as seguintes desigualdades entre as dimensões

$$d_\mu^{(t)} \leq h_\mu \leq 2r d_\mu^{(t)} \quad (1.69)$$

$$d^{(t)} \leq h \leq 2r d^{(t)} \quad (1.70)$$

uma vez que, por exemplo, $S_\mu^{(t,x)}(T, 1) \leq S_\mu^{(t,x)}(T, X) \leq 2r$.

Um aspecto fundamental da dinâmica de evolução dos ACs é que o valor atual de um sítio i depende dos valores anteriores dos sítios distando no máximo r células dele. Após T passos de tempo $\sigma_i(t)$ dependerá dos valores dos sítios cuja distância à ele seja até rT e, portanto, qualquer informação gerada nos padrões de evolução de um AC pode se propagar a uma velocidade máxima de r sítios por passo de tempo: o análogo do cone de luz! Entretanto, para muitas regras, o valor de um sítio após T passos de tempo depende de muito menos células iniciais do que $2rT$ e toda informação gerada pela regra se propaga a velocidades mais baixas. A velocidade máxima de propagação associada à regra F de um AC pode ser definida como

$$\lambda_+ = \left\langle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\|R\|}{T} \right\rangle_t \quad (1.71)$$

onde $\|R\|$ é o menor R para o qual o valor de $\sigma_i(t)$ depende apenas dos estados iniciais dos sítios na faixa $i - r, \dots, i + r$. É claro que $\lambda_+ \leq r$. Considerando-se o efeito causado no padrão de evolução do AC (propagação de danos) pela mudança, no

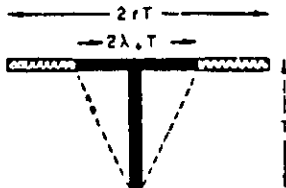


Figura 1.19: Padrões de dependência das seqüências temporais sobre as espaciais. usados na prova das desigualdades entre as correspondentes entropias.

estado inicial, do valor de um único sítio ($\Psi(0) = 1/N$), vemos que λ_+ , a velocidade de propagação, e λ , o expoente de Liapunov, devem ser proporcionais entre si.

A figura 1.19 mostra que, para qualquer T ,

$$S^{(t)}(T) = \frac{1}{T} \log_K \sum_{i=1}^K \Theta(p_i^{(t)}) \leq \frac{1}{T} \log_K \sum_{i=1}^{K^{2rT}} \Theta(p_i^{(x)}) \quad (1.72)$$

já que a seqüência temporal de comprimento T fica especificada no máximo pelos valores de $2rT$ sítios iniciais. Multiplicando e dividindo o lado direito da desigualdade acima por $2rT$ encontramos

$$S^{(t)}(T) \leq 2r S^{(x)}(2rT) \quad (1.73)$$

e, é claro,

$$S_{\mu}^{(t)}(T) \leq 2r S_{\mu}^{(x)}(2rT) \quad (1.74)$$

No limite $T \rightarrow \infty$, quando fica bem definida a velocidade máxima de propagação da regra do AC, o valor do sítio i deve depender no máximo dos estados iniciais de $2\lambda T$ sítios. Portanto podemos estabelecer, como fizemos acima, uma desigualdade mais precisa

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S^{(t)}(T) \leq 2\lambda_+ \lim_{T \rightarrow \infty} S^{(x)}(2rT) \quad (1.75)$$

isto é

$$d^{(t)} \leq 2\lambda d^{(x)} \quad (1.76)$$

Também a desigualdade $d^{(t)} \leq h \leq 2\lambda d^{(t)}$ pode ser melhorada para

$$d^{(t)} \leq h \leq 2\lambda d^{(x)} \quad (1.77)$$

Assim a razão entre as entropias temporal e espacial é limitada pela velocidade de propagação máxima λ do AC. Além disso quando $\lambda = 0$ teremos

$$d_{\mu}^{(t)} = d^{(t)} = h_{\mu} = h = 0 \quad (1.78)$$

de modo que regiões finitas do AC se tornarão finalmente isoladas.

Das definições e propriedades das dimensões estudadas acima vemos que o grau de “caos” associado à evolução dos ACs é determinado pelo comportamento dessas dimensões. O “caos espacial” ocorre quando $d^{(x)}$ e $d_{\mu}^{(x)} > 0$, enquanto o “caos temporal” surge quando $d^{(t)}$ e $d_{\mu}^{(t)} > 0$. O caos temporal exige uma velocidade máxima de propagação de defeitos λ (o expoente de Liapunov) diferente de zero, o que implica na sensibilidade às condições iniciais : pequenas mudanças no estado inicial levam a efeitos sempre crescentes no tempo.

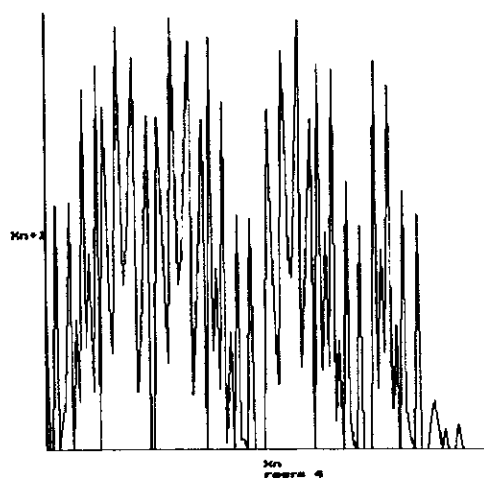
Um aspecto interessante é a origem do “caos” em ACs. Todo autômato unidimensional pode ser visto como um mapa do quadrado unitário sobre ele mesmo. Assim, por exemplo, para um AC binário ($K = 2$) dividimos cada configuração $\{\dots, \sigma_{-2}, \sigma_{-1}, \sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \dots\}$ em duas variáveis reais x e y , pertencentes ao intervalo $[0, 1]$, do seguinte modo: $x = 0, \sigma_0\sigma_1\sigma_2\dots$ e $y = 0, \sigma_{-1}\sigma_{-2}\sigma_{-3}\dots$. X e Y são, portanto, as representações binárias de números reais (< 1) exatamente como as usadas em um computador digital. Então cada regra de AC, que mapeia uma dada configuração $\{\sigma(t)\}$ em uma outra $\{\sigma'(t+1)\}$ no passo de tempo seguinte, pode ser encarada como um mapa

$$x_{n+1} = f_1(x_n, y_n) \text{ e } y_{n+1} = f_2(x_n, y_n) \quad (1.79)$$

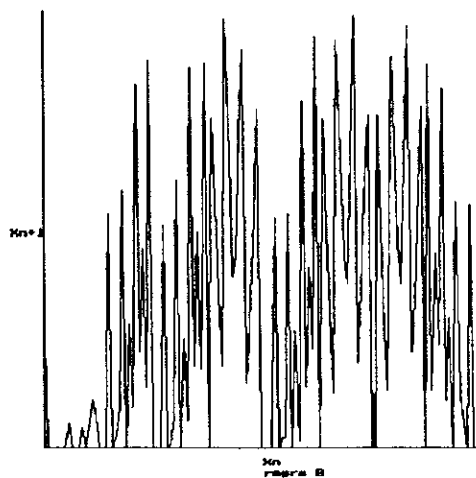
exatamente o análogo de um mapa de Poincaré para um sistema dinâmico tradicional. Então, como no caso dos sistemas dinâmicos, a imprevisibilidade da evolução caótica de um AC determinístico é devida ao fluxo de informação dos dígitos “não significativos” para os dígitos “significativos” da variável contínua. Porém a principal diferença entre os ACs e os mapas como o de Henon é que, enquanto os últimos são contínuos e diferenciáveis (seccionalmente pelo menos), os mapas representando ACs são, em geral, altamente fractais (não diferenciáveis com discontinuidades em todas as escalas de comprimento). Assim em mapas suaves os efeitos não-lineares são vistos apenas nos dígitos significativos, enquanto o processamento de informação nos dígitos não significativos se restringe a um fluxo muito simples. Nos ACs, por sua vez, parece que a informação não está apenas fluindo através de seus sítios, mas sendo manipulada de forma tal que em cada um deles ocorre uma perda de informação, que implica no surgimento de correlações de longo alcance não perturbadas pelo contínuo afluxo de informação. Na figura 1.20 mostramos mapas típicos para as quatro classes de ACs de Wolfram.

Uma vez que a evolução dos ACs é em geral irreversível, levando à conseqüente fusão de várias configurações iniciais distintas, teremos uma contração inicial do espaço de fase em direção a um subconjunto de configurações ou atrator da dinâmica do AC contendo somente uma fração pequena de todos os K^N estados possíveis. Na figura 1.21 mostramos os atratores, representados no quadrado unitário, das regras 18 e 22 ($K = 2, r = 1$) [20].

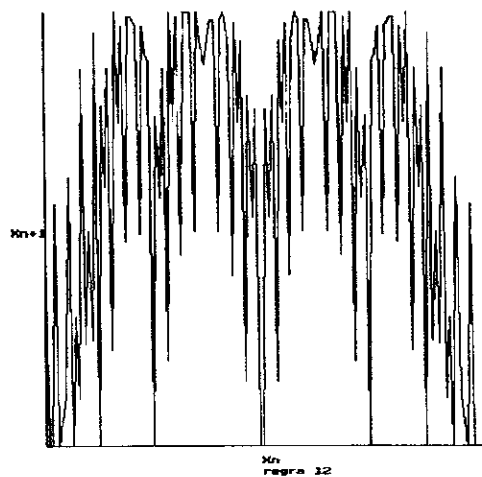
Da figura 1.21 notamos que o espaço de fase de um AC se contrai, sob evolução temporal, a um atrator que pode ser considerado um conjunto de Cantor cuja dimensão é menor do que 1. Assim várias regras definem atratores estranhos que são, no entanto, “imperfeitos”, isto é, de vez em quando a evolução temporal escapa do atrator com uma frequência que decai no tempo como $1/\sqrt{t}$ [21], um comportamento novo quando comparado ao dos sistemas dinâmicos tradicionais.



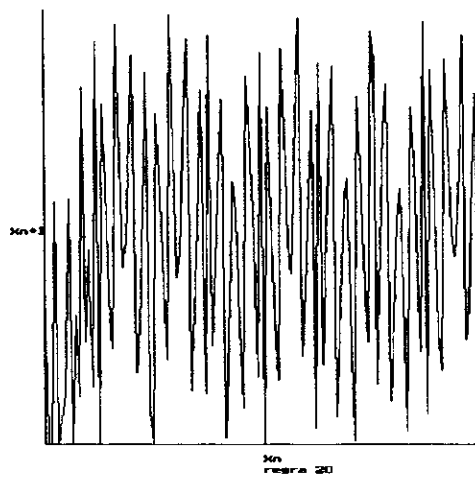
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 1.20: Mapa $x_{n+1} = f(x_n)$ para ACs unidimensionais $K = 2$, $r = 2$ das quatro classes de Wolfram, com $N = 6$. Aqui $x_n = 0, \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N$ e as regras são (a) 4 (classe 1), (b) 8 (classe 2), (c) 12 (classe 3) e (d) 20 (classe 4).

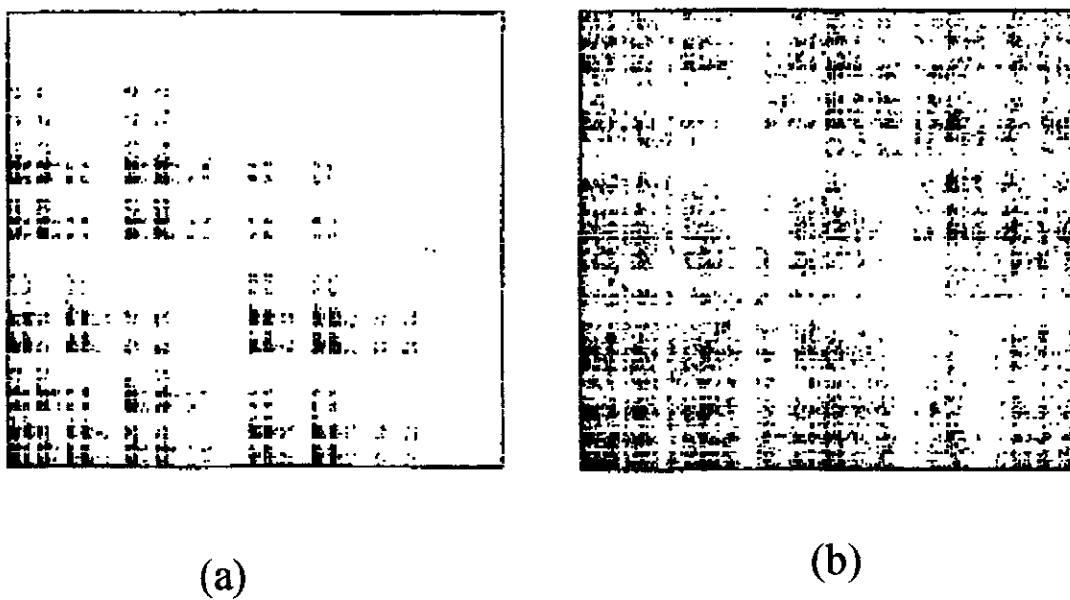


Figura 1.21: Atratores das regras (a) 18 e (b) 22, ambas unidimensionais com $K = 2$, $r = 1$ e de classe 3.

Capítulo 2

AUTÔMATOS E FÍSICA ESTATÍSTICA

Nesse capítulo trataremos de dois importantes ACs ligados diretamente a problemas tradicionais da Mecânica Estatística. O primeiro desses ACs, o autômato reversível Q2R, usado para rápidas simulações do modelo de Ising no ensemble microcanônico, nos possibilitará discutir uma maneira sistemática de se construir regras reversíveis e determinísticas de ACs capazes de exibir quantidades conservadas ou constantes de movimento. Já o segundo AC, o autômato de Domany-Kinzel está relacionado a complicados modelos de spins de Ising em duas dimensões. Discutir essa relação será o principal objetivo desse capítulo.

2.1 Regras Reversíveis e o AC Q2R

Toda descrição microscópica do comportamento da Natureza está baseada em leis físicas que são invariantes à inversão do tempo. Uma condição necessária para um autômato ser reversível no tempo é que cada configuração gerada em sua evolução temporal tenha uma única antecessora, o que implica, portanto, na inexistência de transientes e atratores na dinâmica do AC. A invariância de inversão no tempo ou, mais simplesmente, reversibilidade no tempo, significa que uma dada seqüência de

configurações pode ser obtida em ordem inversa com a *mesma* regra de evolução, simplesmente invertendo-se as duas últimas configurações. Nem todos os ACs reversíveis são invariantes à inversão no tempo. Por exemplo, a regra $\sigma_i(t) = \sigma_{i-1}(t-1)$ na qual o sítio i toma, no próximo passo de tempo, o valor de seu vizinho à esquerda gera um deslocamento global rumo à direita. Nesse caso o passado pode ser exatamente recuperado usando-se uma outra regra $\sigma_i(t) = \sigma_{i+1}(t-1)$, *diferente da regra original*. Quando apenas queremos a conservação da informação a reversibilidade é tudo o que precisamos mas, ao considerar analogias mecânicas, a invariância de inversão no tempo é crucial.

Existe uma maneira simples [22], devida à Fredkin, de construir ACs reversíveis a partir de qualquer função F envolvendo K estados por sítio: tome o valor que F associa a uma dada vizinhança e subtraia, na aritmética módulo K , o valor que o sítio central possuía no tempo $t-1$. Ou seja

$$\sigma_i(t+1) = (F[v(t)] - \sigma_i(t-1)) \bmod K \quad (2.1)$$

ou

$$\sigma_i(t) = \begin{cases} F[v(t)] - \sigma_i(t-1) & , \text{ se } F[v(t)] - \sigma_i(t-1) \geq 0 \\ K + F[v(t)] - \sigma_i(t-1) & , \text{ caso contrário} \end{cases} \quad (2.2)$$

A nova regra é, agora, de segunda ordem no tempo e pode ser resolvida para $\sigma_i(t-1)$ de maneira única, mesmo se F não for invertível, sendo, portanto, reversível no tempo. Essa regra de segunda ordem no tempo pode ser feita de primeira ordem se incluirmos no presente os estados do passado, isto é, se colocarmos variáveis σ_i e $\hat{\sigma}_i$ em cada célula, de modo que o AC tenha, efetivamente, K^2 estados. Então

$$R = \begin{cases} \sigma_i(t+1) = (F[v(t)] - \hat{\sigma}_i(t)) \bmod K \\ \hat{\sigma}_i(t+1) = \sigma_i(t) \end{cases} \quad (2.3)$$

é um autômato invariante à reversão no tempo. Para vermos isso vamos decompor R em dois estágios $R = BA$ com

$$A = \begin{cases} \hat{\sigma}_i(t + 1/2) = (F[v(t)] - \hat{\sigma}_i(t)) \bmod K \\ \sigma_i(t + 1/2) = \sigma_i(t) \end{cases} \quad (2.4)$$

e

$$B = \begin{cases} \sigma_i(t + 1/2) = \hat{\sigma}_i(t) \\ \hat{\sigma}_i(t + 1/2) = \sigma_i(t) \end{cases} \quad (2.5)$$

Podemos ver então que

$$BB = \begin{cases} \sigma_i(t + 1) = \hat{\sigma}_i(t + 1/2) = \sigma_i(t) \\ \hat{\sigma}_i(t + 1) = \sigma_i(t + 1/2) = \hat{\sigma}_i(t) \end{cases} \quad (2.6)$$

e, como $\hat{\sigma}_i(t + 1) = (F[v(t)] - \sigma_i(t + 1/2)) \bmod K$, então

$$AA = \begin{cases} \hat{\sigma}_i(t + 1) = (F[v(t)] - (F[v(t)] - \hat{\sigma}_i(t + 1/2))) \bmod K = \hat{\sigma}_i(t) \\ \sigma_i(t + 1) = \sigma_i(t + 1/2) = \sigma_i(t) \end{cases} \quad (2.7)$$

mostrando que $BB = I$ e $AA = I$, onde I é a matriz identidade. Portanto, definindo-se $R^{-1} = AB$ teremos o AC tempo invertido correspondente à regra R pois

$$R^{-1}R^{-1}RR = ABABABAB = I \quad (2.8)$$

Logo no instante que desejarmos inverter o tempo devemos apenas aplicar o operador B mais uma vez e, a partir de então, continuar a aplicar o mesmo autômato R .

Em lugar de duas variáveis em cada sítio é possível separar cada célula em duas adotando uma estrutura espacial do tipo tabuleiro de xadrez, onde as variáveis σ_i estarão numa subrede e as $\hat{\sigma}_i$ na outra subrede, como mostra a Fig. 2.1. Mas para isso é preciso que a rede tenha um número de coordenação par (isto é, número par de primeiros vizinhos e de sítios em cada direção). Portanto a estrutura de rede é essencial se quisermos obter simetria de inversão no tempo.

Como em mecânica as regras reversíveis devem ter muitas quantidades conservadas que descrevem as condições iniciais do AC. Essas leis de conservação estão

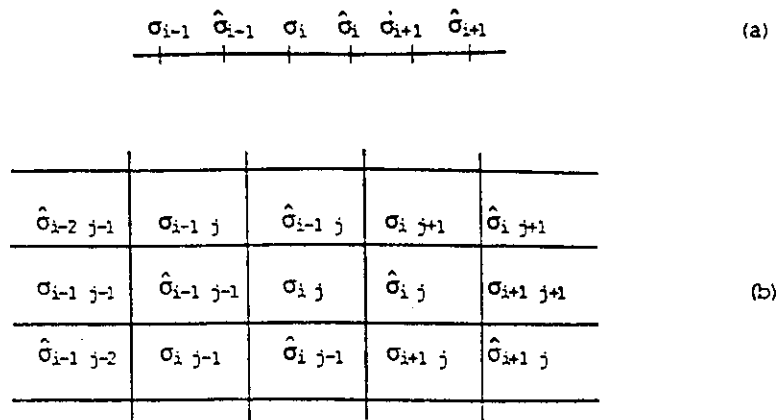


Figura 2.1: Estrutura das subredes em (a) uma dimensão e (b) na rede quadrada.

associadas a determinadas simetrias como, por exemplo, a reversibilidade ou simetria de inversão no tempo. Vamos discutir a seguir um exemplo importante de uma dessas quantidades que é local e globalmente conservada.

Consideremos o AC totalístico com $K = 2$ e F , na eq. 2.3, dada por

$$F(x) = 1 \Leftrightarrow x = q, \quad 0 \leq q \leq 2r \quad (2.9)$$

onde

$$x = \sum_{\substack{j=-r \\ j \neq i}}^{+r} \sigma_j(t) \quad (2.10)$$

introduzido por Vichniac [22]. Pomeau [23] mostrou que para esse AC, definido em redes como as da Fig. 2.1, a grandeza

$$E(t) = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i(t) \hat{\sigma}_j(t) - q \sum_i (\sigma_i(t) + \hat{\sigma}_i(t)) \quad (2.11)$$

(onde $\langle \dots \rangle$ significa pares de primeiros vizinhos) se conserva. Para demonstrar isso vamos reescrever a regra, eq. 2.3, como

$$\sigma_i(t) = F[\{\sigma_j(t)\}] \oplus \hat{\sigma}_i(t) \quad (2.12)$$

ou

$$\sigma_i(t+1) = \hat{\sigma}_i(t) + [1 - 2\hat{\sigma}_i(t)]F[\{\sigma_j(t)\}] \quad (2.13)$$

já que $(F - \hat{\sigma}_i) \text{ mod } 2 = F \oplus \hat{\sigma}_i$ e o restante pode ser verificado por inspeção. Rearranjando os termos da eq. 2.10 temos

$$E(t+1) = \sum_i \sigma_i(t+1) [\sum_j \hat{\sigma}_j(t+1)] - q \sum_i (\sigma_i(t+1) + \hat{\sigma}_i(t+1)) \quad (2.14)$$

e, assim,

$$E(t+1) = \sum_i \sigma_i(t+1) [\sum_j \hat{\sigma}_j(t+1) - q] - \sum_i q \hat{\sigma}_i(t+1) \quad (2.15)$$

Inserindo a eq. 2.13, $\hat{\sigma}_i(t+1) = \sigma_i(t)$ na eq. 2.15 e como que $F[\{\sigma_j(t)\}] = 0$ sempre que $\sum_j \hat{\sigma}_j(t+1) - q \neq 0$, encontramos

$$E(t+1) = E(t) \quad (2.16)$$

Do mesmo modo pode-se mostrar que

$$E_i(t) = \sum_j \hat{\sigma}_i(t) \sigma_j(t) - q \sum_i \sigma_i(t) - q \hat{\sigma}_i(t) \quad (2.17)$$

onde a soma sobre j só é feita sobre os primeiros vizinhos do sítio i , é também conservada, localmente conservada. Portanto vemos que, para esse AC, a quantidade local e globalmente conservada é a energia do modelo de Ising.

O autômato 2.9 com $q = 2$ e definido sobre a rede quadrada é chamado de $Q2R$ ($Q = \text{quatre} = r = \text{número de vizinhos}$, $2 = q$, $R = \text{reversível}$). Nesse caso o invariante da equação 2.11 pode, introduzindo-se as variáveis $s_i = \sigma_i - 1/2$ e $\hat{s}_i = \hat{\sigma}_i - 1/2$ que assumem os valores $\pm 1/2$, ser escrita como

$$-\frac{H}{J} = \sum_{ij} s_i(t) \hat{s}_j + h \sum_i (s_i + \hat{s}_i) \quad (2.18)$$

onde $h = 2 - q$ é o campo externo. Mas esse é justamente o Hamiltoniano do modelo de Ising, de modo que o Q2R conserva exatamente a energia total do sistema na ausência de campo externo, já que $q = 2$ e, portanto, $h = 0$ anulando a última soma em 2.18. Logo o Q2R pode servir como um simulador microcanônico do modelo de Ising. A regra dinâmica é inverter todos os spins com energia local $E = -4$ e manter todos os outros em seu estado atual, pois $\sigma_i(t+1) = [F(v(t)) - \hat{\sigma}_i(t)] \bmod 2 = [F(x) - \sigma_i(t-1)] \bmod 2 = F(x) \oplus \sigma_i(t-1)$ e $F(x) = 1 \leftrightarrow \sum_i \sigma_i = q$ e, nesse caso, $E_i(t) = -q \sum_i \sigma_i = -4$. A presença de $\sigma_i(t-1)$ no cálculo de $\sigma_i(t+1)$ nos lembra que a regra deve ser aplicada primeiro a uma das duas subredes em paralelo e só depois à outra.

A primeira implementação do Q2R numa rede quadrada foi feita por Herrmann [24], que mediu a magnetização para grandes redes (até 1280×1280) em função da energia. Os resultados concordam, dentro da precisão numérica, com a solução exata obtida por Onsager e são mostrados na Fig. 2.2.

A grande vantagem do uso do Q2R é computacional. Usando-se código multi-spin pode-se atualizar 16, 32 ou 64 sítios em paralelo (dependendo do tamanho da palavra do computador) por meio de operações lógicas bit a bit da forma

$$\sigma_i(t+1) = \sigma_i(t) \oplus [(\sigma_1 \oplus \sigma_2) \wedge (\sigma_3 \oplus \sigma_4)] \vee [(\sigma_1 \oplus \sigma_3) \wedge (\sigma_2 \oplus \sigma_4)] \quad (2.19)$$

onde $\sigma_1, \dots, \sigma_4$ são os vizinhos de σ_i no tempo t . A vantagem sobre o Monte Carlo tradicional é a eliminação de comparações e da geração de números aleatórios.

O autômato Q2R parece não satisfazer as exigências de *ergodicidade* da dinâmica do modelo de Ising. No caso do modelo de Ising isso significa que *todo* o espaço de estados deve ser gerado acima do ponto crítico enquanto que, abaixo desse ponto, apenas metade dele (por exemplo, a fração com magnetização positiva) deve ser gerada, o que corresponde a quebra espontânea de simetria característica de sua

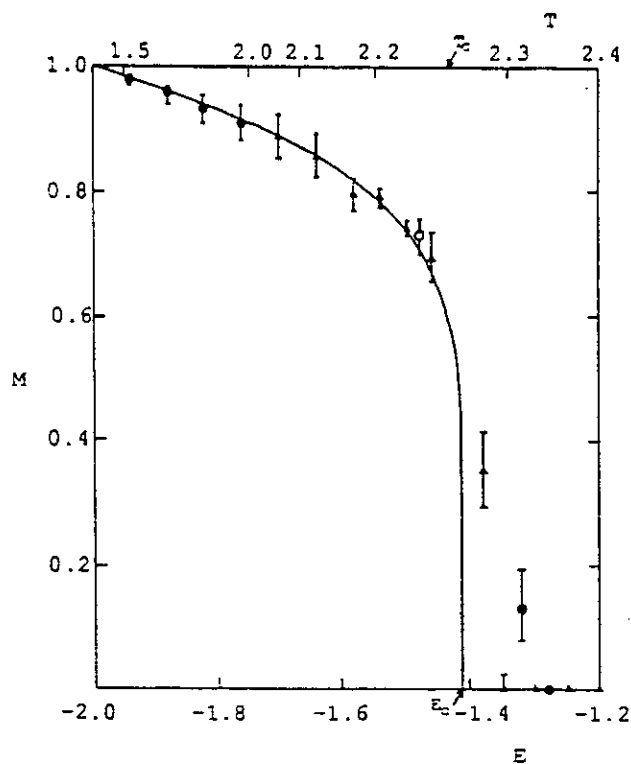


Figura 2.2: Relação entre magnetização e energia para o $Q2R$. A linha cheia corresponde à relação de Onsager para o modelo de Ising. Tamanhos diferentes correspondem a símbolos diferentes. Retirado da referência [24].

transição de fase. Mas, por ser determinística, a dinâmica no espaço de fases do $Q2R$ é controlada por ciclos limites e, assim, ela não deve ser ergódica.

Existe uma série de resultados sobre o $Q2R$ indicando que, quando comparada ao modelo de Ising abaixo do ponto crítico, sua dinâmica subestima as flutuações térmicas [25, 26, 27, 28]. A razão disso é que a regra $Q2R$ não gera convenientemente todo o semi-espaço de fase correspondente à magnetização positiva, mas apenas uma fração desse semi-espaço que, ainda assim, é dependente do estado inicial usado na simulação. De modo a corrigir essa falha de ergodicidade, Oliveira [29] introduziu uma modificação na regra $Q2R$: se apenas três das seis ligações unindo dois spins adjacentes aos seus seis vizinhos são frustradas, então ambos os spins centrais serão invertidos. Quando comparada à $Q2R$, essa regra permite, a cada atualização, uma maior mobilidade na rede das ligações frustradas. Consequentemente ela leva a uma dinâmica que possui maior mobilidade na geração do espaço de fase e melhora, portanto, o seu grau de ergodicidade. A Fig. 2.3 mostra a susceptibilidade, para a rede quadrada, obtida usando-se a regra $Q2R$ e a modificação proposta por Oliveira. Pode-se notar que enquanto a regra modificada reproduz a curva correta apresentando pequenos desvios em baixas energias, os dados do $Q2R$ exibem fortes desvios (1 ordem de magnitude) em relação aos esperados abaixo da energia $E \sim 0,20$. Maiores detalhes, principalmente de implementação computacional, podem ser vistos na referência [30].

2.2 O Autômato Celular Probabilístico de Domany-Kinzel

Nessa seção consideraremos vários aspectos do AC probabilístico (ACP) unidimensional considerado por Domany e Kinzel [10, 31], em particular sua relação com percolação direcionada na rede quadrada e modelos de spins bidimensionais. Uma possível aplicação desse ACP é a modelagem de processos catalíticos em reações químicas [32].

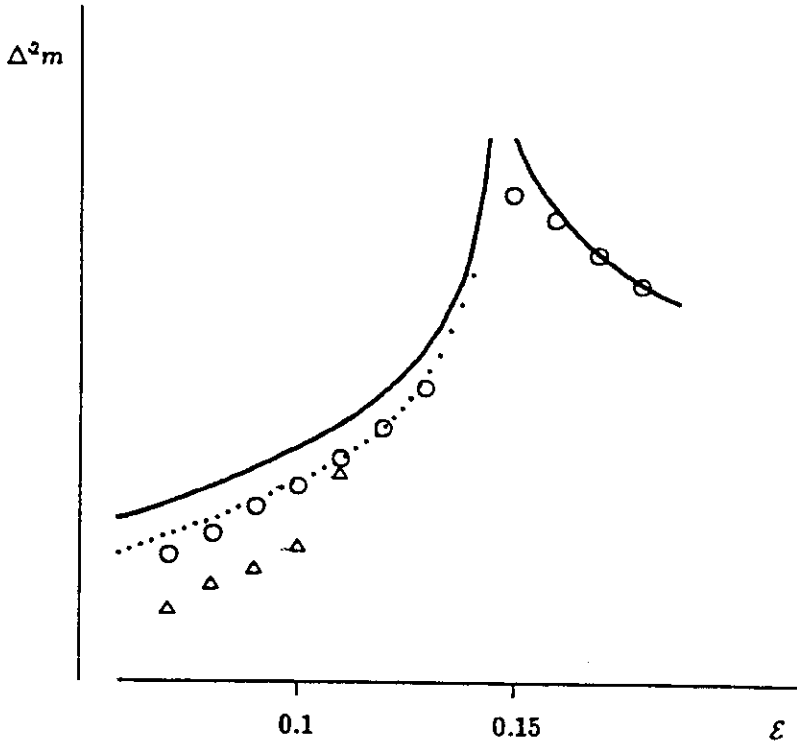


Figura 2.3: Flutuação da magnetização em função da energia para o $Q2R$. A linha cheia representa o resultado exato, no ensemble canônico, para $T \chi = N \left[\frac{\langle (\sum_{i=1}^N \sigma_i)^2 \rangle}{N^2} - m^2 \right]$. A linha pontilhada corresponde à correção no ensemble microcanônico obtida usando-se simulações Monte Carlo. Os triângulos representam os dados do $Q2R$ e os círculos os resultados da regra $Q2R$ modificada. A escala é logarítmica. Retirado da referência [30].

O ACP de Domany-Kinzel generalizado consiste de uma cadeia linear de N variáveis Booleanas $\sigma_i, i = 1, 2, \dots, N$, com condições de contorno periódicas. A evolução temporal (paralela) de cada sítio σ_i depende apenas dos estados anteriores de seus primeiros vizinhos, σ_{i-1} e σ_{i+1} , via probabilidades condicionais

$$p(11/1), p(10/1), p(01/1), p(00/1) \quad (2.20)$$

É claro que $p(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}/0) = 1 - p(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}/1)$. Essas quatro probabilidades condicionais definem o ACP mais geral com variáveis Booleanas e vizinhança de dois sítios. Cada uma delas, $p(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)/1)$ digamos, é a soma sobre oito probabilidades Π_j que especificam a chance de se escolher, no tempo t , a j -ésima regra determinística local tipo Wolfram F_j ($j = 0, 1, 2, \dots, 15$). Isso porque, com vizinhança de dois sítios e variáveis binárias, existem $2^4 = 16$ possíveis regras determinísticas. A primeira, F_0 , é tal que $\sigma_i(t+1) = 0$ para todas as configurações 00, 01, 10 e 11 de $\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)$. Já F_1 associa $\sigma_i(t+1) = 1$ à configuração 11 de $\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)$ e $\sigma_i(t+1) = 0$ para as demais e assim por diante, até F_{15} que associa $\sigma_i(t+1) = 1$ para todas as quatro configurações. Então, sendo Π_j a probabilidade de se usar a j -ésima regra determinística para atualizar o sítio i no tempo t , é claro que o conjunto $\{\Pi_j\}$ satisfaz a regra de soma

$$\sum_{j=0}^{15} \Pi_j = 1 \quad (2.21)$$

e, portanto, apenas 15 parâmetros Π_j são independentes. Além disso a probabilidade condicional $p(00/0)$ de $\sigma_i(t+1) = 0$ dado que a configuração $\{\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)\} = \{0, 0\}$ ocorre é, por exemplo, a soma sobre todas as Π_j associadas às oito regras legais da tabela 2.1. Em geral a probabilidade condicional $p(\sigma_1, \sigma_2/\sigma_3)$ de $\sigma_i(t+1) = \sigma_3$ dado que $\{\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)\} = \{\sigma_1, \sigma_2\}$ é a soma sobre todas as Π_j correspondentes as regras nas quais $\sigma_i(t+1) = \sigma_3$ é associado à configuração σ_1, σ_2 . Uma vez que $p(\sigma_1, \sigma_2/0) = 1 - p(\sigma_1, \sigma_2/1)$ então das oito probabilidades condicionais $p(\sigma_1, \sigma_2/\sigma_3)$ somente quatro delas, $p_2 \equiv p(11/1), p_1 \equiv p(10/1), p_3 \equiv p(01/1)$ e $p_0 \equiv p(00/1)$ digamos, são independentes. A discussão acima é resumida na tabela 2.1.

Regra	Vizinhança no tempo t			
	00	01	10	11
F_0	0	0	0	0
F_1	0	0	0	1
F_2	0	0	1	0
F_3	0	0	1	1
F_4	0	1	0	0
F_5	0	1	0	1
F_6	0	1	1	0
F_7	0	1	1	1
F_8	1	0	0	0
F_9	1	0	0	1
F_{10}	1	0	1	0
F_{11}	1	0	1	1
F_{12}	1	1	0	0
F_{13}	1	1	0	1
F_{14}	1	1	1	0
F_{15}	1	1	1	1

$$p(00/0) = \Pi_0 + \Pi_1 + \Pi_2 + \Pi_3 + \Pi_4 + \Pi_5 + \Pi_6 + \Pi_7$$

$$p(01/0) = \Pi_0 + \Pi_1 + \Pi_3 + \Pi_8 + \Pi_9 + \Pi_{10} + \Pi_{11} + \Pi_{12}$$

$$p(10/0) = \Pi_0 + \Pi_1 + \Pi_4 + \Pi_5 + \Pi_8 + \Pi_9 + \Pi_{12} + \Pi_{13}$$

$$p(11/0) = \Pi_0 + \Pi_2 + \Pi_4 + \Pi_6 + \Pi_8 + \Pi_{10} + \Pi_{12} + \Pi_{14}$$

$$p(00/0) + p(00/1) = 1$$

$$p(01/0) + p(01/1) = 1$$

$$p(10/0) + p(10/1) = 1$$

$$p(11/0) + p(11/1) = 1$$

Tabela 2.1: Relações entre probabilidades condicionais $p(\sigma_1, \sigma_2/\sigma_3)$ do ACP booleano mais geral com vizinhança de dois sítios e as probabilidades Π_j associadas às 16 regras locais determinísticas F_j . As regras F_0, \dots, F_7 são legais enquanto que as regras F_8, \dots, F_{15} são ilegais. Os números nas colunas representam os valores de $\sigma_i(t+1)$ associados às configurações $\{\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)\}$. Retirado da referência [35].

A primeira relação importante do ACP de Domany-Kinzel com problemas tradicionais da física estatística é a percolação direcionada na rede quadrada. Vamos discutir brevemente esse ponto. Considere a rede da Fig. 2.4 onde cada sítio e cada ligação estão presentes ao acaso com probabilidades p_s e p_l , respectivamente. Quando $\sigma_i = 1$ o sítio i pode ser atingido por uma rota dirigida a partir do topo da rede (ou de um sítio semente em $t = 0$), caso contrário, $\sigma_i = 0$, ele não pode. Além da própria existência da célula, pelo menos uma ligação unindo a linha anterior ao sítio σ_i deve estar presente para que ele possa ser atingido a partir do topo da rede. Assim, por exemplo, basta notar que, do ponto de vista da percolação direcionada, a probabilidade condicional $p(11/1)$ corresponde à chance de se atingir um dado sítio na linha inferior sabendo-se que seus vizinhos, a esquerda e a direita imediatamente acima, estão presentes. Dessa maneira obtemos as seguintes relações entre as quatro probabilidades condicionais e as probabilidades p_s e p_l que caracterizam o problema de percolação:

$$\begin{aligned} p(11/1) &= p_s p_l (2 - p_l) \\ p(10/1) = p(01/1) &= p_s p_l \\ p(00/1) &= 0 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Admitindo-se o caso de diferentes probabilidades para ligações à esquerda e à direita temos o caso anisotrópico mais geral onde $p(01/1) \neq p(10/1)$.

Uma vez que p_s e p_l variam, independentemente, no intervalo $[0, 1]$ a correspondência com o problema de percolação direcionada bidimensional só ocorre para valores especiais das probabilidades condicionais do ACP de Domany-Kinzel. Assim, por exemplo, o caso de percolação por sítio ($p_l = 1$) ocorre sobre a linha $p(11/1) = p(10/1) = p(01/1) = p_s$, a diagonal do quadrado unitário definido por $p(11/1)$ e $p(10/1) = p(01/1)$. Já percolação por ligação ($p_s = 1$) ocorre sobre a linha $p(11/1) = p_l(2 - p_l)$ e $p(10/1) = p(01/1) = p_l$, ou seja, $p(11/1) = p(01/1)[2 - p(01/1)]$ mostrada na Fig. 2.5. Todos os casos de percolação bidimensionais, como por exemplo o caso misto (de sítios e ligações), ocorrem dentro do subespaço do quadrado

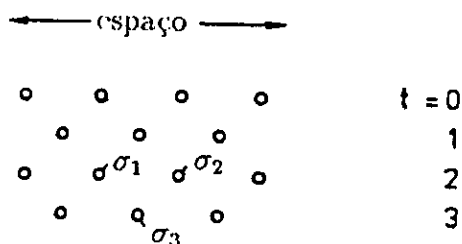


Figura 2.4: Geometria do ACP de Domany-Kinzel unidimensional e sua relação com percolação direcionada na rede quadrada. A probabilidade do sítio σ_3 ser atingido a partir de $t = 0$ (topo da rede) depende da sua própria presença, da presença dos sítios σ_1 e/ou σ_2 e da existência ou não de suas respectivas ligações ao sítio σ_3 .

unitário limitado pelas curvas l (caso de ligação apenas) e s (caso de sítios apenas) na Fig. 2.5. Na região de interseção entre a fase ativa e o subespaço limitado pelas duas curvas l e s , o sistema percola, isto é, existirá um aglomerado conexo infinito ligando um sítio no topo da rede ($t = 0$) a pelo menos um outro na borda inferior ($t = \infty$).

A partir de agora vamos discutir brevemente a relação entre o ACP de Domany-Kinzel e modelos estatísticos do tipo Ising. Como vimos no capítulo 2, a dinâmica dos ACs não está restrita ao peso de Boltzmann e à condição de balanço detalhado, o que lhes permite modelar reações químicas, crescimento de cristais, turbulência, problemas biológicos e outros processos não lineares fora do equilíbrio térmico [36]. Entretanto, ACPs d -dimensionais podem ser mapeados sobre modelos estatísticos $(d + 1)$ - dimensionais [37, 38, 39]. Como veremos a seguir o correspondente modelo de spin é, em geral, anisotrópico, envolve interações entre múltiplos spins e campos externos cujas constantes de acoplamento são calculadas a partir das probabilidades condicionais que especificam a regra de evolução do ACP. Ao contrário da dinâmica de equilíbrio, definida pela mudança da variável local de acordo com o

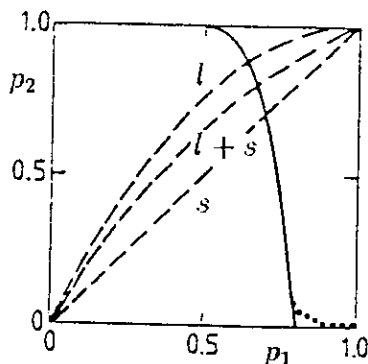


Figura 2.5: Diagrama de fases e subespaço do quadrado unitário que corresponde ao caso geral de percolação direcionada no ACP de Domany-Kinzel unidimensional. As linhas l , $l + s$ e s marcam os casos de percolação por ligação, misto (sítio e ligação) e por sítio, respectivamente, na rede quadrada.

peso de Boltzmann local, mesmo os ACPs unidimensionais exibem transições de fase contínuas caracterizadas por expoentes críticos universais e leis de escala.

De modo a estabelecer a conexão entre o ACP de Domany-Kinzel generalizado e os modelos estatísticos de spin vamos associar a cada variável binária σ_i os valores $+1$ ou -1 , em lugar de 0 ou 1 como antes. Nesse caso o ACP de Domany-Kinzel generalizado passa a ser definido através de quatro probabilidades condicionais $p(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)/\sigma_i(t+1))$:

$$p_0 \equiv p(-1, -1/1), p_1 \equiv p(1, -1/1), p_3 \equiv p(-1, 1/1), p_2 \equiv p(1, 1/1) \quad (2.23)$$

Uma vez que, no tempo $t+1$, a variável σ_i deve assumir necessariamente um dos valores possíveis -1 e $+1$, as probabilidades condicionais ou de transição satisfazem a condição de normalização

$$\sum_{\sigma_i(t+1)=\pm 1} p(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)/\sigma_i(t+1)) = 1 \quad (2.24)$$

que é automaticamente levada em conta colocando-se

$$p(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t) / \sigma_i(t+1)) = \frac{1}{2}[1 + \sigma_i(t+1)h(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t))] \quad (2.25)$$

com $|h(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t))| \leq 1$, já que $p(\sigma_1, \sigma_2 / \sigma_3) \leq 1$. Uma forma geral da função h , que depende da vizinhança local no tempo anterior do sítio i , na notação simplificada da Fig. 2.4 é

$$h(\sigma_1, \sigma_2) = V + T_1\sigma_1 + T_2\sigma_2 + U\sigma_1\sigma_2 \quad (2.26)$$

onde os parâmetros T_1 , T_2 , U , e V estão relacionados às probabilidades condicionais p_0 , p_1 , p_2 e p_3 através das fórmulas

$$\begin{aligned} T_2 &= \frac{1}{2}(p_2 - p_0 + p_3 - p_1) \\ T_1 &= \frac{1}{2}(p_2 - p_0 + p_1 - p_3) \\ U &= \frac{1}{2}(p_2 + p_0 - p_1 - p_3) \\ V &= \frac{1}{2}(p_2 + p_0 + p_1 + p_3 - 2) \end{aligned} \quad (2.27)$$

pois, por exemplo, $h(1, 1) = V + T_1 + T_2 + U = 2p_2 - 1$ e, portanto, $p(1, 1 / \sigma_3) = \frac{1}{2}[1 + \sigma_3(2p_2 - 1)]$ conforme as definições corretas $p(1, 1 / 1) = p_2$ e $p(1, 1 / -1) = 1 - p_2$.

Consideremos agora uma dada “história” ou padrão espaço-temporal do ACP, isto é, um conjunto de sucessivo estados $\{\sigma_i(t)\}$. Uma vez que a evolução do autômato é um processo Markoviano, a probabilidade dessa “história” será

$$P(\{\sigma_i(t)\}) = \prod_t \prod_i p(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t) / \sigma_i(t+1)) \quad (2.28)$$

O produto na eq. 2.28 pode, via uma forma exponencial para $p(\sigma_1, \sigma_2 / \sigma_3)$, ser expresso de uma forma mais conveniente. Escrevendo-se [38]

$$\begin{aligned} p(\sigma_1, \sigma_2 / \sigma_3) &= A \exp(H_1\sigma_1 + H_2\sigma_2 + H_3\sigma_3 + K_{12}\sigma_1\sigma_2 \\ &\quad + K_{23}\sigma_2\sigma_3 + K_{13}\sigma_1\sigma_3 + K_0\sigma_1\sigma_2\sigma_3) \end{aligned} \quad (2.29)$$

a probabilidade associada à “história” $\{\sigma_i(t)\}$, se torna

$$P(\{\sigma_i(t)\}) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(\sigma_i(t))) \quad (2.30)$$

onde H é o Hamiltoniano de um modelo de spin definido numa rede triangular. O Hamiltoniano, que envolve campos magnéticos, e interações entre dois e três sítios de cada plaqueta elementar da rede, possui a seguinte forma

$$\begin{aligned} -\beta H = & (H_1 + H_2 + H_3) \sum_i \sigma_i + \sum_{\text{plaquetas}} (K_{12} \sigma_1 \sigma_2 \\ & + K_{23} \sigma_2 \sigma_3 + K_{13} \sigma_1 \sigma_3 + K_0 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Assim cada “história” ou padrão espaço-temporal do ACP unidimensional passa a ser visto como uma configuração bidimensional estática (o eixo do tempo desempenhando o papel da segunda dimensão) e sua probabilidade de ocorrência é dada, via eq. 2.31, pelo peso de Boltzmann dessa configuração estática em um modelo de spins de equilíbrio em duas dimensões.

As constantes de aclopanento, H_1 , H_2 , H_3 , K_{12} , K_{13} , K_{23} e K_0 que aparecem nas equações 2.29 e 2.31, estão ligadas aos parâmetros que especificam a regra de evolução do ACP como calcularemos a seguir. Considerando, de acordo com a forma exponencial de $p(\sigma_1, \sigma_2/\sigma_3)$, eq. 2.29, as $2^3 = 8$ configurações de spin possíveis temos:

$$\begin{aligned} p(-1, -1/1) &= A \exp(-H_1 - H_2 + H_3 + K_{12} - K_{23} - K_{13} + K_0) = p_0 \\ p(-1, 1/1) &= A \exp(-H_1 + H_2 + H_3 - K_{12} + K_{23} - K_{13} - K_0) = p_3 \\ p(1, -1/1) &= A \exp(H_1 - H_2 + H_3 - K_{12} - K_{23} + K_{13} - K_0) = p_1 \\ p(1, 1/1) &= A \exp(H_1 + H_2 + H_3 + K_{12} + K_{23} + K_{13} + K_0) = p_2 \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned}
p(-1, -1/ -1) &= A \exp(-H_1 - H_2 - H_3 + K_{12} + K_{23} + K_{13} - K_0) \\
&= 1 - p_0 \\
p(-1, 1/ -1) &= A \exp(-H_1 + H_2 - H_3 - K_{12} - K_{23} + K_{13} + K_0) \\
&= 1 - p_3 \\
p(1, -1/ -1) &= A \exp(H_1 - H_2 - H_3 - K_{12} + K_{23} - K_{13} + K_0) \\
&= 1 - p_1 \\
p(1, 1/ -1) &= A \exp(H_1 + H_2 - H_3 + K_{12} - K_{23} - K_{13} - K_0) \\
&= 1 - p_2
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Do produto de todas essas oito equações determinamos a constante de normalização

$$A^8 = p_0(1 - p_0)p_2(1 - p_2)p_1(1 - p_1)p_3(1 - p_3) \tag{2.34}$$

As constantes de acoplamento também são obtidas das oito equações acima. Por exemplo, tomando-se o produto da primeira, quarta, sexta e sétima equações acima e dividindo-se o resultado pelo produto da segunda, terceira, quinta e última expressões, encontramos

$$\frac{e^{4K_0}}{e^{-4K_0}} = \frac{p_0 p_2 (1 - p_1) (1 - p_3)}{p_1 p_3 (1 - p_0) (1 - p_2)} \tag{2.35}$$

o que nos leva à

$$e^{8K_0} = \frac{p_0 p_2 (1 - p_1) (1 - p_3)}{p_1 p_3 (1 - p_0) (1 - p_2)} \tag{2.36}$$

De maneira análoga chegamos às outras expressões procuradas

$$e^{8H_1} = \frac{p_2 p_1 (1 - p_2) (1 - p_1)}{p_0 p_3 (1 - p_0) (1 - p_3)} \tag{2.37}$$

$$e^{8H_2} = \frac{p_2 p_3 (1 - p_2)(1 - p_3)}{p_0 p_1 (1 - p_0)(1 - p_1)} \quad (2.38)$$

$$e^{8H_3} = \frac{p_0 p_2 p_1 p_3}{(1 - p_0)(1 - p_2)(1 - p_1)(1 - p_3)} \quad (2.39)$$

$$e^{8K_{23}} = \frac{p_2 p_3 (1 - p_0)(1 - p_1)}{p_0 p_1 (1 - p_2)(1 - p_3)} \quad (2.40)$$

$$e^{8K_{13}} = \frac{p_2 p_1 (1 - p_0)(1 - p_3)}{p_0 p_3 (1 - p_2)(1 - p_1)} \quad (2.41)$$

$$e^{8K_{12}} = \frac{p_0 p_2 (1 - p_0)(1 - p_2)}{p_1 p_3 (1 - p_1)(1 - p_3)} \quad (2.42)$$

Entretanto, devemos notar que nem todas as constantes de acoplamento são independentes entre si. Isso é claro desde que essas sete constantes são, de fato, funções de apenas quatro probabilidades condicionais independentes. A condição de normalização, eq. 2.24, na forma exponencial

$$\sum_{\sigma_3=\pm 1} \exp[-\beta H(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)] = \frac{1}{A} \quad (2.43)$$

onde A depende apenas das constantes de acoplamento e não dos spins σ_1 e σ_2 , impõe vínculos às interações do modelo estatístico de spins bidimensional derivado do ACP. Portanto a eq. 2.43 força relações diretas entre as sete constantes H_1 , K_{ij} e K_0 . Na verdade, uma vez que o campo total em cada sítio da rede é uma combinação simétrica $H_1 + H_2 + H_3 = h$, o modelo de spins é, de fato, definido por cinco constantes de acoplamento. Logo a condição de normalização, eq. 2.43 define, no diagrama de fase do modelo anisotrópico de spins de equilíbrio parametrizado pelas cinco constantes h , K_{ij} , K_0 , uma variedade de codimensão 1, chamada *variedade de desordem*. Por exemplo, no caso do modelo de Ising na rede triangular e na ausência de campo, para o qual $h = 0$ e $K_0 = 0$, na eq. 2.31, sua variedade de desordem é de acordo com 2.43, dada por

$$\sum_{\sigma_3=\pm 1} \exp(K_{23}\sigma_2\sigma_3 + K_{13}\sigma_1\sigma_3 + K_{12}\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{A} \quad (2.44)$$

ou

$$\exp(K_{23}\sigma_2 + K_{13}\sigma_1 + K_{12}\sigma_1\sigma_2) + \exp(-K_{23}\sigma_2 - K_{13}\sigma_1 + K_{12}\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{A} \quad (2.45)$$

válida para qualquer estado dos spins σ_1 e σ_2 . Assim escrevendo-se a eq. 2.45 para $\{1,1\}$ e $\{1,-1\}$ de σ_1, σ_2 e subtraindo uma da outra, encontramos

$$e^{K_{12}} \cosh(K_{23} + K_{13}) - e^{-K_{12}} \cosh(K_{23} - K_{13}) = 0 \quad (2.46)$$

Portanto a condição de desordem se reduz à

$$t_3 + t_1 t_2 = 0 \quad (2.47)$$

onde $t_3 = \tanh K_{12}$, $t_1 = \tanh K_{23}$ e $t_2 = \tanh K_{13}$.

É claro que todo o procedimento acima pode ser generalizado para ACP d -dimensionais. A idéia geral é considerar os sucessivos estados do autômato d -dimensional como as diversas camadas de uma rede $(d+1)$ -dimensional, com o eixo do tempo sendo a dimensão extra. O caráter Markoviano e local da regra de evolução permitirá a definição de um Hamiltoniano local nessa rede $(d+1)$ -dimensional de tal maneira que a probabilidade de um dado padrão espaço-temporal ou “história” do ACP será igual ao peso de Boltzmann da correspondente configuração $\{\sigma_i(t)\}$ de um modelo estatístico de spins e campos, funções das probabilidades condicionais originais do ACP, e que, portanto, não serão todos independentes entre si. As constantes de acoplamento estarão relacionadas entre si através da condição de normalização das probabilidades e, assim, o modelo de spins $(d+1)$ -dimensional associado estará restrito à sua *variedade de desordem* no diagrama de fases. Nos limites determinísticos do ACP (onde todas as probabilidades condicionais são 0 ou 1) todas as constantes de acoplamento no modelo de spin associado são $+\infty$ ou $-\infty$. Portanto os diferentes limites determinísticos estão relacionados às diferentes maneiras possíveis de se obter o limite de temperatura zero do modelo de spin ao mesmo tempo que se preserva a relação 2.43 entre as constantes de acoplamento. Cada “história” particular de um AC determinístico corresponderá a um diferente estado fundamental do modelo de

spins sujeito a uma dada condição de contorno. O esquema geral de equivalência entre ACPs d -dimensionais e modelos de spins $(d + 1)$ -dimensionais é apresentado na tabela 2.2.

<i>ACP d-dimensional</i>	<i>modelo de spins d + 1-dimensional</i>
padrão espaço-temporal $\{\sigma_i(t)\}$	configuração de spins $\{\sigma_i(t)\}$
probabilidades condicionais locais $p(\{\sigma'(t)\}/\{\sigma_i(t+1)\})$	peso de Boltzmann normalizado local $A \exp(-\beta H(\{\sigma'\}, \{\sigma\}))$
condição de normalização: $\sum_{\{\sigma'\}} p(\{\sigma'\}/\{\sigma\}) = 1$	condição de desordem: $\sum_{\{\sigma_3\}=\pm 1} \exp(-\beta H(\{\sigma'\}, \{\sigma\})) = \frac{1}{A}$
operador de evolução	matriz de transferência linha a linha
configuração inicial	condição de contorno
probabilidade de uma "história": $P(\{\sigma_i(t)\})$	peso termodinâmico: $\frac{1}{Z} \exp(-\beta H(\sigma_i(t)))$
média sobre histórias	média termodinâmica
função de correlação dinâmica: $\langle \sigma_i(t) \sigma_j(t) \dots \rangle_P$	função de correlação $\langle \sigma_i(t) \sigma_j(t) \dots \rangle_H$
transientes	efeitos de superfície
limites determinísticos	diferentes limites de temperatura zero
"histórias" determinísticas	estados fundamentais

Tabela 2.2: Equivalência entre ACPs d -dimensionais e os modelos de spin $(d + 1)$ -dimensionais satisfazendo a condição de desordem. Retirado da referência [38].

Capítulo 3

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS NO AC DE DOMANY-KINZEL

Neste capítulo apresentaremos os resultados centrais desta tese obtidos através de extensivas simulações Monte Carlo realizadas no autômato de Domany-Kinzel. Nestas simulações investigamos o diagrama de fases e a criticalidade do ACP de Domany-Kinzel generalizado, o efeito sobre a criticalidade da introdução de certos vínculos na regra de evolução do ACP, as características do processo de relaxação ao equilíbrio do parâmetro de ordem da transição de fases congelada-ativa e, finalmente, a resposta do AC (susceptibilidades) à presença de campos externos conjugados aos parâmetros de ordem das transições de fase congelada-ativa e ativa-caótica.

3.1 Superfície Crítica e Classes de Universalidade

Recapitulando, nosso sistema consiste de uma rede unidimensional de N sítios ($i = 1, 2, \dots, N$), com condições de contorno periódicas, sendo que cada sítio pode assumir dois estados possíveis $\sigma_i = 0, 1$. O estado do sistema no tempo t é especificado pelo conjunto $\{\sigma_i(t)\}$. No próximo passo de tempo, o estado de um dado sítio será $\sigma_i(t+1) = 0$ ou 1 de acordo com um conjunto de probabilidades condicionais $\{P(\sigma_{i-1}(t), \sigma_{i+1}(t)/\sigma_i(t+1))\}$, mais especificamente $p_1 \equiv p(0, 1/1)$, $p_3 \equiv p(1, 0/1)$

e $p_2 \equiv p(1, 1/1)$. Com $p_0 = 0$ é clara a existência de uma superfície crítica no espaço de parâmetros (p_1, p_2, p_3) separando uma região do cubo unitário na qual o estado assintótico $t \rightarrow \infty$ do ACP é homogêneo (com todos os sítios nulos, *fase congelada*), contendo a origem $p_1 = p_2 = p_3 = 0$, de uma outra na qual o estado assintótico possui uma fração finita de sítios permutantes com valor 1 (*fase ativa*) e que inclui o canto $p_1 = p_2 = p_3 = 1$ (onde o estado final é homogêneo com todos os sítios $\sigma_i = 1$). Porém se $p_0 \neq 0$ sempre, mesmo após atingir o estado homogêneo nulo, teremos uma fração não nula de sítios com valor 1 e, conseqüentemente, a transição de fase será destruída. Portanto consideraremos aqui $p_0 \equiv p(0, 0/1) = 0$ (regras legais), desde que essa probabilidade age como um campo externo que destrói a transição de fase. A transição de fase, que ocorre com $p_0 = 0$, é contínua e caracterizada por expoentes críticos universais.

Não existem resultados analíticos exatos com respeito à superfície crítica exceto no ponto $(p_1, p_2, p_3) = (1/2, 1, 1/2)$ para o qual se aplicam argumentos de dualidade [31]. Esses argumentos podem ser estendidos de modo a provar que a linha crítica com $p_2 = 1$ é uma reta cuja equação é $p_1 + p_3 = 1$ [40, 41]. Por outro lado os trabalhos de Domany e Kinzel [10, 31] demonstraram a existência de apenas duas fases: *a congelada*, na qual todos os estados iniciais levam a um estado absorvente $\sigma_i = 0 \forall i = 1, 2, \dots, N$, e *a ativa* na qual, em todos os passos de tempo, uma fração macroscópica de sítios tem valor 1.

Para caracterizar a transição de fase congelada-ativa definimos um parâmetro de ordem M (a “magnetização”) como a fração $t \rightarrow \infty$ de sítios com valor 1. Nas simulações computacionais da superfície crítica, é necessário fazer a evolução do autômato até que ele atinja o equilíbrio e, só então, avaliar a “magnetização” M . Uma vez que a evolução do ACP deve ser feita até que não existam grandes flutuações no parâmetro de ordem, fizemos, inicialmente, um estudo do transiente, isto é, do tempo necessário para que o ACP atinja o equilíbrio. O estado inicial usado em todas as nossas simulações corresponde, para cada sítio, à situação equiprovável entre os valores 0 e 1 (aproximadamente $N/2$ sítios, escolhidos ao acaso, estão no estado 1). As figuras 3.1 (a) e 3.1 (b) mostram o parâmetro de ordem $M(t)$ em função do tempo para

dois conjuntos de probabilidades condicionais correspondentes a pontos na fase congelada distante e próximo, respectivamente, da superfície crítica. O comportamento do transiente de $M(t)$ para um ponto (p_1, p_2, p_3) que pertence à fase não-congelada e que está distante da superfície crítica é exibido na figura 3.1 (c). Dessas figuras podemos observar, como esperado, que o transiente próximo à superfície crítica é maior do que longe dela; como veremos mais adiante, esse transiente diverge na superfície crítica para $N \rightarrow \infty$. Na figura 3.2 apresentamos o diagrama de fases completo para o ACP de Domany-Kinzel generalizado obtido por nós através de simulações computacionais; o caso isotrópico $p_1 = p_3$ é mostrado na figura 3.3. É importante notar que o diagrama de fases apresenta três e não duas fases como previamente sugerido nos trabalhos originais de Domany e Kinzel. No caso isotrópico nossa fronteira crítica congelada-não congelada é semelhante à obtida por Kinzel [31] usando métodos de matriz de transferência e escala de tamanho finito. Mas nossas simulações Monte Carlo mostram que o estado ordenado é denso o bastante para suportar uma transição distante do limite determinístico $p_2 = 0$, $p_1 = p_3 = 1$, contrariamente aos argumentos de Kinzel. Ainda no caso isotrópico, calculamos o expoente β associado ao parâmetro de ordem M e definido por $M \sim (p_1 - p_{1c})^\beta$. Na figura 3.4 apresentamos um típico gráfico de $\ln M_\infty \times \ln(p_1 - p_{1c})$ para o parâmetro de ordem. Nossas simulações fornecem o resultado $\beta = 0.25 \pm 0.02$ que deve ser comparado ao valor $\beta = 0.273 \pm 0.002$, obtido por Kinzel [31], e com os valores da percolação direcionada [42]. Nossos resultados Monte Carlo suportam a hipótese de universalidade, isto é, de que os mesmos expoentes críticos, incluindo β , descrevem as propriedades críticas ao longo de todo o contorno de fase congelada-ativa da figura 3.3, exceto para $p_2 = 1$ onde nossas simulações são consistentes com um $\beta = 0$ e, portanto, com uma classe de universalidade diferente. Para o caso anisotrópico ($p_1 \neq p_3$) obtemos uma classe de universalidade distinta caracterizada por $\beta \sim 0.50 \pm 0.02$, consistente com o fato, mostrado na referência [38], de certas regras lineares de ACPs terem transições de fase cujas classes de universalidade estão relacionadas ao problema de “self-avoiding walks” direcionadas.

De modo a entender melhor a natureza da fase não congelada longe do canto determinístico $p_1 = p_3 = 1$ e $p_2 = 0$ (regra 90 na notação de Wolfram), estudamos

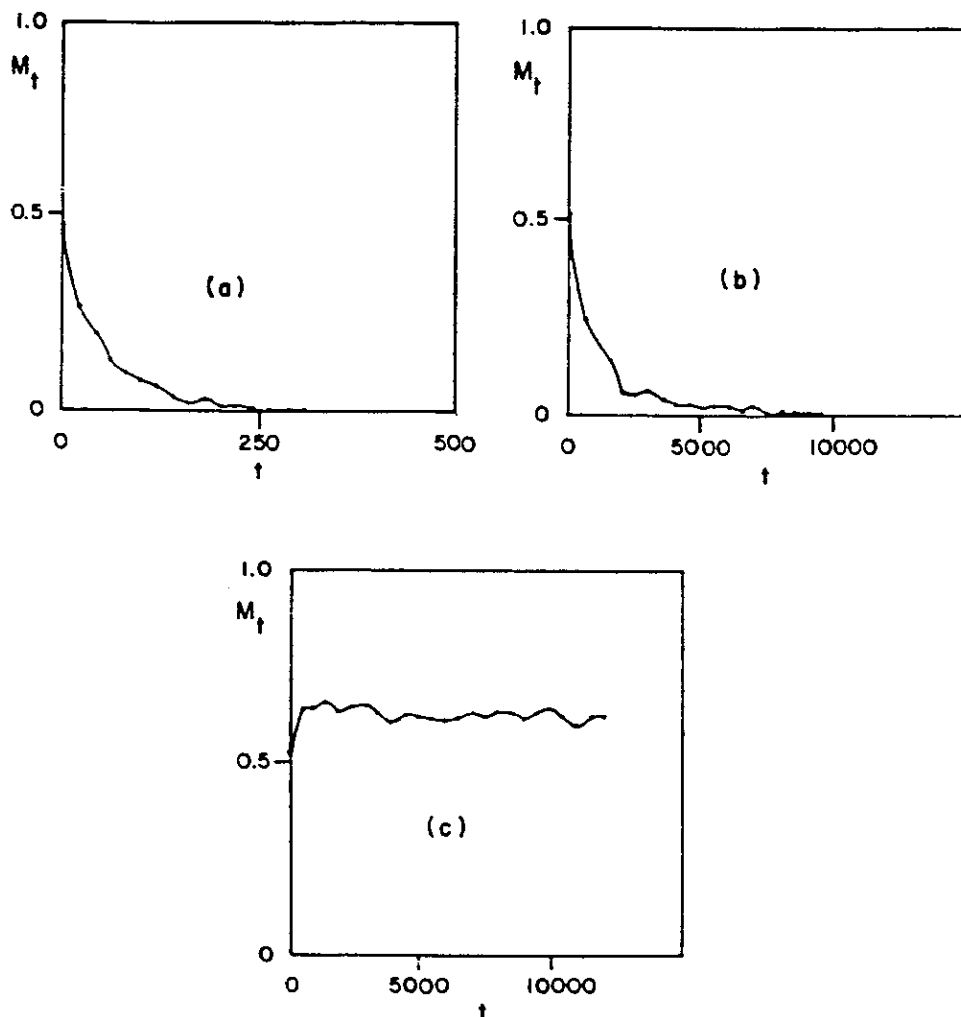


Figura 3.1: Parâmetro de ordem $M(t)$ em função do tempo para um conjunto particular de probabilidades condicionais. Todas as figuras são para $p_2 = 0.70$ e para os seguintes valores de p_1 e p_3 : (a) $p_1 = p_3 = 0.67$, (b) $p_1 = p_3 = 0.63$ e (c) $p_1 = p_3 = 0.80$. $p_c(10/1) = p_c(01/1) \sim 0.68$. Os dois primeiros conjuntos de probabilidades condicionais (a e b) pertencem à fase congelada enquanto o último (c) pertence à fase ativa.

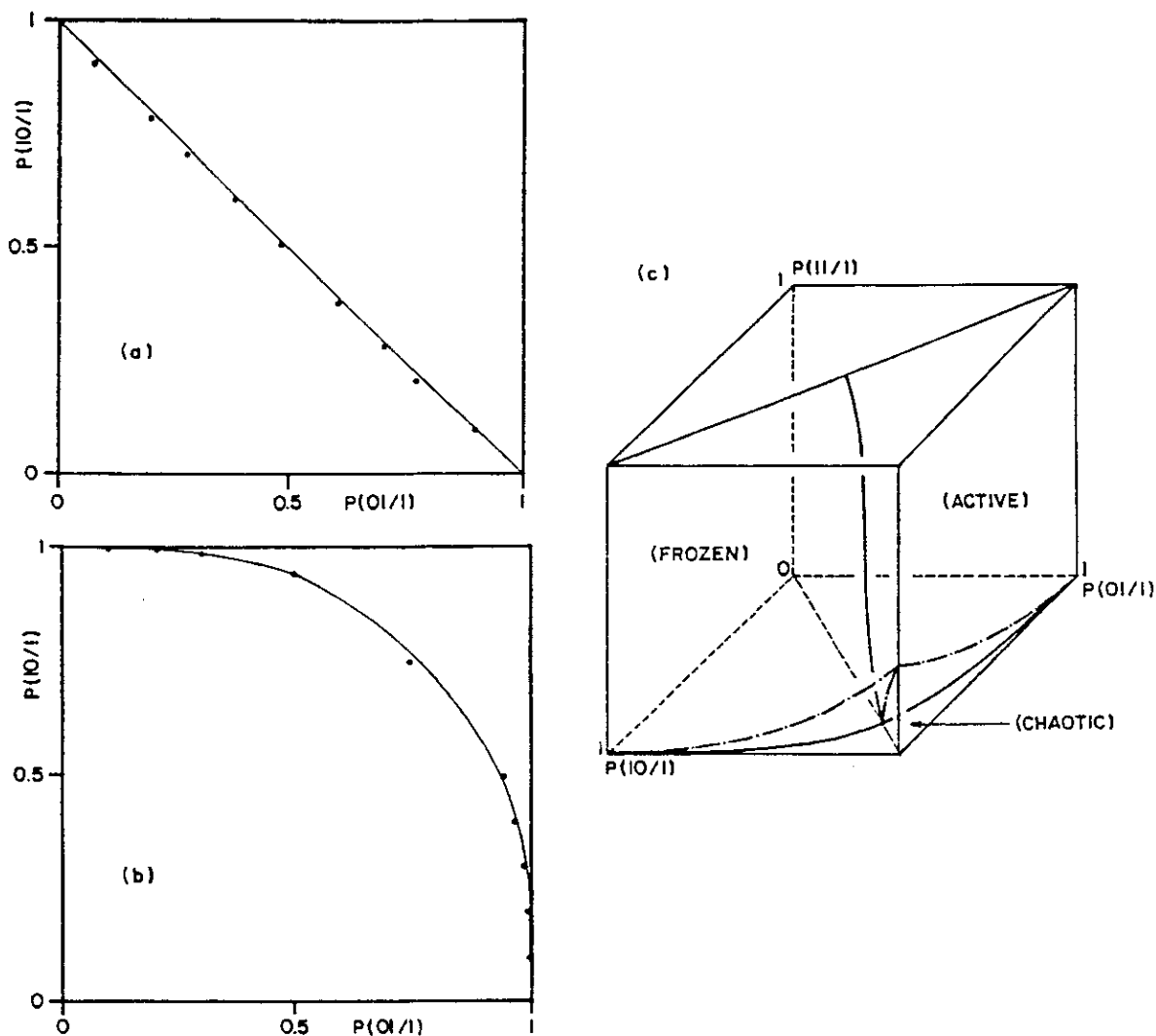


Figura 3.2: Superfície crítica: (a) $p_2 = 1.0$ (a coerência dos resultados numéricos e analíticos melhora para sistemas maiores e tempo de evolução (médias) mais longos.); (b) $p_2 = 0.2$; (c) o diagrama de fases completo do ACP de Domany-Kinzel generalizado. A linha cheia representa a superfície crítica entre as fases *congelada* ($M = 0, \Psi = 0$) e *ativa* ($M \neq 0, \Psi = 0$). A linha pontilhada é o contorno da transição dinâmica entre as fases *ativa* e *caótica* ($M \neq 0, \Psi \neq 0$) nos planos $p_1 = 1$, $p_3 = 1$ e $p_1 = p_3$, respectivamente. No plano $p_2 = 0$ as transições de fase congelada e caótica- não caótica possuem a mesma linha crítica.

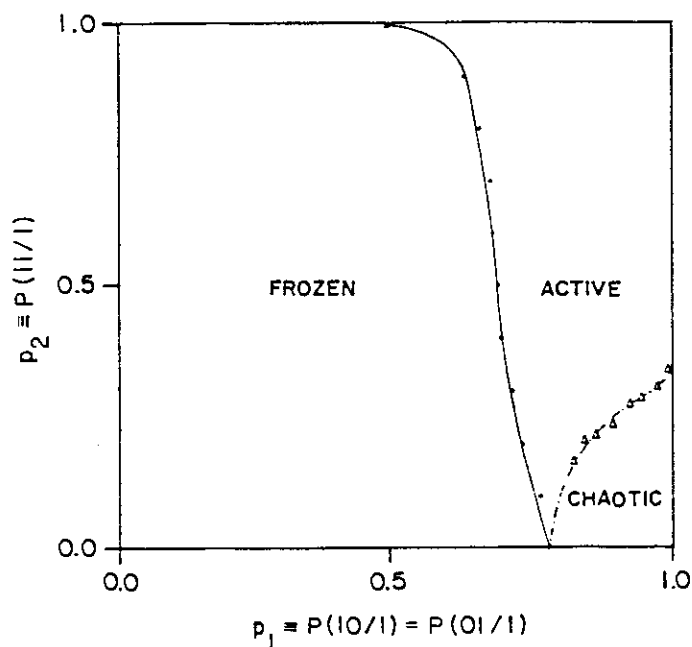


Figura 3.3: Corte do diagrama de fases do ACP de Domany-Kinzel generalizado ao longo do plano isotrópico ($p_1 = p_3$). Os dados foram obtidos a partir de simulações com $N = 3200$ sítios, transientes de 10.000 e 3.000 passos de tempo para as transições congelada-ativa e ativa-caótica, respectivamente. O plano foi acompanhado por 30.000 passos de tempo.

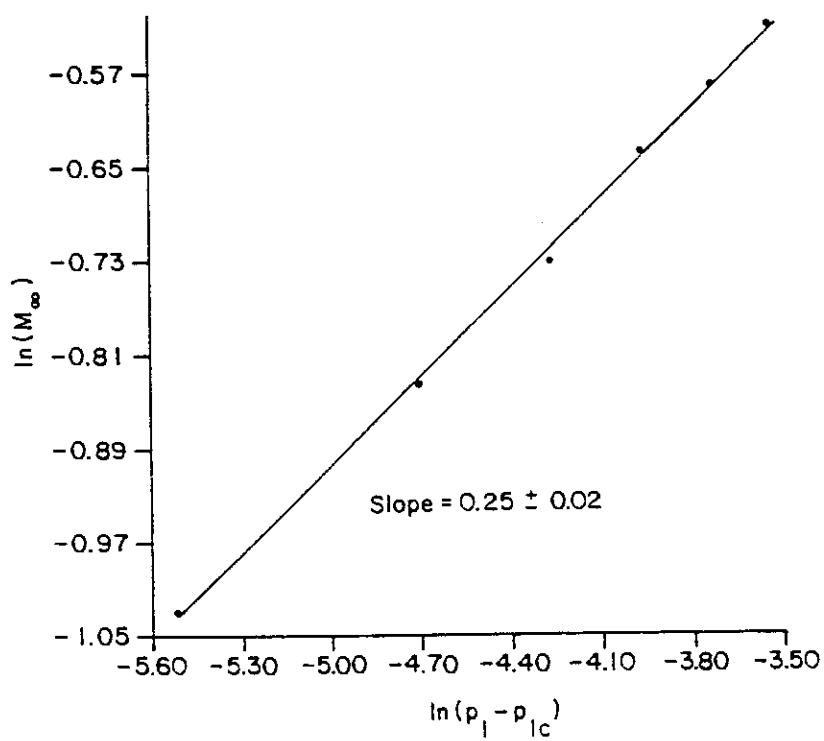


Figura 3.4: Gráfico de $\ln M_\infty \times \ln(p_1 - p_{1c})$ no caso isotrópico e para $p_2 = 0.90$. A linha cheia é uma guia para os olhos.

como ocorre a propagação de danos nesse ACP. Para isso simulamos o autômato até que ele atinja o equilíbrio e, então, construímos uma réplica do sistema na qual um “dano inicial” é criado pela inversão de uma fração p de sítios, escolhidos ao acaso, com relação às células correspondentes no ACP original. Essa estratégia economiza tempo de simulação quando comparada àquela na qual o dano é criado desde o instante inicial. Com a subsequente evolução no tempo, o dano inicial se espalha através de parte da rede (região danificada) onde os sítios dos dois autômatos possuem valores diferentes. Esse dano é medido pela *distância de Hamming normalizada* Ψ , definida como a fração de sítios na réplica que diferem dos seus correspondentes no sistema original. Na figura 3.5 é mostrado como Ψ varia em função do dano inicial p para diferentes tamanhos do sistema e diferentes tempos de evolução. A partir desses dados vemos que uma fração $p \simeq 50\%$ é bastante conveniente para simulações confiáveis já que o sistema atinge o equilíbrio mais rapidamente para grandes valores de p . Também vemos dessa figura que o valor de $N = 3200$ sítios é uma boa aproximação para o limite termodinâmico desde que, para $N = 6400$ e para $p > 10\%$, Ψ assume os mesmos valores que os obtidos com $N = 3200$. Se o dano se espalhar por todo o ACP então o autômato é sensível às condições iniciais (*fase caótica*), caso contrário ele estará num regime não caótico.

O método de propagação de danos foi usado com sucesso, nos últimos anos, no estudo das transições de fase dinâmicas em modelos tipo Ising e no autômato $Q2R$ [43, 44, 45, 46], vidros de spin [47], autômatos determinísticos [48] e outros sistemas de spin como os modelos ANNNI e XY [49, 50]. Relações exatas conectando a propagação de danos e propriedades termodinâmicas de sistemas do tipo Ising foram estabelecidas por Coniglio e colaboradores [51]. Essas relações foram, desde então, estendidas para os modelos de Potts e Ashkin-Teller [52] e para o modelo Z_n [53].

Para o cálculo de Ψ tomamos uma média temporal sobre um período mínimo tão longo quanto o comprimento N da rede. O *ponto crítico para propagação de danos* foi definido como sendo o conjunto de probabilidades condicionais $p_s \equiv (p_{1s}, p_{2s}, p_{3s})$ para o qual uma perturbação inicial provoca, com probabilidade não nula, um dano que se espalha indefinidamente no ACP. Assim, para um valor fixo de p_1 e p_3 , Ψ é zero

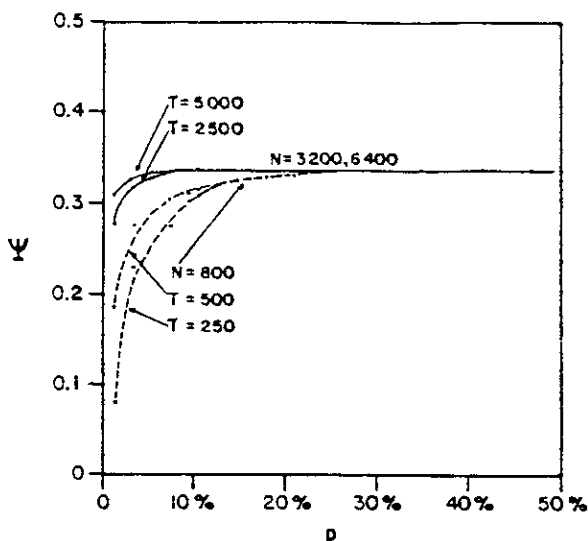


Figura 3.5: Parâmetro Ψ para diferentes valores da probabilidade p do dano inicial, para $p_2 = 0.15$ e $p_1 = p_3 = 0.90$. As linhas são guias para os olhos. τ é o tempo (após o equilíbrio) sobre o qual se fez a média de Ψ .

se $p_2 \geq p_{2s}$ e é, ao contrário, diferente de zero se $p_2 < p_{2s}$. O contorno de fase para essa transição dinâmica, obtido pela extrapolação de nossos resultados para valores crescentes de N , corresponde as linhas pontilhadas das figuras 3.2 (caso geral) e 3.3 (caso isotrópico). Na fase congelada o parâmetro de ordem Ψ é zero (assim como M); por outro lado, a fase não congelada é subdividida em duas regiões: uma na qual $\Psi = 0$ (fase ativa) e outra na qual $\Psi \neq 0$ (fase caótica), porém nessas duas regiões $M \neq 0$. Como uma função de (p_1, p_2, p_3) Ψ se anula, próximo à p_{2s} , de acordo com uma lei de potência $\Psi \sim (p_{2s} - p_2)^\mu$, como pode ser visto na figura 3.6. O valor de μ obtido em nossas simulações apenas para o caso isotrópico é $\mu = 0,37 \pm 0,10$, o mesmo ao longo de toda a superfície crítica $p_1 = p_3$.

Muitos dos resultados, publicados nas referências [54, 35], foram confirmados por simulações numéricas mais extensivas [55, 56] e por argumentos analíticos do tipo campo médio [55, 57]. Na referência [56] as fronteiras críticas entre as três fases do AC de Domany-Kinzel foram determinadas, com grande precisão, usando-se o *método do gradiente* [58], sendo mostrada na figura 3.7. A aproximação de campo médio usada

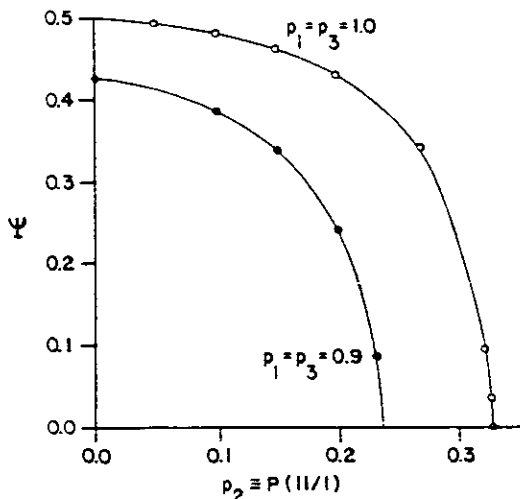


Figura 3.6: O parâmetro de ordem da transição dinâmica Ψ em função das probabilidades. Os dados correspondem à 3200 sítios, transiente até o equilíbrio de 2000 passos de tempo e evolução do dano por outros 3000 passos de tempo.

na referência [55] fornece um diagrama de fases, visto na figura 3.8, que não apresenta o comportamento qualitativo correto. Já a aproximação do tipo campo médio usada por Tomé [57] produz um diagrama de fases qualitativamente mais correto (sem reentrâncias) mas apresenta, ao contrário das simulações, um ponto triplo ocorrendo para $p_2 \neq 0$. Esse diagrama de fases é mostrado na figura 3.9.

3.2 A Evolução Temporal da Magnetização.

Vimos, na seção anterior, que no cálculo computacional da superfície crítica congelada-ativa, por exemplo, é necessário evoluir o autômato até que ele atinja o equilíbrio avaliando, a cada passo de tempo, o parâmetro de ordem M . Assim o autômato evolui até que não existam grandes flutuações da magnetização, exibindo transientes cujos comprimentos dependem fortemente da distância do conjunto (p_1, p_2, p_3) da superfície crítica, como mostra a figura 3.1. Espera-se que o tempo necessário para a magnetização atingir o equilíbrio divirja sobre a superfície crítica

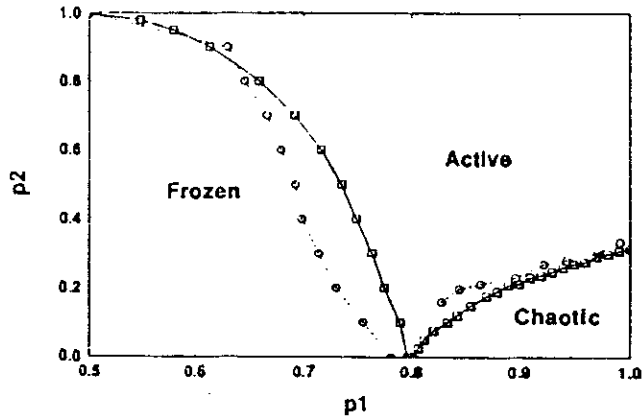


Figura 3.7: Diagrama de fases obtido por Zebende e Penna [56], usando o método numérico do gradiente. \circ e linhas pontilhadas representam nossos resultados, enquanto os \square e linhas cheias indicam as fronteiras críticas obtidas por Zebende e Penna. Esse diagrama de fases foi também confirmado por Khoring e Schreckenberg [55].

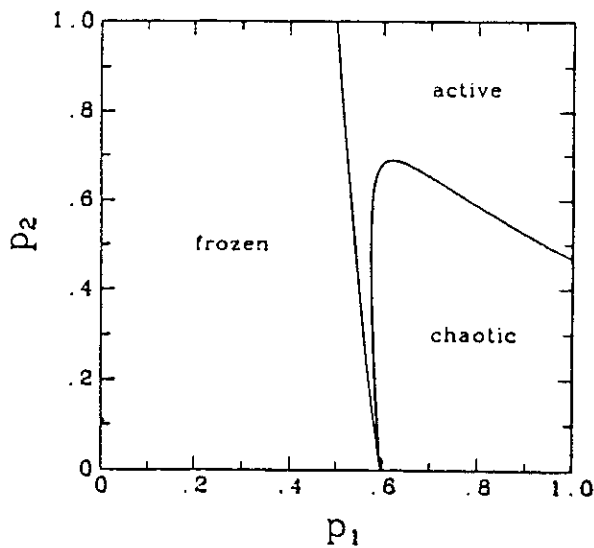


Figura 3.8: Diagrama de fases obtido por Khoring e Schreckenberg [55], usando um passo a mais (aproximação de duas árvores) além do campo médio simples. Essa aproximação produz comportamento reentrante tanto na direção de p_1 quanto de p_2 , um fenômeno ausente nas simulações numéricas.

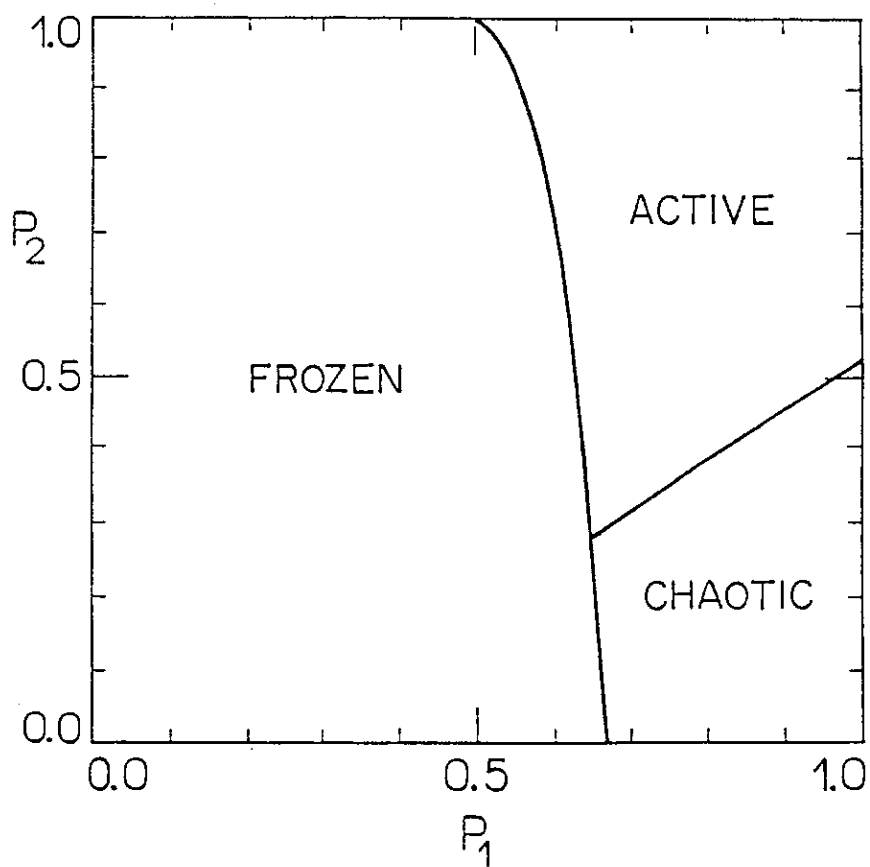


Figura 3.9: Diagrama de fases obtido por Torné [57] usando uma aproximação de campo médio mais precisa que a usada na referência [55].

no limite $N \rightarrow \infty$.

Como se pode ver a partir da figura 3.10, a magnetização exibe um decaimento exponencial em direção ao seu valor de equilíbrio descrito pela fórmula

$$M(t) - M_\infty \sim e^{-t/\tau} \quad (3.1)$$

onde, estritamente falando, $M_\infty \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} M(t)$, que não deve ser confundido, como apontou Carter [59], com $M_\infty \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} M(t)$ que geralmente é zero. Além disso, próximo à superfície crítica espera-se que o tempo de relaxação característico τ obedeça uma lei de potência

$$\tau \sim |p_1 - p_{1c}|^{-z} \quad (3.2)$$

Por razões de simplicidade computacional, entretanto, em lugar de determinar τ e seu expoente z a partir do decaimento exponencial da magnetização, medimos diretamente o tempo total τ^* necessário para a magnetização atingir seu valor de equilíbrio. Uma vez que τ^* é proporcional à τ temos, pela eq. 3.2,

$$\tau^* \sim |p_1 - p_{1c}|^{-z} \quad (3.3)$$

para p_2 fixo. Essa expressão define o expoente crítico z associado ao parâmetro de ordem M da transição congelada-ativa. Na figura 3.11 apresentamos um típico gráfico log-log de $\tau^* \times |p_1 - p_{1c}|$. Como um resultado dessas simulações encontramos $z = 1,0 \pm 0,03$. Uma vez que essas simulações envolvem sistemas com até 12800 sítios e até 10^6 passos de tempo, acreditamos que o valor correto de z possa ser $z = 1$.

Também existe um processo de relaxação similar associado com a distância de Hamming Ψ , o parâmetro de ordem da transição de fase ativa-caótica. Esse processo pode, possivelmente, ser caracterizado por um expoente crítico z distinto.

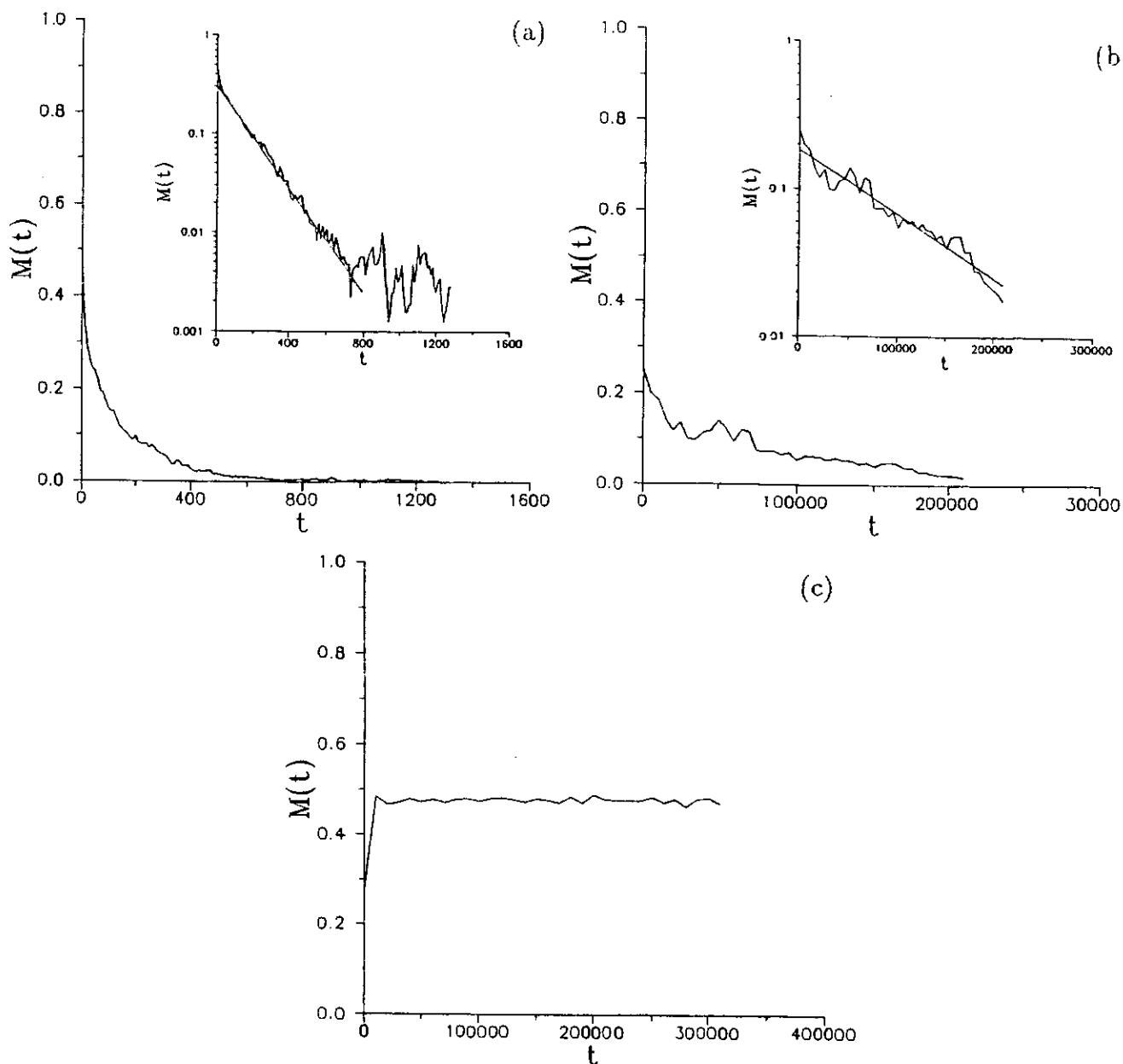


Figura 3.10: Parâmetro de ordem $M(t)$ em função do tempo para um conjunto particular de probabilidades condicionais. Todas as figuras são para $p_2 = 0.50$ e para os seguintes valores de p_1 e p_3 : (a) $p_1 = p_3 = 0.72$, (b) $p_1 = p_3 = 0.7845$ e (c) $p_1 = p_3 = 0.80$. Nos detalhes, o mesmo em representação log-log. Para esse valor de p_2 o ponto crítico congelado-ativo é $p_{1c} \sim 0.785$. Os dois primeiros conjuntos de probabilidades condicionais (a e b) pertencem à fase congelada enquanto o último (c) pertence à fase não congelada.

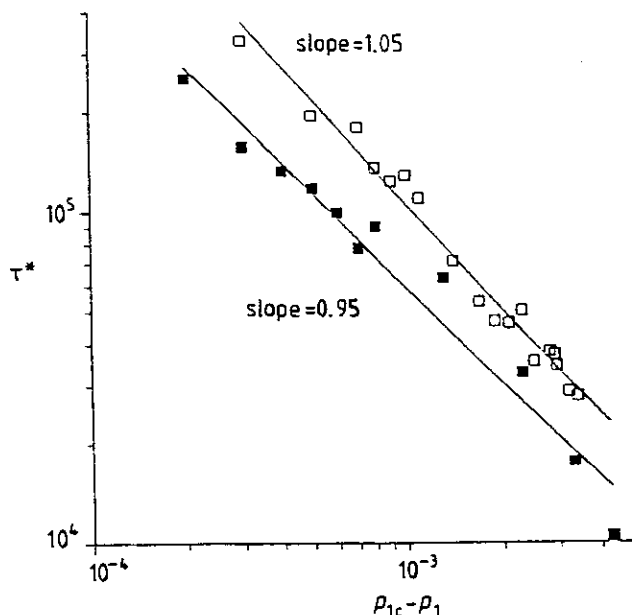


Figura 3.11: Gráfico log-log de τ^* versus $(p_{1c} - p_1)$ no caso isotrópico. Os dados correspondem a simulações com 3200 (■) e 12800 (□). As linhas cheias são guias para os olhos.

3.3 Efeito do “Campo” Externo Uniforme.

Se consideramos $p_0 \equiv p(00/1) = 0$, é claro que, quando a configuração do sistema é nula (isto é, todos os sítios tem valor 0) no tempo t , ela permanecerá nula em todos os passos de tempo subsequentes (M_∞). Por outro lado, se $p_0 \neq 0$ e o sistema está na configuração nula no tempo t , ele adquirirá uma fração não nula de sítios com estados diferente de zero ($M_\infty \neq 0$) nos passos de tempo subsequentes. Consequentemente a probabilidade p_0 é o análogo de um campo externo em ferromagnetos que destrói a transição de fase. Essa era a razão de só considerarmos regras legais ($p_0 = 0$) no ACP de Domany-Kinzel ao investigarmos sua superfície crítica congelada-ativa.

Se considerarmos $p_0 \neq 0$ a superfície crítica congelada-ativa desaparece, embora, como mostrado na figura 3.12, a transição ativa-caótica permanece. Também podemos estudar a suscetibilidade associada

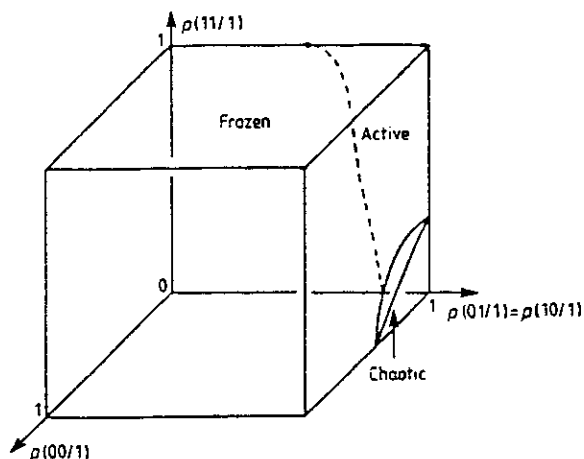


Figura 3.12: Diagrama de fase para o caso isotrópico ($p_1 = p_3$) e $p_0 \equiv p(0, 0/1)$ arbitrário.

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial M}{\partial p_0} \right|_{p_0=0} \quad (3.4)$$

Calculamos essa derivada numericamente mesmo sabendo que esse método não é muito preciso. A razão para isso é a aparente falta de uma relação do tipo flutuação-dissipação válida na fase congelada. Na figura 3.13 mostramos a suscetibilidade para $p_2 = 0.1$ no caso isotrópico. Essa curva exhibe, além da esperada tendência à divergência sobre a superfície crítica congelada-ativa, um pequeno pico na superfície crítica ativa-caótica. Um resultado difícil de entender é que as nossas simulações produzem sistematicamente um pico secundário à esquerda do central. De modo a decidir se tal pico inesperado não é produto de flutuações estatísticas, mais simulações, inclusive para outros valores de p_0 , serão necessárias. Mesmo porque, como podemos notar, simulações mais extensivas são necessárias para o cálculo do expoente crítico associado à divergência da suscetibilidade.

3.4 Dinâmica Vinculada.

Até esse ponto apresentamos resultados para o ACP de Domany-Kinzel obtidos considerando-se números aleatórios *independentes* para atualizar *cada* um dos N

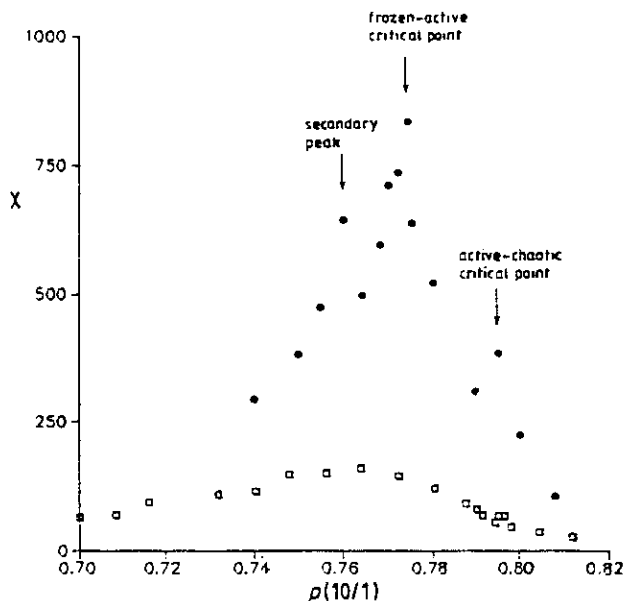


Figura 3.13: $\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial p_0} \Big|_{p_0=0}$ obtida numericamente para $p_2 = 0.1$. Os dados usados na derivação numérica de M correspondem à $p_0 \simeq 10^{-4}$ (\square) e $p_0 \simeq 10^{-5}$ (\bullet). O sistema possui 3200 sítios.

sítios em *cada* passo de tempo t . Vamos agora generalizar a regra dinâmica introduzindo vínculos no ACP isotrópico. A espécie de vínculo que consideraremos consiste em usar, num dado passo de tempo, os *mesmos* números aleatórios para atualizar n ($1 \leq n \leq N$) sítios vizinhos, sendo que sempre o mesmo conjunto de n sítios contíguos será tomado. O modelo $n = 1$ se reduz ao ACP original; já $n = N$ é um caso extremo no qual um único número aleatório é usado para atualizar uma geração inteira. O diagrama de fases para vários valores de n é mostrado na figura 3.14. No limite $n = N \rightarrow \infty$, o diagrama de fases com $p_0 = 0$ exhibe, em quase toda parte, uma fase congelada já que as linhas críticas congelada-ativa e ativa-caótica se colapsam sobre a linha $p_2 = 1$ e/ou sobre a linha $p_1 = 1$. Esse fato não é de todo surpreendente uma vez que, no limite $n = N \rightarrow \infty$, o sistema torna-se do tipo unidimensional no espaço-tempo porque a aleatoriedade espacial desaparece (por outro lado ele é bidimensional no caso de n finito e $N \rightarrow \infty$). Além disso podemos ver do diagrama de fases (figura 3.14(a)) que a área da fase congelada A_f tende à 1 enquanto as áreas

das fases ativa A_a e caótica A_c tendem, ambas, à zero quando n cresce de 1 à ∞ ; também verificamos que a razão A_a/A_c decresce com o crescimento de n . Portanto, uma tendência a um limite “totalitário” (*mesmos* números aleatórios para *todos* os elementos de uma dada geração) diminui o caos porém decresce ainda mais (certos tipos) de atividade!

Uma importante questão deve ser respondida: os vínculos introduzidos no ACP modificam as classes de universalidade desse modelo? Para investigar esse ponto, estudamos como o expoente crítico β associado à magnetização se comporta em função do alcance n dos vínculos. Nossos resultados são mostrados na figura 3.15 e indicam que as classes de universalidade do caso vinculado são as *mesmas* do sistema original, exceto para $n = N \rightarrow \infty$. Esse fato também não pode ser considerado completamente surpreendente, desde que cada bloco de n sítios vinculados se comporta, de algum modo, na criticalidade como se fosse um único sítio efetivo do ACP de Domany-Kinzel original.

Todos os resultados apresentados nas últimas três seções foram publicados na referência [60].

3.5 Qual é o Campo Conjugado à Distância de Hamming?

Vimos na seção 3.1 que o ACP de Domany-Kinzel possui uma fronteira crítica entre as fases caóticas e não-caótica caracterizada pelo anulamento da distância de Hamming Ψ , que desempenha o papel de um parâmetro de ordem. Até hoje permanece aberta a questão da existência de um campo conjugado associado à distância de Hamming. Nessa seção faremos uma sugestão de um possível candidato ao papel de campo conjugado ao parâmetro de ordem da transição dinâmica no ACP de Domany-Kinzel.

Do ponto de vista termodinâmico um campo externo será o *conjugado* de um dado parâmetro de ordem se ele satisfizer as condições: (i) se ele for diferente

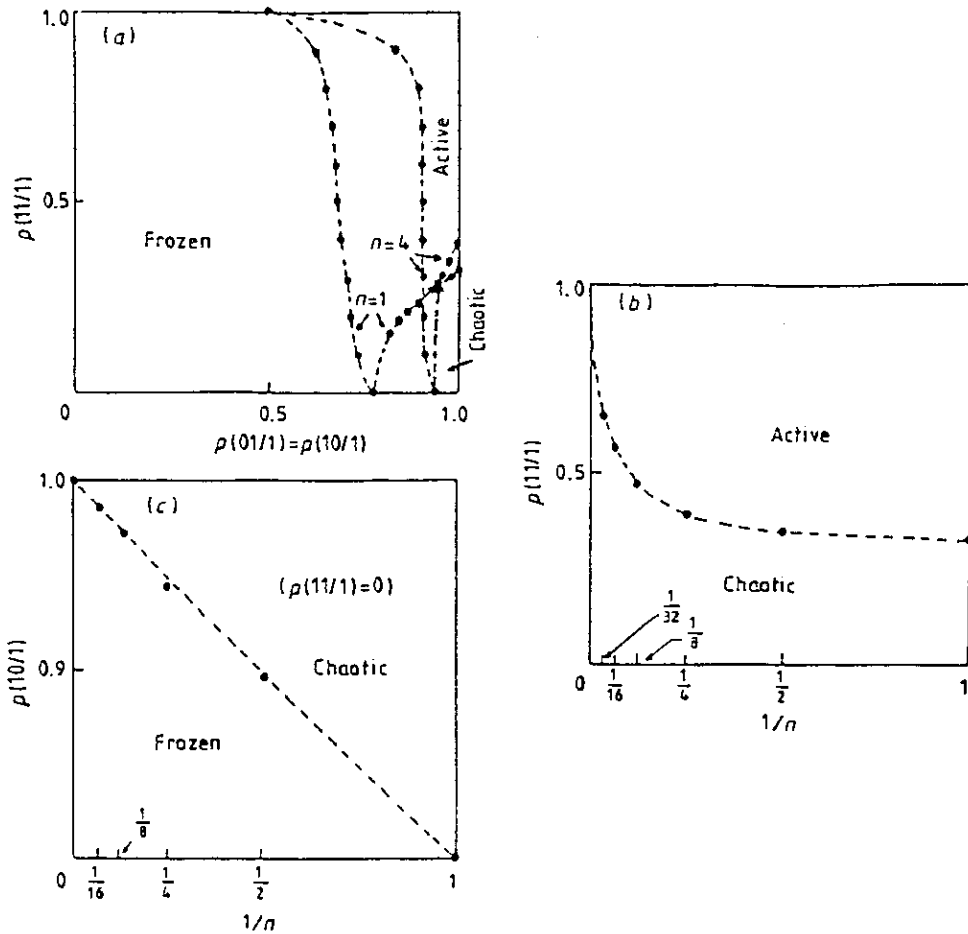


Figura 3.14: Diagrama de fases isotrópico ($p_1 = p_3$) e legal ($p_0 = 0$) do ACP com $n \geq 1$. ($n = 1$ se reduz ao autômato original de Domany-Kinzel). (a) Todo o espaço $p_1 = p_3$; (b) evolução com n do ponto crítico sobre a linha $p_1 = p_3 = 1$; (c) evolução com n do ponto crítico sobre a linha $p_2 = 0$. As linhas pontilhadas são guias para os olhos.

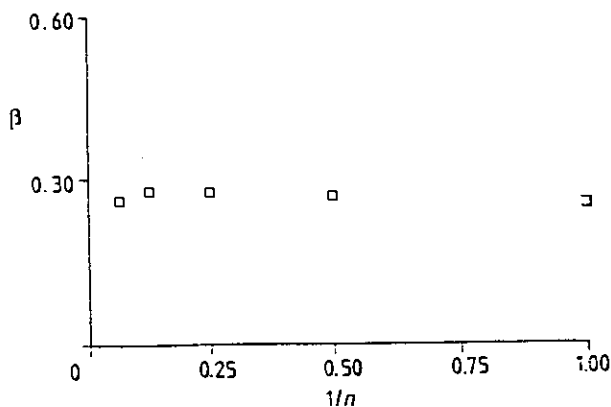


Figura 3.15: Expoente crítico β em função do alcance n dos vínculos para $p_2 = 0.70$. Os dados correspondem à simulações com 3200 e 6400 sítios; transientes de 50000 passos de tempo foram usadas para a transição de fase congelada-ativa. A magnetização foi observada (para efeitos de média) sobre outros 100000 passos de tempo.

de zero então o valor assintótico (tempos longos) do parâmetro de ordem não se anulará, destruindo, portanto, a transição de fase; (ii) a suscetibilidade do parâmetro de ordem, no limite de campo nulo, diverge na transição de fase (contínua). A questão central discutida aqui será se essa estrutura é preservada mesmo para as transições dinâmicas como aquelas que aparecem nos ACPs.

Se existe um campo h conjugado ao parâmetro de ordem Ψ , ele deve destruir a transição de fase ativa-caótica e a função resposta linear associada

$$\chi_{\Psi} \equiv \left. \frac{\partial \Psi}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (3.5)$$

deve divergir sobre a superfície crítica ativa-caótica.

De modo a propor um campo conjugado h adequado, devemos observar que a fase caótica foi detectada através do método de propagação de danos. Nesse método é feito, tipicamente após o AC atingir o equilíbrio, uma réplica do sistema que contém um dano inicial (uma fração p de sítios invertidos aleatoriamente em relação aos originais) e se observa como esse dano evolui no tempo usando-se a *mesma* seqüência

de números aleatórios para a atualização do dois sistemas. Então a idéia básica é, simplesmente, a seguinte: na fase ativa, por exemplo, onde $\Psi_\infty \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \Psi(t) = 0$ e, portanto, o ACP normalmente aniquila o dano inicial, se usarmos (de vez em quando) números aleatórios distintos para atualizar a réplica do sistema, ela adquirirá uma fração não-nula de sítios que diferirão de suas contrapartidas no ACP original em passos de tempo subsequentes. Portanto proporemos que o campo conjugado h seja *proporcional à frequência com a qual números aleatórios diferentes são usados na atualização da réplica do sistema.*

Como mostrado na figura 3.16, existem pelo menos quatro maneiras de se implementar o campo externo h . A primeira (chamada “random individual”; Fig. 3.16(a)) é aplicar (com frequência h_1) números aleatórios *discrepantes* às duas réplicas em qualquer sítio (escolhidos ao acaso na cadeia) a cada passo de tempo. Um outro modo (“regular individual”; Fig. 3.16(b)) é, a cada passo de tempo, usar diferentes números aleatórios (com frequência h_2) para atualizar sempre os mesmos sítios, regularmente localizados na cadeia linear. Analogamente, podemos definir os casos “random collective” (Fig. 3.16 (c)) e “regular collective” (Fig. 3.16(d)) associados, respectivamente, à h_3 e h_4 . Em nossas simulações todos os quatro casos foram implementados em sistemas com $N = 3200$ e $N = 6400$. Para cada conjunto de parâmetros definindo o ACP foram considerados ensembles de tipicamente até 100 configurações iniciais aleatórias onde todos os estados eram equiprováveis. Nas simulações o tempo transiente foi de 10000 passos de tempo e a distância de Hamming foi observada por outros 30000 passos de tempo. O comportamento da distância de Hamming em função do campo externo nas vizinhanças do ponto crítico ativo-caótico é exibido na figura 3.17. As características principais da dependência do campo de Ψ são as mesmas para h_1 , h_2 , h_3 e h_4 .

Os resultados exibidos na figura 3.17 (parâmetro de ordem) e na figura 3.18 (susceptibilidade) mostram claramente que, por um lado, h destrói a transição de fase ativa-caótica e, por outro lado, que a correspondente susceptibilidade tende a divergir no limite $N \rightarrow \infty$. Consequentemente a definição proposta para h (frequência com a qual números aleatórios discrepantes são aplicados a ambas as réplicas, aqui

implementada através de quatro maneiras diferentes) pode legitimamente ser considerada como o parâmetro conjugado à distância de Hamming. A validade da presente definição foi recentemente estudada por meio de uma aproximação do tipo campo- médio [57] que confirmou completamente nossos resultados numéricos [61]. Essa mesma definição de h está sendo usada por Tamarit e Silva [62] para a transição dinâmica do modelo de Ising bidimensional. Seus resultados preliminares, mostrados na figura 3.19, indicam uma clara divergência na suscetibilidade dinâmica χ_ψ , mais uma vez confirmando nossa hipótese.

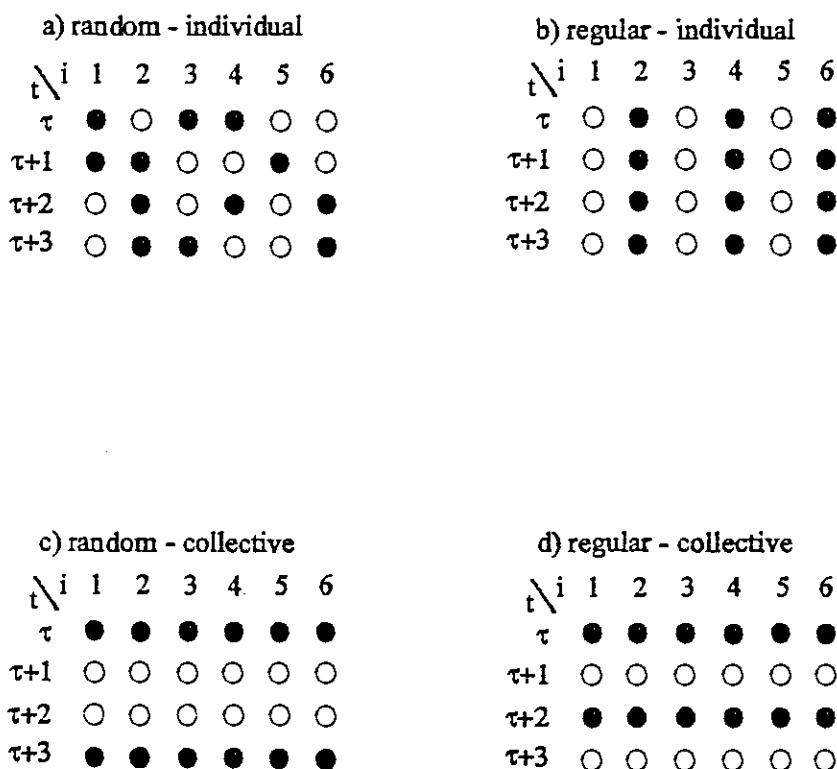


Figura 3.16: Quatro maneiras diferentes de implementar o campo externo $h = 1/2$. Os círculos negros representam os sítios atualizados, em ambas as réplicas, com números aleatórios *discrepantes*. r é o tempo t no qual as discrepâncias foram introduzidas pela primeira vez. (a) *Random-individual*: a cada passo de tempo, escolhemos *aleatoriamente* uma concentração h_1 de sítios que são atualizados com números aleatórios *discrepantes*. (b) *Regular-individual*: a cada passo de tempo, atualizamos com números aleatórios *discrepantes* uma concentração h_2 de sítios *regularmente* espaçados. (c) *Random-collective*: a uma concentração h_3 de passos de tempo escolhidos *aleatoriamente*, atualizamos *todos* os sítios com números aleatórios *discrepantes*. (d) *Regular-collective*: a uma concentração h_4 de passos de tempo *regularmente* espaçados, atualizamos *todos* os sítios com números aleatórios *discrepantes*.

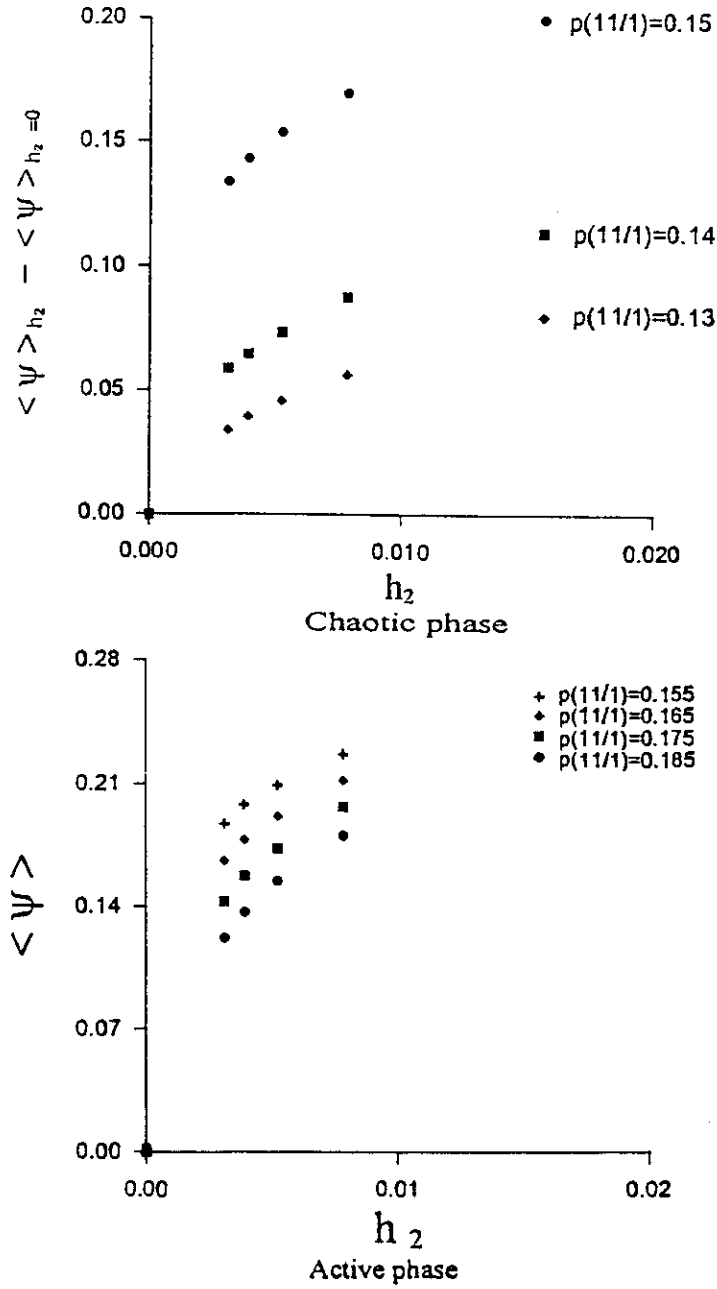


Figura 3.17: Distância de Hamming Ψ em função do campo externo h_2 para $p_1 = 0.85$ e $N = 6400$. Os dados correspondem à simulações com transientes de 10000 passos de tempo; Ψ foi observado por outros 30000 passos de tempo. Para $p_1 = 0.85$ o ponto crítico ativo-caótico é $p_{2c} \simeq 0.154$.

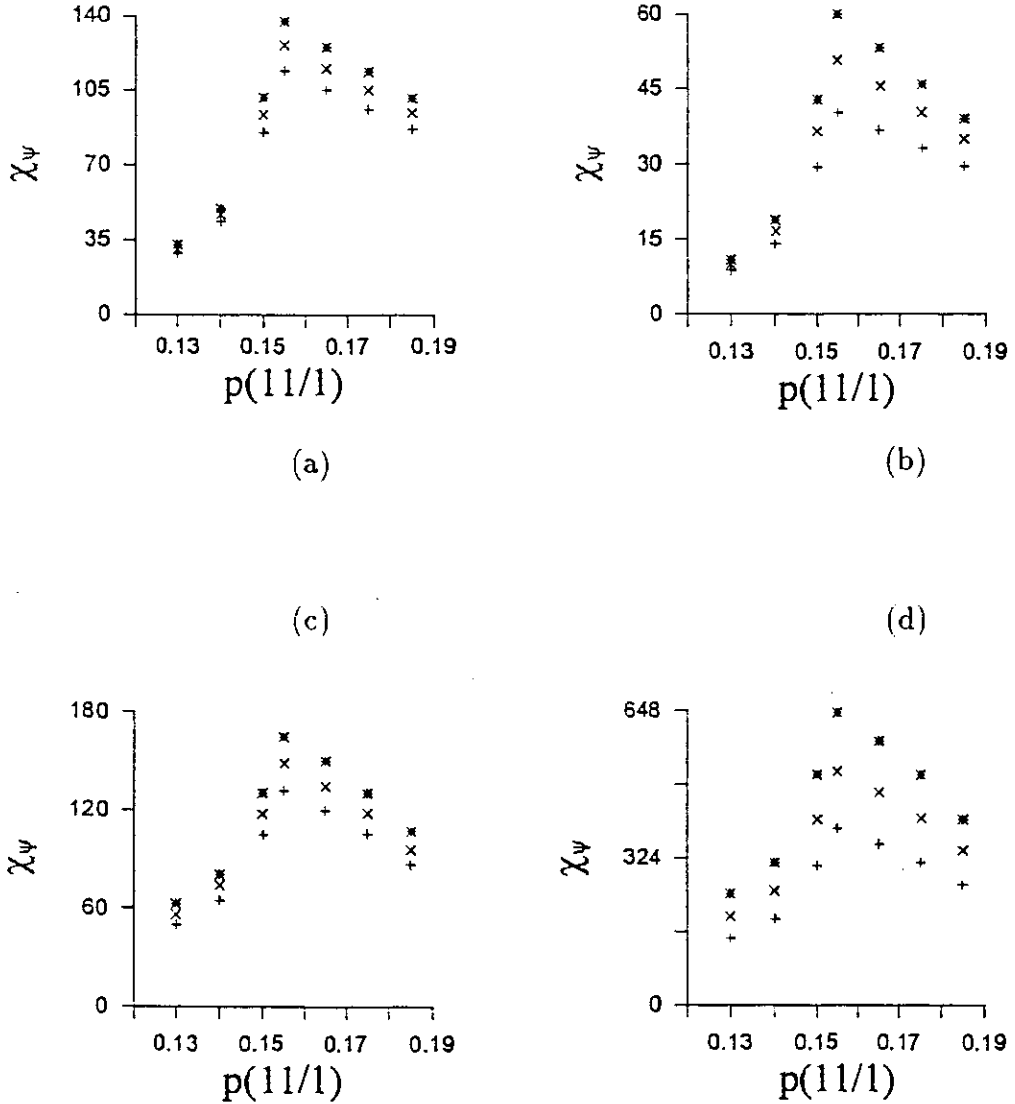


Figura 3.18: Suscetibilidade dinâmica $\chi_\Psi \simeq (\langle \Psi \rangle_{h \neq 0} - \langle \Psi \rangle_{h=0})/h$ em função de p_2 para (a) $h_1 = 1/640$ (*), $1/576$ (x) and $1/512$ (+); (b) $h_2 = 1/320$ (*), $1/256$ (x) and $1/192$ (+); (c) $h_3 = 1/640$ (*), $1/576$ (x) and $1/512$ (+) e (d) $h_4 = 1/2500$ (*), $1/2000$ (x) and $1/1500$ (+). Os dados correspondem à simulações com $N = 6400$ sítios e $p_1 = 0.85$ fixo; transientes de 10000 passos de tempo e Ψ foi observado por outros 30000 passos de tempo. Para $p_1 = 0.85$ o ponto crítico ativo-caótico é $p_{2c} \simeq 0.154$.

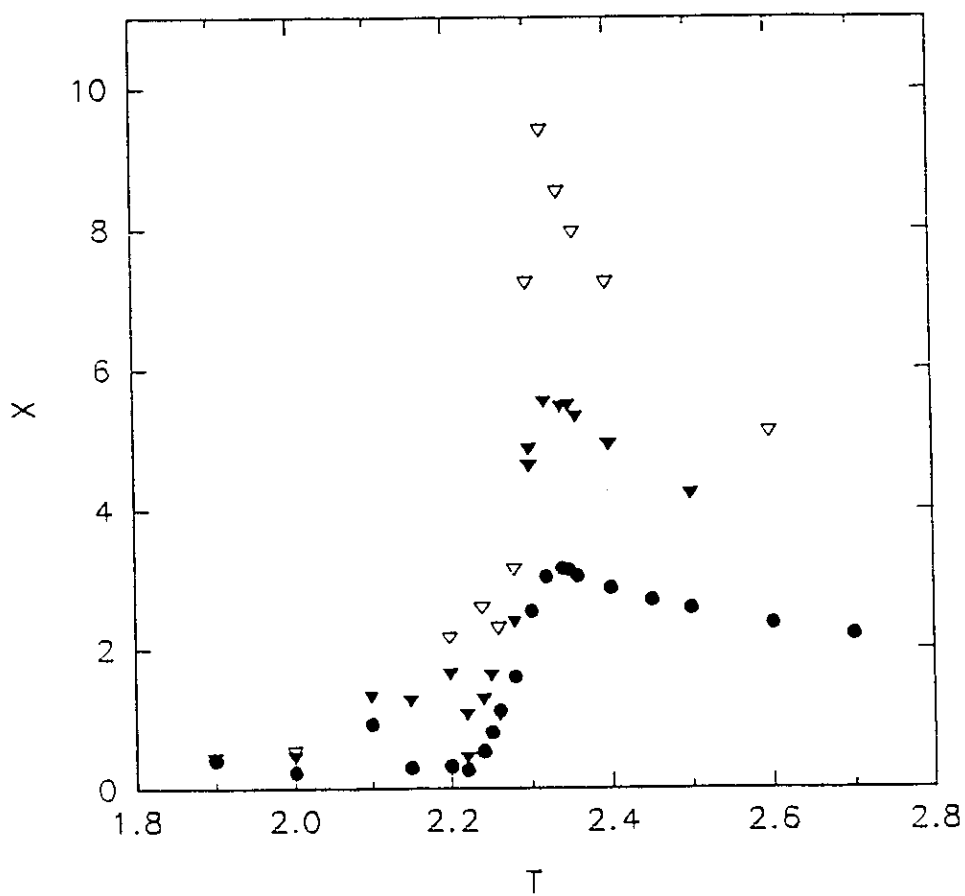


Figura 3.19: Suscetibilidade dinâmica $\chi_{\Psi} \simeq (\langle \Psi \rangle_{h \neq 0} - \langle \Psi \rangle_{h=0})/h$ em função de T para o modelo de Ising bidimensional, obtida por Tamarit e Silva. A rede possui 64×64 sítios, $h = 0.03$ (∇), $h = 0.05$ (\blacktriangledown) e $h = 0.10$ (\bullet).

Capítulo 4

O MODELO DO RELÓGIO QUIRAL DE TRÊS ESTADOS.

Este capítulo constitui, isoladamente, a segunda parte desta tese. Nele discutiremos alguns aspectos da criticalidade (diagrama de fases e classes de universalidade) do modelo do relógio quiral de três estados (ou mais simplesmente Potts quiral), estudados através de um formalismo de grupo de renormalização no espaço real que preserva a função de correlação entre dois sítios. De modo a obtermos uma solução exata das transformações de renormalização, isto é, evitar a proliferação de interações ou acoplamentos no Hamiltoniano original sob essas transformações, o modelo quiral é definido sobre uma rede hierárquica planar. No entanto, acreditamos que as várias linhas críticas e pontos do diagrama de fase sejam excelentes aproximações para a rede quadrada. Nossos resultados foram publicados na referência [63].

4.1 Modelo e Formalismo

A partir das primeiras observações de estruturas moduladas em materiais ferroelétricos e magnéticos, ocorridas no final dos anos 50 e início dos anos 60 [64, 65], surgiu um grande interesse no estudo de modelos estatísticos capazes de exibir tais modulações. Do ponto de vista teórico dois são, basicamente, os modelos estudados:

o modelo de Ising com interação axial de segundo vizinho ou modelo ANNNI (do inglês axial next-nearest-neighbour Ising) e o modelo do relógio quirál (algumas vezes chamado de modelo do relógio assimétrico ou Potts quirál ou, ainda, Potts helicoidal). Os Hamiltonianos de ambos contém interações competitivas responsáveis pela origem de estruturas espacialmente moduladas. No caso do modelo quirál, a competição é gerada pela presença de interações quirais ou helicoidais ao longo de um dado eixo da rede. Já no caso do modelo ANNNI é a competição, ao longo de uma dada direção da rede, entre um acoplamento ferromagnético entre primeiros vizinhos e uma interação antiferromagnética entre segundos vizinhos, a responsável pelas modulações. Uma discussão detalhada desses dois modelos pode ser encontrada nas revisões de Yeomans [66] e Selke [67].

O modelo do relógio quirál pode servir como um protótipo para a fusão (“melting”) de uma fase comensurável adsorvida [68], cuja realização experimental em duas dimensões é representada pelo hidrogênio dissociado em Fe(110) [69, 70]. Por outro lado, não se conhece nenhum sistema similar em três dimensões que seja descrito por esse modelo. Sabe-se que em $d = 2$ o modelo do relógio quirál de três estados mostra uma fase flutuante incomensurável acima das fases comensuráveis de baixas temperaturas [71, 72, 73], entretanto, permanece uma considerável controvérsia sobre se existe um ponto multicrítico do tipo Lifshitz ou se a fase flutuante se estende até campo quirál $\Delta = 0$ [72, 73, 74, 75, 76]. Huse e Fisher [76] sugerem a existência de um ponto de Lifshitz que governa a transição da fase ordenada (ferromagnética) para a fase desordenada (paramagnética) quando $0 < \Delta \leq \Delta_L$. Já Everts e Roder [77], que não podem definitivamente excluir a possibilidade da fase flutuante se estender até $\Delta = 0$, também sugerem a existência de um ponto de Lifshitz com quiralidade finita.

O modelo do relógio quirál de q estados é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \cos\left(\frac{2\pi}{q}(n_i - n_j + \Delta \cdot \mathbf{R}_{ij})\right) \quad (4.1)$$

onde a soma é sobre todos os pares de sítios primeiros vizinhos de um dado arranjo,

$K \equiv J/k_B T$, \mathbf{R}_{ij} é o vetor unitário que vai do sítio i ao sítio j e n_i são as variáveis de spin capazes de assumir os valores $n_i = 0, 1, 2, \dots, q-1$ e Δ é um vetor paralelo a uma dada direção fixa da rede. O parâmetro $\Delta \in \mathbf{R}$ pode gerar uma tendência de rotação contínua do ângulo de fase $2\pi n_i/q$ em função da sua posição ao longo da direção de Δ . Isso compete com a restrição do ângulo de fase ser discreto e pode levar a transições de fases comensuráveis-incomensuráveis. Para $q = 2$ o Hamiltoniano quiral é, para Δ arbitrário, equivalente ao modelo de Ising (anisotrópico) a campo nulo. Quando $\Delta = 0$ e $q = 3$ o modelo se reduz ao modelo padrão de Potts ferromagnético de três estados. A partir de agora consideraremos redes planares e $\Delta = \Delta \hat{y}$, onde \hat{y} é o vetor unitário ao longo de uma dada direção escolhida e fixada de uma vez por todas.

O estado fundamental do modelo com $q = 3$ estados é ferromagnético ($n_i = n_j$ para todos os sítios) quando $|\Delta| < \frac{1}{2}$. Para $\frac{1}{2} < \Delta < \frac{3}{2}$ o estado fundamental apresenta uma configuração ferromagnética ao longo do eixo x e uma configuração quiral destrógrira ao longo da direção y . De maneira mais clara os spins formam, ao longo do eixo y , o padrão $\dots 01201201 \dots$. Esse estado fundamental é comensurável com a rede e a modulação espacial possui um período de $p = 3$ constantes de rede. $\Delta = \frac{1}{2}$ é um ponto de multifase [78] no qual o estado ferromagnético e qualquer possível seqüência quiral destrógrira compartilham a mesma energia. Portanto, nesse ponto, o estado fundamental é infinitamente degenerado.

Em $\Delta = 0$ o Hamiltoniano, eq. 4.1, tem uma simetria S_3 , ou seja, é invariante sob qualquer permutação dos rótulos dos três estados de spin. Para $\Delta \neq 0$ o modelo tem uma simetria Z_3 , menor, para qual o Hamiltoniano é invariante apenas sob permutações cíclicas dos rótulos de spin. Por outro lado, a função de partição é invariante sob as seguintes transformações:

$$(i) \quad \Delta \rightarrow -\Delta \quad (4.2)$$

desde que se façam as identificações

$$n_i \rightarrow -n_i(\text{mod } 3), \quad (4.3)$$

isto é, se nós trocarmos a ordem destrógira pela levógira.

(ii)

$$\Delta \rightarrow \Delta + m \quad (4.4)$$

onde m é um inteiro arbitrário e desde que nós transformemos cada spin n_i em

$$n_i \rightarrow (n_i + my_i)(\text{mod}3), \quad (4.5)$$

onde y_i é a coordenada do sítio i ao longo do eixo y .

Combinando essas duas operações de simetrias com $m = 1$, a função de partição é invariante sob a transformação

$$\begin{aligned} \Delta &\rightarrow 1 - \Delta \\ n_i &\rightarrow (-n_i + y_i)(\text{mod}3) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Então as fronteiras de fases são invariantes sob uma reflexão em torno da linha $\Delta = \frac{1}{2}$ e, portanto, devemos analisar somente a faixa $0 \leq \Delta \leq \frac{1}{2}$. Entretanto devemos nos lembrar que as fases devem ser diferentemente identificadas de acordo com os regimes $0 \leq \Delta < \frac{1}{2}$ e $\frac{1}{2} < \Delta \leq 1$. De fato, da segunda equação em 4.5, devemos levar em conta a correspondência entre os estados fundamentais ferromagnético ($\Delta < \frac{1}{2}$) e quiral ($\Delta > \frac{1}{2}$).

Discutidos esses aspectos do modelo, nos voltaremos agora para o Hamiltoniano quiral, eq. 4.1, definido sobre uma rede hierárquica gerada pela célula mostrada na Fig. 4.1. A escolha desta célula foi feita de modo a simular a rede quadrada. Para tal, dois aspectos parecem essenciais: a auto-dualidade da rede quadrada e a preservação, sob transformações de renormalização, dos estados fundamentais do sistema. Selecionamos a *menor* célula do tipo ponte de Wheatstone que possui essas duas propriedades. A transformação de renormalização entre a célula da Fig. 4.1(a) e a simples ligação da Fig. 4.1(b) é definida pela imposição da igualdade

$$\exp[-\mathcal{H}'(K', \Delta') + c] = \sum_{n_3, \dots, n_{14}} \exp[-\mathcal{H}(K, \Delta)]. \quad (4.7)$$

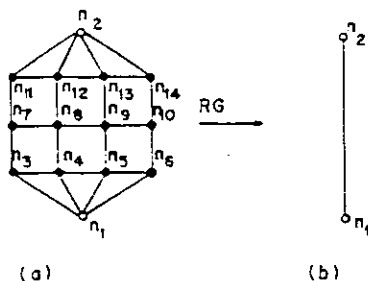


Figura 4.1: Células usadas para construir o grupo de renormalização; bolas cheias e bolas vazias representam, respectivamente, sítios internos e terminais. (a) grafo com $b = 4$ e (b) grafo com $b' = 1$.

Após algumas manipulações algébricas obtemos as seguintes relações de recorrência:

$$c = \frac{1}{3} \ln(\phi_0 \phi_1 \phi_2) \quad (4.8)$$

$$K' = \frac{1}{3} [(2 \ln \phi_0 - \ln(\phi_1 \phi_2))^2 + 3(\ln(\phi_2/\phi_1))^2]^{1/2} \quad (4.9)$$

$$\Delta' = \frac{3}{2\pi} \tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{3} \ln(\phi_2/\phi_1)}{2 \ln \phi_0 - \ln(\phi_1 \phi_2)} \right) \quad (4.10)$$

onde ϕ_0 , ϕ_1 e ϕ_2 são expressões analíticas para as somas que aparecem à direita da eq. 4.7, nas quais os spins terminais estão fixos em $(n_1, n_2) = (0, 0)$, $(1, 0)$ e $(2, 0)$, respectivamente. Cada uma dessas expressões envolve a contagem de 3^{12} configurações que foram somadas algebricamente através do uso de um programa em linguagem PL1. Os fluxos de renormalização (determinados pelas duas últimas equações de 4.10 no espaço dos parâmetros (K', Δ') fornecerá o diagrama de fases e os expoentes críticos térmicos do sistema.

4.2 Resultados

As relações de recorrência em 4.10 apresentam um ponto fixo instável em $\Delta = 0$ e $K = \frac{2}{3} \ln(\sqrt{3} + 1)$, que corresponde ao ponto crítico ferromagnético *exato* do modelo de Potts de três estados. Seus expoentes críticos são $\nu_T \simeq 0.975$ e $\nu_\Delta \simeq 3.052$;

consequentemente o expoente de crossover é $\phi = \nu_t/\nu_\Delta \simeq 0.319$, o qual deve ser comparado com o valor $\phi = \frac{1}{6}$ obtido por den Nijs [79] e $\phi = 0.19 \pm 0.06$ fornecido pelo método de expansão em séries para a rede quadrada [80]. Existe um segundo ponto fixo instável localizado em $\Delta = \frac{1}{2}$ e $K^{-1} = 0$. E também um ponto fixo semi-estável presente em $Z \simeq 0.113$ ($K \simeq 1.452$) e $\Delta \simeq 0.382$, onde a variável conveniente Z é definida como $Z = \exp(-3K/2)$. Para esse ponto fixo obtivemos o expoente crítico $\nu_L \simeq 0.949$. Esse ponto deve ser identificado com um ponto fixo do tipo Lifshitz e nossa estimativa para a sua localização (K, Δ) é consistente com a da referência [72] que sugere $K \simeq 1.053$ e $\Delta \in [0.4, 0.425]$, e com a referência [73] que sugere $(K, \Delta) \simeq (1.111, 0.4 \pm 0.03)$. Embora nosso formalismo de renormalização não mostre a linha de transição de fase flutuante-paramagnética surgindo a partir desse ponto fixo por nós encontrado, acreditamos que ela exista na rede hierárquica (como é o caso na rede quadrada) e, portanto, que esse ponto deveria ser interpretado como um ponto fixo de Lifshitz. Em 1981 Huse [81] estudou esse modelo usando o método de renormalização de Migdal-Kadanoff, exato para a rede hierárquica diamante, e encontrou, para dimensão $d = 2$ e fator de escala $b = 2$, um ponto crítico de Potts de três estados com expoentes $\nu_t = 1.20$, $\nu_\Delta = 2.38$ e expoente de crossover $\phi = 0.5$; todos os outros pontos na fronteira da fase ferromagnética são atraídos para um novo ponto crítico semi-estável com expoente $\nu = 1.01$. Nosso resultados são qualitativamente consistentes com os obtidos por Huse.

De modo a completar a análise dos pontos fixos e do fluxo de renormalização, temos que considerar a forma assintótica das relações de recorrência (duas últimas equações de 4.10) quando Z tende à zero ($T \rightarrow 0$). Os termos dominantes envolvem o estado fundamental e os primeiros estados excitados do sistema sujeito às condições especiais impostas pelos valores fixos associados aos dois spins terminais da célula mostrada na Fig. 4.1. De fato, surgirá uma transição interfacial de “wetting” que dividirá a fase comensurável em duas regiões distintas, a saber, $0 \leq \Delta \leq \frac{1}{4}$ e $\frac{1}{4} < \Delta \leq \frac{1}{2}$. Para $0 \leq \Delta \leq \frac{1}{4}$ temos as seguintes relações de recorrência assintóticas:

$$Z' \sim Z^b \quad (4.11)$$

$$\Delta' \sim \Delta \quad (4.12)$$

onde b é o fator de escala ($b = 4$ em nosso caso). O Jacobiano dessas transformações é

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Em outras palavras, Δ é um parâmetro marginal e temos uma *linha de pontos fixos* para $Z = 0$ e $\Delta \in [0, \frac{1}{4}]$. Essa linha de pontos fixos parece ser devida ao “wetting” incompleto nessa região da fase ferromagnética. Para $\frac{1}{4} < \Delta < \frac{1}{2}$, as relações de recorrência assintóticas são

$$Z' \sim Z^{b(\sqrt{3}\cos(2\pi\Delta/3) - \sin(2\pi\Delta/3))} \quad (4.14)$$

$$\Delta' \sim \frac{1}{4} \quad (4.15)$$

Então o ponto fixo é localizado em $(Z, \Delta) = (0, \frac{1}{4})$ e o jacobiano associado é nulo. Partindo de um valor de Z pequeno a linha $Z = 0$ se comporta como um atrator para Δ tal que $b(\sqrt{3}\cos(2\pi\Delta/3) - \sin(2\pi\Delta/3)) > 1$ e como um repulsor, caso contrário. O diagrama de fluxo de renormalização completo é mostrado na Fig. 4.2. A Fig. 4.3 mostra a linha crítica bem como a linha correspondente à transição de “wetting”. Temos duas razões distintas para acreditar que nosso formalismo de grupo de renormalização é capaz de localizar *exatamente* a linha de “wetting”. A primeira delas é que essa linha termina em $\Delta = \frac{1}{4}$ para $T = 0$ e esse ponto é exatamente o obtido, para a rede quadrada, por Huse *et al* [80] para a transição de “wetting” a $T = 0$. A segunda razão é que em nosso grupo de renormalização, que é exato para a rede hierárquica da Fig. 4.1, estamos considerando tanto as propriedades termodinâmicas de equilíbrio de superfície quanto de volume do modelo.

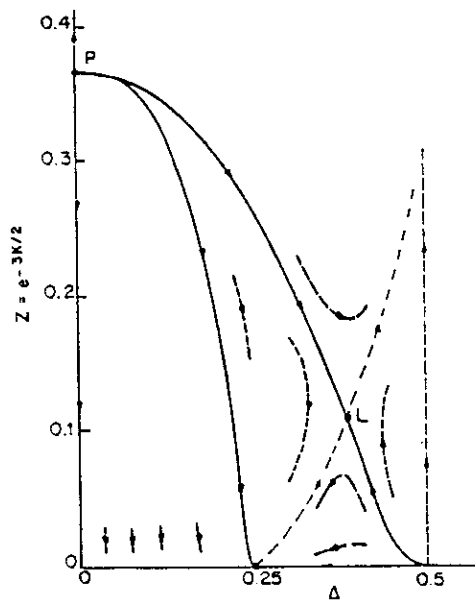


Figura 4.2: Diagrama de fluxo de renormalização. P e L denotam, respectivamente, os pontos fixos de Potts e Lifshitz. Em $\Delta = 0$ o fluxo é o do modelo de Potts de três estados. Vemos que o ponto fixo L governa a transição de fase ferromagnética-desordenada para $\Delta \neq 0$. Também, o ponto fixo em $Z = 0$ e $\Delta = \frac{1}{4}$ é um atrator para uma linha especial (a linha de “wetting”). Na linha $Z = 0$ temos um segmento de pontos fixos para $\Delta \in [0, \frac{1}{4}]$.

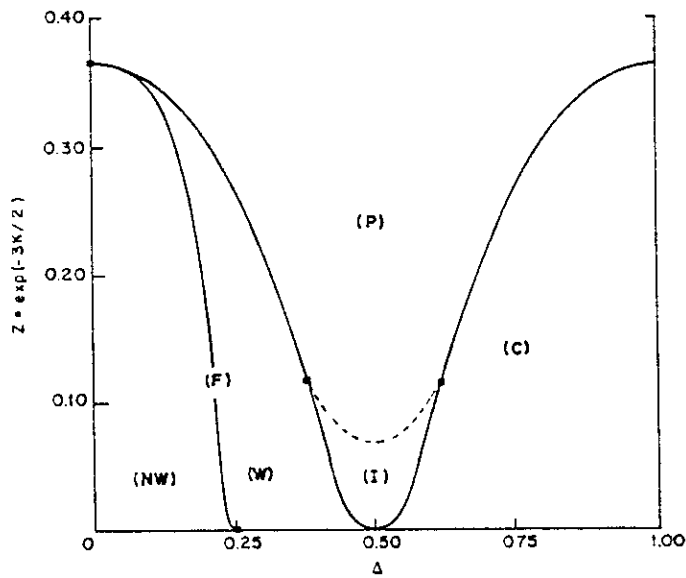


Figura 4.3: Parte do diagrama de fase do modelo quiral de três estados. (P) denota a fase desordenada, (F) a fase ferromagnética e (C) a fase quiral. A fase ferromagnética é dividida, pela linha de “wetting”, em duas regiões: a de não-“wetting” (NW) e a de “wetting” (W). As fronteiras entre as fases paramagnética e incomensurável or comensurável de alto período de modulação (I) é indicado.

4.3 Conclusões.

Nesse capítulo focalizamos a criticalidade (diagrama de fases e expoentes críticos térmicos) do modelo do relógio quiral de três estados definido sobre uma rede hierárquica planar adequada (veja Fig. 4.1). Para tal adotamos um formalismo de grupo de renormalização no espaço real que preserva a função de correlação entre dois sítios.

Desse estudo obtemos que o parâmetro quiral Δ é relevante e, portanto, qualquer ponto da fronteira de fase ferromagnética-desordenada com $\Delta \neq 0$ é governado por um ponto fixo distinto do ponto crítico de Potts puro. Assim temos uma nova classe de universalidade: a *quiral*. Nossos resultados suportam a possibilidade de um ponto de Lifshitz caracterizando essa nova classe de universalidade. Também calculamos numericamente a linha da transição de “wetting” resultante das propriedades de interface do modelo. Essas propriedades de interface são detectáveis por nosso formalismo de renormalização em razão das condições especiais impostas aos dois spins terminais da célula. Acreditamos que as várias linhas críticas e pontos do diagrama de fases são excelente aproximações para a rede quadrada. De modo a estudar as fases moduladas deveríamos considerar a evolução sob transformações de renormalização do vetor de onda q que caracteriza as fases moduladas ao longo da linha proposta por Huse [81].

Conclusões

Nesta tese foram estudados a criticalidade de dois modelos, o autômato probabilístico unidimensional de Domany-Kinzel e o modelo do relógio quiral de três estados definido sobre uma rede hierárquica planar auto-dual. O grande interesse atual na investigação dos autômatos celulares (ACs) provém de dois aspectos básicos. Em primeiro lugar porque os ACs são capazes de gerar espontaneamente estruturas complexas, um dos mais interessantes fenômenos exibidos pelos sistemas dinâmicos. Além do comportamento dinâmico (temporal) dos sistemas caóticos com poucos graus de liberdade, os ACs, como sistemas espacialmente estendidos (com muitos graus de liberdade), são capazes de exibir caos e gerar complexos padrões espaciais. Em segundo lugar porque sua tripla discretização (do espaço, do tempo e das variáveis dinâmicas) possibilita uma grande velocidade de simulação dos ACs e, portanto, pode permitir explorar melhor o espaço de parâmetros ou decidir mais rapidamente quais os mecanismos físicos relevantes envolvidos num dado sistema complexo.

O autômato celular probabilístico unidimensional de Domany-Kinzel pode ser mapeado sobre modelos estatísticos de spins bidimensionais cujos acoplamentos são determinados a partir das probabilidades condicionais usadas na definição das regras do autômato. Esse autômato contém, como casos particulares, os problemas de percolação direcionada e percolação compacta na rede quadrada. Através de extensivas simulações computacionais, investigamos vários aspectos da criticalidade do autômato de Domany-Kinzel tais como: o diagrama de fases dos casos isotrópico e anisotrópico, parâmetros de ordem, campos conjugados a esses parâmetros e as funções resposta lineares (susceptibilidades) associadas, o efeito da introdução de vín-

culos na dinâmica de evolução do AC sobre as classes de universalidade do modelo, tempo de relaxação ao equilíbrio, etc.

Os principais resultados desse amplo estudo numérico foram a demonstração inequívoca da existência de uma terceira fase (fase caótica) no diagrama de fases do AC em adição as duas outras (congelada e ativa) já conhecidas, e a proposta, pela primeira vez, de um campo externo conjugado à distância de Hamming, o parâmetro de ordem que caracteriza a transição de fase ativa-caótica (transição dinâmica). Esses resultados importantes motivaram a realização de vários outros trabalhos, analíticos e numéricos, que comprovaram e melhoraram os resultados discutidos nesta tese.

Nossas simulações apontam também para a necessidade de investigar ainda mais certos pontos, entre os quais se destacam: determinar numericamente o expoente crítico β da magnetização no subespaço da percolação compacta, $p(11/1) = 1$, no qual nossos resultados preliminares indicam uma transição de fase descontínua com $\beta = 0$, diferente do resultado analítico obtido por Essam, talvez em razão da ordem na qual os limites $t \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$ são tomados; obter os expoentes críticos que caracterizam as suscetibilidades associadas à magnetização (parâmetro de ordem da transição ativa) e à distância de Hamming (parâmetro de ordem da transição caótica ou dinâmica), bem como o expoente dinâmico associado ao tempo de relaxação em direção ao equilíbrio da distância de Hamming.

Também investigamos, através de um grupo de renormalização no espaço real, o modelo do relógio quiral de três estados definido em uma rede planar e auto-dual. Nessa rede, do tipo ponte de Wheatstone, a estrutura dos estados fundamentais do modelo é preservada e as transformações de renormalização são exatamente solúveis. O principal resultado obtido é a relevância do parâmetro quiral Δ significando, portanto, que qualquer ponto da fronteira entre as fases ferromagnética e desordenada com $\Delta \neq 0$ tem seu comportamento crítico governado por um ponto fixo distinto do ponto crítico de Potts, definindo assim uma nova classe de universalidade: a quiral, possivelmente caracterizada por um ponto de Lifshitz. Também calculamos numericamente

a linha da transição de “weting” resultante das propriedades de interface do modelo. Entretanto o formalismo de grupo de renormalização usado não foi implementado para detectar a rica estrutura de fases moduladas apresentada pelo modelo quiral. Aqui uma direção natural para prosseguir esse trabalho é generalizar nosso formalismo de grupo de renormalização introduzindo nas transformações de renormalização o vetor de onda q usado na caracterização das fases moduladas.

Bibliografia

- [1] B. J. West and A. L. Goldberger, *Am. Sci.* **75**, 354 (1987); A. L. Goldberger, D. R. Rigney and B. J. West, *Sci. Am.*, 35 (1990);
- [2] M. J. Vilela, M. L. Martins and S. R. Boschetti, submetido para publicação no *J. of Pathol.*, (1994);
- [3] C. K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley and A. L. Goldberger, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1343 (1993);
- [4] R. V. Solé, O. Miramontes and B. C. Goodwin, *J. Theor. Biol.* **161**, 343 (1993);
- [5] S. Wolfram, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 601 (1983);
- [6] S. Wolfram, *Physica* **10D**, 1 (1984);
- [7] C. Tsallis, in “*Condensed Matter Theories*” vol 8,657, eds. L. Blum and F. B. Malik (Plenum Press, New York, 1993);
- [8] K. E. Kurten, *J. Phys. (France)* **50**, 2313 (1989);
- [9] S. A. Kauffman, *J. Theor. Biol.* **22**, 437 (1969);
- [10] E. Domany and W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 447 (1984);
- [11] B. Derrida, in “*Summer School on Statistical Mechanics*”, Altemberg FRG (1989);
- [12] N. Packard and S. Wolfram, *J. Stat. Phys.* **38**, 901 (1985);

- [30] P. M. C. de Oliveira, “ *Computing Boolean Statistical Models* ” , (World Scientific, Singapore,1991);
- [31] W. Kinzel, *Z. Phys. B* **58**, 229 (1985);
- [32] N. I. Jaeger, K. Möller and P. J. Plath, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1*, **82**, 3315 (1986);
- [33] P. J. Plath, *Catalysis today* **3**, 475 (1988);
- [34] P. J. Plath, K. Möller and N. I. Jaeger, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1*, **84**, 1751 (1988);
- [35] H. J. Verona de Resende, M. L. Martins, A. C. N. Magalhães and C. Tsallis, in “ *Nonlinear Phenomena in Fluids, Solids and Other Complex Systems* ”, eds. P. Cordero e B. Nachtergaele (Elvesier Science Publishers B. V., 1991);
- [36] S. Wolfram, “ *Theory and Applications of Cellular Automata* ” , (World Scientific, Singapore,1986);
- [37] P. Rujan, *J. Stat. Phys.* **49**, 139 (1987);
- [38] A. Georges and P. LeDoussal, *J. Stat. Phys.* **54**, 1011 (1989);
- [39] J. L. Lebowitz, C. Maes and E. R. Speer, *J. Stat. Phys.* **59**, 117 (1990);
- [40] J. W. Essam, *J. Phys. A* **22**, 4927 (1989);
- [41] M. L. Martins, H. F. Verona de Resende, C. Tsallis, and A. C. N. Magalhães, in *CECAM Workshop on Computer Simulation of Cellular Automata*, Paris, 1988; Abstract publicado no *J. Stat. Phys.* **55**, 1358 (1989);
- [42] J. W. Essam and W. Tanlakishani, in “ *Disorder in Physical Systems* ”, eds. G. R. Grimmett e D. J. A. Welsh (Oxford University Press, Oxford, 1990);
- [43] H. E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2326 (1987);

- [44] U. M. S. Costa, *J. Phys. A* **20**, L583 (1987);
- [45] B. Derrida and G. Weisbusch, *Europhys. Lett.* **4**, 657 (1987);
- [46] A. U. Newmann and B. Derrida, *J. Phys. France* **49**, 1647, (1987);
- [47] L. De Arcangelis, H. J. Herrmann and A. Coniglio, *J. Phys. A* **22**, 4659 (1989);
- [48] L. R. da Silva, A. Hansen and S. Roux, *Europhys. Lett.* **8**, 47 (1989);
- [49] M. N. Barber and B. Derrida, *J. Stat. Phys.* **51**, 877, (1988);
- [50] A. Coniglio and B. Derrida, *J. Phys. A* **22**, L939, (1989);
- [51] A. Coniglio, L. De Arcangelis, H. J. Herrmann and N. Jan, *Europhys. Lett.* **8**, 315 (1989);
- [52] A. M. Mariz, *J. Phys. A* **23**, 979, (1990);
- [53] A. M. Mariz, A. M. C. de Souza and C. Tsallis, *J. Phys. A* **26**, L1007, (1993);
- [54] M. L. Martins, H. F. Verona de Resende, C. Tsallis, and A. C. N. Magalhães, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2045 (1991);
- [55] G. A. Kohring and M. Schreckenberg, *J. Phys. France* **2**, 2033, (1992);
- [56] G. F. Zebende and T. J. P. Penna, *J. Stat. Phys.* **74**, 1273, (1994);
- [57] T. Tomé, submetido para publicação na *Physica A*, (1994);
- [58] L. R. da Silva and H. J. Herrmann, *J. Stat. Phys.* **52**, 463, (1988);
- [59] J. A. Carter, *comunicação privada*, (1992);
- [60] M. L. Martins, G. F. Zebende, T. J. P. Penna and C. Tsallis, *J. Phys. A* **27**, 1 (1994);
- [61] C. Tsallis and M. L. Martins, submetido para publicação no *Europhys. Lett.*, (1994);

- [62] F. A. Tamarit and L. Silva, *comunicação privada*, (1994);
- [63] M. L. Martins and C. Tsallis, *J. Phys. A* **23**, 3043 (1990);
- [64] A. Yoshimori, *J. Phys. Soc. Japan* **14**, 807 (1959);
- [65] S. Tanisaki, *J. Phys. Soc. Japan* **16**, 579 (1961);
- [66] J. Yeomans, in “*Solid State Physics*”, (Academic Press, New York), a ser publicado;
- [67] W. Selk, *Phys. Rep.* **170**, (1988);
- [68] D. A. Huse and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **29**, 239 (1984);
- [69] F. Boszo, G. Ertl, M. Grunze and M. Weiss, *Appl. Surface Sci.* **1**, 103 (1977);
- [70] R. Imbihl, R. J. Behm, K. Cristmann, G. Ertl and T. Matsushima, *Surface Sci.* **117**, 257 (1982);
- [71] S. Ostlund, *Phys. Rev. B* **24**, 398 (1981);
- [72] W. Selke and J. M. Yeomans, *Z. Phys. B* **46**, 311 (1982);
- [73] P. M. Duxbury, J. M. Yeomans and P.D. Beale, *J. Phys. A* **17**, L179 (1984);
- [74] F. D. M. Haldane, P. Bak and T. Bohr, *Phys. Rev. B* **28**, 2743 (1983);
- [75] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **28**, 2746 (1983);
- [76] D. A. Huse and M. E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 793 (1982);
- [77] H. U. Everts and H. Höder, *J. Phys. A* **22**, 2475 (1989);
- [78] J. M. Yeomans and M. E. Fisher, *Physica A* **127**, 1 (1984);
- [79] M. den Nijs, *J. Phys. A* **17**, L295 (1984);
- [80] D. A. Huse, A. M. Szpilka and M. E. Fisher, *Physica A* **121**, 363 (1983);

[81] D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **24**, 5180 (1981);